

離散対称性をもつスピン系のモンテカルロシミュレーション における状態空間を拡大する有効な技法

神戸大学 自然科学 杉本 弘治¹

1 はじめに

2次元 Fulley Frustrated XY モデル (2DFFXY モデル) では、フラストレーションの効果により低温で新たに複数のスピンにより定義されるカイラル自由度と離散的な Z_2 の対称性が生まれる。2DFFXY モデルは、もともとスピンが持つ連続的な $SO(2)$ の対称性もあわせて $SO(2) \times Z_2$ の対称性を持っている。この Z_2 の転移と $SO(2)$ の転移が同時に起こるのか、それとも別々の温度で起こるのかは、未だに決着のついていない問題である [1]。結論が得られていない一つの原因として、この系の転移が別々の温度で起こると主張する論文でもその転移の温度が非常に近いことが挙げられる。また、転移が一つしか存在しない場合には、これまでのような二つの転移がどこで起きるかを調べる手法では決着をつけるのには不十分だと考えられる。

そのため、この系の臨界特性を知るためには従来のやり方で統計を上げるのではなく、転移の性質を露わに出来るような新しい手法が必要だと考えられる。

2 状態空間の拡張

転移の性質を知る上で重要な因子として転移点近傍での長波長のゆらぎがある。周期境界条件を用いたシミュレーションでは、システムサイズ以上のゆらぎの長波長成分が抑制されている。シミュレーションの中にゆらぎの長波長成分の情報を入れることにより、臨界現象の性質を効率的に詳しく知ることができる可能性がある。しかしながらシステムサイズが有限の系でも、境界条件自身にゆらぎを許すことでシミュレーションにシステムサイズ以上の長波長のゆらぎの一部を取り入れることができる。すなわち、境界条件自身をゆらがせることで、シミュレーションでサンプリングされる状態空間を拡大することが可能となる。

連続対称性をもつスピン系での状態空間を拡張させる技法を用いたシミュレーションは Olsson によって行われた [2]。これは、Saslow、Gabey らが、不整合構造をもつ系における周期境界条件に関する問題を解決するために提唱したスパイラル・アルゴリズム [3] を一般的に拡張して2次元の XY モデルに応用したものである。この技法を用いたシミュレーションにより、Olsson は 2DFFXY モデルの転移は二つ存在し、連続対称性の転移点 T_{KT} が $T_{KT} \approx 0.446$ 、離散対称性の転移点 T_c が $T_c \approx 0.452$ という結果を得た [4]。しかしこのシミュレーションは、スピンの回転自

¹ E-mail: hiroharu@radix.h.kobe-u.ac.jp

由度の長波長のゆらぎのみを考えており、カイラル自由度の長波長のゆらぎを考慮に入れていないことに相当する。スピンの回転自由度の長波長のゆらぎのみを考えることは、スピンの位相の秩序状態を妨げる働きのみを取り入れることになり、そのために実際シミュレーション結果でも T_{KT} が低くなっているという可能性は除外できない。このように2つの対称性の競合が起きていると考えられる系で、片方の長波長のゆらぎのみを取り入れるのは、転移の性質を正しく記述していない可能性がある。

2DFFXY モデルでは、離散的、連続的の2つの対称性 $SO(2) \times Z_2$ を持つことから、この両者を独立に同時に用いることが転移の性質を明らかにする上で重要である。境界条件にゆらぎを取り入れる場合にも、Ising のような離散的な対称性をもつモデルと XY や Heisenberg モデルの連続的な対称性をもつモデルとでは異なる方法が用いられることになる。これは、連続対称性を持つモデルでは無限小変換が可能であるのに対し、連続対称性を持つモデルではそれができないことによる。

3 シミュレーション

本研究の目的は、離散対称性をもつスピン系 (Ising モデル、Potts モデル、2DFFXY モデル等) のモンテカルロシミュレーションにおいて、状態空間のサンプリングを従来用いられる周期境界条件と比較して拡大する技法を開発することにある。2D Ising モデルにおいてこの技法を開発することにした。2D Ising モデルの離散対称性の破れは、解析的に答えが出ていることから、新しい技法の有効性、及び妥当性を見るのに適していると考えられる。

連続対称性をもつスピン系では無限小変換が可能のため任意の状態空間のモードを立たせることが可能であるが、2DIsing モデルで行った今回のシミュレーションでは、周期境界条件でのシミュレーションと比較して、新たに3つのモードを取り入れることが可能となった。3つのモードとは、オリジナルの系に対して、反転させたものを X 軸方向、もしくは Y 軸方向のどちらかのみにコピーし残りにはオリジナルのをコピーしたもの2つと、X、Y とともに反転させたものをコピーしたものである。波数空間で見ると、周期境界条件のサンプリングポイントを $\vec{k} = (0, 0)$ とすると、新たに、 $\vec{k} = (\pi/L_x, 0)$ 、 $\vec{k} = (0, \pi/L_y)$ 、 $\vec{k} = (\pi/L_x, \pi/L_y)$ がサンプルされることになる (図 1)。

次にこの技法を取り入れたシミュレーションの予備計算の結果を示す。エネルギー状態の出現確率、磁化の出現確率のヒストグラムを状態空間を拡大したシミュレーションと周期境界条件を用いたシミュレーションと比較したものが次の図である。この図からわかるように、システムサイズを大きくしていくことで、2つのシミュレーションの値が、同じ値に収束していく傾向がわかる。

今後は、状態空間を拡大したシミュレーションを用いたシミュレーションの結果が周期境界条件を用いた結果と一致することを確認した上で、この技法を用いて 2DFFXY モデルの転移の性質を調べていきたい。

参考文献

- [1] G. Ramirez-Santiago, J. V. José, *Phys. Rev. B* **49** (1994), 9567 ; S. Lee, and K.-C. Lee, *Phys. Rev. B* **49** (1994), 15184 ; H. Kawamura, *J. Phys. Condens. Matter* **10** (1998), 4707 ; D. H. Lee, J. D. Joannopoulos, J. W. Negele, and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **33** (1986), 450.
- [2] P. Olsson. *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3339 (1994)
- [3] W. M. Saslow, M. Gabay, and W. M. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **68** (1992), 3627.
- [4] P. Olsson, *Phys. Rev. Lett.* **75** (1995), 2758.

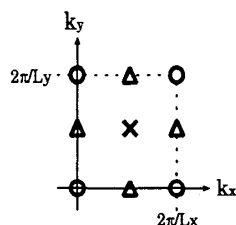
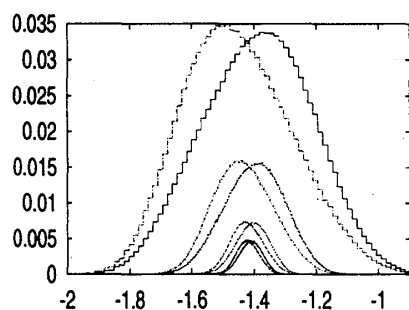
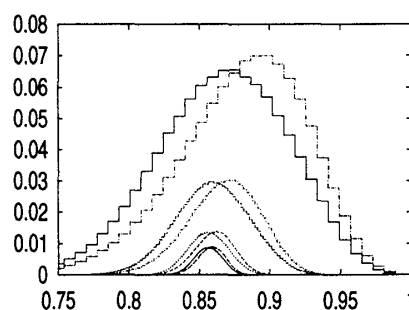


図 1: ○が周期境界条件のサンプリングポイント。新たに△と×がサンプルされる。



fluct. N=16 ———	period. N=16 ———
fluct. N=32 - - - - -	period. N=32 - - - - -
fluct. N=64	period. N=64
fluct. N=96 ———	period. N=96 ———

図 2: 横軸はエネルギー、縦軸は出現確率。fluct. は状態空間のサンプリングを拡大したシミュレーション。period. は周期境界条件を用いたシミュレーション。システムサイズが大きくなるとピークが近付いていく。



fluct. N=16 ———	period. N=16 ———
fluct. N=32 - - - - -	period. N=32 - - - - -
fluct. N=64	period. N=64
fluct. N=96 ———	period. N=96 ———

図 3: 横軸は磁化の値、縦軸は出現確率。fluct. は状態空間のサンプリングを拡大したシミュレーション。period. は周期境界条件を用いたシミュレーション。システムサイズが大きくなるとピークが近付いていく。