研究会報告

層状三角格子反強磁性体の相転移
(reweighting 法による臨界指数)

摂南大学工学部　渡会征三

イジング型異方性をもつ層状三角格子反強磁性体 (スピンは古典系で $|S_i|=1$ とする)

$$H=\sum_{<ij>}^{intra}(S_{ix}S_{jx}+S_{iy}S_{jy}+\alpha S_{iz}S_{jz})-\sum_{<ik>}^{inter}S_iS_k \qquad (1)$$

はモンテカルロシミュレーションにより,[1] 逐次相転移 ($\alpha=1.6$ で $T_{c1}\sim1.5, T_{c2}\sim0.9$) を示すことが知られている。 その比熱 C と磁気相図の概略は図 1 のようになっている。

ここでは reweighting 法[2]により二つの転移点における臨界指数を求めてみるが、結果はまだ予備的な段階のものである。 reweighting されるモンテカルロデータは第 1 相転移点付近では 温度 $T_0=1.471$ で、第 2 相転移点付近では $T_0=0.865$ で、 $L=18\sim48$ のサイズについて求めたものである。 初期状態にランダムなスピン配列をとった後、5000MCS (モンテカルロステップ数) を平衡化のために費やし 200000MCS にわたり系のエネルギー E, 3 つの副格子磁化ベクトルの計 1 0 個のデータをファイルに格納した。 そのあと、それらのデータから reweighting 法により適当な物理量の温度依存性を求めるわけである。

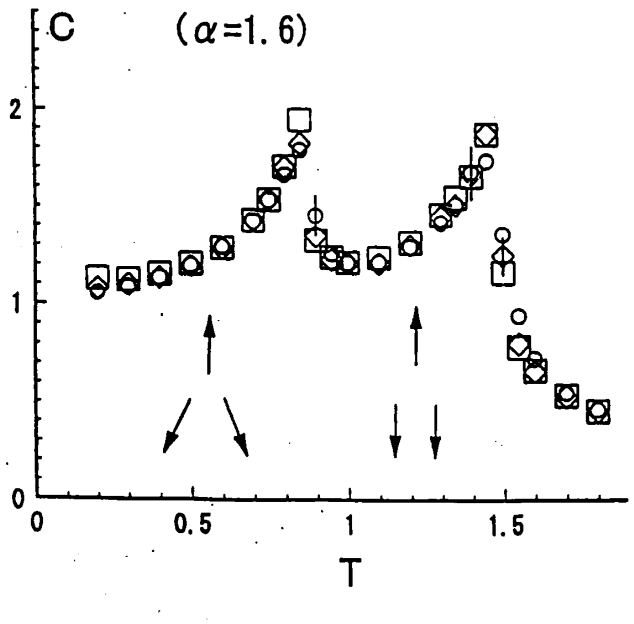


図 1 式 (1) で $\alpha=1.6$ の場合 (今後も同じとする)。 □, ◇, ○は $L=24,18,12$ のデータ。

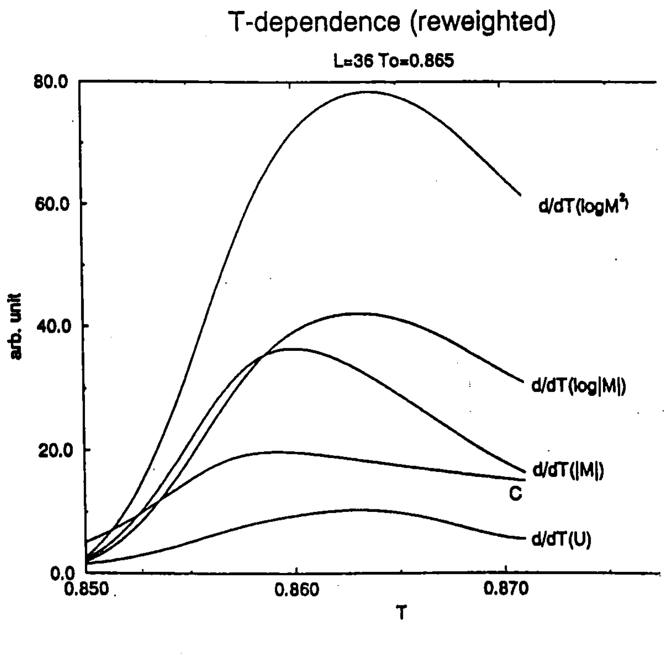


図 2 幾つかの量の温度微分 (C以外)。

求める物理量としては中間相と低温相に分けて

$$|M| = \begin{cases} |M_{Az}| + |M_{Bz}| + |M_{Cz}|, & (T_{c2} < T \le T_{c1}) \\ (M_{Ax}^2 + M_{Ay}^2)^{\frac{1}{2}} + (M_{Bx}^2 + M_{By}^2)^{\frac{1}{2}} + (M_{Cx}^2 + M_{Cy}^2)^{\frac{1}{2}}, & (T \le T_{c2}) \end{cases}$$

$$M^2 = \begin{cases} M_{Az}^2 + M_{Bz}^2 + M_{Cz}^2, & (T_{c2} < T \le T_{c1}) \\ (M_{Ax}^2 + M_{Ay}^2) + (M_{Bx}^2 + M_{By}^2) + (M_{Cx}^2 + M_{Cy}^2), & (T \le T_{c2}) \end{cases}$$

と定義して、Order parameter m, Susceptibility χ, Binder parameter U を以下のように仮定した，

$$m(L) = <|M|>/N, \quad \chi(L) = <M^2>/NT, \quad U(L) = 1 - <M^4>/3<M^2>^2 \qquad (2)$$

ただし $N = L^3$, $<>$ はreweightingされた２０万 MCS データでの平均を表す。図２に $T_0 = 0.865, L = 36$ の場合のいくつかの量の温度依存性を示す。

スケーリング仮定より、例えば $\frac{d}{dT}\log <|M|>$ は

$$\frac{d}{dT}\log <|M|> \sim L^{1/\nu} f(tL^{1/\nu}) \quad (t = |T - T_c|/T_c, f = \text{scaling function}) \qquad (3)$$

のような L 依存性となるが、現時点で T_c はまだ求まっていない。そこで図２の $\frac{d}{dT}\log <|M|>$ のピークを与える温度を仮の $T_c(L)$ として log-log plot から $1/\nu$ を求めたのが図３と図４である。

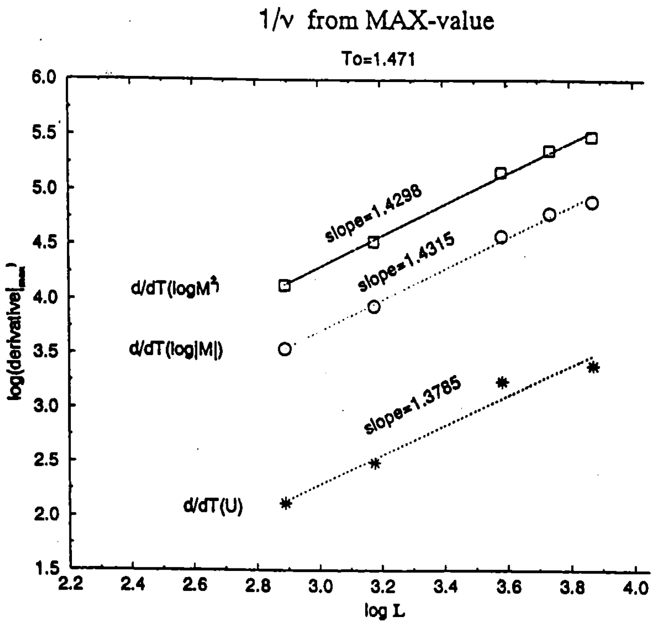


図３ 中間相での $1/\nu$ (log-log plot)。

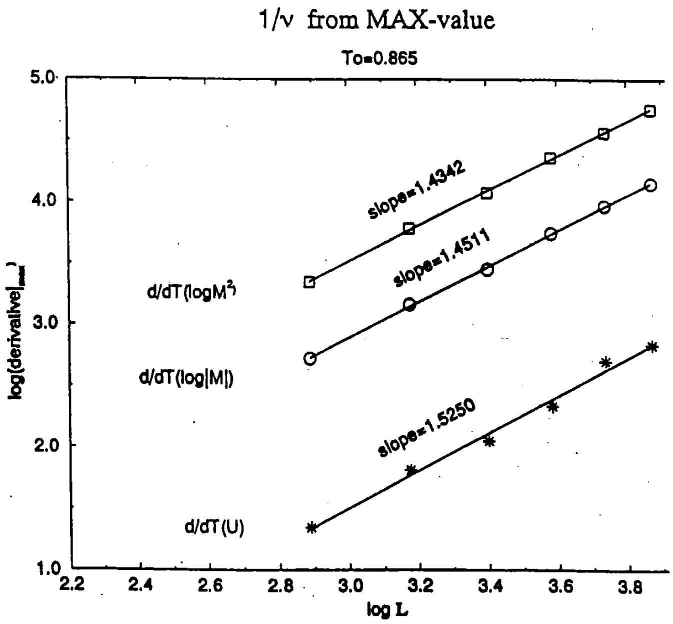


図４ 低温相での $1/\nu$ (log-log plot)。

この結果を見ると、Binder parameter U から求まった $1/\nu$ は他のものとかなりかけ離れていることがわかる。 これは $< M^4 >$ という高次の量を用いているからと思われる。 さてここで図3と図4を参考に両転移点で $1/\nu = 1.45$ と仮定しよう。

一般に有限サイズ系では物理量やその温度微分のピークを与える $T_c(L)$ は $T_c(L) \sim L^{-1/\nu}$ のようにスケールされるので図3と図4での $T_c(L)$ から $T_c = T_c(\infty)$ を外挿してみよう。 中間相での結果は図5に示されていて、 U 以外での平均値では $T_{c1} = 1.4736$ となっている。同様に低温相では $T_{c2} = 0.8599$ となる。

次にこの2つの T_c を採用して式(3)から $1/\nu$ を求めてみる。 中間相でのその結果が図6に示されている。やはり前と同様 U での値はかけ離れているのでこれを捨てて平均値をとると、中間相では $1/\nu = 1.4559$ 低温相では $1/\nu = 1.4511$ を得た。

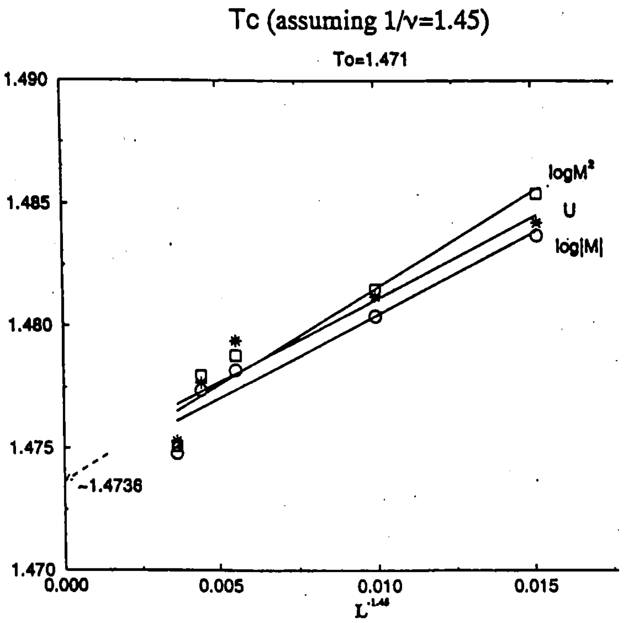


図5 $1/\nu = 1.45$ と仮定した第1相転移点。

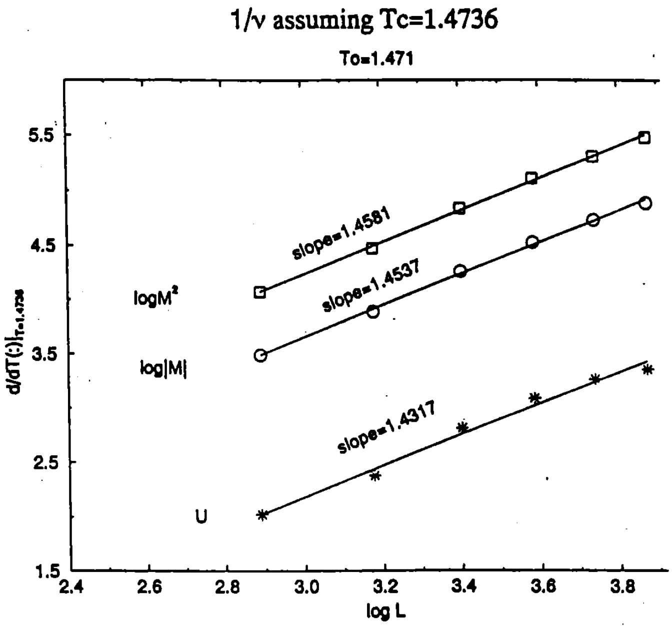


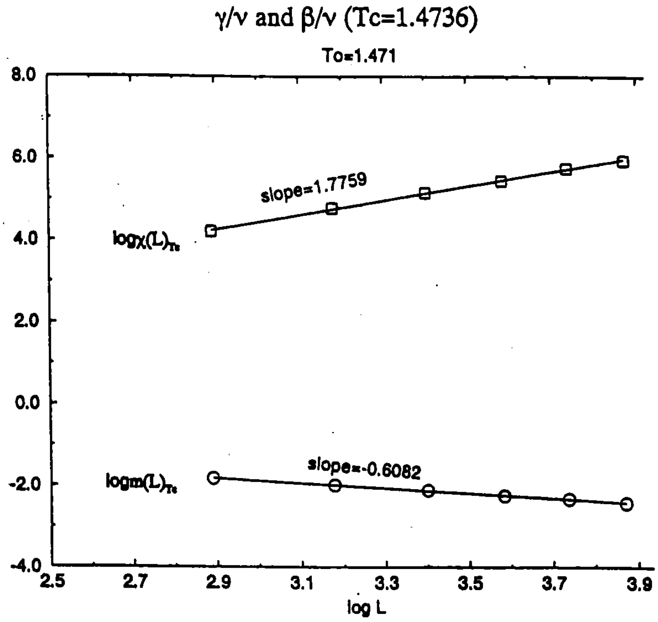
図6 $T_{c1} = 1.4736$ と仮定した $1/\nu$ 。

更にこの $1/\nu$ を使って再度 $T_c(L) \sim L^{-1/\nu}$ から転移温度を計算したが結果は以前の $T_{c1} = 1.4736$, $T_{c2} = 0.8599$ と同じである。 以上のことからここでは

$$T_{c1} = 1.473 \quad (\nu = 0.686), \qquad T_{c2} = 0.860 \quad (\nu = 0.689) \qquad (4)$$

なる指数を採用する。

最後に式 (2) で仮定した Order parameter と Susceptibility から (4) を使いスケーリング仮定より β, γ を求めよう。 図7に T_{c1} での log-log plot を示してある。 このようにして求められた臨界指数を表1にまとめた。



	ν	β	γ
$T_{c1} = 1.473$	0.68	0.41	1.21
$T_{c2} = 0.860$	0.68	0.42	1.26
(３ＤＸＹ)	~ 0.67	0.346	1.32

図７　$1/\nu = 1.4559$ として再度 T_{c1} を計算。

表１　得られた臨界指数。

尚、今回の予備的計算結果では誤差については求めていない。 また m , χ の選び方に指数の値は左右されるであろう。

式 (1) の系では T_{c2} では 副格子磁化の xy 成分の秩序化のため相転移の Universality Class は３ＤＸＹモデルのそれであり、また T_{c1} では 磁化の z 成分が３つの副格子に配置されることからやはり３ＤＸＹモデルのそれであろうと推測される。 参考のため表１に３ＤＸＹモデルでの臨界指数[3]も併記されている。 今回の結果では、T_{c1} と T_{c2} は同じ Universality Class に対応しているように思わせるが３ＤＸＹモデルのそれかどうかはもっと精度をあげて計算する必要があろう。 今後、臨界指数を求めるための適切な物理量の選定および精度の向上を計って計算を進めて行きたい。

参考文献

1) S. Watarai and S. Miyashita : J.Phys.Soc.Jpn. **63** (1994) 1916.
2) A. M. Ferrenberg and D. P. Landau : Phys.Rev. **B44** (1991) 5081.
3) H. Kawamura : J.Phys.Soc.Jpn. **61** (1992) 1299. ただし ν はハイパースケーリング則より見積もった。