研究会報告

ポッツ模型の相転移
－ 特に反強磁性相互作用について －

東工大　理　小野昱郎

§１．はじめに

ポッツ模型はイジング模型を拡張してスピン状態を増した統計模型である。ｑ－状態ポッツ模型のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(\sigma_i, \sigma_j) \qquad \sigma_i = 1, 2 \ ... \ q$$

と表わされる。ここで、δはクロネッカーのデルタ関数である。強磁性相互作用（$J>0$）のとき、低温の秩序相のスピンはすべて同じ状態を占める。一方反強磁性相互作用（$J<0$）では、スピンはたがいに異なった状態を占めた方がエネルギー的に安定である。相互作用を最近接格子に限った場合、正方格子や単純立方格子のやうに２つの同等な副格子Ａ，Ｂに分けられる場合と、３角格子や面心立方格子のように、最近接格子点同志がまた最近接格子点となる場合とでは基底状態のスピン配列の縮退やフラトレーションも異なっている。また、ｑの値によっても色々と変化する。ここでは、上で述べた格子上でのポッツ模型の相転移をクラスター近似とモンテカルロ・シミュレーションで調べた結果を報告する。

§２．零点エントロピー

（ａ）　正方格子と単純立方格子

正方、単純立方格子ともＡ，Ｂ副格子に分けて考える。正方格子の場合を図１に示す。$q=2$のときは、Ａ，Ｂ副格子はそれぞれ$\sigma=1$と$\sigma=2$のスピンで占められている。一方$q=3$のときは、例えばＡ副格子は$\sigma=1$，Ｂ副格子は$\sigma=2$と$\sigma=3$のスピンがランダムに配列した状態が基底状態になる。このとき、縮退の数は格子点の数をＮとして$2^{(N/2)} \times 6$となる。Ａ副格子はここでは、$\sigma=1$と仮定したが、$\sigma=2$または３でもよく、また、Ａ，Ｂ副格子のスピン配列を取り替えてもよいので、因子６がつく。スピン１個当りのエントロピーは　$S/N=(1/2)\ln 2+O(1/N)=0.346\cdots$となる。Ａ副格子のスピンの状態がすべて$\sigma=1$の時、あるＡスピンのまわりの最近接Ｂスピンすべて$\sigma=2$とそろっていれば、Ａスピンは$\sigma=3$の状態も許されるから、縮退数もさらに増加する。したっがて、上で述べたエントロピーの値は下限である。

$q=4$の場合、基底状態のスピン配列の１つは、Ａ副格子に対しては$\sigma=1$、Ｂ副格子に対しては、$\sigma=2,3,4$がランダムに配列する。もう１つのタイプはＡ副格子は$\sigma=1,2$、Ｂ副格子には$\sigma=3,4$のランダムな配列でもよい。前者の１個あたりのエントロピーは　$(1/2)\ln 3=0.5493$，後者は$\ln 2=0.6931$となり、後者の方が大きい。一般のｑでは、ｑが偶数のときは$\ln(q/2)$で、ｑが奇数のときは$(1/2)\ln q'(q'+1)$となる。ここで、$q=2q'+1$である。

（ｂ）　３角格子・面心立方格子

３角格子や面心立方格子のように最近接格子点同志がまた最近接格子点となる場合は事情が異なっている。ｑ＝２の場合基底スピン配列でもｗｒｏｎｇボンドがあり、フラストレーションしている。三角格子では、ｗｒｏｎｇボンドは全体の１／３もあり、零点エントロピーは少なくとも（１／３）ｌｎ２　ある。この場合、　Ｗａｎｎｉｅｒ[1]　によって指摘されているように相転移は生じない。一方、ｑ＝３では、基底スピン配列はＡ，Ｂ，Ｃの３副格子構造をとり、ｗｒｏｎｇボンドは現れない。ｑ＝４では、Ａ，Ｂ副格子でそれぞれσ＝１とσ＝２、一方，Ｃ副格子ではσ＝３とσ＝４のランダムな配列が許されるので、このときエントロピーも（１／３）ｌｎ２よりは大きくなる。ｑ≧５では、ｗｒｏｎｇボンドはあらわれないので、フラストレーションはない。しかし、零点エントロピーはさらに増加する。

面心立方格子では、４副格子に分けて考える。ｑ≦３ではフラストレーションがある。ｑ＝４では、ちょうどスピンの状態と副格子を１：１に対応させることができる。ｑ≧では零点エントロピーがのこる。

§３．クラスター近似[2]

強磁性相互作用の単純な低温相にくらべこのように基底状態の縮退の多い系は相転移はなくなるか、または低温相が質的にも違ってくる可能性がある。平均場近似では、格子の形や次元の影響やフラストレーションの効果を十分に取り入れていない。さらに進んだ近似として正方形や３角形のクラスターを用いたカクタス近似で考える。さらに、自由エネルギーを比較して１次転移かどうか調べた。転移温度を表１にまとめた。

この表からわかるように、正方格子で、ｑ＝３では、ｋＴｃ／｜Ｊ｜＝０．６５２となり、平均場近似の４／３＝１．３３３よりかなり低い。しかし、Ｂａｘｔｅｒの厳密解[3]やＹａｓｕｍｕｒａとＯｇｕｃｈｉ[4]よる高温展開ではスタガード帯磁率の発散はなく、転移はない。また、モンテカルロ・シミュレーション[5]の結果もこれを支持している。ｑ≧４では、相転移はない。

一方、単純立方格子では表１に示すように、ｑ＝３では平均場近似で、ｋＴｃ／｜Ｊ｜＝２に対し、正方カクタス近似で１．４２２となる。高温展開では、１．２１で、後で示すようにモンテカルロでは１．２３となる。しかし低温温の秩序相はＫｏｓｔｅｒｌｉｔｚ－Ｔｈｏｕｌｅｓｓ[6]型となることが示される。ｑ＝4ではｋＴｃ／｜Ｊ｜＝０．８８８で更に低くなる。ｑ＝５でも、この近似では転移はあるが、ｑ≧６では、転移はない。高温展開やモンテカルロの結果では、ｑ＝５で、すでに転移はないことが示されている。

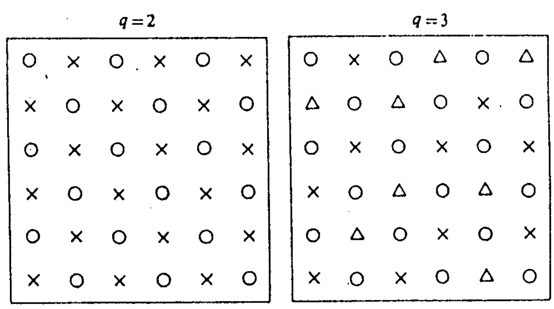

図１．基底状態のスピン配列

表 1

（a） 正方格子

q	S／N	四角近似	高温展開	モンテカルロ
2	0	1．385（2）	1．15	1．135
3	(1/2) ln 2	0．652（2）	パラ	パラ
4	ln 2	0．0	パラ	パラ

（b）単純立方格子

2	0	2．446	2．25	2．22
3	(1/2) ln2	1．422	1．21	1．23
4	ln 2	0．888	0．64	0．7
5	(1/2) ln6	0．53	パラ	パラ
6	ln 3	0．	パラ	
7	(1/2) ln12	パラ	パラ	

§4．単純立方格子上のｑ＝３，４のモンテカルロ・シミュレーション

（a）比熱とスピン分布

２次元正方格子上の反強磁性相互作用、ｑ＝３，４のポッツ模型のシミュレーョンはBanavar、JasnowとGrest [5] によって行われ、ｑ＝３，４の場合とも相転移がないことと結論している。これはBaxterの厳密解の結論とも一致している。３次元単純立方格子のシミュレーションでは、Ａ，Ｂ副格子のスピン分布の差が現れることがわかったが、これが長距離の秩序状態かどうか明確になっていない。

さて、単純立方格子でのシミュレーションの結果をのべる。ｑ＝３の場合、エネルギーとそのゆらぎから求めた比熱を図２に示す。比熱はｋＴ／｜Ｊ｜＝１．２５付近にはっきりしたピークがある。Ａ，Ｂ副格子に分けたスピン分布の温度変化を図３にしめす。もし、副格子に通常の長距離秩序があれば、ある特定の状態を占めるスピンの数は温度の低下とともに単純に増加するはずである。しかし、シミュレーションの結果は多数を占めるスピン状態は温度とともにはげしく変化し、安定な分布は低温でもないことがわかる。十分長いステップ平均を取れば、各副格子で分布は一様になると推定される。しかし、通常のパラ相と異なり、各ステップでの瞬間値は平均分布確率の１／３より大きくゆらいでいる。

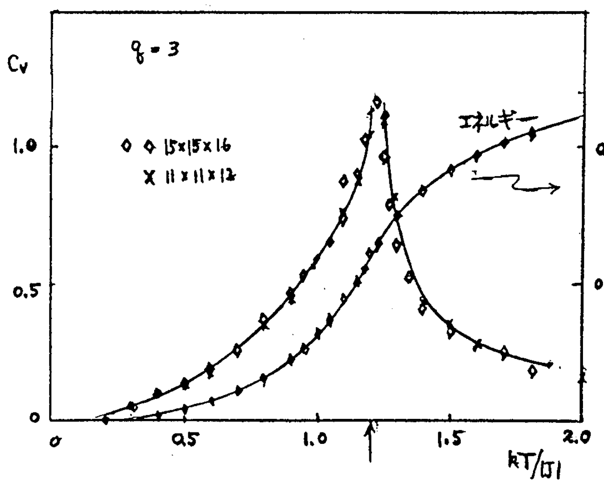

図２．単純立方格子ｑ＝３の比熱の温度変化

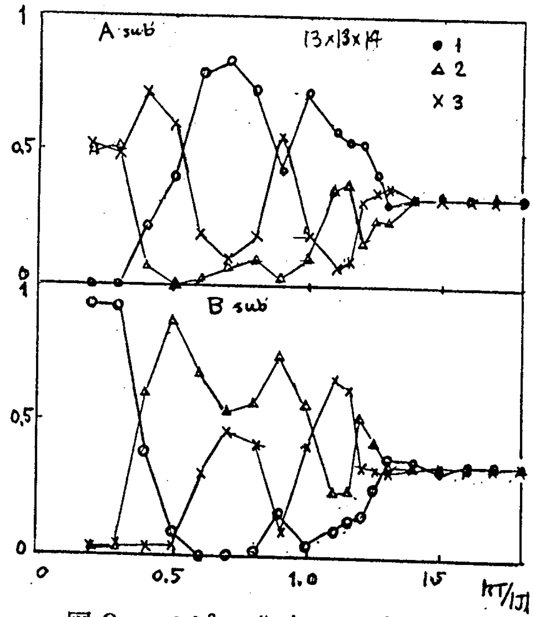

図３．スピン分布の温度変化

（ｂ）　秩序変数とゆらぎ

ここでは、秩序変数を正確に定義し、そのゆらぎのサイズ依存性から秩序相の性格を調べた。ｑ＝３の場合各モンテカルロ・ステップ，ｔでの状態σを占めている割り合いを$p_\sigma(t)$として、２つの秩序変数を

$$\left.\begin{aligned} \zeta_1(t) &= p_1(t) - \frac{1}{2}[p_2(t) + p_3(t)] \\ \zeta_2(t) &= \frac{\sqrt{3}}{2}[p_2(t) - p_3(t)] \end{aligned}\right\}$$

と定義する。$p_1 + p_2 + p_3 = 1$であるから、この２つの秩序変数は独立になる。ζ_1は１軸性の秩序を表わすのに都合がよい。パラ相では両秩序変数が零になる。完全な秩序相をこの２変数（ζ_1，ζ_2）であらわすと（１，０）、（$-1/2$，$\sqrt{3}/2$）または（$-1/2$，$-\sqrt{3}/2$）と表わされる。それぞれ、$p_1=1$，$p_2=1$または$p_3=1$に対応する。

Ａ，Ｂ副格子のスピン分布は逆になっているので、反強磁性的な相を特長ずける秩序変数として

$$\left.\begin{aligned} \zeta_1^- &\equiv \frac{1}{2}(\zeta_1^A - \zeta_1^B) \\ \zeta_2^- &\equiv \frac{1}{2}(\zeta_2^A - \zeta_2^B) \end{aligned}\right\}$$

をとればよい。この秩序変数の許される範囲は正六角形で表わされる。

この秩序変数のゆらぎを平均した$\langle \zeta^2 \rangle = \langle (\zeta_1^-)^2 + (\zeta_2^-)^2 \rangle$とスピンの反強磁性的な相関関数を$Q^-(r)$との関係は$\langle \zeta^2 \rangle = (1/N)\,\Sigma Q^-(r)$とあらわされる。一方、相関関数$Q^-(r)$の距離依存性は距離ｒが十分大きいとき

$$Q^-(r) \sim \frac{\exp(-\kappa r)}{r^{d-2+\eta}}$$

のようにあらわされる。ここで、κは相関距離の逆数、dは格子の次元、ηは臨界指数である。1辺Lの有限格子では

$$\sum_r Q^-(r) \sim \int_0^L Q^-(r)\ r^{d-1}dr$$

ここで、$L=N^{1/d}$ である。高温領域ではL＞＞1／κであるから、$\sum_r Q(r)\to O(1)$となる。臨界領域ではL＜＜1／κであるから、

$$\sum_r Q^-(r) \to \int_0^L \left(\frac{1}{r}\right)^{d-2+\eta} r^{d-1}dr \sim L^{2-\eta} \sim N^{((1-\eta)/d)}$$

となる。長距離の秩序があれば、

$$\sum_r Q^-(r) \to L^d\langle\zeta\rangle^2 \sim N\langle\zeta\rangle^2 \sim O(N)$$

となり、スピン数Nに比例する。

図4は各温度でのゆらぎのサイズの対数依存性を表わしたものである。T＞1．4ではサイズ依存性はなく、したがって、パラ相である。T＜1．2では、明らかにサイズとともに増加する。したがって、$N^{a(T)}$とおけば、この句配よりNの指数a(T) を求めることができる。

図5に指数a(T) ＝ (＝ (2－η) ／d) の温度変化をまとめた。T＝1．4付近でa(T) は急激に増加するが、T＝1．1以下ではゆるやかで一定の増加を示す。もし、長距離秩序があれば、a(T) ＝1となるはずであるが、少し小さく通常の秩序でないことがわかる。相関関数は距離のべきで減少し、いわゆるＫｏｓｔｅｒｌｉｔｚ－Ｔｈｏｕｌｅｓｓ型の相となっていることがわかる。

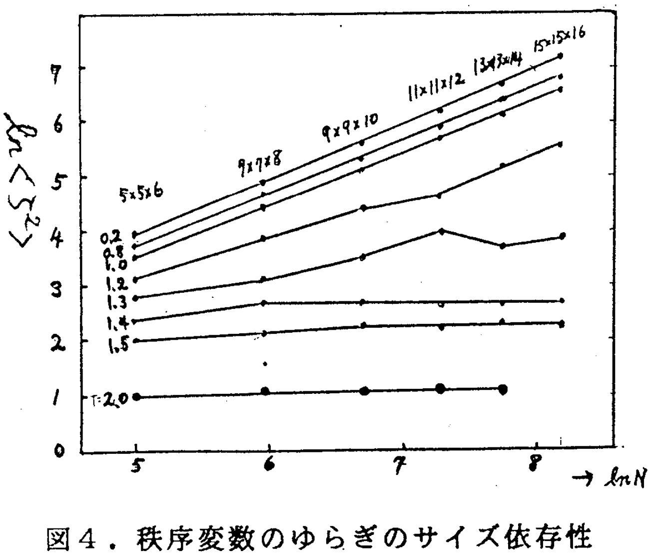

図4．秩序変数のゆらぎのサイズ依存性

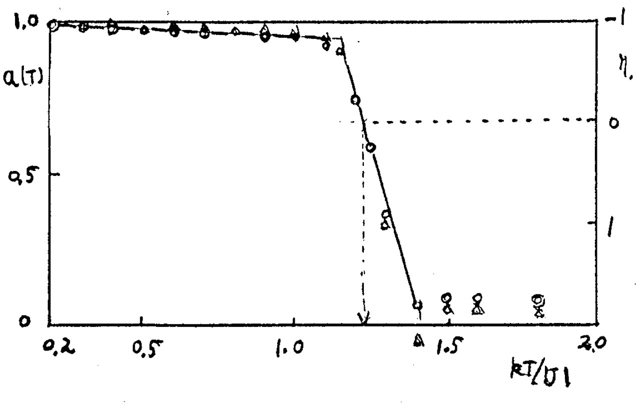

図5．指数a(T) の温度変化

（c）　q＝4　の場合

この場合、図6から明らかなように、比熱のピークはkT／｜J｜＝0．7付近にある。スピン状態の分布の温度変化を図7に示す。比熱のピーク以下の温度で、A格子σ＝1とσ＝3のスピンの割り合いが増加し、σ＝2とσ＝4のスピンは減少することがわかる（図7）。B格子ではこの逆になっている。しかも低温になるほど分布は安定になっていく。q＝3の場合とちがって、よい秩序ができていることがわかる。勿論、絶対零度でもσ＝1とσ＝3はA格子を半々に占めており、零点エントロピーは残っている。

念のため、秩序変数のゆらぎを調べてみる。独立な秩序変数として、

$$\left.\begin{aligned}\zeta_x &= \frac{1}{\sqrt{3}}(p_1 + p_2 - p_3 - p_4)\\ \zeta_y &= \frac{1}{\sqrt{3}}(p_1 - p_2 - p_3 + p_4)\\ \zeta_z &= \frac{1}{\sqrt{3}}(p_1 - p_2 + p_3 - p_4)\end{aligned}\right\}$$

を用いる。反強磁性の秩序変数として，$\zeta_x^- = (1/2)(\zeta_x^A - \zeta_x^B)$ とすれば、ゆらぎ$\langle(\zeta_x^-)^2 + (\zeta_y^-)^2 + (\zeta_z^-)^2\rangle$を求め、図8に示すように、サイズ依存性を調べた。転移温度付近を除くと、Nのべき指数a（T）は高温で0、低温でほぼ1となることがわった。（図9）これで、長距離秩序が存在することが確かめられた。

2次元正方格子の場合は、q＝4では相転移はないが、3次元の場合秩序相が低温で生じるのが特長である。

§5．おわりに

反強磁性ポッツ模型の正方格子と単純立方格子の相転移をクラスター近似とモンテカルロ・シミュレーションで調べた。正方格子ではq≧3で秩序相はない。単純立方格子では、q＝3の場合、低温でK－T相、q＝4は2副格子秩序が見出された。

面心立方格子については、現在、クラスター近似とモンテカルロ・シミレーションで調べている。

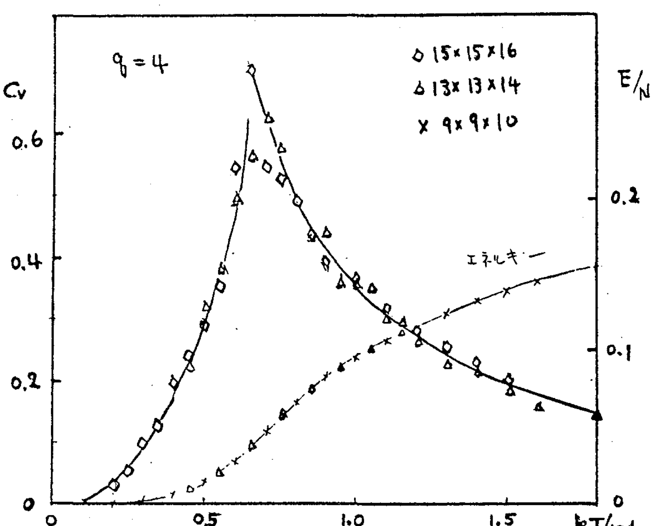

図6．単純立方格子q＝4の比熱の温度変化

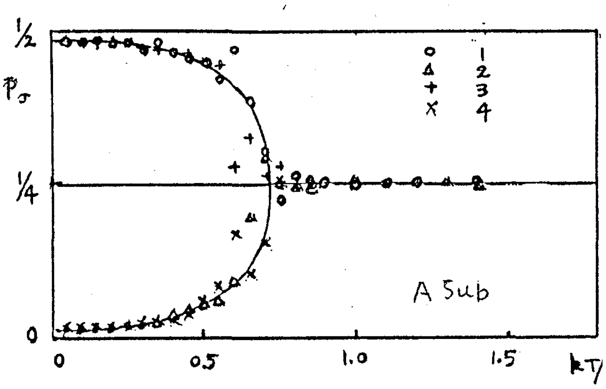

図7．スピン分布の温度変化

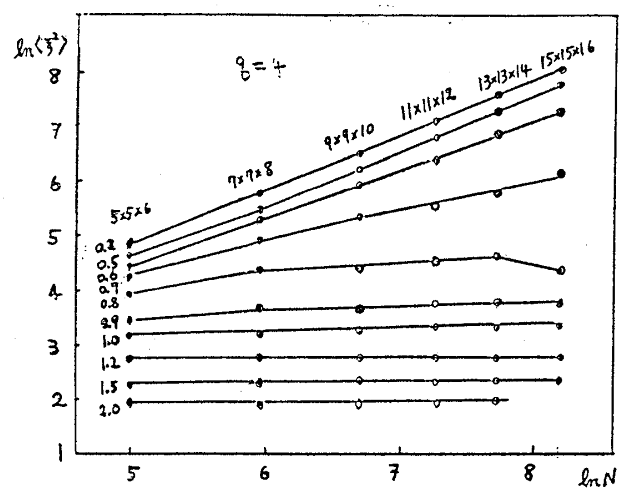

図8．秩序変数のゆらぎ

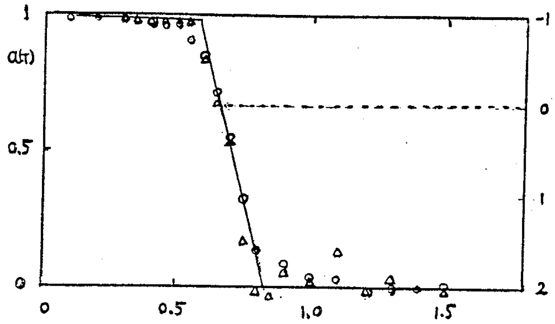

図9．指数a(T) の温度変化

参考文献

1) G. H. Wannier: Phys. Rev. 79 (1950) 357.
2) I. Ono: J. Phys. Soc. Jpn 44 (1978) 1033.
3) R. J. Baxter: Proc. R. Soc. London A383 (1982) 43.
4) K. Yasumura and T. Oguchi: J. Phys. Soc. Jpn 53 (1984) 515.
5) J. R. Banavar, G. S. Jasnow and Grest: Phys. Rev. Lett. 45 (1980) 1224; Phys. Rev. B25 (1982) 4639.
6) J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless: J. Phys. C6 (1973) 1181.