

3. クラスター変分法について

東北大・工 守 田 徹

クラスター変分法について、3つの話をする。第1は、ペア近似（ベージェ近似）のフラストレートした系への適用について、第2は単純化したクラスター変分法について、第3はクラスター変分法によるカイラル秩序の計算についてである。第1と第2の話は、日本物理学会秋の分科会で報告したものである。第3の話は、Fujiki と協力して進めている研究である。

1. ペア近似

イジング模型で、交換相互作用が0でないスピンの対をボンドで結んだ格子を考える。交換相互作用の符号は、スピンの向きが同じ向きを向くときエネルギーが下がるように選んであるものとする。次々のボンドに対する交換相互作用の積が負となる閉じたループをフラストレートしたループと呼ぶことにする。巨視的な数のフラストレートしたループが存在する系を、フラストレートした系と呼ぶことにする。そのような系にクラスター変分法のペア近似を適用すると、自由エネルギーが最低になる状態は、低温では常に常磁性であることが示される。図1の面心平方格子上のイジング模型に対し、厳密解とペア近似の相図の比較を図2に示す。厳密解では、低温相は常に反強磁性相か強磁性相であるが、ペア近似では、フラストレートした系の低温相は常に常磁性になっている。以上の内容の詳細は、文献[1]に掲載されている。図1, 2 は文献[2]による。

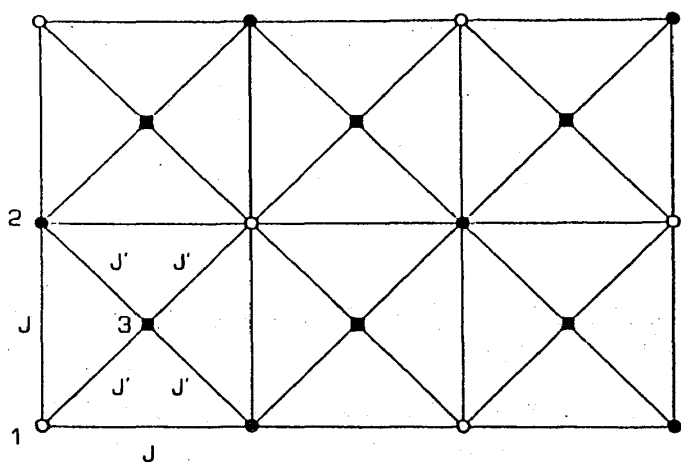
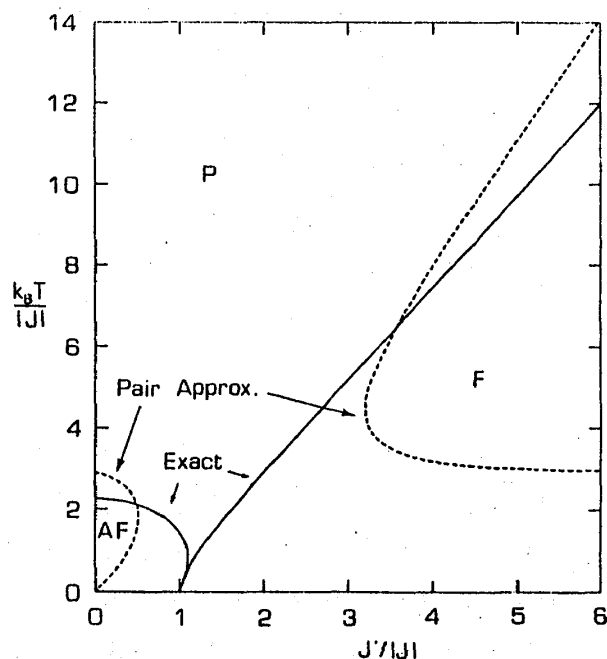


図1. 面心立方格子

図2. $J < 0$ のときの相図

2. 簡単化したクラスター変分法

Suzuki [3] のCAM 理論は、3つの近似による近似値が存在するとき有力な方法である。Katori and Suzuki [4] とFujiki [5] は、フラストレートしていない系に、クラスター変分法の種々の近似を用いCAM 理論を適用した。フラストレートした系では、上述のように、ペア近似が使えなくなる可能性がある。このため、ペア近似に代わる近似で、計算が容易な近似が望まれる。ここで、著者が1959年に書いた論文[6]を思い出す。そこでは、Yvonがベータ近似を導いた方法を拡張した近似が、クラスター変分法を簡単にしたものになっていることが示されている。クラスター変分法では、自由エネルギーは変分関数の最小値として求められる。変分する分布関数間にreducibilityが要求される。Yvonの方法を拡張した方法でも変分関数は同じであるが、分布関数間のreducibilityとしては1スピンの分布関数へのreducibilityのみが要求される。例えば、4角近似では4体、2体、1体の分布関数が現われ、4体と2体から1体へのreducibilityのため、夫々からの有効場が現われる。元来のクラスター変分法では、更に、4体から2体へのreducibilityのため有効相互作用が現われ、常磁性相でもその値は0ではない。簡単化したクラスター変分法では有効相互作用が現われないので、常磁性相の計算は簡単である。

クラスター変分法と簡単化したクラスター変分法を、正方格子、立方格子上のイジング模型に適用したときの臨界温度を、表1で比較した。表1は文献[7]による。

表1. 正方格子、立方格子上の系の臨界温度

	square	sc
cube EFA		8.6181
molecular-field approx.	4.0	6.0
square EFA	3.4659	5.7459
pair approx.	2.8854	4.9326
square-cactus approx.	2.7708	4.8928
cube-cactus approx.		4.8396
square approx. in SCVM	2.6253	4.7611
cube approx. in SCVM		4.7060
square approx. in CVM	2.4257	4.6097
cube approx. in CVM		4.5810
exact	2.2692	
high-temperature series		4.5103

簡単化したクラスター変分法を図1の面心正方格子上のイジング模型に適用したときの4角近似の相図を図3に載せた。SCVM1とSCVM2がその結果である。CVM1とCVM2はクラスター変分法の結果である。クラスター変分法を面心正方格子に適用する際、図4に示すような2種類の4角形に基づく4角近似が考えられる。CVM1とSCVM1は5つの格子点から成る4角の近似で、CVM2とSCVM2は4つの格子点から成る4角の近似である。その夫々は、 $J'/|J| < 1$ と $J'/|J| > 1$ でよい近似になっている。そして、その夫々の範囲で、簡単化した

クラスター近似の4体分布関数からreduceして得られる2体分布関数と2体分布関数が、強磁性的であるか反強磁性的であるかについて、定性的には矛盾がない。反対の範囲ではそれらは矛盾し、近似はずっとよくないことが認められる。

ここの計算の詳細は、文献[7]に掲載予定である。

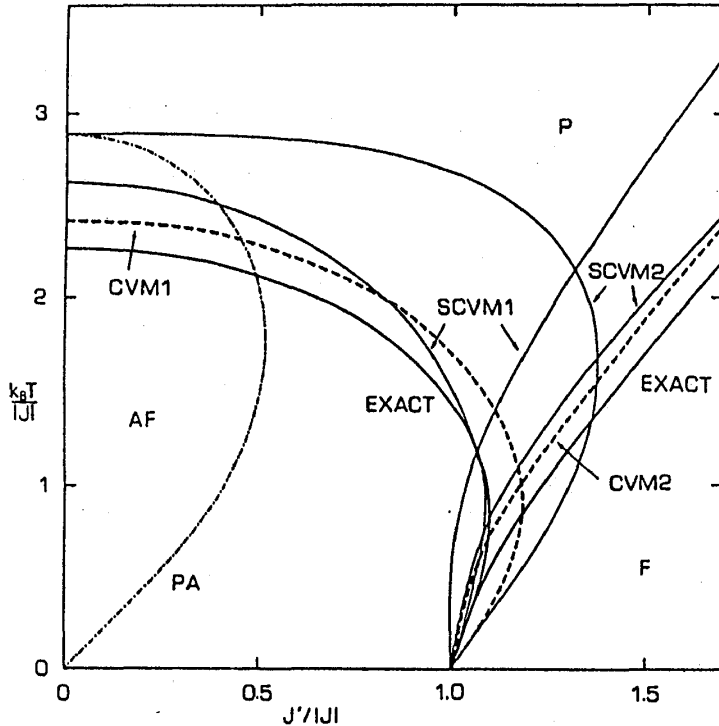


図3.

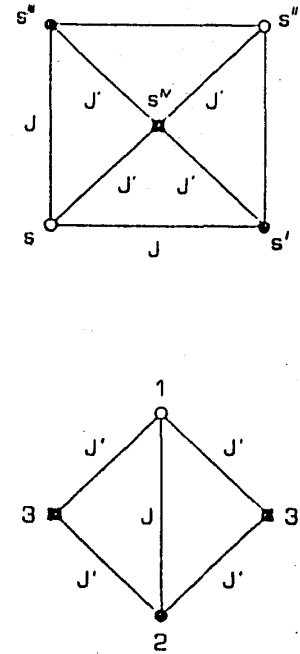


図4.

3. カイラル秩序

カイラル秩序が存在する二次元系では、格子の面は、格子点と格子点の対を結ぶボンドで囲まれた面要素に分けられている[8]。このときボンド同志は交差せず、各格子点で偶数個のボンドが結ばれている。カイラル秩序状態では、各面要素はカイラルリティ+又は-の状態にある。ボンドで接した2つの面要素のカイラルリティは相異なる。このようなカイラル秩序状態を考察するときには、ボンドに向きを、どの面要素の周も次々のボンドの向きに沿って一周できるようにつけるものとする。面要素のカイラルリティは、その周りのスピンを、ボンドの向きに沿って、 $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \dots, \mathbf{s}_l$ と呼ぶことにすれば

$$X_{pl} = \gamma_{pl} \left\langle \sum_{j=1}^l \mathbf{s}_j \times \mathbf{s}_{j+1} \right\rangle$$

で計算される。ここで $\mathbf{s}_{l+1}$ は $\mathbf{s}_1$ を表すものとする。 γ_{pl} は面要素の周りのボンドの向きが時計周りのとき-1、その逆のとき+1とする。

ここでボンドについて、その向きにスピンを $\mathbf{s}$ と $\mathbf{s}'$ として、 $\langle \mathbf{s} \times \mathbf{s}' \rangle$ をボンドのカイラル

ティ X_b と呼ぶ。すべてのボンドについてそのカイラリティを計算すれば、面要素のカイラリティも計算できることになる。ボンドのカイラリティは2つのスピンの相関関数から計算される。

三角格子上の n クロックモデルについて、カイラリティを与える対相関関数をクラスター変分法で計算する最低近似は3角近似である。三角格子の格子点を3つの副格子1, 2, 3に分け、ボンドの向きは副格子1, 2, 3の格子点から、それぞれ副格子2, 3, 1の格子点に向くようにつけるものとする。3つの副格子のスピンの向きを、120度ずつ異なる向きを基準に測り、すべての格子点、すべてのボンドは同等であるとして、クラスター変分法の3角近似を適用した。 $n=6, 12$ の n クロックモデルに対し、磁化 $m = \langle \mathbf{s} \rangle$ とカイラリティ $X_b = \langle \mathbf{s} \times \mathbf{s}' \rangle$ の大きさを図5に示した。

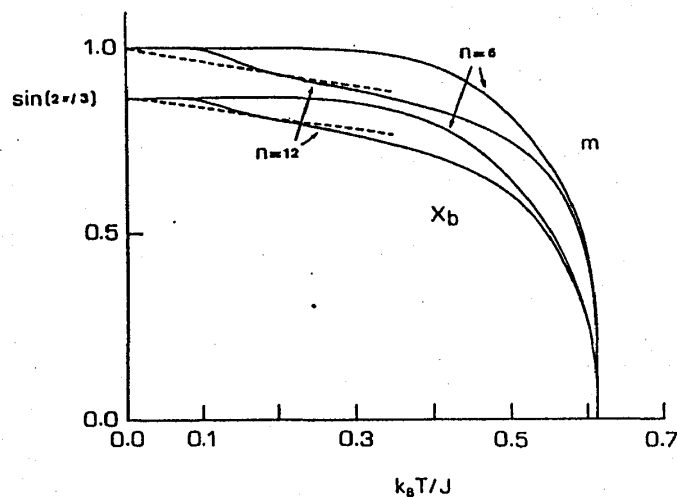


図5

文 献

- [1] T. Morita, Phys. Lett. A132 (1988) 1.
- [2] T. Morita, Physica 141A (1987) 335.
- [3] M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. Suppl. No.67 (1986) 1.
- [4] M. Katori and M. Suzuki, J. Phys. Soc. Japan 57 (1988) 3753.
- [5] S. Fujiki, in Proceedings of YKIS'88 (Springer-Verlag), to appear.
- [6] T. Morita, J. Phys. Soc. Japan 14 (1959) 563.
- [7] T. Morita, Physica A (1989), to appear.
- [8] S. Miyashita and H. Shiba, J. Phys. Soc. Japan 53 (1984) 1145.