Bussei Kenkyu

Kosterlitz-Thouless 相転移系の非平衡緩和解析

東京工業大学 理学部　尾関 之康[1]
東京大学 工学部　伊藤 伸泰[2]

1 はじめに

統計物理においてフラストレーション系やランダム系、低次元系は、複雑な相図が現れ、新しい普遍性クラスの可能性にもつながり、盛んに研究されている。平衡モンテカルロ法は、相転移や臨界現象の分野において広く使われ、様々な結果を導く。もちろんフラストレーション系やランダム系にも応用されているが、低温における特有の「遅い緩和」のため、しばしば困難が生じ、解析可能なサイズを制限し、誤った結論を導くこともある。

非平衡緩和法は、平衡相転移を効率良く解析する数値計算法である。シミュレーションにおける熱平衡化過程の秩序変数 (強磁性では磁化) の緩和の様子から、様々な性質を導き出す [1]。転移温度を始め、各臨界指数の評価も可能である。非平衡緩和法は平衡モンテカルロ法に比べて次のような利点がある。平衡化過程を完了させる必要が無く、平衡状態へ向かう漸近緩和モードの識別できる時間で計算を止められるので、「遅い緩和」の影響を受け難くなる。このため、フラストレーション系やランダム系に於いても、十分大きなサイズの解析が可能になる。

2 次元の古典 XY 模型等に現れる Kosterlitz-Thouless (KT) 転移では、低温相で長距離秩序を伴わず常に相関距離が発散する。また、転移温度に向かって相関距離は冪発散ではなく、指数発散する。このため、転移温度近傍で緩和が異常に遅くなり、精度の良い数値解析が難しくなる。非平衡緩和法で KT 転移を解析する際にも、2 次相転移とは異なる難しさが現れるが、スケーリングによってこれを回避し、精度の良い転移温度の評価が可能になった。そこで、本報告ではこの方法を様々な KT 転移系に適用した結果とその関係について議論する。具体的には、正方格子 FM XY 模型、6 状態 Clock 模型、三角格子 AF XY 模型、正方格子 Fully-Frustrated (FF) XY 模型、正方格子 Gauge Glass 模型 (cosine 型と Gauss 型) を扱った。これらは、KT 転移系であると共に、フラストレーションやランダムネスを含み、複雑な振舞いを示す。

2 KT 転移の非平衡緩和解析

通常の二次相転移の場合、緩和の初期状態として完全秩序状態を選ぶ。系の秩序変数 $m(t)$ の緩和の様子を調べ、漸近形が冪緩和する温度を臨界点と判断する。実用的には log 微分をとり、$\lambda(t) \equiv -\mathrm{d}\log m(t)/\mathrm{d}\log t$ で定義される局所指数が発散すれば無秩序相、ゼロになれば秩序相と判断し、転移温度の上限と下限を評価する。

[1] E-mail:yozeki@stat.phys.titech.ac.jp
[2] E-mail:ito@ap.t.u-tokyo.ac.jp

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

KT転移では、低温相で常に冪緩和が現れ、上のような転移温度の下限の評価ができない。そこでKT転移温度を正確に決めるために、スケーリング式を利用する。

$$m(t,\varepsilon) = \tau(\varepsilon)^{-\lambda}\bar{m}(t/\tau(\varepsilon)) \tag{1}$$

ここで、$\varepsilon \equiv T - T_{\mathrm{KT}}$、$\tau(\varepsilon)$ は温度 ε における緩和時間を表す。式 (1) によって転移温度以上の各温度における緩和時間 $\tau(\varepsilon)$ を決定する。独立なパラメーターは λ と τ であり、パラメーターの変化は曲線の平行移動を起こすのみなので、プロットは比較的容易にできる。一般に、KT転移温度に向かって相関距離は、二次相転移のように冪的にではなく、$\xi \sim \exp(a/\sqrt{\varepsilon})$ のように指数関数的に発散する。そこで、緩和時間も同様に発散すると仮定する。

$$\tau(\varepsilon) = b\exp(a/\sqrt{\varepsilon}) \tag{2}$$

式 (2) を使って、上で求めた緩和時間からKT転移温度を見積もる。KT転移温度を仮定して、式 (2) に対して最小二乗法を行い、残差が最小になる温度を T_{KT} とする。

3 解析結果

各模型で計算は概ね、1000×1001 格子上で行い、$10 \sim 20$ の温度 (KT相の外側で) において最大で 10^5MCS程度まで観測を行い、各温度320サンプル程度の統計平均を行っている。例として図1にFM XY模型の磁化緩和を、図2にスケーリング式 (1) へのフィットを、図3に得られた緩和時間 $\tau(\varepsilon)$ と残差が最小になる曲線 (2) を示した。各模型の解析では、秩序変数や結果として得られる値に違いはあるが、解析の手順や手間、得られる図はこれらと大差無い。

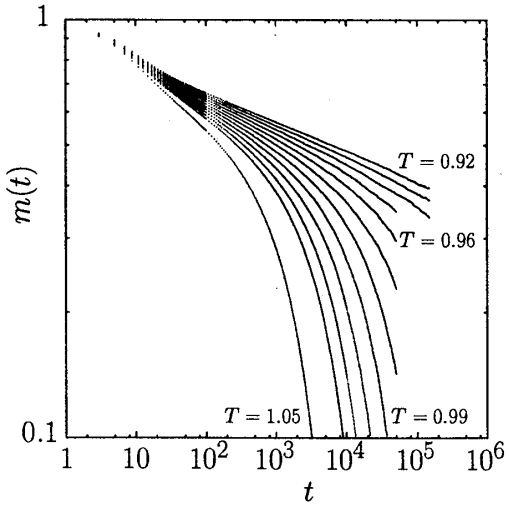

図 1: 正方格子FM XY模型の磁化緩和 $m(t)$ を $T = 0.92, 0.93, 0.94, 0.95, 0.96, 0.97, 0.98, 0.99, 1.00, 1.01, 1.02, 1.05$ についてプロット。

正方格子FM XY模型では解析の正しさを確認した。図に見るように、非常に綺麗なスケーリングフィットが得られる。$T_{\mathrm{KT}} = 0.894(5)$、$\lambda = 0.063$ が得られた。6状態Clock模型では系の離

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

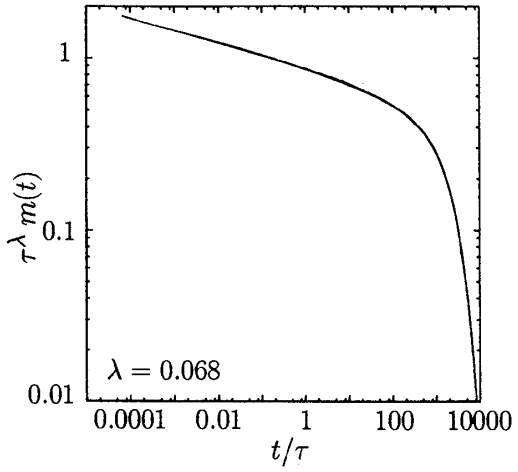

図 2: 磁化緩和のスケーリングプロット。$1.05 \geq T \geq 0.92$ を式 (1) でフィットした。

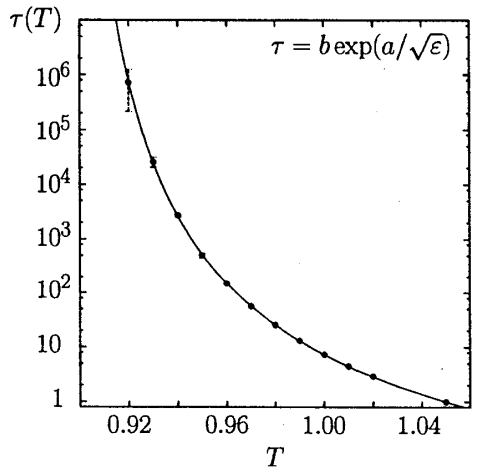

図 3: 緩和時間 $\tau(\varepsilon)$ を $T = 1.05$ を基準にしてプロットした。式 (2) に $T_{\mathrm{KT}} = 0.894$ を適用した。

散性のため低温に FM 相が現れる。高温側の転移 (PM↔KT) では $T_{\mathrm{KT}} = 0.899(5)$、$\lambda = 0.067$ が得られた。低温側の転移 (KT↔FM) では、式 (1) を FM 相に適用する必要があるが、その際に式はこのままで修正は必要無い。$T_{\mathrm{KT}} = 0.704(5)$、$\lambda = 0.029$ が得られた。これらは、平衡モンテカルロ法等の結果とコンシステントな値を示している。

三角格子 AF XY 模型や正方格子 FF XY 模型では、スピンの配向秩序に関する KT 転移の他に、Ising 的な 2 回対称性の破れを伴うカイラル秩序相が現れる。二つの転移が同じ温度で起きるか否か、またカイラル転移が Ising 的な普遍性に属するか否かが長く論争されている。そこで基底状態から出発して、配向秩序変数 $m(t)$ とカイラル秩序変数 $\kappa(t)$ の緩和を調べた。結果は表 1 に示す。両格子共、誤差を越えて $T_{\mathrm{c}} > T_{\mathrm{KT}}$ を示しており、逐次相転移を示唆している。また、揺らぎの緩和によって得られたカイラル転移の臨界指数は、2 次元 Ising とは異なるクラスを示唆している。

Gauge Glass 模型は、$O(2)$ 対称な系にランダムなゲージを導入したもので、XY 模型にランダム Dyalosinski-Moriya 相互作用が加わった系や、磁場中の超伝導セラミクスを記述する。この系

NII-Electronic Library Service

Bussei Kenkyu

格子	T_{KT}	λ	T_{c}	ν	β	η	z
正方格子	0.449(1)	0.090	0.4535(5)	0.851(25)	0.112(7)	0.28(3)	2.48(8)
三角格子	0.508(1)	0.092	0.512(1)	0.845(25)	0.105(8)	0.26(3)	2.51(7)

表 1: FF XY 模型の KT 転移温度 T_{KT} と臨界指数 λ、カイラル転移温度 T_{c} とその臨界指数 ν, β, η, z

は、3 次元にスピングラス相が現れることや、2 次元の KT 相の境界が温度軸に平行になるかリエントラント的に内に曲がるかについての論争がある。また、そもそも KT 相がランダムネスに対して不安定であるという指摘もあり、議論されている。Gauge Glass では $O(2)$ 対称性を有するいくつかの模型が扱われている。cosine 型では、XY 相互作用 $-J\cos(\theta_i - \theta_j)$ に対応したハミルトニアン $\mathcal{H} = -J\sum\cos(\theta_i - \theta_j + A_{ij})$ を扱い、ランダム変数 A_{ij} は $P(A_{ij}) \propto \exp(D\cos A_{ij}))$ の分布に従う。この分布は $D = \infty$ で規則系、$D = 0$ で一様ランダム系に対応する、Gauss 分布に近い形をしている。分布をこのように選ぶことでゲージ理論との比較が可能になる。この他、周期 Gauss ポテンシャルで書かれたいわゆる Villain 模型にランダムなゲージを加えた Gauss 型もよく研究されている。この場合の分布関数は正規 (Gauss) 分布に採れば、ゲージ理論が適用可能になる。ゲージ理論によれば、KT 相の存在する領域は、$J/k_{\mathrm{B}}T \equiv K = D$ 上で最も小さい $D = D_{\mathrm{c}}$ を示す。即ち $D < D_{\mathrm{c}}$ に KT 相は存在しない。そこで、両模型について $K = D$ に沿った転移を解析した結果、共に図 1〜図 3 と同様の図が得られ、cosine 型で $T_{\mathrm{KT}} = 0.325(6)$、$\lambda = 0.050$ が、Gauus 型で $T_{\mathrm{KT}} = 0.370(12)$、$\lambda = 0.046$ が得られた。これより KT 相のランダムネスに対する安定性を確認することができた。

4 まとめ

非平衡緩和による KT 転移系の解析を紹介した。各模型は異なる背景を有し、ハミルトニアンも各々特徴があるが、解析過程は似通っており、方法の汎用性を示している。臨界指数 λ は、簡単な議論から $\eta/2z$ に等しいことが示されるが、得られた各模型の値は決して普遍的とは言えない。ただし、いくつかのクラスに分類できる可能性も見え、今後の研究を待ちたい。

参考文献

[1] レビューとして、伊藤伸泰、尾関之康、野々村禎彦: 日本物理学会誌 **54** (1999) 336; Y. Ozeki, N. Ito and K. Ogawa: Activity Report 1999 (Supercomputer Center, ISSP Uinv. of Tokyo, 2000); 伊藤伸泰、尾関之康: 固体物理 **36** (2001) 839.

NII-Electronic Library Service