

17. カイラル相転移と超有効場理論

東大理 川島 直輝 ・ 鈴木 増雄

二次元三角格子上の反強磁性回転子模型は既に幾つかの研究事例に見られる様に興味深い相図及び臨界現象を示す。特に顕著な性質はその秩序相の中に現れる。この系はもとのスピンでみると回転対称性を持っているためMermin-Wagnerの定理により有限の自発磁化の出現は禁止されているが、カイラリティと呼ばれる量に関しては $Z(2)$ の対称性を持つ。そのためこの量に関して(反)強磁性イジングモデルに見られる様な秩序・無秩序型の相転移の存在が期待される。実際にこの様な相転移の存在はモンテカルロ=シミュレーション等によって確認されている(ref. 1)。しかし、カイラリティ間の有効相互作用についてはその様な描像が可能であるかどうかを含めてあまり知られていない為、直ちにこのモデルの臨界現象がイジングモデルのそれと同じであるとは結論出来ない。モンテカルロ=シミュレーションによればその答えはYESである。即ちカイラリティに関係した全ての臨界指数はイジングモデルのそれと一致する。例えば、比熱は対数発散し、カイラリティの揺らぎは系の温度と臨界温度との差の $-7/4$ 乗に比例して発散する等がそれらの数値計算の結果である。一方、 $Z(2)$ 対称性とは別にこの系はスピン空間での回転に関する連続的対称性を持っている。強磁性の回転子模型の場合にはこの対称性はKT転移を引き起こすことがよく知られている。そのためこのモデルの場合にもKT的な相転移が予想される。数値計算の結果によれば、イジング的な転移とKT的な転移が別個に存在するとしても両者の転移温度は極めて近く、転移点が一つなのか二つなのかを断定することは難しい。例えば宮下-斯波による数値計算では、

$$T_{KT} = 0.502(2) J$$

$$T_{Ising} = 0.513 J$$

と言う結論を出しているのに対し、Lee等は、

$$T_{KT} = T_{Ising} = 0.510(5) J$$

$$|T_{KT} - T_{Ising}| < 0.01 J$$

であるとしている。この様な状況であるので、転移温度及び臨界指数を高い精度

で求められる新しい方法を考えることは意味のあることであろう。

鈴木によって確立されたコヒーレント異常法 (CAM) はこの様な問題に対する一般的な手法を与える (ref. 2)。これによれば、臨界点において発散するある物理量に対して、近似の次数をあげることで真の値に収束する様な近似の無限列が存在するとき、たとえ個々の近似が正しい臨界指数を持たなくとも、発散の強さの漸近的振舞いから正しい臨界現象が予言できる。既に CAM はスピン系を中心とする様々な問題に適用され、その有効性が示されている。しかし、カイラル相転移の様に系を記述する秩序変数が単なる 1 スピンの期待値では無いとき、その様な近似列の構成は自明でなく、この問題に対する満足な平均場型の近似列は存在しなかった。最近、鈴木はこれに対し秩序変数が多点関数であるときにも一般に適用可能な近似の構成手段を提案した (超有効場理論: ref. 3)。従って、これと CAM とを組み合わせることによりカイラル相転移の解明が可能となった。この報告ではそれを実際に適用した結果について述べる。

扱うモデルは以下のものである。

$$H = -J \sum_{(i,j)} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (J > 0)$$

ここで (i,j) は全ての最近接スピン対についての和をとることを表す。また、格子は 2 次元三角格子を考える。このモデルの基底状態はよく知られた 120° 構造であるが、これは局所的なカイラリティーが整列した状態である。局所的なカイラリティーは、

$$X_\mu \equiv (2/\sqrt{27}) (S_{\mu 1} \times S_{\mu 2} + S_{\mu 2} \times S_{\mu 3} + S_{\mu 3} \times S_{\mu 1})$$

で与えられる。ここで $S_{\mu i}$ は μ で番号付けられた小さな三角形 (互いに最近接である 3 つのスピンから成る三角形) に属するものの内、 i 番目の副格子に含まれるスピンを表す 2 成分ベクトルである。カイラリティー X は X_μ の全ての μ にわたる和である。

さて、超有効場理論 (SEFT) によれば系を記述するハミルトニアン H 、および期待される秩序変数 Q が与えられたとき、平均場近似 (超有効場近似) を構成する方法は次の様なものである。まず有効場を表す項として、

$$H_{\text{eff}} = - \sum_{\mu \in \partial \Omega} \Lambda_\mu Q_\mu$$

を考える。但し、 Ω は扱うクラスター Ω に含まれる小三角形の内、クラスター

の外部と直接的な相互作用を持つものの集合である。(この際、従来の平均場近似の様に Q がもとのハミルトニアン分割によって得られるものであることは必ずしも必要ではない。) 実際に扱うハミルトニアンはこれにクラスターの外部を切り捨てたもとのハミルトニアンの一部 H_0 を加えたものである。即ち、

$$H_{\text{SEFT}} = H_0 - H_{\text{eff}}$$

となる。更に、変分パラメータ Λ_μ は Bethe 近似と同様のセルフ=コンシステント条件、

$$\langle Q_0 \rangle = \langle Q_\mu \rangle \quad (\text{全ての } \mu \in \partial\Omega \text{ について})$$

によって決定する。この近似で Q に関する感受率を計算するとそれは一般に平均場型の特異性を持つ。また、幾つかのクラスターのサイズについて感受率を計算することにより次に述べるCAMが適用可能な近似の列を作ることが出来る。

CAMは前述の様な物理量に対する近似列から真の臨界現象を予言する方法である。次の様な状況を考えよう。まずパラメータ x に依存する物理量を $Y(x)$ 、およびそれに対する近似列を $\{Y^{(n)}(x)\}$ としよう。ここで、 $Y(x)$ は $x = x_c^*$ において特異的であるとする。即ち、
 $Y(x) \sim (x_c^* - x)^{-\tau} (Y_0 + Y_1(x_c^* - x) + Y_2(x_c^* - x)^2 + \dots)$
 また、 $Y^{(n)}(x)$ は近似的な転移点 $x = x_c^{(n)}$ において、

$$Y^{(n)}(x) \sim \bar{Y}^{(n)} \times (x_c^{(n)} - x)^{-\tau_0}$$

の様に振舞うものとする。

この時、 $\bar{Y}^{(n)}$ と $x_c^{(n)}$ の間に、

$$\bar{Y}^{(n)} \propto (x_c^* - x_c^{(n)})^{-\phi}$$

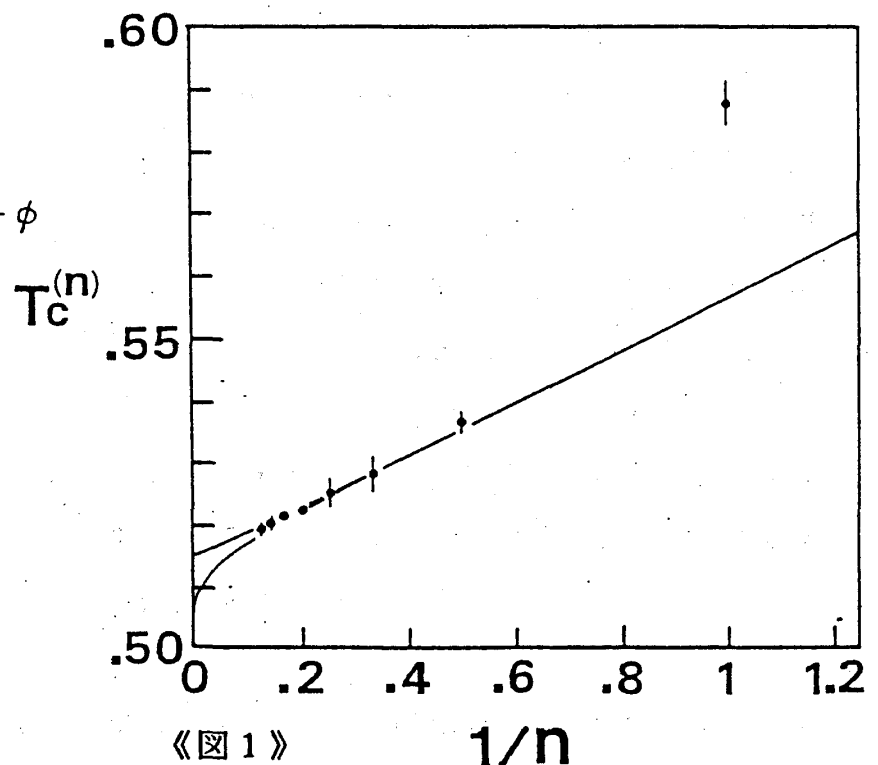
$$\text{及び、 } \tau = \tau_0 + \phi$$

の関係が存在する。これら

の関係式を用いれば x_c^*

及び τ を求めることが出来る。ここでは Q_μ として局所的なカイラリティー

X_μ と副格子磁化に対応する M_μ を考える。 $Y(x)$



《図1》

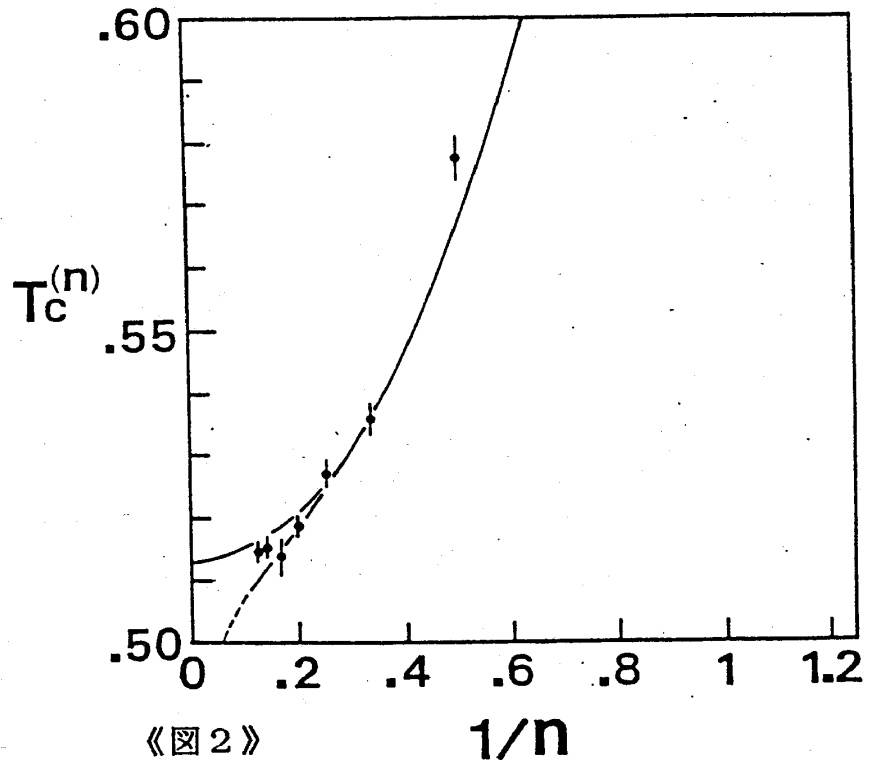
はそれぞれの秩序変数の揺らぎであり、 x は温度の逆数である。計算は数値的に、モンテカルロ法を用いて行った。図1は Q としてカイラリティーをとったときに得られた近似的な臨界温度である。図の横軸はクラスターの一次元的なサイズ n の逆数を示し、最大クラスター ($n=8$) は651個のスピン、最小クラスター ($n=1$) は21個のスピンを含む。この図からも臨界点に関する近似列が最初に挙げた他の数値計算の結果である $T_c \sim 0.51$ に正しく収束している様子が分かるであろう。図2は Q として

$$M_\mu = 1/3 (e_1 \cdot S_{\mu 1} + e_2 \cdot S_{\mu 2} + e_3 \cdot S_{\mu 3})$$

$$e_i = (\cos \theta_i, \sin \theta_i)$$

$$\theta_1 = 0^\circ, \quad \theta_2 = 120^\circ, \quad \theta_3 = 240^\circ$$

を用いた時の同様の図である。この系は低温側でこの秩序変数に関する長距離秩序、即ち副格子磁化を持たないことが知られているが、転移点で揺らぎは発散する。図2に示された近似的な臨界温度はこの特異性に対応すると考えられるが、モンテカルロ法のステップ数が少ないこともあり n を無限大にしたときに図1と同じ温度に収束するかど



《図2》

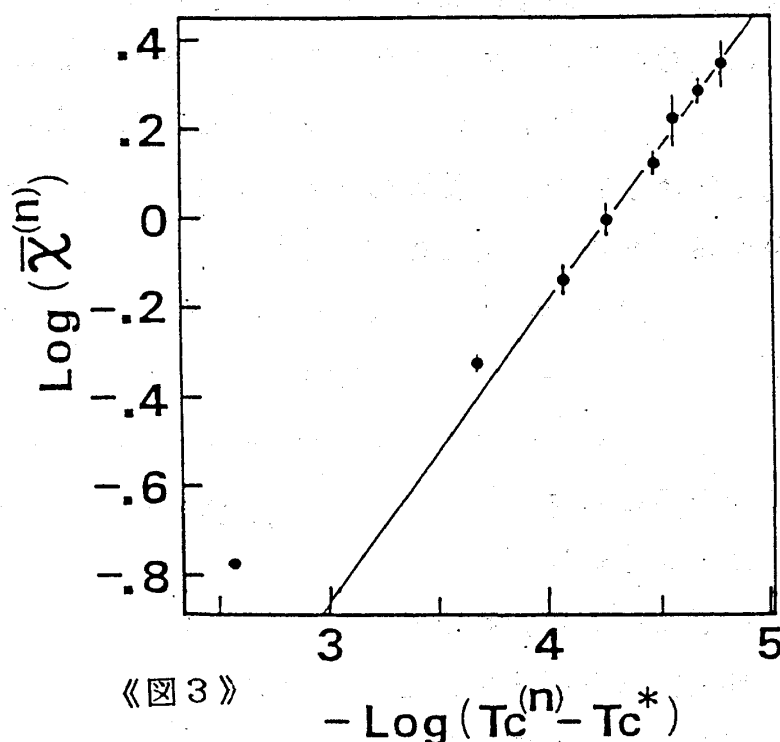
うかは図から直ちに判断することが出来ない。図3は $Q=X$ のときの近似列に対するCAMによる解析を示したものである。最小自乗法によって臨界指数と臨界温度を求めると次の様な結果を得た。

$$T_c = 0.5096(5); \quad \gamma = 1.7(2)$$

これはともに $ref. 1$ の数値計算の結果と矛盾しない。

以上まとめると、これまで平均場型の近似が無かった複雑な秩序変数を持った系に対してもSEFTによってそれが可能であることが分かった。従って、

CAMを組み合わせることで臨界現象の定量的な解析が可能である。これらの方法の有効性はカイラル相転移に対する今回の適用例により確かめられた。特に扱ったクラスターが小さいにもかかわらず求められた臨界温度の精度は高い。臨界指数についてはイジングモデルのものと一致することを示唆しているが、別の可能性を排除するほどの精度ではない。今後の期待される応用としては、スピングラスへの応用があり、その一部は既に進行中である。また電子系への応用も興味深い。



《図3》

【参考文献】

- 1) S. Miyashita and H. Shiba,
J. Phys. Soc. Jpn. 52 (1984) 1145.
D. H. Lee, et. al.,
Phys. Rev. Lett. 52 (1984) 433,
Phys. Rev. B33 (1986) 450.
- 2) M. Suzuki,
J. Phys. Soc. Jpn. 55 (1986) 4205.
- 3) M. Suzuki,
J. Phys. Soc. Jpn. 57 (1988) 683,
J. Phys. Soc. Jpn. 57 (1988) 2310.
- 4) N. Kawashima and M. Suzuki,
to be submitted.