

3次元 Z_6 対称性モデルの秩序

東京大学 工学系研究科 轟木 義一¹, 宮下 精二
東京工業大学 理工学研究科 上野 陽太郎

我々はモンテカルロシミュレーションを持ちいて3次元の Z_6 対称性をもつ典型的なモデルである6状態一般化クロックモデルの中間相の存在, およびその性質を調べた. このモデルの中間相はI型不完全秩序相 (IOP1) と呼ばれる二つの状態が混ざった相ただ一つであり, 次に IOP1 の性質を調べたところ, IOP1 は相関長が有限で堅い相であることが解った [1].

1 Introduction

3次元の Z_6 対称性を持つモデルとして6状態クロックモデルの他にも3状態 Potts モデル, 積層三角格子反強磁性 Ising モデルなどがあり, これらのモデルの秩序については古くから大変興味を持たれていた. 2次元の場合では繰り込み群の研究 [2] やシミュレーション [3] を用いた解析の結果, これらのモデルは一回の1次転移か, もしくは2回のKT転移がある事がわかっていた. もし, 2回のKT転移がある場合は中間相としてKT相と呼ばれる2次元XYモデルの低温相に相当する秩序相が現れることが知られているが, 3次元の場合では2次元の場合と同じように3次元XYモデルの低温相 (XY相) にに対応する相が現れるかどうかという事は沢山の議論がなされてきた.

3次元の Z_6 対称性を持つモデルで始めて中間相の存在を指摘したのは目方 [4] であろう. 彼は次近接相互作用を持つ三角格子反強磁性イジングモデルの平均場近似を行った. このモデルの低温相はフェリ相であるが, 中間相として二つの隣り合うフェリ状態が混ざった部分無秩序相 (PD相) が, エントロピーの効果によって現れる事を示した.

一方で, 3次元6状態クロックモデルは, 宮下の詳細なシミュレーション [5] により中間相がない事がわかり, 今まで見えていた中間相は, 相関長が有限だが非常に長いために十分なシステムサイズが取れていなかったからだという事が解った. さらに, このことは押川による繰り込み群の研究 [6] によって Z_6 対称性を持つモデルに特徴的な強い有限サイズ効果である事が説明され, また, それによる考察によって得られたスケーリングを用いる事によって3状態反強磁性 Potts モデルにも中間相がないという事が解った.

しかしながら, このクロックモデルと Potts モデルの二つのモデルは中間相が出にくいパラメータになっていると考えられるので, この二つのモデルで中間相が出なかったからといって, 3次元の Z_6 対称性を持つモデルに中間相がないと結論づけるのは早いだろう.

¹E-mail: todoroki@spin.t.u-tokyo.ac.jp

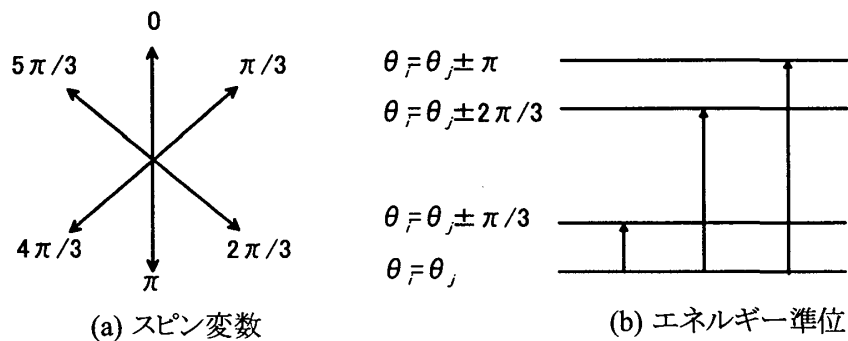


図 1: スピン変数とエネルギー準位

そこで、我々は 6 状態クロックモデルを一般化した 6 状態一般化クロックモデルについて、中間相の出やすいパラメータ領域でシミュレーションを行い中間相の存在をしらべた。また、その性質についても調べた。

2 6 状態一般化クロックモデル

6 状態一般化クロックモデルのハミルトニアンは次のように与えられる。

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} \varepsilon_0 \delta_{\theta_i, \theta_j} + \varepsilon_1 \delta_{\theta_i, \theta_j \pm \pi/3} + \varepsilon_2 \delta_{\theta_i, \theta_j \pm 2\pi/3} + \varepsilon_3 \delta_{\theta_i, \theta_j \pm \pi}, \quad (1)$$

ここで、 $\langle i, j \rangle$ は最近接のについてとる。今の場合、単純立方格子を考えている。また、 θ_i は i 番目の格子点の上のスピン変数であり、 $0, \pi/3, 2\pi/3, \dots, 5\pi/3$ の 6 つの値を取る。このモデルは隣り合うスピンの角度差によって図 1 のようにエネルギーが決まるモデルであり、それを調節することにより、他の Z_6 対称性を持つモデルの有効ハミルトニアンになると考えられる。もし、 $\varepsilon_0 = 0, \varepsilon_1 = 1/3, \varepsilon_2 = 2/3, \varepsilon_3 = 1$ とすれば通常の 6 状態クロックモデルと一致する。今、隣り合う二つの状態が混ざりやすいようなパラメータにしたいのだから、 ε_1 を小さくすればよい。そこで我々は $\varepsilon_0 = 0, \varepsilon_1 = 0.1, \varepsilon_2 = 1, \varepsilon_3 = 1$ とした。

6 状態一般化クロックモデルは以前に上野らによってモンテカルロひねりの方法を用いた研究が行われており [6] PD 相に対応する二つの隣り合う状態が混ざった I 型不完全秩序相 (IOP1) と 3 つの隣り合う状態が混ざった II 型不完全秩序相 (IOP2) という 2 つの中間相が現れるという結果を得ていた。しかし、彼らは通常の 6 状態クロックモデルや 3 状態反強磁性 Potts モデルに現れていたような、 Z_6 対称性を持つモデルに特徴的な有限サイズ効果のために現れるみかけの中間相を考慮していなかった。我々はその点に注意して我々は詳細にシミュレーションを行った。

3 結果

我々は、モンテカルロひねりの方法を用いてシミュレーションを行った。モンテカルロひねりの方法は一對の境界を固定することによってできる界面の自由エネルギーのサイズ依存性によって秩序相を区別する方法である。界面の自由エネルギー ΔF のサイズ依存性 $\Delta F \sim L^\psi$ として、剛性指

表 1: 各秩序状態に対応する剛性指数の値と符号

	無秩序相	IOP1	IOP2	XY	COP
$\phi_1(\pi)$	—	+	+	1	2
$\phi_1(\pi/3)$	—	—	+	1	2
$\phi_2(\pi/3)$	—	+	—	1	—

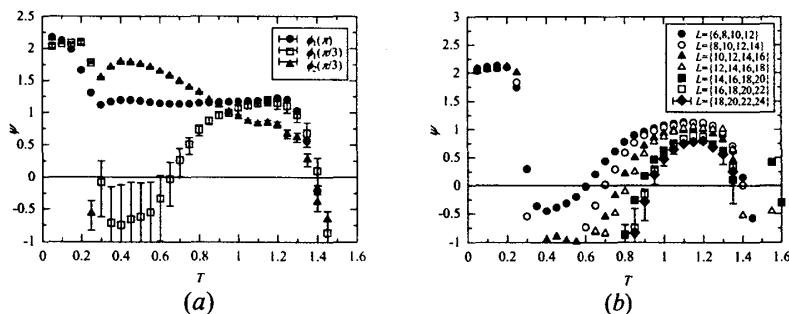


図 2: 剛性指数の温度およびサイズ依存性. (a) 三つの境界条件の下での温度依存性. (b) 境界条件 $\phi_1(\pi/3)$ の下でのサイズおよび温度依存性

数を定義すると、剛性指数の値によって秩序相を区別できる.

$$\psi = \begin{cases} D-1 & \text{ドメインウォール型の界面 } (\xi < \infty) \\ D-2 & \text{スピン波型の界面 } (\xi = \infty) \\ \text{non-integer} & \text{新しいタイプの界面} \end{cases} \quad (2)$$

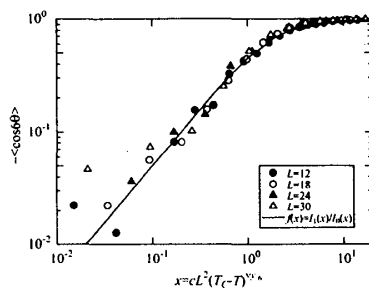
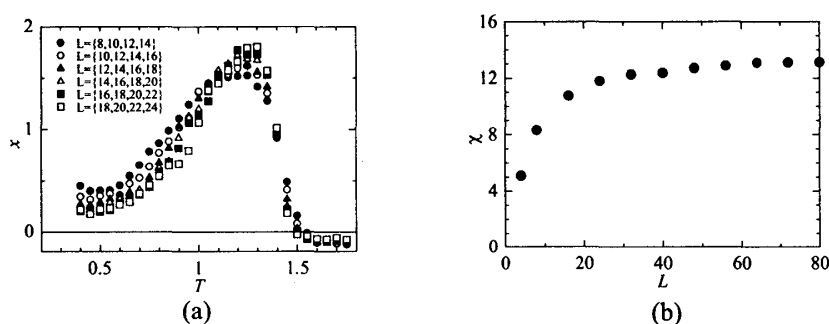
また、界面が現れないような境界条件を課すと、剛性指数の値は有限サイズ効果のために負になる。我々は、考えられる秩序相を区別する為に境界条件として次の三つを用いた。

1. 境界条件 $\phi_1(\pi)$ 片方の境界を状態 1 にし、もう片方を状態 4 に固定する。
2. 境界条件 $\phi_1(\pi/3)$ 片方の境界を状態 1 にし、もう片方を状態 2 に固定する。
3. 境界条件 $\phi_2(\pi/3)$ 片方の境界を状態 1 と 2 の二つの状態とれるようにし、
もう片方を状態 2 と 3 の二つの状態をとれるようにする。

この三つの境界条件を用いると表 1 のように剛性指数の符号と大きさによつての相を区別することができる。

図 2(a) は三つの境界条件に対する剛性指数の温度依存性である。この図より 3 つの相転移がある事がわかる。また秩序相は高温側から無秩序相, XY 相, IOP1, COP の 4 つの相が確認できる。しかしながら XY 相は、通常の 6 状態クロックモデルで見たような、有限サイズ効果によって現れていたものである。実際、サイズをあげていくと、XY 相が消えて行くことが確認できる (図 2(b))。このことは、三つの相転移のうち一つは有限サイズ効果による見かけ上のものであり、実際は XY 相は現れないことを示唆している。

また、押川によって与えられた Z_6 対称性を持つモデルのスケーリング関数を用いると一番高温側の転移点によって IOP1 の領域がスケールできる (図 3)。これは IOP1 の領域のゆらぎが高温側

図 3: $-\langle \cos 6\phi \rangle$ のスケーリングプロット図 4: 揺らぎの温度およびサイズ依存性. (a) x の温度およびサイズ依存性. (b) $T = 0.4$ での x のサイズ依存性

の転移点によって制御できているという事であり, 高温側の転移点と IOP1 の間には別の中間相がありえない事を意味する. これらの事から, 6 状態一般化クロックモデルではパラメータによって中間相が現れる場合がありそれは IOP1 ただ一つである.

つぎに IOP1 の性質を調べた. 我々は次のような揺らぎを調べた.

$$\chi = \frac{1}{L^3} (\langle (p_1 - p_2)^2 \rangle - \langle p_1 - p_2 \rangle^2), \quad (3)$$

これは, もし XY 相であれば $\chi \sim L^2$ というサイズ依存性を示し, COP のような堅い相では $\chi \sim L^0$ というサイズ依存性示す. $\chi \sim L^x$ として, x のサイズおよび温度依存性を図 4(a) に示す. ここで, 高温側の転移点付近では $x = 2$ に近づく, これは見掛け上の XY 相が現れていることを表している. ここで, IOP1 の領域ではサイズをあげていくにしたがって $x = 0$ に向かっていくことが確認できる (4(b)). さらに温度を $T = 0.4$ と固定してさらに大きいサイズでのサイズ依存性を調べたのが図である. すると, サイズを大きくして行くと χ のサイズ依存性がなくなる事が確認できる. したがって, IOP1 は COP と同様な相関長が有限で堅い相だという事がわかる. また, 実際に IOP1 の領域で, $\phi_2(\pi/3)$ の境界条件の下で大きいサイズでの断面のスナップショットを見ると, 図 5 のようにドメインウォール型の界面ができていることが確認できる.

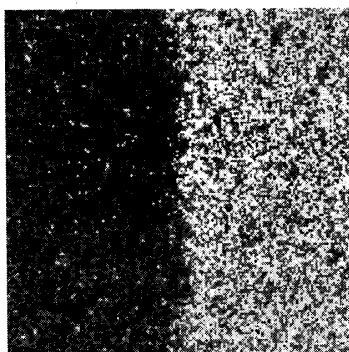


図 5: $\phi_2(\pi/3)$ の境界条件の下での断面のスナップショット. セルの色の濃さで各状態を区別している. ドメインウォール型の界面が確認できる.

4 まとめと考察

我々は 6 状態一般化クロックモデルの秩序について調べた. このモデルでは, 低温相は COP であり, 中間相がでやすいパラメータに設定すると中間相として IOP1 だけが現れる事が解った. この相は, COP と同じ相関長が有限な堅い相である事がわかった.

また, この結論は目方が次近接相互作用がある三角格子の平均場理論で得ていた, PD 相に対応する相であり, 目方の平均場理論以降, PD 相の正当性についてさまざまな議論がなされていたが, 我々の結果で, Z_6 対称性を持つモデルで PD 相に対応する相が存在する事が確かめられたことになる.

参考文献

- [1] N. Todoroki, Y. Ueno and S. Miyashita, preprint
- [2] J. L. Cardy, J. Phys. **A** **26**, (1982), 6201.
- [3] S. Miyashita, H. Kitatani and Y. Kanada, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, (1991), 1523.
- [4] M. Mekata, J. Phys. Soc. Jpn. **42** (1977) 76
- [5] S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997), 3411.
- [6] M. Oshikawa, Phys. Rev. **B** **61** (2000) 3430.
- [7] Y. Ueno and K. Kasono, Phys. Rev. **B** **48** (1993), 16471.