

連続スピン系におけるミクロカノニカルなモンテカルロ法

大阪府立大学 大学院理学系研究科 神吉 一樹¹

統計力学におけるモンテカルロ法では、通常は温度 T を与えたときの物理量のカノニカル平均を計算する。我々は、エネルギー E を与えたときの物理量、特に温度をミクロカノニカル・アンサンブル上の期待値として計算し、その方法の有用性について検討した [1]。ミクロカノニカルな温度はエントロピーのエネルギー微分として定義されるが、それがミクロカノニカル平均として表されることが Rugh[2] により示された。この方法がハイゼンベルク・スピンや XY スピンなどの連続スピン系にも拡張して適用できることが Nurdin と Schotte[3] により示された。ミクロカノニカル・アンサンブルを生成する方法としては、over-relaxation 法 [4] がある。この方法は、通常のカノニカルなシミュレーションと組み合わせて、効率を上げるという目的でよく使われている [5] が、単独で適用することによりエネルギー一定の状態を次々と作り出すことができる。1つのスピンを内部磁場に対して反転させるという単純な over-relaxation 法では、次のスピンの向きが一意に決まってしまうので、サイトの選び方をランダムにしたり、内部磁場の周りの歳差の角度を乱数により選ぶなどする必要がある。歳差の自由度をもたない XY スピンについては2サイトのスピンについてミクロカノニカルなアップデートの方法 [6] を適用して、エルゴード性の問題が生じないようにした。また、multicanonical 法のアルゴリズムを適用し、ある一定のエネルギー領域でのランダム・ウォークを行いながら、それぞれのエネルギーでの期待値を計算するという方法も考えられる。

まず、ミクロカノニカルな方法を2次転移を起こす模型に適用し、転移点近くで顕著になる有限サイズの効果を除いて、カノニカルなシミュレーションにより求められたものと一致するエネルギーと温度の関係が得られることを確かめた。さらに、温度と磁化について、自己相関関数およびそれを積分した自己相関時間を計算し、over-relaxation 法をメトロポリス法、熱浴法、Creutz のデーモン法 [7] などと比較した。その結果、単純に相関時間が短いという意味で、over-relaxation 法は単一スピンをアップデートするこれらのアルゴリズムの中で最も速いということを示した。ミクロカノニカルな方法における有限サイズスケーリングにより、転移温度や臨界指数の評価をすることは今後の課題である。

次に、ミクロカノニカルな方法を1次転移を起こす模型—単純立方格子上の最近接と次近接のサイト間に相互作用のある反強磁性体—に適用した。この模型は強い1次転移を示すことが知られているが [8, 9]、我々は、XY、ハイゼンベルク、 $O(4)$ スピン系のそれぞれについてミクロカノニカルなシミュレーションを実行し、温度はエネルギーについての非単調な関数となることを示した。また、この1次転移は "order by disorder" の効果により collinear なスピン配列が選択され

¹E-mail: kanki@p.s.osakafu-u.ac.jp

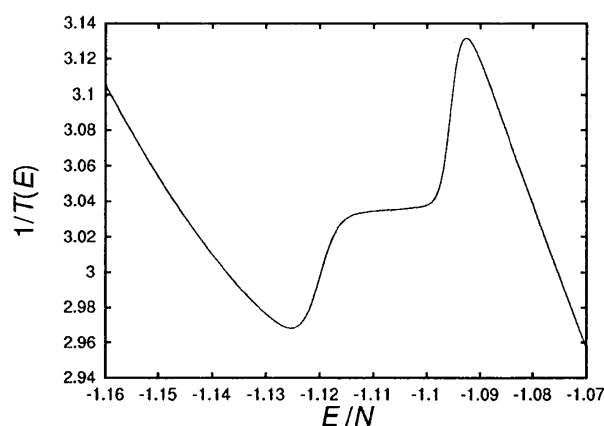


図 1: 単純立方格子 ($20 \times 20 \times 20$, 周期的境界条件) 上のハイゼンベルク反強磁性模型についてのミクロカノニカルな温度の計算結果。相互作用の大きさは最近接スピ間が $J_1 = 1$ 、次近接スピ間が $J_2 = 0.26J_1$ で、いずれも反強磁性的とした。

て生じる Z_3 対称性の破れに由来すると考えられる。計算結果の例を図 1 に示す。また、弱い 1 次相転移を示す [10, 11] 積層三角格子上的 XY 模型について、ミクロカノニカルなシミュレーションを実行し、1 次相転移の性質が 120° 程度以上の大きな系で現れることを示した [12]。

参考文献

- [1] K. Kanki, D. Loison and K. D. Schotte, Eur. Phys. J. B (2005) 出版予定.
- [2] H.H. Rugh, J. Phys. A: Math. Gen. **31**, 7761 (1998) および Phys. Rev. Lett. **78**, 772 (1997).
- [3] W. B. Nurdin and K. D. Schotte, Phys. Rev. E **61**, 3579 (2000); Physica A **308**, 209 (2002).
- [4] M. Creutz, Phys. Rev. D **36**, 515 (1987).
- [5] 例えば、D. Loison and P. Simon, Phys. Rev. B **61**, 6114 (2000).
- [6] A. Cruz, L. A. Fernández, D. Iñiguez and A. Tarancón, Phys. Lett. B **374**, 152 (1996)
- [7] M. Creutz, Phys. Rev. Lett. **50**, 1411 (1983).
- [8] J. L. Alonso et al., Phys. Rev. B **53**, 2537 (1996);
- [9] C. Pinettes and H. T. Diep, J. Appl. Phys. **83**, 6317 (1998).
- [10] D. Loison, in *Frustrated Spin Systems*, ed. H. T. Diep (World Scientific, 2004), およびその参考文献.
- [11] M. Itakura, J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 74 (2003).
- [12] K. Kanki, 投稿準備中.