

反強磁性三角格子XYモデルの 二種類の相転移と そのユニバーサリティ-クラス

理学研究科 宇宙地球科学専攻
大阪大学

小渕 智之

目標

- ▶ 2次元XYスピン系に起こるKT転移を通して、繰りこみ群を解説すること
 - ▶ 情報の問題における繰りこみ群適用の可能性についても考えたい
- ▶ もうちょっと身近なモチベーション
 - ▶ 身近な人たちのセリフ
 - ▶ 「KT転移なんて幻想です。実際には無いんです。」
 - ▶ 「平均場と繰りこみって何が違うんですか？」
- ▶ これらに(ある程度)答えることが目標
 - ▶ もちろん自分の研究成果も話します。

モデル

▶ ハミルトニアン

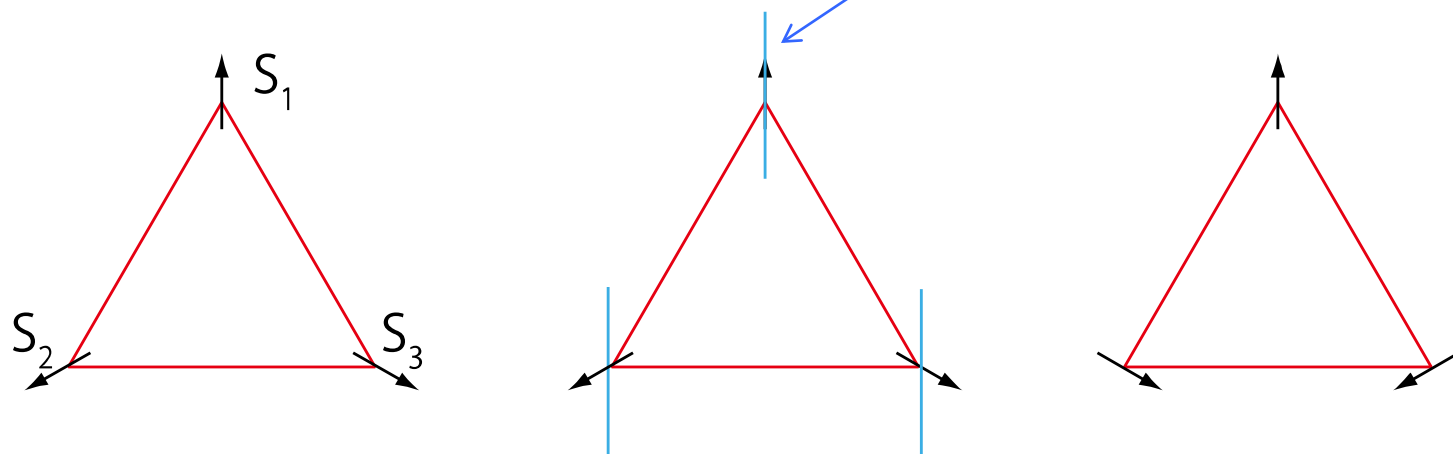
▶ 反強磁性三角格子のXYモデル

$$\mathcal{H}_{XY} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j), (J = -1)$$

▶ 対称性

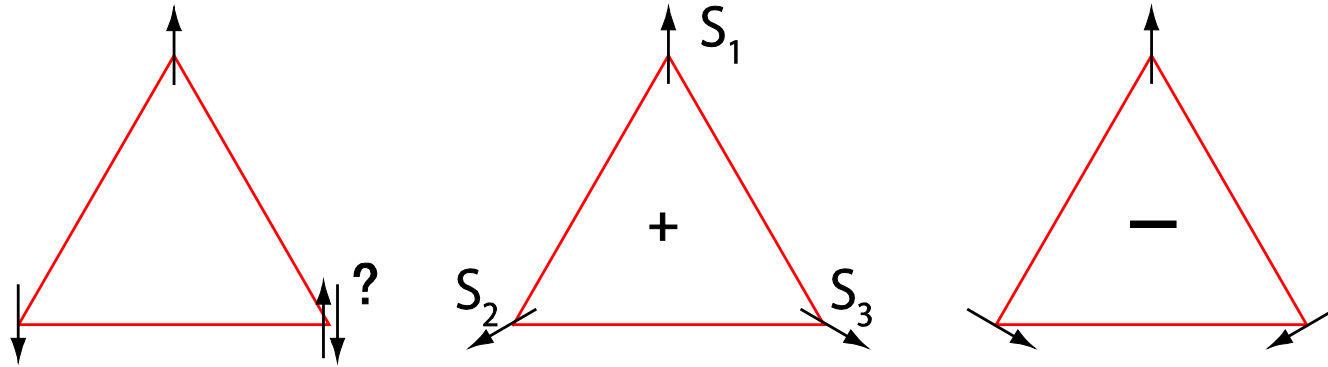
▶ グローバル回転(SO(2)対称性)

▶ 鏡映反転にたいする Z_2 対称性



フラストレーションとカイラリティ

▶ フラストレーション



▶ イジングとベクトルスピンの違い

- ▶ イジング: フラストレーションをもろにうける
⇒ 大量の縮退、相転移無し
- ▶ ベクトルスピン: 適当に開いてフラストレーションを逃がせる
⇒ 相転移有り: 秩序変数 = カイラリティ

$$m_c(p) = \frac{2}{3\sqrt{3}} \mathbf{e}_z \cdot \left(\sum_{\langle i,j \rangle \in \partial p \cap \otimes} \mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j \right)$$

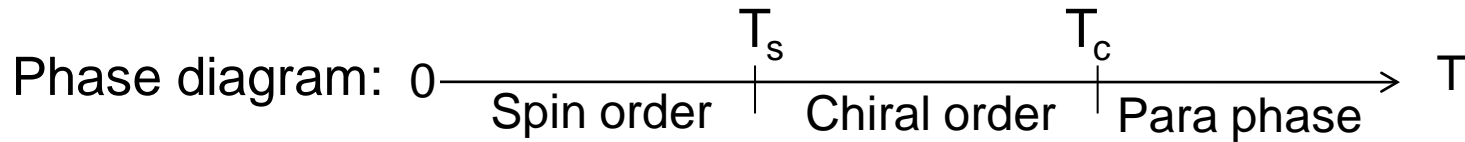
カイラル転移とスピン転移

- ▶ 系の対称性
 - ▶ 鏡映反転: Z_2 対称性
 - ▶ グローバル回転: $SO(2)$ 対称性
- ▶ Mermin-Wagnerの定理
 - ▶ 2次元では $SO(2)$ 対称性は破れない
＝スピンが固まる転移(強磁性など)はない
- ▶ 2次元強磁性XYモデル
 - ▶ Kosterlitz-Thouless(KT)転移という特殊な転移
 - ▶ XYモデルの周期性が生むトポロジカル欠陥による転移
- ▶ 2次元反強磁性XYモデル: 2回の転移が起き得る
 - ▶ カイラル転移 = Z_2 対称性の破れ
 - ▶ スピン転移 = KT的な転移

結果

- ▶ 手法: モンテカルロシミュレーション (普通のメトロポリス)
 - ▶ ヒストグラム法 + オーバーリラクゼーション

▶ 相図



▶ ユニバーサリティークラス

- ▶ カイラル転移 = イジング (鏡映反転の Z_2 対称性の破れ)
- ▶ スピン転移 = KT 的だが臨界指数のずれ (Non-universal KT)
- ▶ 先行研究
 - ▶ カイラル転移 = イジング、3-states ポッツ...
 - ▶ スピン転移 = 準長距離秩序: KT 転移、Non-universal KT、1次転移...
 - 二つが同時に起きる派: 1次転移、Ising かつ KT 転移...

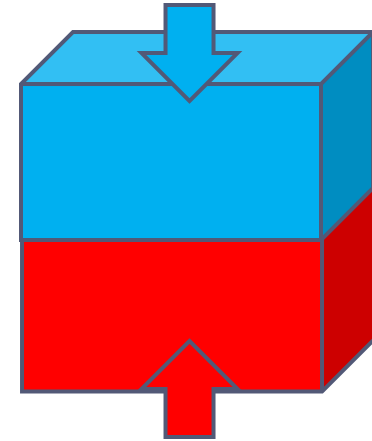
平均場じゃだめ？

- ▶ 答え: 2次元だと全然だめ
- ▶ 平均場→スピンの凍結する単純な相転移
 - ⇔ Mermin-Wagnerの定理
 - ▶ 定性的に既にだめ。
 - ▶ 近似を上げてても(ベーテとか)だめ。臨界指数とか絶望的。
- ▶ 平均場 = 期待値近傍の揺らぎを無視
 - ← 間違いの原因
- ▶ 2次元のように低い次元では、揺らぎを適切に取り込んだ解析が必要
 - ⇒ 繰りこみ群 ← KT転移を準厳密に導出

イジング系の表面転移（ラフニング転移）

▶ 3次元イジングモデル

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j$$



▶ At $T = T_c \approx 4.5$ 強磁性転移

▶ 境界条件

▶ 周期境界条件→単一の強磁性ドメイン

▶ 反周期境界、逆向き固定境界→ドメインウォールの励起

▶ ドメインウォール自体の相転移

▶ 表面の粗さの転移⇔ラフニング転移

▶ 転移温度 $T_r \approx 0.5T_c$

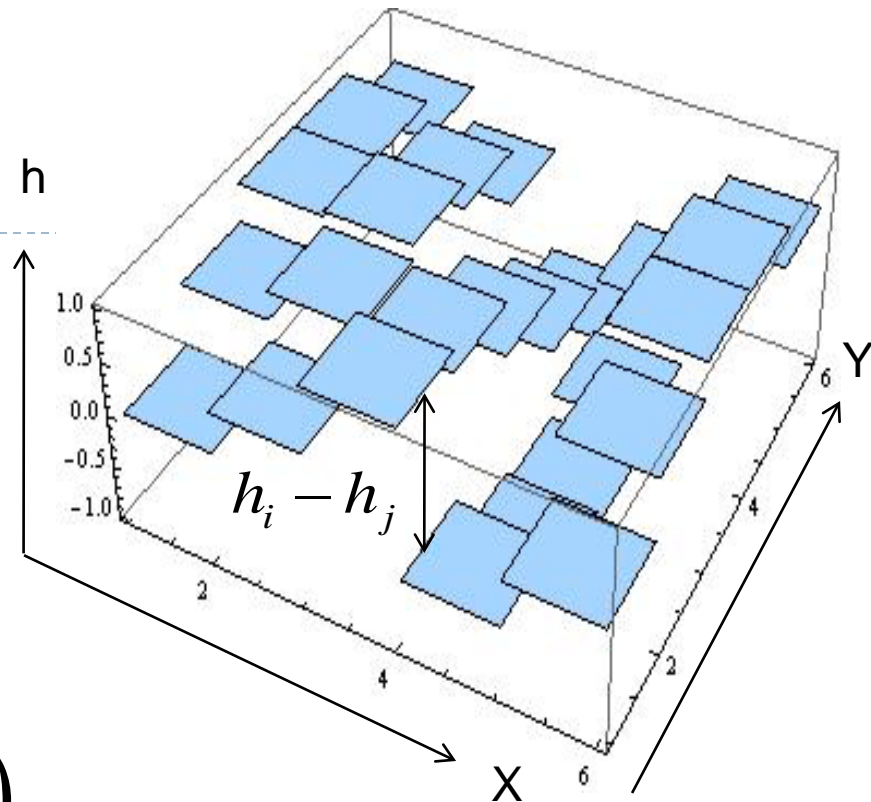
▶ 転移温度以下⇒平坦なドメインウォール

SOS模型

- ▶ ラフニング転移の記述
 - ▶ Solid on Solid (SOS)モデル
- ▶ 分配関数

$$Z = \sum_{\{h_i = -\infty\}}^{\infty} \prod_{\langle i, j \rangle} B_{ij}(h_i - h_j, \beta),$$

$$B_{ij}(h_i - h_j) = \begin{cases} e^{-\beta|h_i - h_j|} : \text{Absolute value SOS(ASOS)} \\ e^{-\beta(h_i - h_j)^2} : \text{Discrete Gaussian(DGSOS)} \end{cases}$$



SOSモデルと(強磁性)XYモデルの関係

XYモデル



ユニバーサリティ

Villainモデル



Duality+
ポアソン和公式

DGSOS



ASOS



ポアソン和公式

CSWモデル

← 繰りこみ群で解析

SOSモデルと(強磁性)XYモデルの関係

XYモデル



$$Z_{XY} = \int \prod_i \frac{d\theta_i}{2\pi} \prod_{\langle i,j \rangle} e^{\beta \cos(\theta_i - \theta_j)} \left(\begin{array}{l} \cos(\theta_i - \theta_j) \\ \approx -\frac{1}{2}(\theta_i - \theta_j)^2 \end{array} \right)$$

Villainモデル



$$Z_V = \int \prod_i \frac{d\theta_i}{2\pi} \prod_{\langle i,j \rangle} \sum_{p_{ij}=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta}{2}(\theta_i - \theta_j - 2\pi p_{ij})^2}$$

DGSOS



CSWモデル

▶ VillainとXY

- ▶ 2π の周期性
- ▶ 力学変数 Θ の並進対称性
- ▶ 低温での振る舞い(スピン波)

→ VillainとXYは同じ(と信じられている)

SOSモデルと(強磁性)XYモデルの関係

XYモデル



Villainモデル



▶ Charged Spin Wave (CSW) モデル

- ▶ スピン波に電荷(離散自由度)が加わっている
 - ▶ 電荷がなければ可解

DGSOS



CSWモデル

$$Z_{CSW} = \sum_{\{q_i = -\infty\}}^{\infty} \int \prod_i d\varphi_i e^{-\frac{1}{2\beta} \sum_{\langle i,j \rangle} (\varphi_i - \varphi_j)^2 + i2\pi \sum_i q_i \varphi_i}$$

← 繰りこみ群で解析

$$Z_{CSW} \xrightarrow{i^\nabla, q_i=0} Z_{SW}$$

可解

CSWの繰りこみ群

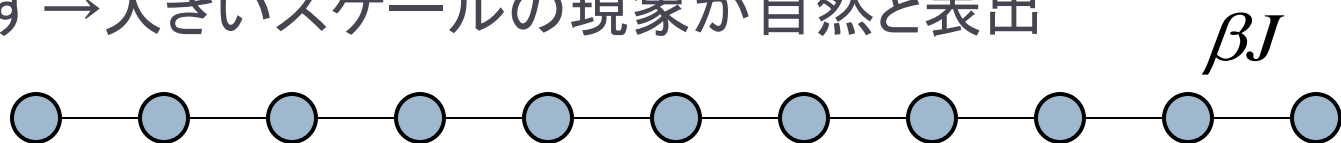
$$Z_{CSW}(\beta) = \sum_{\{q_i = -\infty\}} \int \prod_i d\varphi_i e^{-\frac{1}{2\beta} \sum_{\langle i,j \rangle} (\varphi_i - \varphi_j)^2 + i2\pi \sum_i q_i \varphi_i}$$
$$\Rightarrow Z_{\sin}(\beta) = \int \prod_i d\varphi_i e^{-\frac{1}{2\beta} \sum_{\langle i,j \rangle} (\varphi_i - \varphi_j)^2 + 2y \sum_i \cos(2\pi\varphi_i)} \left(y = e^{-\frac{\pi^2\beta}{2}} \right)$$

▶ いくつかの方法があるけれど

- ▶ サインゴルドンモデル(先に小さい q の和を取る)へ移行
 - ▶ 波数空間繰りこみ群(一番ありふれた繰り込み群)で計算可

▶ 繰りこみ群(の思想)とは？

1. 小さい(長さ)スケールをトレースアウト
2. 残った自由度が成す系を別パラメータの同じ系と見なす
3. 1~2を繰り返す→大きいスケールの現象が自然と表出



CSWの繰りこみ群

$$Z_{CSW}(\beta) = \sum_{\{q_i = -\infty\}} \int \prod_i d\varphi_i e^{-\frac{1}{2\beta} \sum_{\langle i,j \rangle} (\varphi_i - \varphi_j)^2 + i2\pi \sum_i q_i \varphi_i}$$
$$\Rightarrow Z_{\sin}(\beta) = \int \prod_i d\varphi_i e^{-\frac{1}{2\beta} \sum_{\langle i,j \rangle} (\varphi_i - \varphi_j)^2 + 2y \sum_i \cos(2\pi\varphi_i)} \left(y = e^{-\frac{\pi^2\beta}{2}} \right)$$

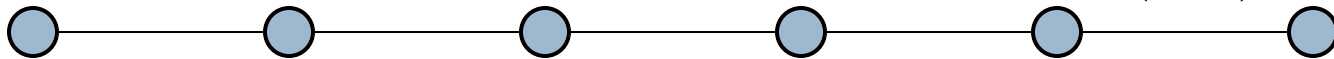
▶ いくつかの方法があるけれど

- ▶ サインゴルドンモデル(先に小さい q の和を取る)へ移行
 - ▶ 波数空間繰りこみ群(一番ありふれた繰り込み群)で計算可

▶ 繰りこみ群(の思想)とは？

1. 小さい(長さ)スケールをトレースアウト
2. 残った自由度が成す系を別パラメータの同じ系と見なす
3. 1~2を繰り返す→大きいスケールの現象が自然と表出

$(\beta J)'$



CSWの繰りこみ群

$$Z_{CSW}(\beta) = \sum_{\{q_i = -\infty\}}^{\infty} \int \prod_i d\varphi_i e^{-\frac{1}{2\beta} \sum_{\langle i,j \rangle} (\varphi_i - \varphi_j)^2 + i2\pi \sum_i q_i \varphi_i}$$
$$\Rightarrow Z_{\sin}(\beta) = \int \prod_i d\varphi_i e^{-\frac{1}{2\beta} \sum_{\langle i,j \rangle} (\varphi_i - \varphi_j)^2 + 2y \sum_i \cos(2\pi\varphi_i)} \left(y = e^{-\frac{\pi^2\beta}{2}} \right)$$

▶ いくつかの方法があるけれど

- ▶ サインゴルドンモデル(先に小さい q の和を取る)へ移行
 - ▶ 波数空間繰りこみ群(一番ありふれた繰り込み群)で計算可

▶ 繰りこみ群(の思想)とは？

1. 小さい(長さ)スケールをトレースアウト
2. 残った自由度が成す系を別パラメータの同じ系と見なす
3. 1~2を繰り返す→大きいスケールの現象が自然と表出

$(\beta J)^n$

サインゴルドンの繰りこみ群

$$Z_{\sin}(\beta) = \int \prod_i d\varphi_i e^{-\frac{1}{2\beta} \sum_{\langle i,j \rangle} (\varphi_i - \varphi_j)^2 + 2y \sum_i \cos(2\pi\varphi_i)} \left(y = e^{-\frac{\pi^2\beta}{2}} \right)$$

▶ 手順

1. 連続化 (格子間隔 $a \rightarrow 0$),
2. フーリエ変換 (波数空間へ移行)

$$Z_{\sin}(\beta) = \int_{0 < |k| < \Lambda} \prod_k d\varphi_k e^{\frac{1}{2} \int dx \left\{ -(\nabla \varphi(\mathbf{x}))^2 + 2y \cos(2\pi\sqrt{\beta}\varphi(\mathbf{x})) \right\}}$$

$$\varphi(\mathbf{x}) = \int dk \varphi(k) e^{ikx}$$

3. 波数の大きい部分 $\Lambda - d\Lambda < |k| < \Lambda$ を積分
4. 積分の影響をパラメータに押し込める $(\beta, y) \rightarrow (\beta', y')$
5. 3~4を繰り返して行った先を見る $(\beta, y) \rightarrow (\beta_{\text{eff}}, y_{\text{eff}})$

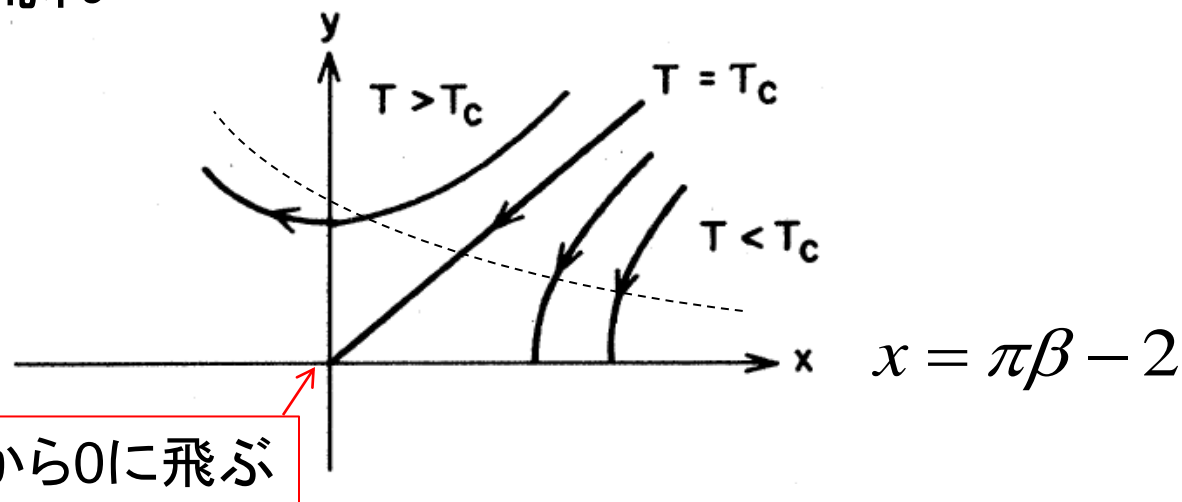
▶ ポイント

- ▶ 物理的意味: 大きい波数成分の消去 \Leftrightarrow 小さい長さスケールの消去
- ▶ 4.が可能: 有意な変数の個数が有限&それを尽くしている

KT転移の描像

$$Z_{\text{sin}} \propto e^{-\frac{1}{2\beta} \sum_{\langle i,j \rangle} (\varphi_i - \varphi_j)^2 + 2y \sum_i \cos(2\pi\varphi_i)}$$

▶ 繰りこみの流れ



β_{eff} は $2/\pi$ から 0 に飛ぶ

▶ 結論

$$Z_V(\beta) = \begin{cases} \text{Para} & (T > T_c) \\ Z_{\text{SW}}(\beta_{\text{eff}}(\beta)) & (T < T_c) \quad \beta_{\text{eff}}(\beta) < \beta \end{cases}$$

▶ 低温では $y \rightarrow 0 \Rightarrow$ Spin Wave で OK

▶ (但し、温度は、離散性の効果でより高温の β_{eff} に繰りこまれる)

スピン波の振る舞い

▶ 相関関数

$$\langle (\theta_0 - \theta_r)^2 \rangle = \begin{cases} e^{-r/\xi} & (T > T_c) \\ r^{-\eta} & (T < T_c) \end{cases} \quad \begin{cases} \xi \propto e^{-c/\sqrt{T-T_c}} & (T \downarrow T_c) \\ \eta = \frac{1}{2\pi\beta_{eff}} & \end{cases}$$

低温ですっと相関長発散 ← 準長距離秩序

▶ KT転移を特徴づける量

- ▶ Helicity modulus Y : ひねりに対する F の変化率 $\propto \beta_{eff}$
- ▶ Vorticity modulus V : $q_{||} = \pm 1$ を導入した時の F の変化率

$$V(T, L) = v_0(T) + v_2(T) \ln L \quad v_2(T) = \begin{cases} 0 & (T > T_c) \\ > 0 & (T < T_c) \end{cases}$$

Helicity Modulus

▶ ひねりの導入

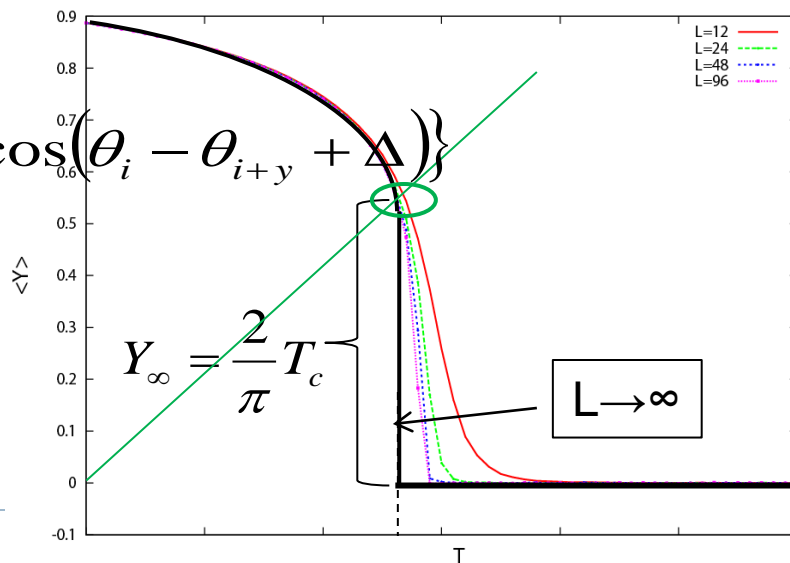
$$Z_{SW}(\beta_{eff}, \Delta) = \int \prod_i d\theta_i e^{-\frac{\beta_{eff}}{2} \sum_i \{(\theta_i - \theta_{i+x})^2 + (\theta_i - \theta_{i+y} + \Delta)^2\}}$$

▶ Helicity Modulus

$$Y \equiv -\frac{1}{\beta} \left. \frac{d^2 \log Z_{SW}(\beta_{eff}, \Delta)}{d\Delta^2} \right|_{\Delta=0} = \frac{\beta_{eff}}{\beta}$$

▶ XYモデルにも定義可能

$$\mathcal{H}_{XY}(\Delta) = -\sum_i \{ \cos(\theta_i - \theta_{i+x}) + \cos(\theta_i - \theta_{i+y} + \Delta) \}$$



話を戻して

- ▶ 反強磁性三角格子上的XYモデルのモンテカルロシミュレーション
- ▶ 物理量

- ▶ カイラル磁化、複素磁化

$$m_c(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{p \in \text{all } \Delta} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_p} m_c(p) \quad m_s(\mathbf{q}) = \left| \frac{\sqrt{2}}{N} \sum_i e^{i(\mathbf{K} + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}_i} \mathbf{S}_i \right|$$

- ▶ ビンダー比

$$g_c = \frac{3}{2} \left(1 - \frac{\langle m_c^4(0) \rangle}{3 \langle m_c^2(0) \rangle^2} \right) \quad g_s = 2 \left(1 - \frac{\langle m_s^4(0) \rangle}{2 \langle m_s^2(0) \rangle^2} \right)$$

- ▶ 相関長(Ornstein-Zernike formを仮定)

$$\xi_{c,s} = \frac{1}{2 \sin(2\pi / \sqrt{3}L)} \sqrt{\frac{\langle m_{c,s}^2(0) \rangle}{\langle m_{c,s}^2(\mathbf{q}_{\min}) \rangle} - 1}$$

- ▶ Helicity modulus, Vorticity modulus

期待される振る舞い

▶ カイラル転移点 (T_c) 近傍

▶ 2次転移

- ▶ 比熱の発散
- ▶ ビンダー比、相関長のクロス

▶ ユニバーサリティー: イジング?

- ▶ 有限サイズスケーリング $\chi_c(T_c, L) \propto L^{2-\eta}$

$$T_c(L) = T_c + aL^{-1/\nu}$$

Ising values

$$\eta = 0.25$$

$$\nu = 1$$

▶ スピン転移点 (T_s) 近傍

▶ 準長距離秩序 (無限次相転移)

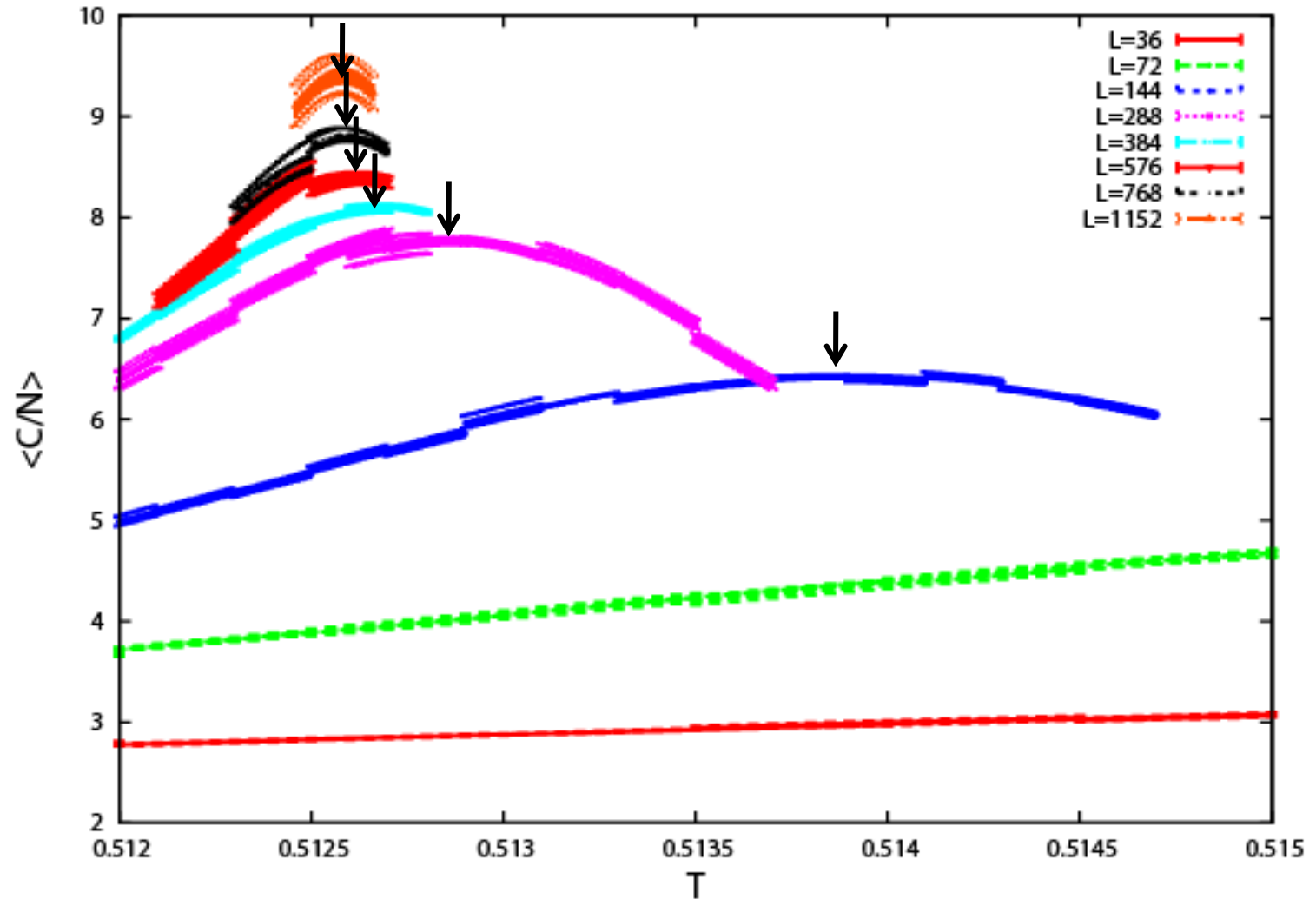
- ▶ ビンダー比、相関長、 ν_2 のマージ
- ▶ Helicity modulus のジャンプ

▶ ユニバーサリティー: Just KTか? 否か?

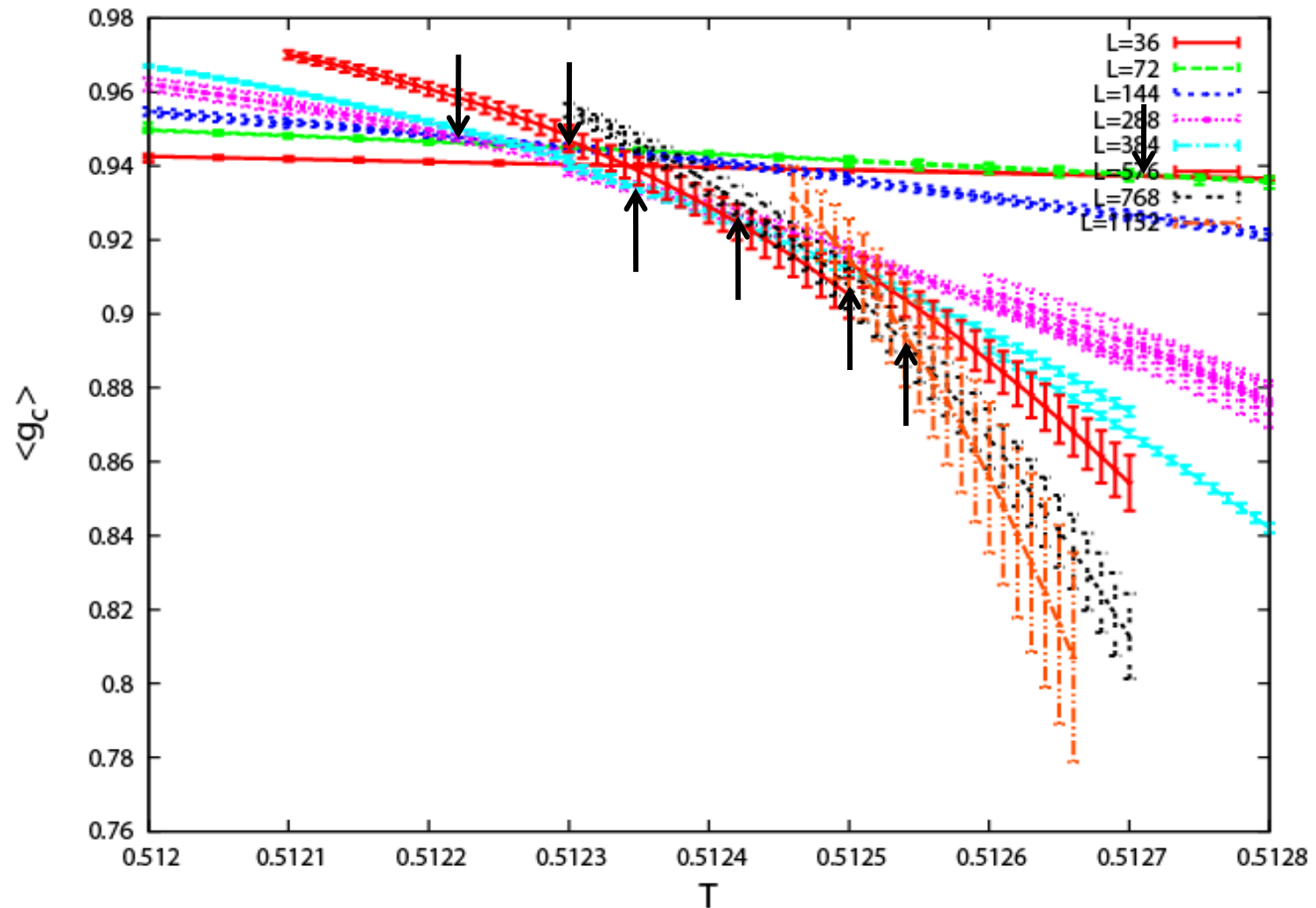
- ▶ 転移点で $\eta < \frac{1}{4}$?

Choi-Stroud, Minnhagen,
Lee-Lee, Kawamura

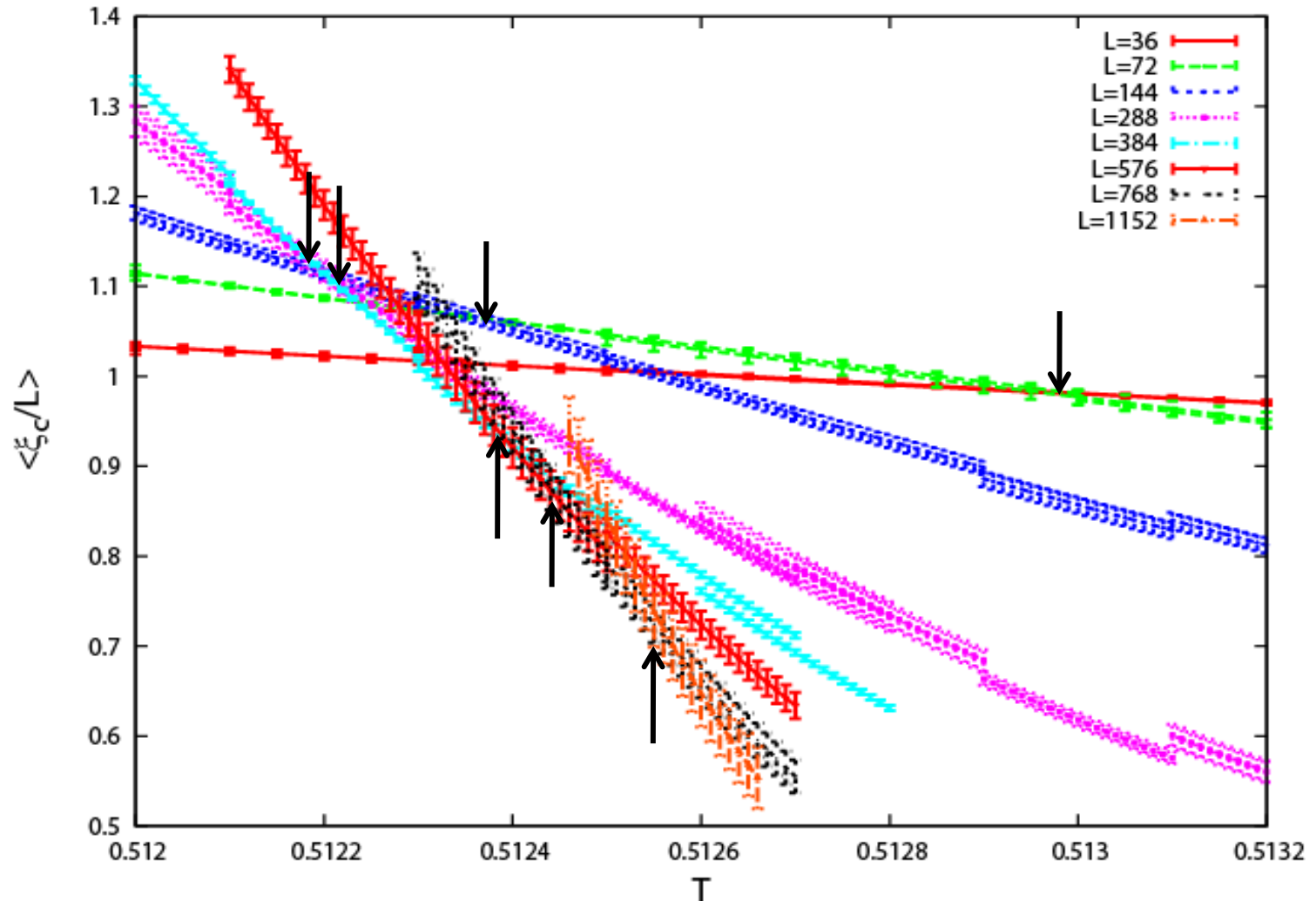
Peak of Specific Heat around T_c



Cross of Binder parameter around T_c



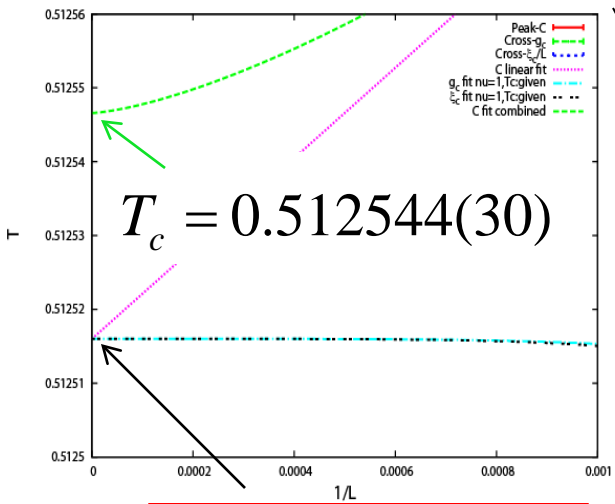
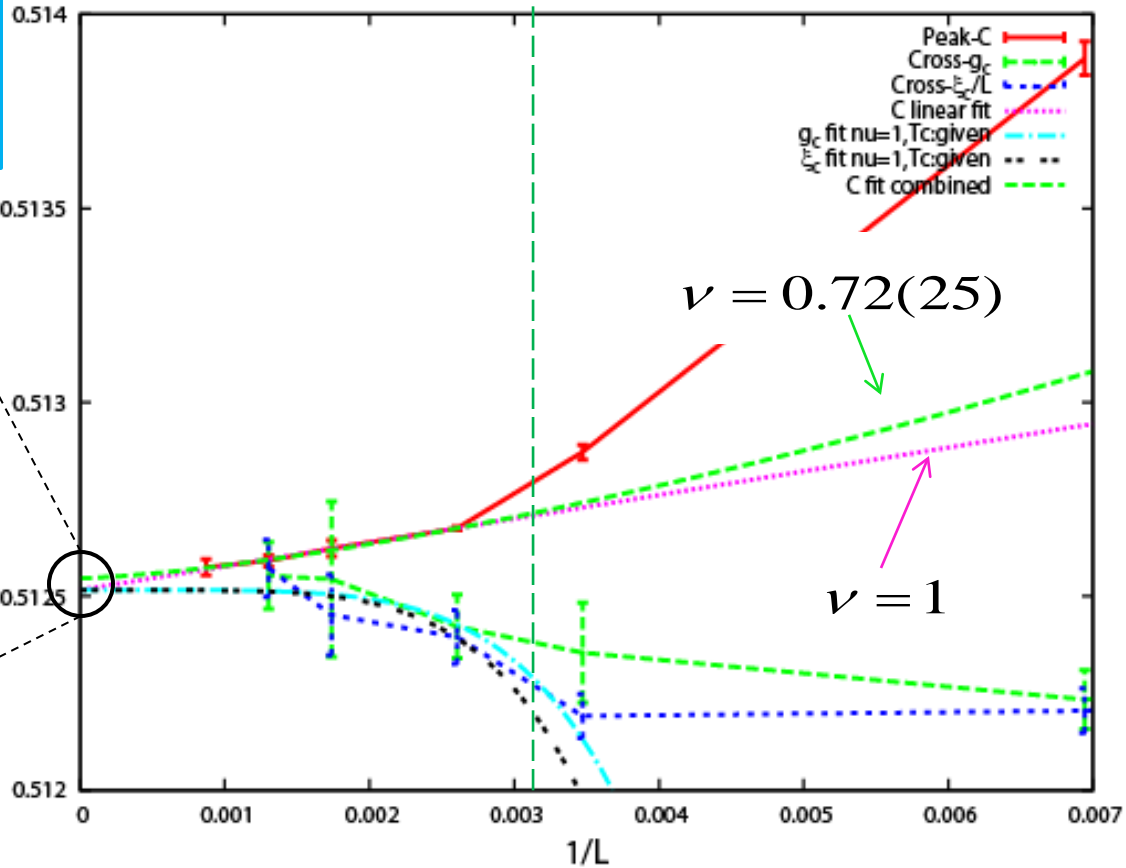
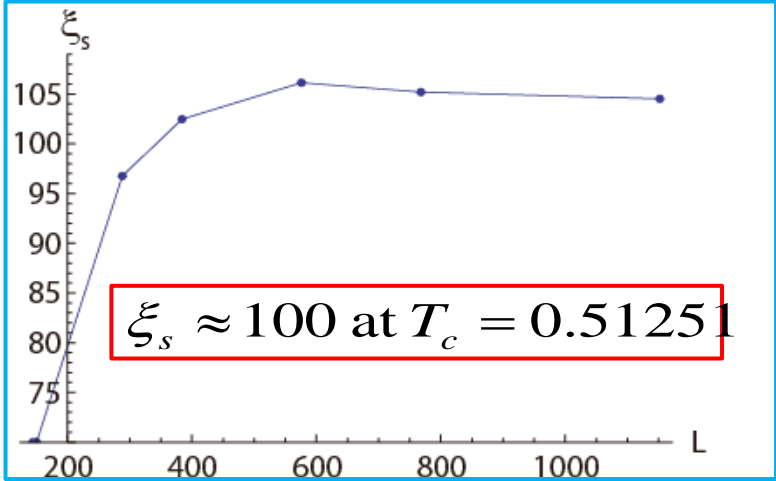
Cross of Correlation Length around T_c



Location of T_c

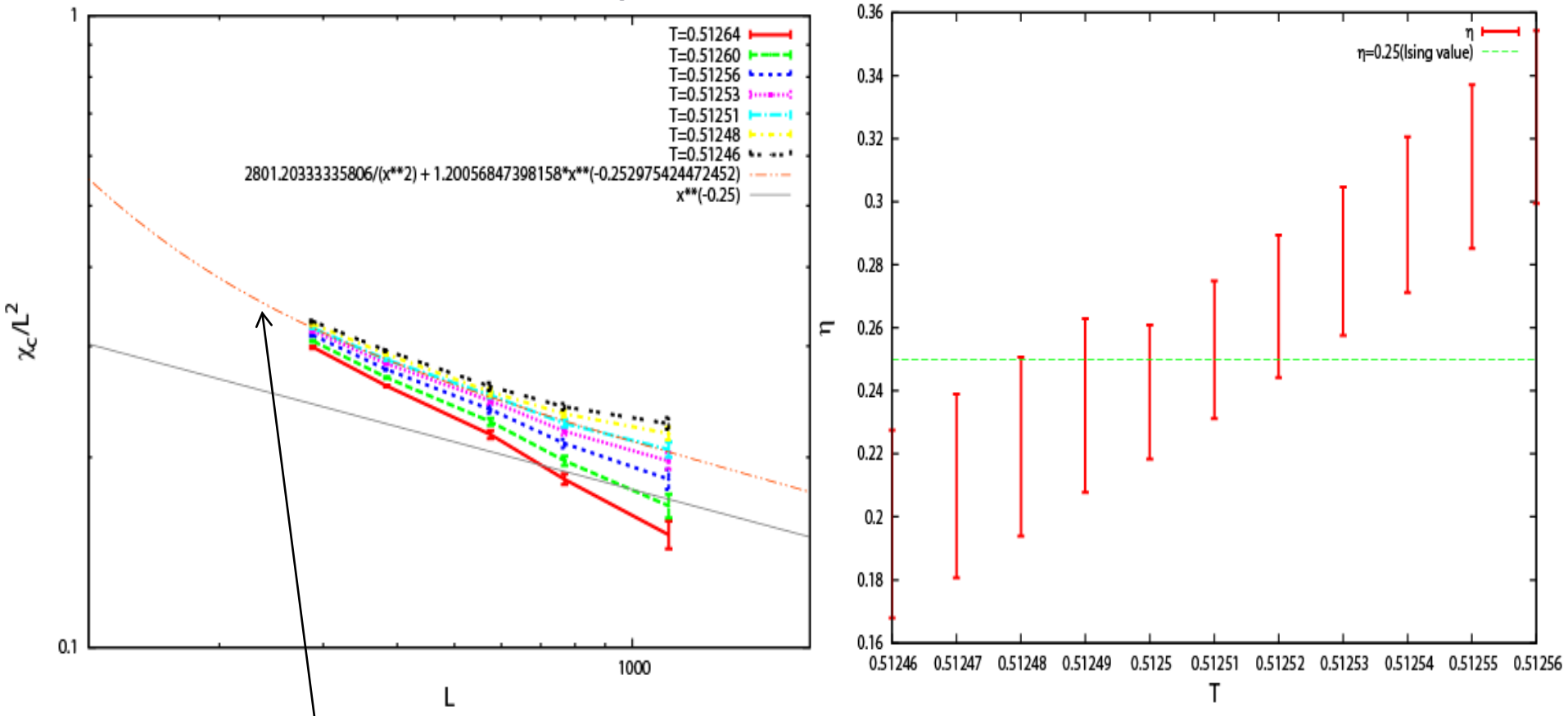
May be due to Grown Spin-Correlation length at T_c

Behavior Change around $L \sim 200-300$



$T_c = 0.512515(20)$

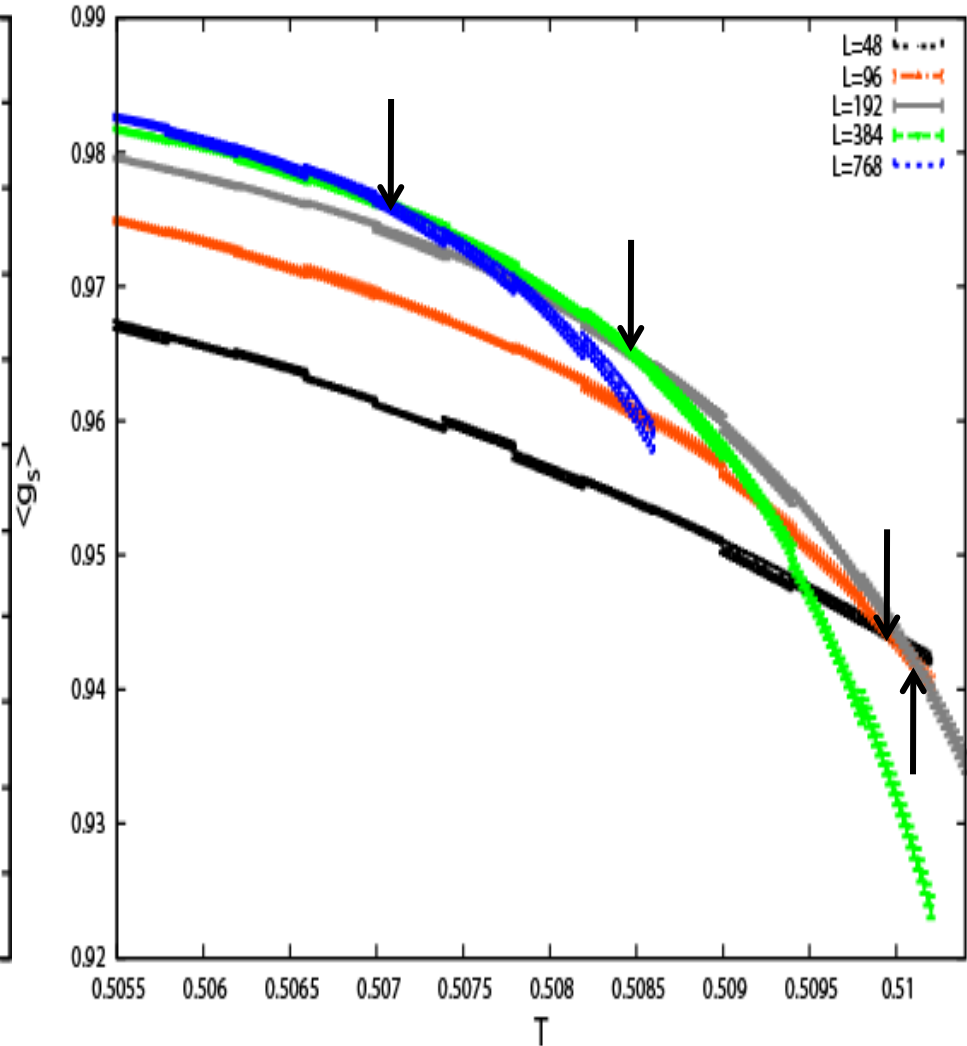
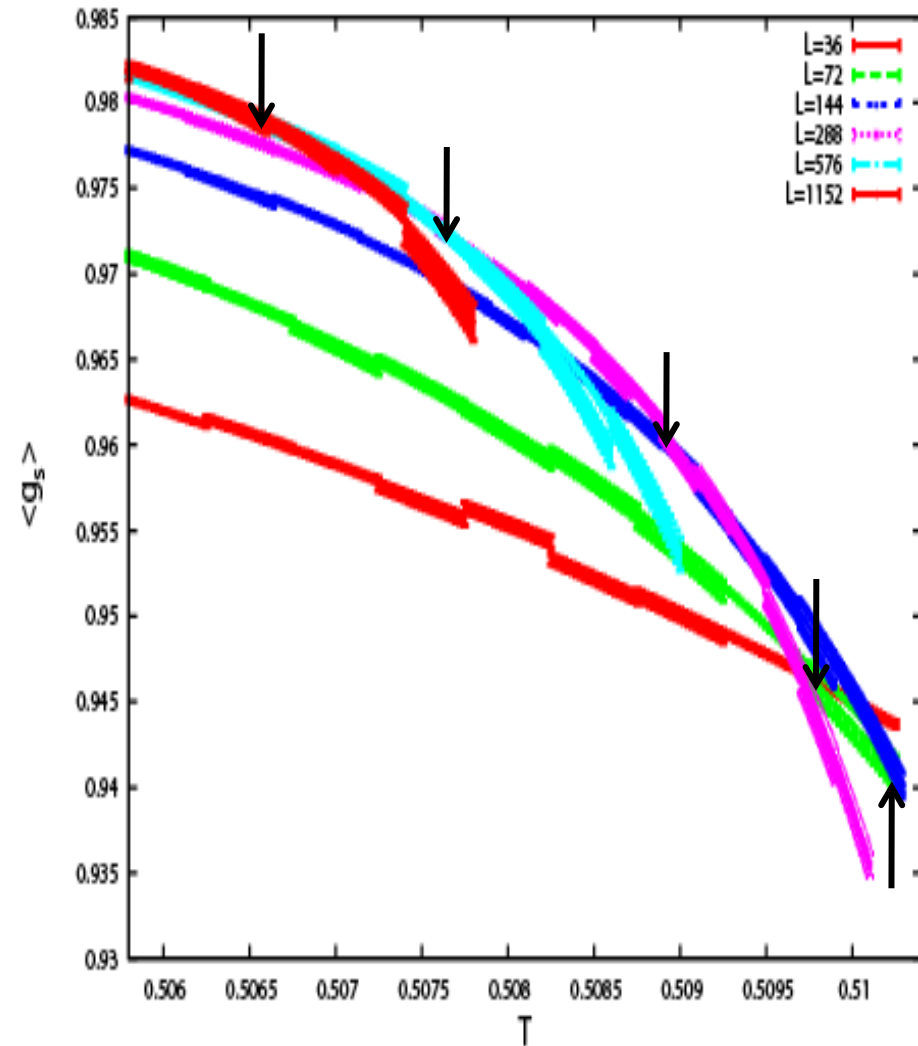
Critical Property of Chiral Transition



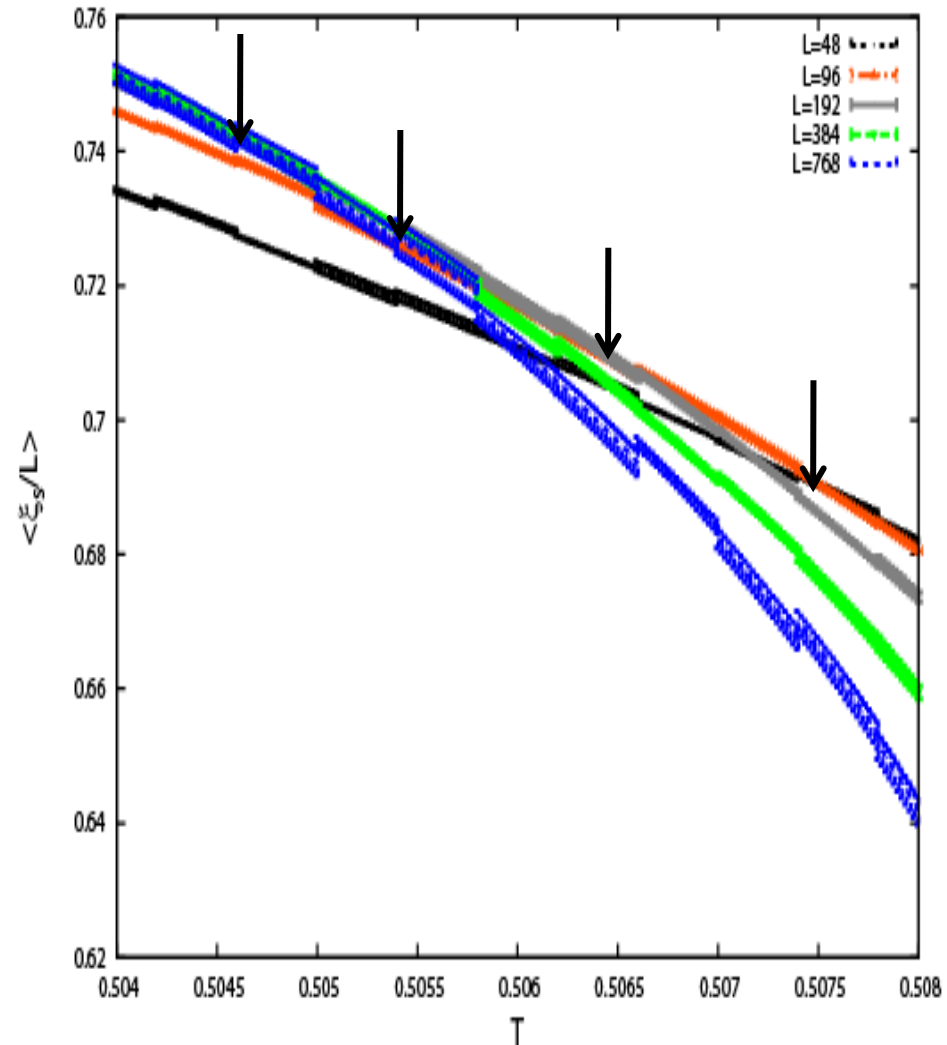
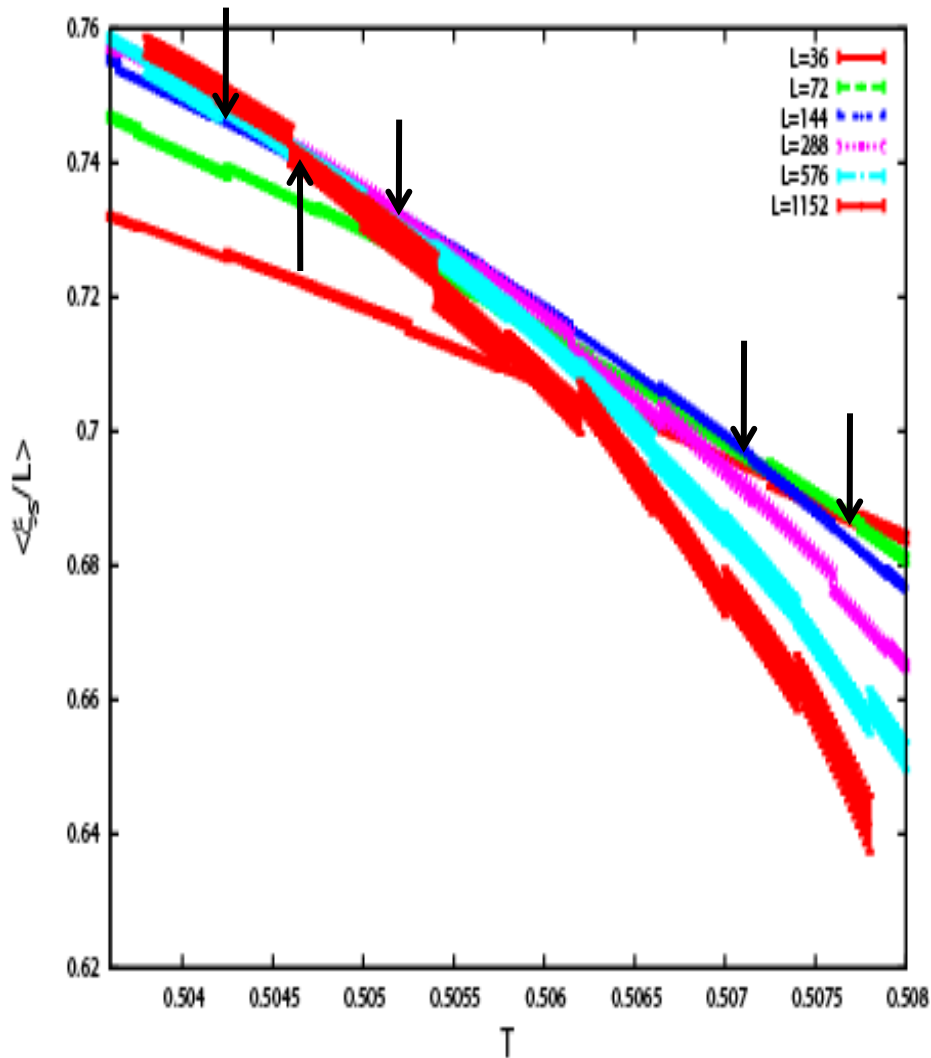
Fitting of Chiral susceptibility $\chi_c(T, L) \approx a(T) + b(T) \cdot L^{2-\eta}$

$\eta \doteq 0.25 \rightarrow$ Ising universality

Binder parameter around T_s

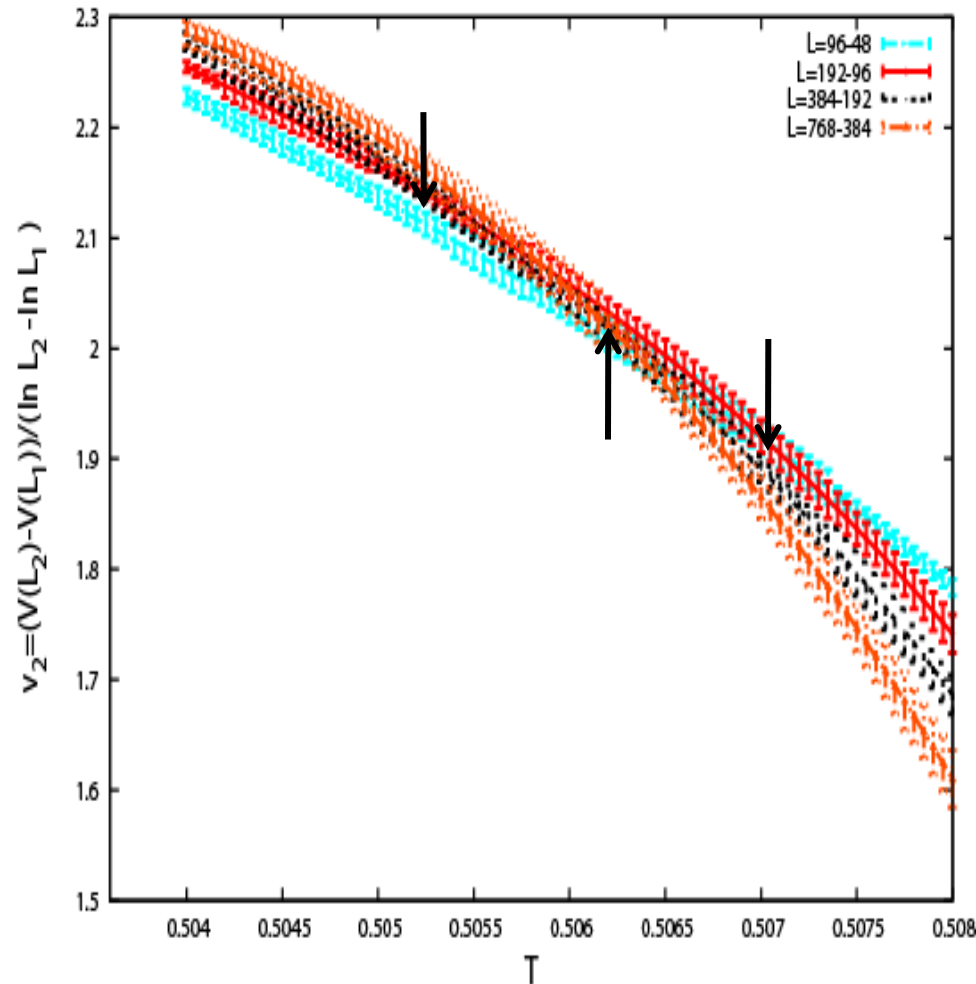
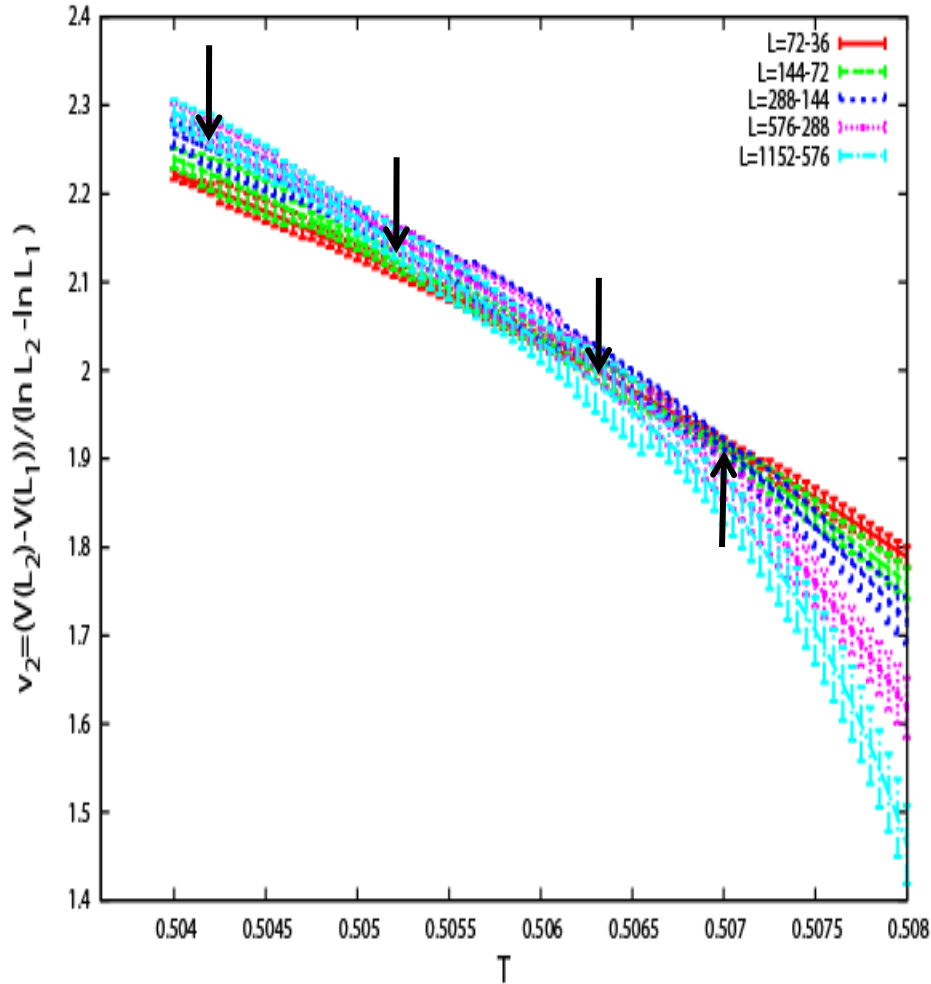


Correlation Length around T_s



Extremely hard to identify crossing points for large L ...

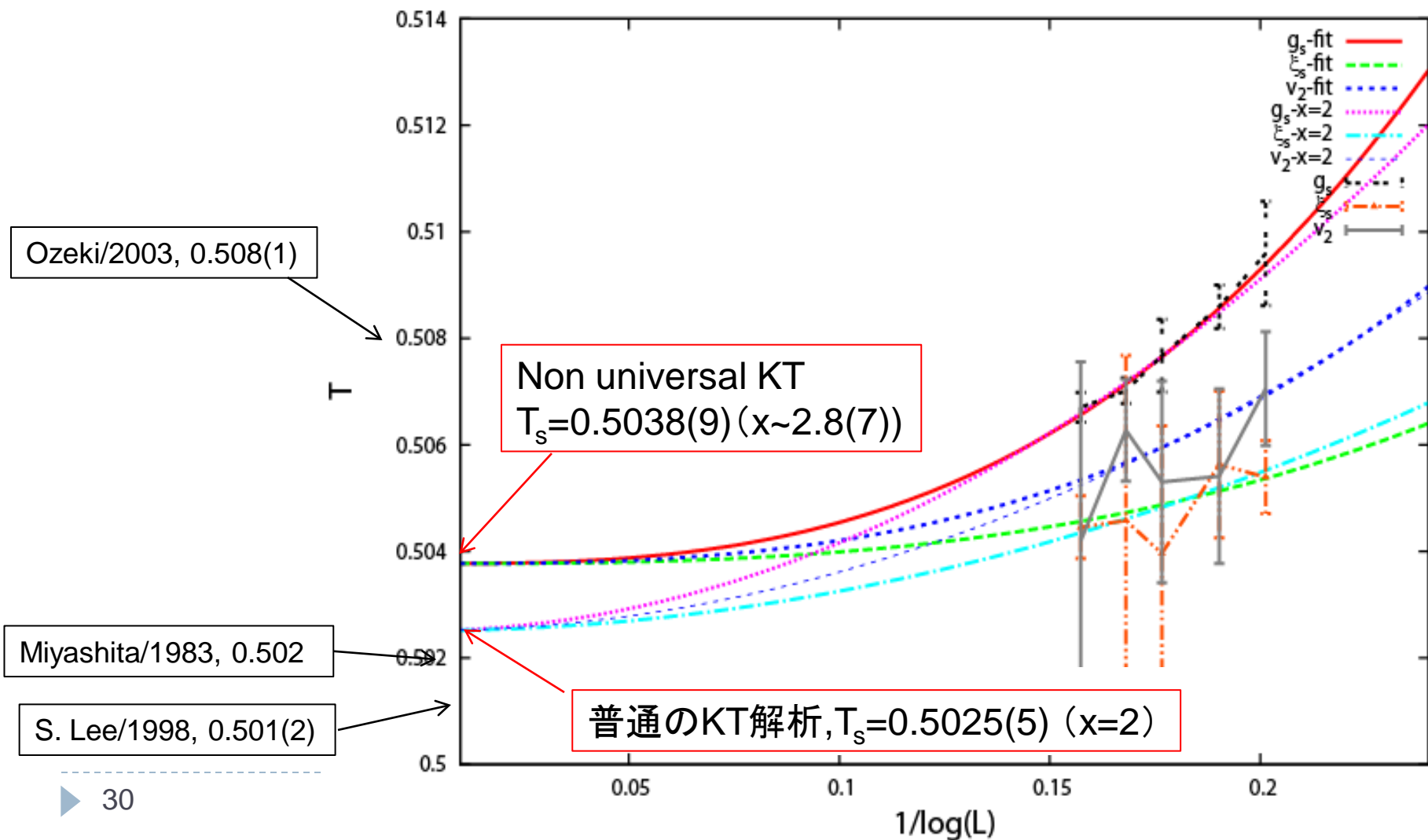
Reduced Vorticity $v_2(T)$ around T_s



Scaling of Vorticity modulus: $V(T, L) \approx a(T) + v_2(T) \cdot \log L$

Estimate of T_s

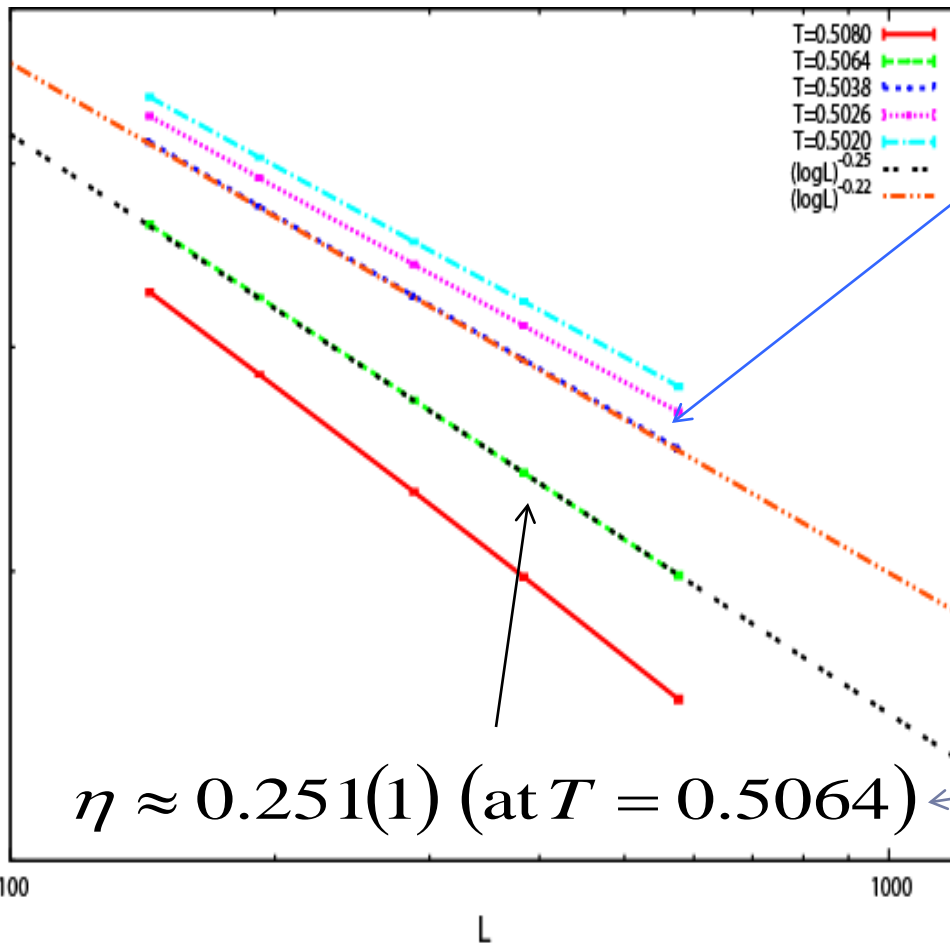
▶ 準長距離秩序 $\xi_s \approx e^{c(T-T_c)^{-1/x}} \rightarrow$ スケーリング形 $(\log L)^{-x}$



Critical exponent η

▶ 2通りの決め方

- ▶ 帯磁率から決める $\chi_s(T, L) \approx L^{2-\eta}$



$\eta \approx 0.220(1)$ (at $T = 0.5038$)

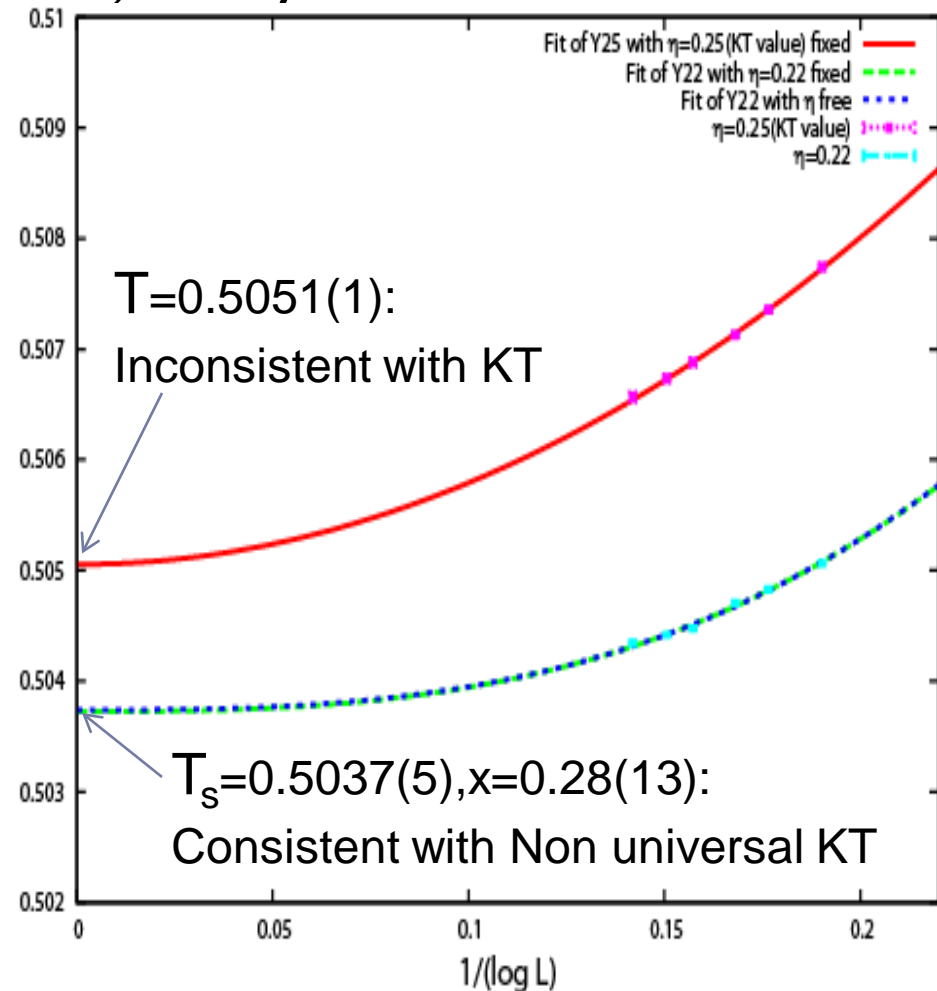
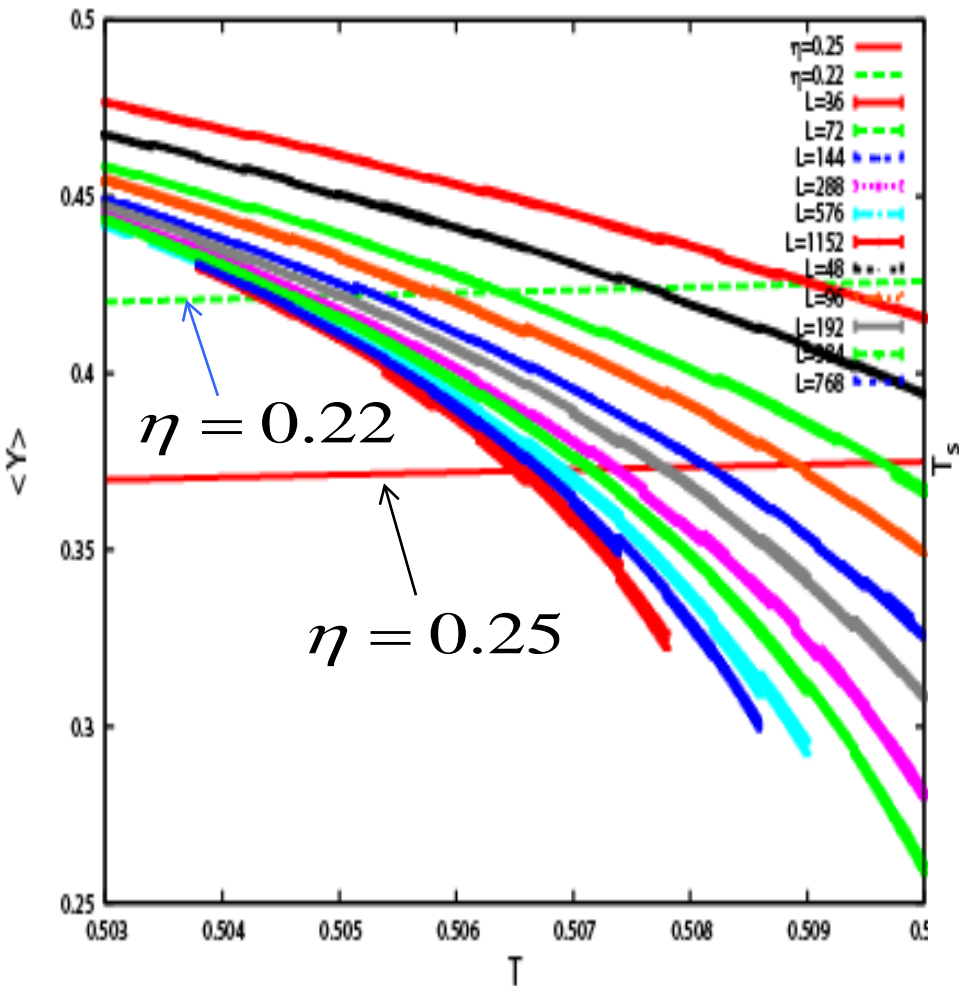
$\eta \approx 0.251(1)$ (at $T = 0.5064$)

Binder比等から決めた
転移点とかなりずれる

Critical exponent η

▶ 2通りの決め方

- ▶ Helicity modulusから決める $Y = T / 2\pi\eta$



解析のまとめ

	Scaling	Binderのクロス等からの T_s	帯磁率からの T_s と η	Helicityからの T_s と η
KT	$(\log L)^{-2}$	0.5025(5) $x=2(\text{fix})$	$T_s=0.5064(2)$ $\eta=0.25(\text{fix})$	$T_s=0.5051(1)$ $\eta=0.25(\text{fix})$ $x=2(\text{fix})$
Non-KT	$(\log L)^{-x}$	0.5038(9) $x=2.84(70)$	$T_s=0.5038(\text{fix})$ $\eta=0.220(1)$	$T_s=0.5037(5)$ $\eta=0.220(\text{fix})$ $x=2.8(13)$

KTを仮定するとinconsistentな転移温度を導く
 →Non-Universal KT転移

まとめと比較

▶ モンテカルロで反強磁性三角格子上的XYモデルを解析

Author/ Year	T _c	Universality at T _c	T _s	Universality at T _s	Size/ Method
Miyashita et al./1983	0.513	Ising	0.502	KT	L=45/ MC
S. Lee et al./1998	0.513(1)	3-state Potts	0.501(2)	Non-universal KT	L=102/ MC
Ozeki et al./2003	0.512(1)	Ising	0.508(1)	KT	L=2000/ NER
Our result /2011	0.512515(20)	Ising	0.5038(9)	Non-universal KT	L=1152/ MC

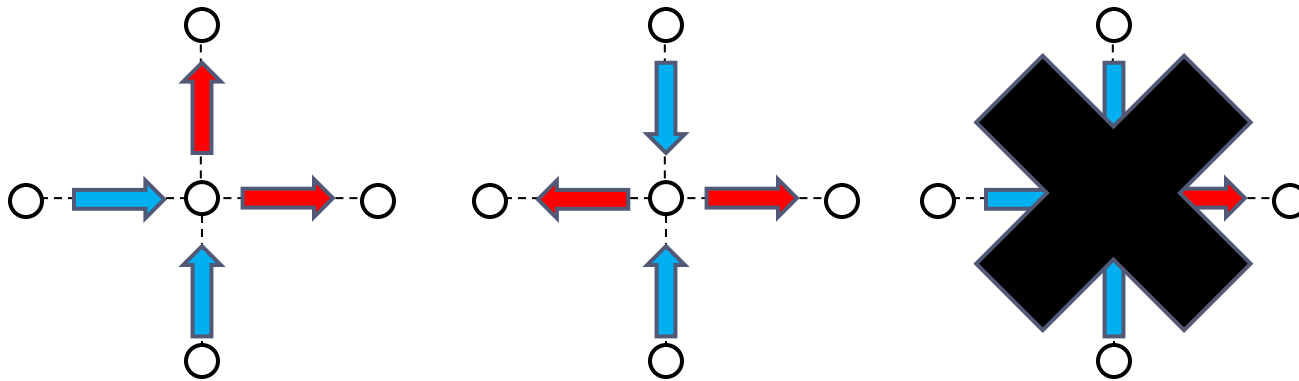
- ▶ カイラル転移→Isingのユニバーサリティと考えて矛盾ない
- ▶ スピン転移→KTと考えると転移点がばらつく
→KT likeだけどNon-universalな転移

SOSモデルと厳密解

- ▶ Body-Centered SOS model (BCSOS)

$$Z_{BCSOS} = \sum_{\{h_i = -\infty\}}^{\infty} \prod_{\langle i, j \rangle} e^{-\beta |h_i - h_j|} \quad |h_i - h_j| = 1$$

- ▶ BCSOS=ある種のアイスモデル(F model) (H.V. Beijeren 1977)

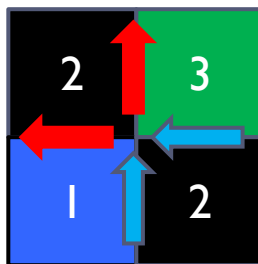


- ▶ 2次元アイスモデル=多くがSolvable→KTの厳密解

$$\xi \propto e^{-c/\sqrt{T-T_c}} \quad (T \downarrow T_c), \quad c = \frac{\pi^2 T_c}{8\sqrt{\ln 2/2}} \quad (\leftarrow \text{e.g. BCSOS})$$

ColoringとKT転移

- ▶ Three coloring=アイスモデル(A. Lenard, E. H. Lieb 1967)



- ▶ Three ColoringはKT転移を起こす
 - ▶ 他のColoringだったら？
 - ▶ Coloringの問題一般に繰りこみ群は適用可？
- ▶ 情報の繰りこみ群
 - ▶ 色々な人が妄想してるけど堅実な切り口を見たこと無い
 - そういう人のとはちょっと目標が違うのかも・・・
 - ▶ まずは3色でやって色数増やしていくのがいいかも
 - ▶ だれかネタに困ったらやってみてください