

新しい型の浸透相と相転移

モンテカルロ計算と新しい記述による証明

東工大理 上野陽太郎

長距離秩序とは？と問えば，“結合”が系全体に広がった状態であると多くの人は答えるだろう。それではその“結合”は？と問えば，答えるのは簡単ではない。Ising 強磁性体ならば，それは隣接のスピンが平行な状態であると云いたくなるが，正しくない。3次元の $T = \infty$ で考えれば，これは $p = \frac{1}{2}$ のランダムサイトパーコレーションと同じだから ($p_c \simeq 0.31, sc$)， $\uparrow\uparrow$ の領域も $\downarrow\downarrow$ の領域も系全体に広がっている。数値計算によれば/1/，そんな高温の状態が sc では $T > 0.95T_c$ から始まるので，このような幾何学的結合の浸透によって相転移を説明することは出来ない。しかし，真の結合（物理的結合と以下で呼ぶ）が一般的に定義され，その結合による相転移と秩序相の記述が可能になる/2/。これがこの話の目的の1つである。

相転移の記述は秩序変数で十分であるように見えるが，秩序変数は，力学に例えるならば， \mathbf{r} や $\dot{\mathbf{r}}$ の運動学的量に対して，物理的結合は力やエネルギーの力学的量であるからコペルニクスからニュートンへの飛躍ほどではないにせよ，相転移の何か新しい知見や洞察が期待できる。実際，フェロ Potts モデルでは，この結合を利用した格段に熱平衡化が早い，いわゆる Swendsen-Wang アルゴリズムが開発されただけでなく，秩序化過程等の多くの興味ある研究がなされた/3/。

系が複雑になれば，秩序変数だけでなく相転移自身さえ見つけるのが困難な場合があり，それがどんなものか興味深い。反強磁性 Potts モデル，積層三角格子反強磁性 Ising モデルや我々が扱う3次元一般化クロック (GCL) モデルはまさにそんな系で，モンテカルロひねりの方法によれば，新しい型の秩序相である不完全秩序相 (IOP) が存在する (/4/とその中の文献)。それが関係する相転移の1つは対称性の破れを伴わないもので，3次元系では初めて得られた。これらの新しい秩序と相転移は物理的結合による記述によって始めて明確に理解できる/2/。この記述によって IOP が新しい型の浸透相であり，それが GCL モデルに存在することを証明する。それによって上記の相転移が純粋にトポロジカルなものであることが分かる。この後半の部分はスペース不足だから簡単にシナリオだけを記す。

1. 不完全秩序相と相転移——モンテカルロ計算の結果

3次元一般化6状態クロックモデルの相互作用は，スピン状態を $\sigma_i (= 1 \sim 6)$ で表せば，隣接スピン間の状態差 $\tau = |\sigma_i - \sigma_j| \pmod{6}$ に対し，

$$V(\tau) = \varepsilon_1 \delta(\tau, 1) + \varepsilon_2 \delta(\tau, 2) + \varepsilon_3 \delta(\tau, 3). \quad (1)$$

ただし， $0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \varepsilon_3$ 。なお，通常のクロックモデルでは $\varepsilon_\tau = 1 - \cos(\frac{2\pi}{6}\tau)$ である。実際の計算では更に $\varepsilon_2 = \varepsilon_3 = 1$ と固定し， ε_1 のみを動かす ($0 < \varepsilon_1 < 1$)。図1の得られた相図では， $\varepsilon_1 = 1$ (フェロ Potts) の近傍では1次転移となり，低温では通常のフェロ相であ

る。これは1つの状態が支配しているので完全秩序相 (COP) と呼んでいる。他方, $\varepsilon_1 = 0$ 近傍では隣合った2状態が支配的な IOP1 と3状態が支配的な IOP2 が存在する (図2参照)。図3はスピン配列の断面図である (周期的境界条件)。左の IOP1 では隣合った2状態は共に浸透している。右の IOP2 では1つの状態が大勢を占め、両隣の状態 (oと口) が有限のクラスター状で存在するように見える。しかし、3次元的にはoも口も浸透する可能性があるし、IOP2 と COP 間の相転移を説明するためにはそれ以外にないと推測された。なお、(スピンの状態分布から分かるように) これが対称変化を伴わない相転移である。COP と IOP の違いは剛性に良く現れているが、詳細は文献を。

図 1

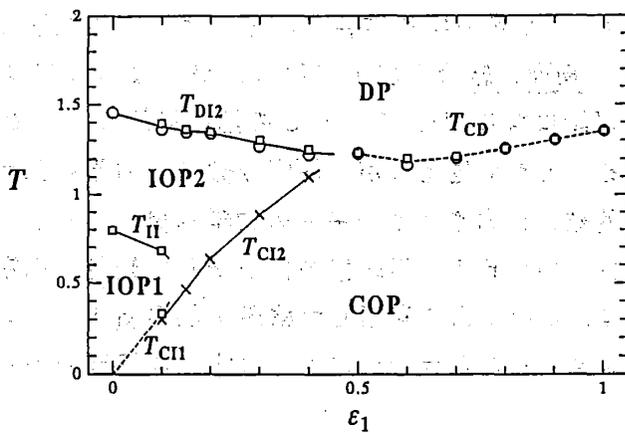


図 2

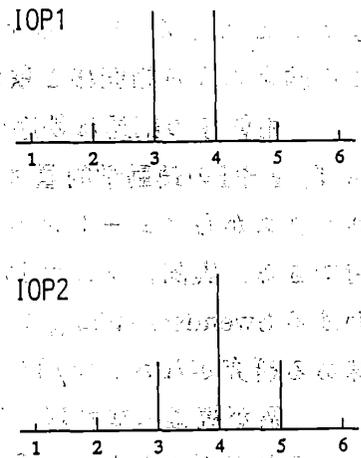
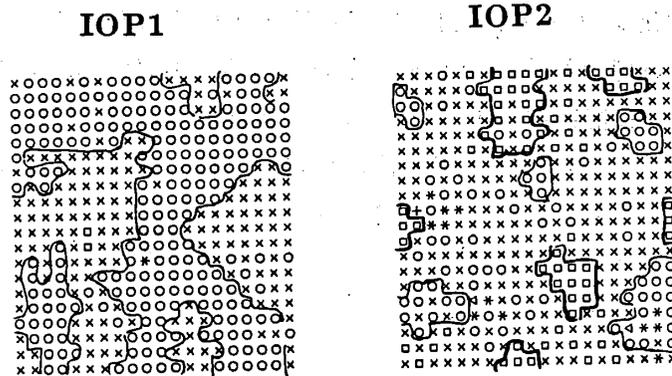


図 3



2. 物理的結合による記述

分配関数を物理的結合からなる図形の和で表すために、一般化クロックモデルのボルツマン因子を式 (1) から次のように分解する。

$$\exp(\beta V(\tau)) = \delta(\tau, 0) + e^{-\beta\varepsilon_1} \delta(\tau, 1) + e^{-\beta\varepsilon_2} \delta(\tau, 2) + e^{-\beta\varepsilon_3} \delta(\tau, 3) \quad (2A)$$

$$= (1 - e^{-\beta\varepsilon_2}) \delta(\tau, 0) + (e^{-\beta\varepsilon_1} - e^{-\beta\varepsilon_2}) \delta(\tau, 1) + e^{-\beta\varepsilon_2} \delta(\tau, 2) + e^{-\beta\varepsilon_3} \delta(\tau, 3) \quad (2B)$$

$$= A\{p_l\delta(\tau, 0) + p_j\delta(\tau, 1) + p_v\} \quad (2B')$$

(2B') は (2B) を確率 $p_l = A(1 - e^{-\beta\epsilon_2})$, $p_j = A(e^{-\beta\epsilon_1} - e^{-\beta\epsilon_2})$, $p_v = Ae^{-\beta\epsilon_2}$ を使って表しただけである ($p_l + p_j + p_v = 1$)。 (2A) の各項は先述の幾何学的結合だから、それから得られる図形はスピン配列となる。 それに対し、 (2B) から得られる図形は我々が求めているものであることが以下のように分かる。 その図形の成分となる (2B) の各項を bond と呼び、第 1 項から順に link bond, joint bond, vacant bond と名づける。 v-bond は恒等式 $e^{-\beta\epsilon_2} = e^{-\beta\epsilon_2}(\delta(\tau, 0) + \delta(\tau, 1) + \delta(\tau, 2) + \delta(\tau, 3))$ から、どのスピン対状態に対しても同じ確率 $p_v = e^{-\beta\epsilon_2}/A$ で生じるので、結合にならない。 即ち、物理的非結合を表す。 それに対し、確率 p_l と p_j で生じる l-bond と j-bond は対称性を破るので正味の結合、即ち、物理的結合であることが分かる。 なお、この定義は転移の次数の関係ない。

これらの bond で作られる図形には可能なスピン状態が付与され、それ全体が分配関数に寄与する。 但し、スピン状態が与えられない図形は除外する。 v-bond のみから生じた図形では当然マクロにも対称性の破れはなく、無秩序相に寄与する。 その図形に有限サイズの l-bond のクラスターが存在しても、マクロには対称性は破られない。 l-bond の浸透 (∞ クラスター) があって初めてマクロな対称性が破られ、それは COP へ寄与する。 j-bond が浸透している図形から図 3 のようなスピン配列も得られるだろう。 そのとき当然 l-bond も浸透しているが、そのような図形が大勢を占めるとき、IOP が出現するといえる。 したがって、GCL モデルの秩序相として、l-bond のみの浸透相と j-bond の浸透相が存在し得ることが分かる。 後者では、1 色の j-bond の浸透が IOP1、2 色が IOP2 となる。

3. 物理的結合だけを持つモデル——PC 型モデル

v-bond が全く生じない $p_v = 0$ のモデルを物理的結合 (PC) 型のモデルと呼ぼう。 このモデルの特徴は、幾何学的結合と物理的結合が等しいこと、必ず何らかの秩序が存在することである。 PC 型のモデルの例として SOS モデルがある。 相互作用は $V(h_i - h_j) = |h_i - h_j|^m$ ($m = 1$, ASOS; $m = 2$, 離散ガウス; $m = \infty$, RSOS) なので、 $|h_i - h_j| \rightarrow \infty$ の確率 (p_v) はゼロになるからである。 実際にこれらのモデルは高温でも無秩序相はなく、 $\xi = \infty$ のラフ相が存在する。 説明は省略するが、ラフ相は全ての色の j-bond が浸透した秩序相である。

我々の 6 状態 GCL モデルも $\epsilon_2 = \epsilon_3 \rightarrow \infty$ にすれば PC 型モデルになる。 このモデルで隣接スピンが取り得る状態変化は $\sigma_i - \sigma_j \pmod{6} = 0, \pm 1$ である。 このモデルは、 $\sigma_i - \sigma_j = +1$ あるいは -1 を結んでできる曲面は必ず閉じている (自由境界へ出る場合を除き) という大きな幾何学的特徴を持つ。 そのため、説明は省略するが、PC 型 q 状態 GCL モデル ($q > 4$, sc) は同じ制限 ($h_i - h_j = 0, \pm 1$) をもつ 3 次元 RSOS モデルと等価となる。

4. j-bond 浸透相としての IOP の存在証明

証明は 3 段階に分けられる。 先ず、PC 型 GCL モデルで高温側 ($\exp(-\beta\epsilon_1) \sim 1$) に何らかの j-bond 浸透相があることを証明する。 この証明から $\epsilon_1 = 0$ では全ての温度で何か浸透相が存在することになる。 次に、PC 型ではない ($\epsilon_2 = \epsilon_3 < \infty$) GCL モデルで $\epsilon_1 = 0$ の場合を

考える。全温度で存在する j-bond 浸透相が $\epsilon_3 < \infty$ にしたとき存在する条件を調べ、低温側に存在できることを証明する。最後に、モンテカルロの結果から両 IOP の存在する領域は $\epsilon_1 = 0$ を含むので、その結果との比較から、目的が得られる。

第 1 段階の証明としては、先ず Peierls の方法によって低温側に COP が存在することが証明される。相転移があるかどうかは IOP もフェロ相だから従来の方法が使えないので、j-bond 浸透相の高温側での存在を次の（常識的には当たり前の）仮定の上に立ち証明する。即ち、スピン自由度を制限して（例えば $\sigma = 1, 2$ ）COP に比べエントロピーの高い相が実現すれば、制限をはずしても COP が現れることはない。隣接 2 状態へ制限すれば、それは Ising モデルになる。3 次元 Ising モデルは先述のように無秩序相では $\uparrow\downarrow$ 状態が幾何学的に浸透していることが得られている。（注意：PC 型モデルでは幾何学的と物理的は同じ）。したがって、制限を外せばその状態は j-bond 浸透相として存在することになる。

第 2 段階の証明は、 $\epsilon_1 = 0$ の場合に $p_v(> 0)$ で生じる v-bond が作る v-bond クラスタ（隣接している集まりを単にこう呼べば）を考える。サイズ s のクラスタが現れる確率 $p(s)$ の上限を求め、 $s \rightarrow \infty$ で $p(s) \rightarrow 0$ の条件を計算する。その結果、低温側 ($T \leq 0.38, \text{sc}$) に v-bond の ∞ クラスタは存在しないことが得られた。したがって、 $\epsilon_1 = 0$ では j-bond 浸透相は少なくとも低温では破壊されないことが証明された。

第 3 段階では、モンテカルロの結果を利用する。前の証明から $\epsilon_1 = 0$ の低温側にある IOP1 は（1 色の）j-bond 浸透相であると断定できる。中間相の IOP2 は COP でも無秩序相 (DP) でもないこと、また COP も DP も各々 1 つしかないことから、IOP2 は 2 色の j-bond 浸透相しか有り得ないと結論される。したがって、IOP2 と COP 間の相転移は純粋にトポロジカルなものと結論できる。

上記の結果から、3 次元の他のモデル ($q = 3$ 反強磁性 Potts, 積層 3 角格子反強磁性 Ising, 通常の $q = 6$ クロック等) に存在する IOP1 あるいは IOP2 も当然（モデルに応じて定義された）j-bond の浸透相と考えられ、同様に証明も可能だろう。第 1 段階の結果から 3 次元 RSOS モデルでは何か IOP（多分 IOP1 と IOP2）と相転移が存在することが得られる。これは、3 次元 SOS モデルでは（離散ガウスモデルの結果から）相転移は一般に存在しないと信じられていたが、それを否定する新しい結果である。なお、2 次元 GCL モデルにも同様の証明が可能で従来の結果と矛盾しない。

1. H. Müller-Krumbhaar, Phys. Lett. **50A** (1974) 27; D. W. Heerman and D. Stauffer, Z. Phys. **B44** (1981) 339.
2. Y. Ueno, preprint.
3. R. Swendsen and J.-S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58** (1987) 86; R. G. Edwards and A. D. Sokal, Phys. Rev. **D38** (1988) 2009.
4. Y. Ueno and K. Kasono, Phys. Rev. **B48** (1993) 16471.