反強磁性三角格子上 XY モデルの二種類の相転移とそのユニバーサリティークラス

小渕　智之
大阪大学理学研究科　宇宙地球科学専攻

フラストレーションとは、各ボンドのエネルギーを最適化することが全体としてのエネルギーの最適化につながらない状況であるーもう少し広い表現を使えば、いくつかの最適化条件が互いに相反し同時に最適化出来ない状況を指す。このような場合、往々にして個々の要素が少しずつ我慢することにより、全体が最適化される状況が実現する。スピングラスのようなフラストレーションだけでなくランダムネスも混在しているモデルではこのような最適化状態を探すことさえ難しいが、より単純な、幾何的配置のためにフラストレーションが生じているモデルでは、そのような最適状態（基底状態）を探すのは比較的簡単である。その結果、フラストレーションが系に及ぼす効果をより純粋に調べることが出来る。図 1 は幾何的フラストレーションの例（反強磁性三角格子）である。イジングスピン（図 1 左）はフラストレーションを逃がすことが出来ず、基底状態に不安定で膨大な縮退を生じる。一方、ハイゼンベルグスピンや XY スピン（plane rotater）などベクトル自由度を持つスピンは、互いに少しずつ我慢した状態（120 度ずつ傾いた状態）を作りそこで安定化する（図 1 中、右）。

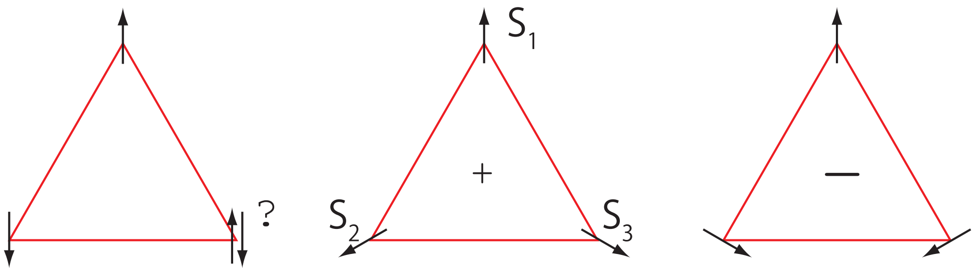

図 1: 反強磁性三角格子上のスピンの基底状態。（左）イジングスピンの場合。上下 2 方向しか向けないため、フラストレーションを逃がすことが出来ない。（中、右）ベクトルスピンの場合。お互いに 120 度ずつ傾いた配位が基底状態となる。中, 右図はどちらも基底状態だが、全スピンの鏡映反転でのみ移り代われる。プラケット内の ± は、どちらの鏡像かを区別する量-カイラリティ-の符号。

フラストレーションが及ぼす大きな影響の一つは、系の（主に基底状態の）対称性の変化である。対称性は相転移の性質を左右する決定的なファクターの一つであるから、これにより系の相転移の性質は大幅に変わり得る。例えば、強磁性三角格子上のイジングスピンは強磁性転移を有限温度で起こすが、反強磁性の場合はいかなる相転移も示さない [1]。フラストレーションから来る新奇な相転移メカニズムの探索が、相転移・臨界現象研究の一翼として、統計物理の立場で長年行われてきた。

このような背景のもと、フラストレート磁性体の古典的なモデルである、反強磁性三角格子上の XY モデルのモンテカルロシミュレーション ($L \leq 1152$ サイズまで) による研究を行ったのでこ

れを報告する。この系のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \boldsymbol{S}_i \boldsymbol{S}_j, \quad (\boldsymbol{S} = (S_x, S_y), |\boldsymbol{S}| = 1) \tag{1}$$

で与えられるベクトルスピンモデルである。$J > 0$ は強磁性であり、そのときこの系は Kosterlitz-Thouless(KT) 転移と呼ばれる特殊な相転移を起こす [2]。一方、$J < 0$ の反強磁性の場合は 2 種類の相転移を起こすと考えられている。このうち高温で起こる方は、2 次元強磁性イジングモデルの相転移と本質的に同じであると考えられている。この転移は、カイラリティと呼ばれる量で調べることが出来る。カイラリティはプラケット単位で定義される量で、スピンのインデックスを図 1 の中図に従うと、定義は

$$\kappa = \frac{1}{2\sqrt{2}} (\boldsymbol{S}_1 \times \boldsymbol{S}_2 + \boldsymbol{S}_2 \times \boldsymbol{S}_3 + \boldsymbol{S}_3 \times \boldsymbol{S}_1) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \sum_{\langle i,j \rangle \in \odot} \boldsymbol{S}_i \times \boldsymbol{S}_j \tag{2}$$

となる。これはちょうど強磁性体の磁化と同じで秩序変数になっており、関連する量の臨界指数を調べることによりそのユニバーサリティ-クラスを調べることが出来る。我々の結果は、$T = 0.51251(9) \equiv T_c$ においてカイラル転移が置き、そのユニバーサリティークラスが確かにイジング型であることを示している。

さらに低温で起こる転移は、KT 転移もしくはそれに似た相転移であると考えられている。KT 転移は、下部臨界次元（XY の場合 2 次元）で起こる特殊な相転移で、渦というトポロジカル欠陥の相関長が延び、それによる渦の凝縮によって起こる転移と考えられている。この KT 転移には幾つか顕著な性質があるが、典型的なものとして

1. 低温で相関長が発散し続ける (転移点直上は無限次相転移)
2. 転移点直上でがヘリシティーモデュラスが系の子細によらず、決まった幅のジャンプをする
3. 転移点直上で相関関数の臨界指数 η が系の子細によらず 1/4 をとる

等が挙げられる。我々の結果によれば、このうち 1. の性質を満たすが、2,3. については満たさない KT-like な転移が $T = 0.503(3) \equiv T_s$ で起こることが示唆された。しかし、この相転移は通常の KT 転移と同様に、有限サイズ効果が大きく、確たる結論を得るにはさらなる解析が必要であることも同時に示唆された。

本講演では、以上の結果の紹介を行う。しかし、シミュレーションの詳細の説明よりむしろ、カイラル、KT 転移に関する基礎的な点の解説に重点を置く予定である。特に、KT 転移は実空間繰りこみ群によって（ほぼ）厳密に解析される相転移であり、実空間繰りこみ群の稀有で顕著な成功例である。この系の繰りこみ群の性質を振り返っておくことは、今後繰りこみ群の地平を拡大する上で重要だと思われる。そこでこの性質の解説になるべく注力し、KT 転移に関する現在でも未解決のトピック [3] について触れることを目標にする。

参考文献

[1] I. Syozi: *Prog. Theor. Phys.* **1** (1950) 341

[2] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless: *J. Phys. C* **6** (1973) 1181

[3] P. Minnhagen: *Phys. Rev. B* **32** (1985) 3088