2，3次元古典ＸＹ模型の モンテカルロシュミレーション

岡山大学　川端親雄

前回の研究会で，Kosterlitz と Thoulers が提唱した2次元古典ＸＹ模型の渦巻現象をモンテカルロ法により実証したが，今回は，3次元の場合につき，同じモンテカルロ法を適用し，2次元と比較検討した。渦巻は低温側に発生することが見られ，又帯磁率は有限温度で発散することがわかった。さらに，Kosterlitz と Thoulers の渦巻対を2次元プラズマ問題に対応したモデルでモンテカルロシュミレーションで行った。

二次元ハイゼンベルグ模型と 平面回転子模型の計算機実験

原研　別役　広

二次元系の相転移の存在とその性質に関する問題は，この十年間多くの研究者の関心を集めてきた。[1] Bloch のスピン波の理論によると，二次元系は相転移を起さないという結論が得られる。これに対して Stanley と Kaplan[2,3] は，二次元ハイゼンベルグ系と平面回転子系での高温級数展開から，これらの系で帯磁率はある有限温度（T_{SK}）で発散することを示した。そしてこの結果から，長距離秩序度は存在しないが，スピン－スピン相関が非常にゆるやかに減衰するために帯磁率が無限大になるような低温相が存在すると主張した。その直後 Mermin と Wagner[4] は，二次元系では有限温度で長距離秩序度は存在し得ないことを厳密に証明した。

厳密に等方的で厳密に二次元的な物質は現実には存在しないので，相転移の存在を実験的な方法で解決することはできない。従って他の近似的方法を用いることが望しい。その方法の一つはモンテカルロ法を用いた計算機実験の方法である。この方法を用いて，二次元ハイゼンベルグ模型と平面回転子系の性質を調べた。ハイゼンベルグ系のハミル

トニアンは

$$\mathscr{H}^{H} = -2J \sum_{<i,j>} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad , \tag{1}$$

である。ここで$\vec{S}_i$は三次元単位ベクトルである。これに対して平面回転子系では

$$\mathscr{H}^{PR} = -2J \sum_{<i,j>} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) , \tag{2}$$

である。 S_i^x， S_i^y は平面内に拘束された単位ベクトルの成分である。各スピンは正方格子上に配置していて周期的境界条件を満しているものとする。平均場近似での転移温度は， $T_M^H = 8/3\ J/k_B$， $T_M^{PR} = 4J/k_B$ である。温度は T_M を単位として測ることにすると， Stanley-Kaplan の転移温度は $T_{SK} \simeq 0.45$ である。最近 Kosterlitz と Thouless[5] は，二次元平面回転子系には渦を含んだトポロジカルな長距離秩序度が存在していて，渦の解離によって転移温度 $T_V \sim \pi J/k_B = \pi/4\ T_M^{PR}$ で相転移が起ると主張している。 T_V は

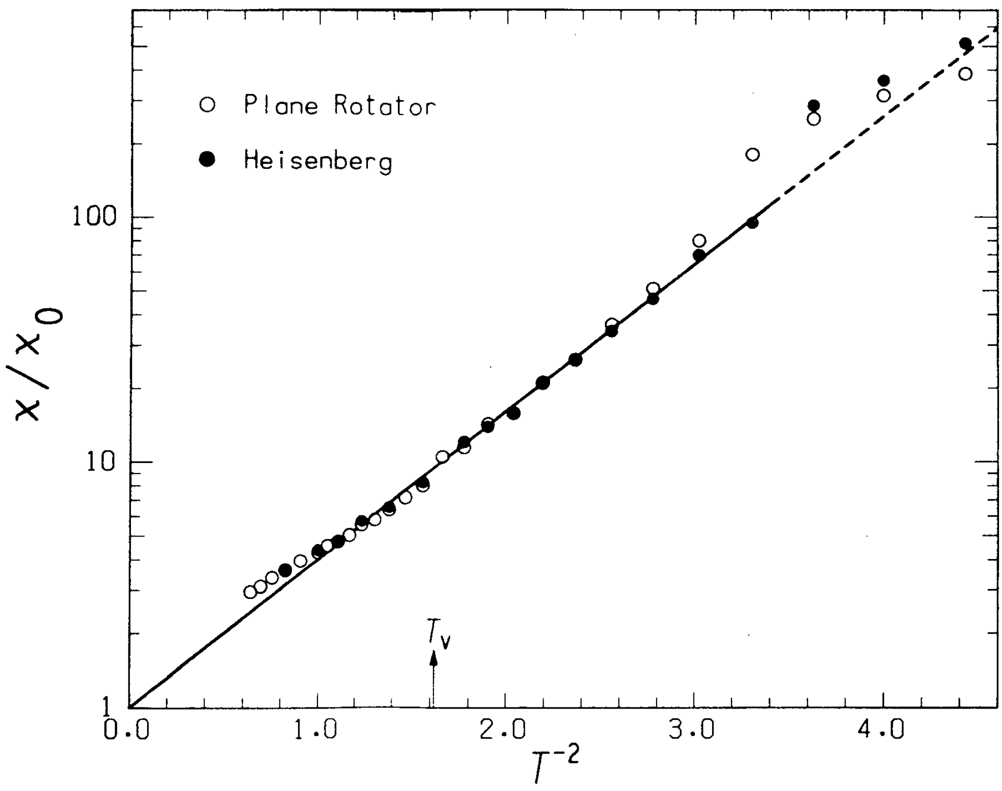

図 1　正方格子上に配列したハイゼンベルグ・スピン系のモンテカルロ法によって決められた秩序変数の温度依存性。実線は最小自乗法で ($1 - T/Tc$)$^{\beta}$ に適合するように決めたものである。

T_{SK}より十分高いので，平面回転子系ではT_{SK}とT_V のいずれで相転移が起るのか興味のある所である。

モンテカルロ法による計算は，三次元ハイゼンベルグ系の場合と同様の手法を用いて行った。[6] 第1図はハイゼンベルグ系の秩序変数を温度の関数として示したものである。この結果は，ある転移温度 T_c以下で有限系の全体にわたって長距離秩序度が確立されていることを示している。この結果は， Watston ら[7] の磁化の自乗平均の平方根を秩序変数として得られた結果と一致している。秩序変数の温度変化は冪乗則$M(T) = (1 - T/T_c)^{\beta}$ に非常に良く合う。βと T_c の値はスピン数によるが， 900 と 2500 スピン系での差はそれほど大きくはない。2500 スピン系に対する $T_c = 0.515 \pm 0.006$ は $T_{SK} \simeq 0.45$ と同程度であるが多少大きい。$\beta = 0.45 \pm 0.01$ は三次元ハイゼンベルグ系の値$\beta = 1/3$ より大きく平均場の値$\beta = 0.5$ に近い。第2図は平面回転子系の場合の秩序変数

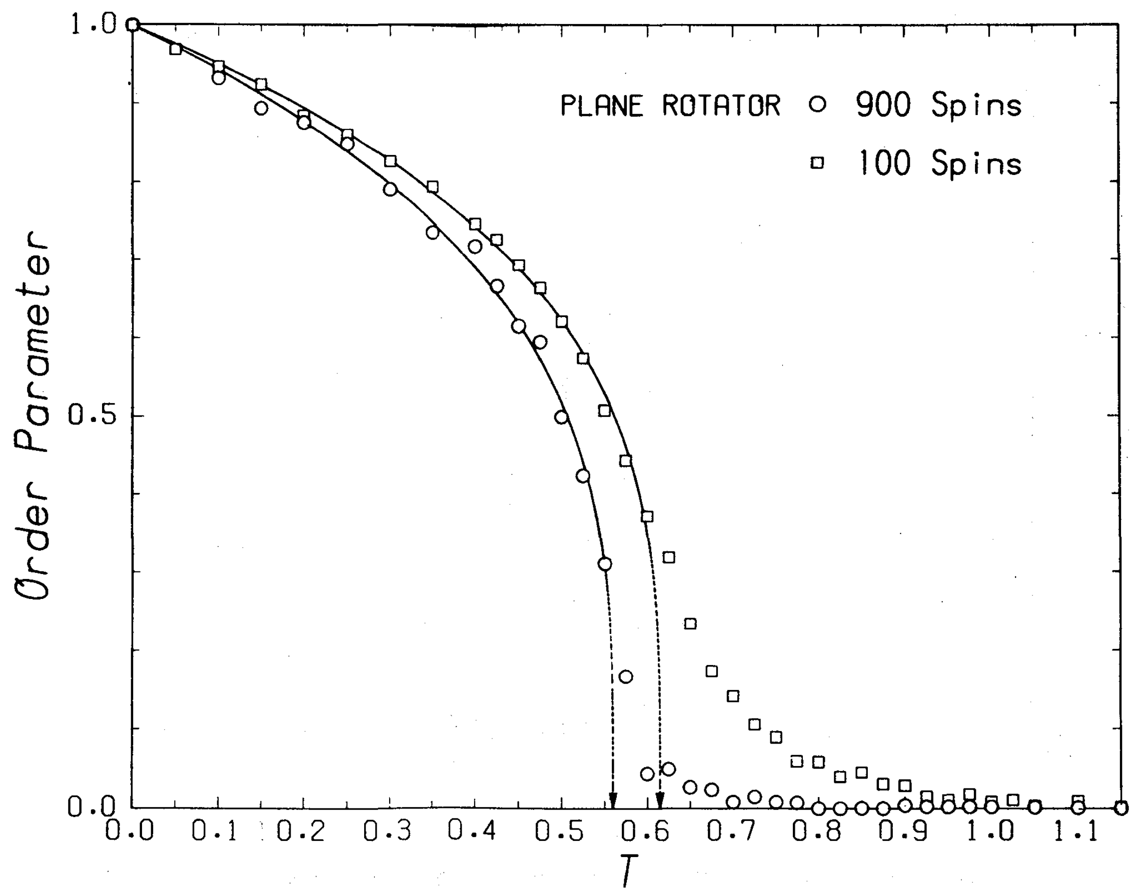

図2　正方格子上に配列した平面回転子系のモンテカルロ法によって決められた秩序変数の温度依存性。

の温度変化である。転移温度 T_c は T_{SK} より多少大きいが，T_V よりは非常に小さい。最近接のスピン相関はエネルギーに比例している。これを温度に関して微分して求めた比熱は，ハイゼンベルグ系，平面回転子系とも T_c に近傍にピークを持つ丸められた比熱曲線を与える。

帯磁率は磁化の遙動から次の式で求められる。

$$\chi/\chi_0 = N < \vec{m}^2 > \quad . \tag{3}$$

モンテカルロ法の計算から求めた帯磁率は，高温級数展開の10次迄の項から求めた値よりも大分大きい。第3図は帯磁率の対数を温度の自乗の逆数の函数としてプロットし

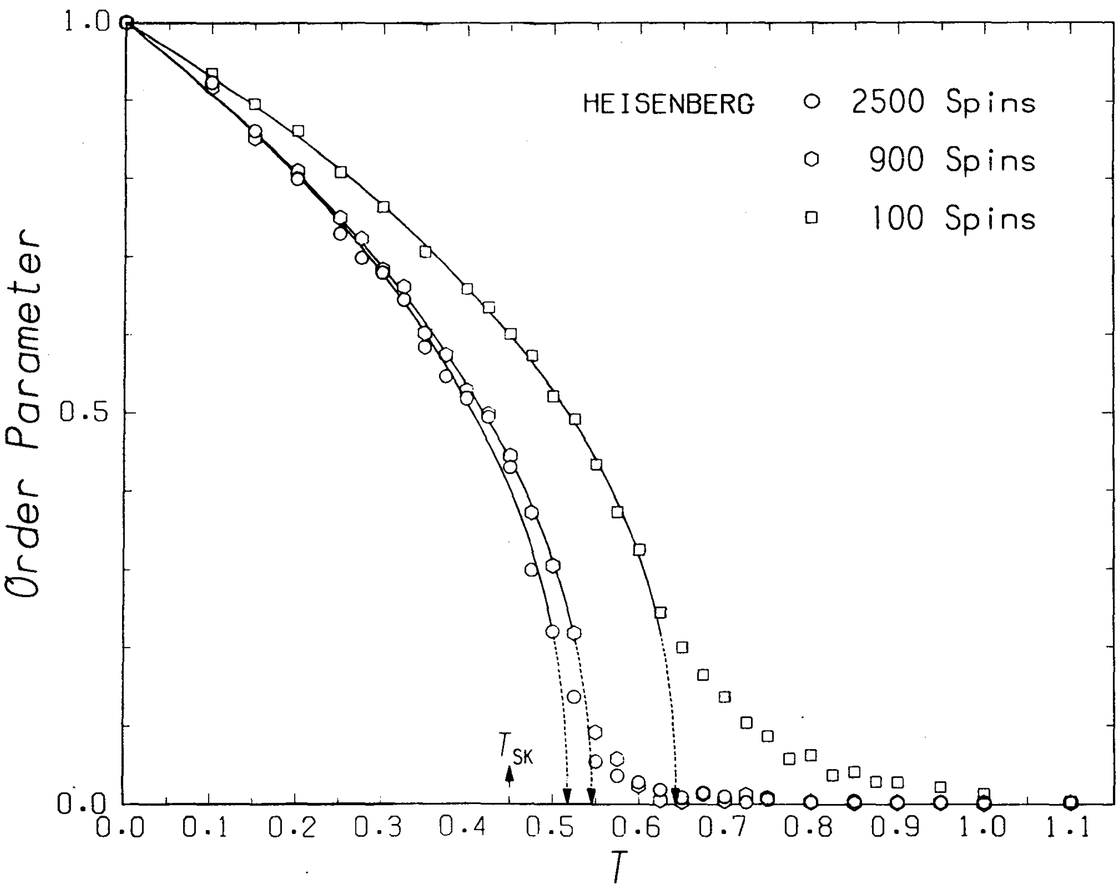

図3　正方格子上に配列した2500 スピンのハイゼンベルグ系と 900ケの平面回転子系の帯磁率の温度依存性。帯磁率の対数を，T_M でスケールした温度の自乗の逆数でプロットしてある。実線は(4)式に従ってプロットした。T_V は Kosterlitz と Thouless の予測した転移温度である。

たものである。ハイゼンベルグ系，平面回転子系とも，温度を T_M でスケールする時帯磁率は

$$\chi/\chi_0 = \exp\ \{(\alpha/T)^2\}\ , \tag{4}$$

の形で変化していることを示している。ハイゼンベルグ系に対して，最小自乗法から求めた定数 α は J/k_B を単位として 3.137 ± 0.004 となり π の値に非常に近い。図中の直線は $\alpha = 3\pi/8$ としてプロットしたものである。平面回転子系では，T_V で非常に小さいが異常が見られる。

(4)式の形の帯磁率は T_{SK} の近傍で大きな変化を与える。例えば $T = 0.45$ で $\chi/\chi_0 = 1000$，$T = 0.39$ で $\chi/\chi_0 = 10000$ である。このように T_{SK} の近傍で大きく変化する量を有限の展開項を用いた外挿法を用いて外挿すると，T_{SK} の近傍で帯磁率が見掛け上発散するという結果が得られる。T_{SK} 以下では帯磁率は発散はしないが，非常に大きくなっている。このために長距臨秩序度はないが，非常に長い短距離秩序度をもつ〝準秩序相〃が近似的に実現される。このことが，二次元系の種々の異常な性質を説明すると考えられる。

参　考　文　献

1) H. E. Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena (Clarendom Press, Oxford, 1971).
2) H. E. Stanley and T. A. Kaplan: Phys. Rev. Letters **17**, 913 (1966).
3) H. E. Stanley: Phys. Rev. Letters **20**, 589 (1968).
4) N. D. Mermin and H. Wagner: Phys. Rew Letters **17**, 1133 (1966).
5) J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless: J. Phys. C 8, 336 (1975).
6) H. Betsuyaku: Phys. Letters (to be published).
7) R. E. Watson, M. Blume, and G. H. Vineyard: Phys. Rev. B 2, 684 (1970).