



12. 格子GLモデルのモンテカルロシミュレーションによる渦糸状態の相転移の研究

Monte Carlo study of Flux Lattice Melting Phase Transition using Lattice GL Model

講演者 板倉充洋

所属 日本原子力研究所計算科学技術推進センター

高磁場における磁束格子融解相転移は平均場近似だと二次転移になるが、Brezin *et al.* による繰り込み群の解析¹では、空間的揺らぎを考慮すると一次転移になるという結論が得られる。本研究の目的は数値的にこのシナリオを検証することである。

繰り込み群の解析では磁場中の超伝導体の自由エネルギーとして以下のGinzburg-Landau (GL) モデルを用いる。

$$H = \int dx dy dz \left(\kappa |\nabla + i\mathbf{A}|\phi|^2 + \alpha |\phi|^2 + \beta |\phi|^4 \right) \quad (1)$$

ただし高磁場であると仮定し、磁場の揺らぎは無視してある。 \mathbf{A} は $\nabla \times \mathbf{A} = (0, 0, B)$ を満たすベクトルポテンシャルである。式1の二次までの項を対角化すると以下ようになる。

$$H_2 = \sum_{k_z, i, j} (E_i + \alpha + k_z^2) |\phi_{k_z, i, j}|^2 \quad (2)$$

ただし k_z, i, j はそれぞれ z 方向の波数、ランダウレベルのインデックスおよび縮退のインデックスである。 E_i の間隔は磁場に比例するので高磁場では最低ランダウレベル (LLL) 成分のみを考えるという近似が正当化される。このとき式1は以下ようになる。

$$H = \int dx dy dz \left(\kappa |\partial_z \bar{\phi}|^2 + (\alpha + E_0) |\bar{\phi}|^2 + \beta |\bar{\phi}|^4 \right) \quad (3)$$

ここで $\bar{\phi}$ は ϕ の LLL 成分のみをとったものである。第一項の z 方向の揺らぎを無視する平均場近似では、 $\alpha + E_0 = 0$ で二次相転移が起こり、 $\bar{\phi}$ の零点が三角格子を組む Abrikosov 状態になる²。

以下では直観的に分かりやすく、また数値計算との相性の良いブロックスピン変換による実空間繰り込みの枠組に基づいて揺らぎの効果を考える。空間を z 方向に離散化して考えると、式3は以下ようになる。

$$H = \sum_z \kappa |\vec{S}_z - \vec{S}_{z+1}|^2 + \alpha |\vec{S}_z|^2 + \beta f_4(\vec{S}_z) \quad (4)$$

ここで $\vec{S}_z = (S_{z,0}, S_{z,1}, \dots)$ は z 番めの XY 平面にある j 番めの LLL 成分の係数を j 成分に持つベクトルである。また $f_4(\vec{S}_z)$ は $S_{z,j}$ の四次の多項式である。

LLL の数を N_L とすると、式4は一次元 $2N_L$ 成分古典スピン系と見ることが出来る。各スピンは f_4 のために $2N_L$ 次元空間の特定の方向を向きやすい異方性をもち、この方向が Abrikosov 状態に対応する。

ここで実空間繰り込みを考える。具体的には、 z 方向に b 個のスピンをまとめて平均したブロックスピン \vec{S}_z' を導入する。このブロックスピンの確率分布も、式4と同じ形で係数が違う以下の有効ハミルトニアンで記述されると仮定する。

$$H' = \sum_z \kappa' |\vec{S}_z' - \vec{S}_{z+1}'|^2 + \alpha' |\vec{S}_z'|^2 + \beta' f_4(\vec{S}_z') \quad (5)$$

三つの係数 κ', α', β' はスピンのスケールリング $S \rightarrow aS$ による任意性があるので独立なものは2つである。ここではこのような変換に対して不変な $\tilde{\kappa} = \kappa'/\alpha'$ と $\tilde{\beta} = \beta'/(\alpha')^2$ を独立なパラメータとして採用する。それぞれは「温度」と「非線形性」という物理的な意味を持つ。

一般論として、0でない共通の平均値を持つ変数を足していくと、その分散は平均値に対して小さくなっていく。逆に相関のない変数を足していくと分散に比べて平均値は小さくなっていく。すなわち転移点より低温ではブロックスピン変換により有効温度はより低くなり、転移点より高温では有効温度はより高くなっていく。

非線形性は、モデルにより0に収束したり（四次元）、発散したり（一次転移）有限値に収束したり（三次元の二次転移）する。これを図示すると以下のようなになる。

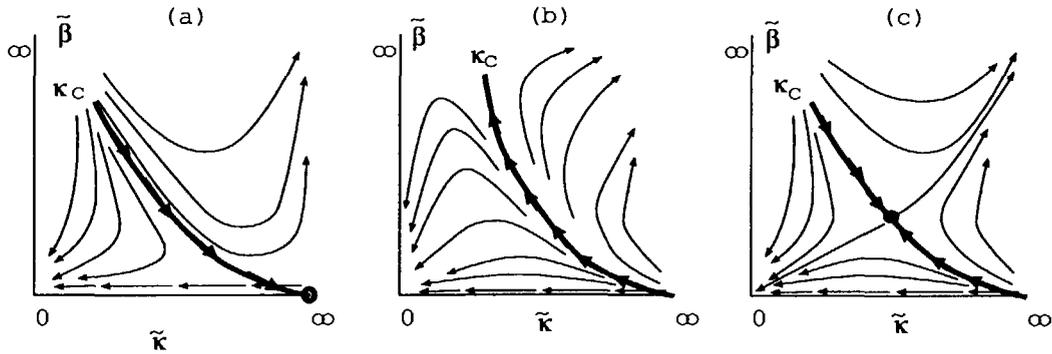


図1: 繰り込みの流れ：(a)0に収束 (b)発散 (c)有限に収束

ϵ 展開による解析では、モデル3を一般化して D 次元 $2N_L$ 成分スピン系にし、 $D = 4$ (元の系は6次元)からの展開を行なう。これによると繰り込みの流れは (b) の発散するケースになるという結果が得られている。

数値的にこれを検証するには、実際にブロックスピンの統計量から $\tilde{\kappa}$ と $\tilde{\beta}$ を見積り、繰り込みの流れを調べればよい。ただそのような係数を見積もるより、それに共役な量を測定する方がはるかに計算が楽なので、実際は以下のような量を測定する。

$$B_L = \langle |\vec{S}_L'|^4 \rangle / \langle |\vec{S}_L'|^2 \rangle^2 \quad (6)$$

$$K_L = \langle \vec{S}_L'(z) \cdot \vec{S}_L'(z+1) \rangle / \langle |\vec{S}_L'|^2 \rangle \quad (7)$$

ただし \vec{S}_L' は L^D 個のスピンを足したブロックスピンである。 B_L は相転移のモンテカルロシミュレーションで広く用いられている Binder パラ

メータであり、またモデル 3の場合特に Abrikosov ratio と呼ばれる。高温極限では $B_L = 2$, また低温極限では $B_L \approx 1.18$ となる。 K_L は隣接するブロックスピン同士の相関係数である。実際の数値計算ではサイズ L の系を計算して、 B_L と $K_{L/2}$ を計算することになる。

図 2 の (a),(b),(c) のそれぞれの場合の対応する B_L, K_L の流れを図示すると以下ようになる。高温の極限は $B_L = B_{\text{gauss}}, K_L = 0$ となる。 B_{gauss} はガウス分布の場合の値である。低温の極限では $B_L = B_{\text{min}}, K_L = 1$ となる。 B_{min} は B_L のとりうる最小値である。

(a) の非線形性がないガウス型固定点が安定な場合には、転移点で B_L は ϕ が確率分布 $\exp(-|\phi|^4)$ に従う場合の値 B_4 に収束し、 K_L は 1に収束する。

(b) の一次転移の場合、転移点の定義として「秩序相と無秩序相がそれぞれ確率 p と $1-p$ で出現する温度」と定義すると、 $0 < p < 1$ であればどのような p をとってもサイズが無限大になる極限では良い定義になる。しかし B_L と K_L の値は p によるので、転移点での値を定義することは出来ない。また K_L は温度と共に単調に減少するが、 B_L は転移点に下から近付くと一旦無限大に飛んでから B_{gauss} になる。また $|\phi|^6$ などの高次の項も無視できなくなり、 B_L は $\tilde{\kappa}, \tilde{\beta}$ 以外の量にも依存するので軌跡が交差する。

(c) の場合は転移点での B_L と K_L の値はその相転移のユニバーサリティーと系の形状から決まるある値に収束する。

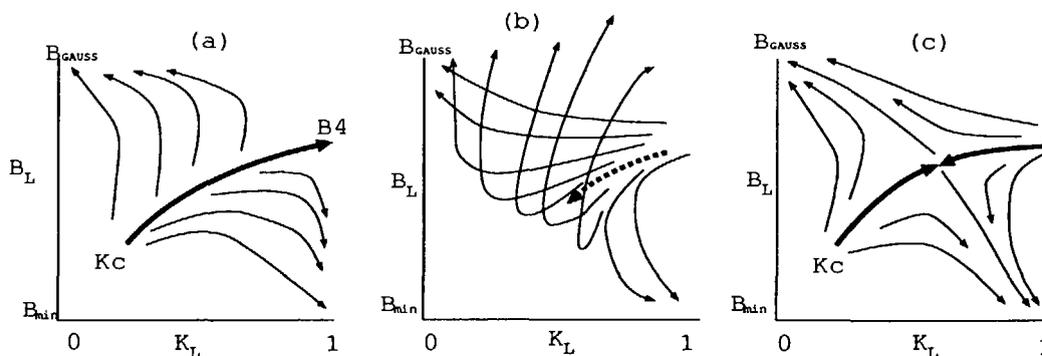


図 2: B_L, K_L の流れ : (a)0に収束 (b)発散 (c)有限に収束

以下では実際の数値計算の詳細について述べる。用いるモデルは式 1 を格子で離散化した以下のハミルトニアン

$$H = \kappa/2(J_z \sum_r |(\phi_r - \phi_{r+z})|^2 + J_{xy} \sum_{\langle ij \rangle} |\phi_i - \exp(iA_{ij})\phi_j|^2) + \sum_r \alpha|\phi_r|^2 + \beta|\phi_r|^4 \quad (8)$$

である。 J については、Hu *et.al.*により一次転移が確認された³ $J_{xy} = 1, J_z = 1/10$ を用いた。系のサイズは x, y 方向に $L \times L = 32 \times 32$, z 方向に $L_z = 16, 32, 48$ を用いた。全ての方向に周期境界条件を採用し、ランダウゲージ

$$A_{ij} = (2\pi y B/L, 0, 0)$$

を用い、 $B = 1$ とした。vortex/plaquette = $1/32$ である。この場合各ランダウレベルの波動関数は

$$\phi_{l,k_x}(x,y) = \exp(2\pi i x k_x / L) F_l(\text{mod}(y+k_x, L)), \quad 0 \leq x, y, k_x \leq L-1 \quad (9)$$

と表される。 F_l は $L \times L$ 行列

$$X_{n,m} = \begin{cases} 2 \cos(2\pi n B / L), & (n = m) \\ 1, & (\text{mod}(n - m, L) = \pm 1) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (10)$$

の l 番めに大きい固有値の固有ベクトルである。ただし $\text{mod}(x, L)$ は整数 x を L で割った余りである。LLL に対応した F_0 はほぼガウシアンをしている。係数 α, β は、確率分布 $\exp(\alpha|\phi|^2 - \beta|\phi|^4)$ の元で $\langle |\phi|^2 \rangle = 1$ となる組をいくつか採用した。XY モデルは $\alpha = 2\beta = \infty$ の場合にあたる。

状態更新はメトロポリス法と有効場に対する鏡映反転をもちいて、物理量の測定は L ステップおきに行なった。連続する 2 つの測定において物理量の相関係数が 0.9 を越える場合はさらに測定間のステップを倍にしていた。また各温度で始めの 1000 測定を捨てて、3000 回の測定を行なった。各測定においては、系の上半分及び下半分、そして系全体の LLL 成分のブロックスピンを測定し、 B_{L_z} と $K_{L_z/2}$ を計算した。

以下に B_L, K_L を $1/\kappa$ に対してプロットしたものを示す。XY モデルの場合と、 $\alpha = 2.23, \beta = 1.24$ という値について計算した。

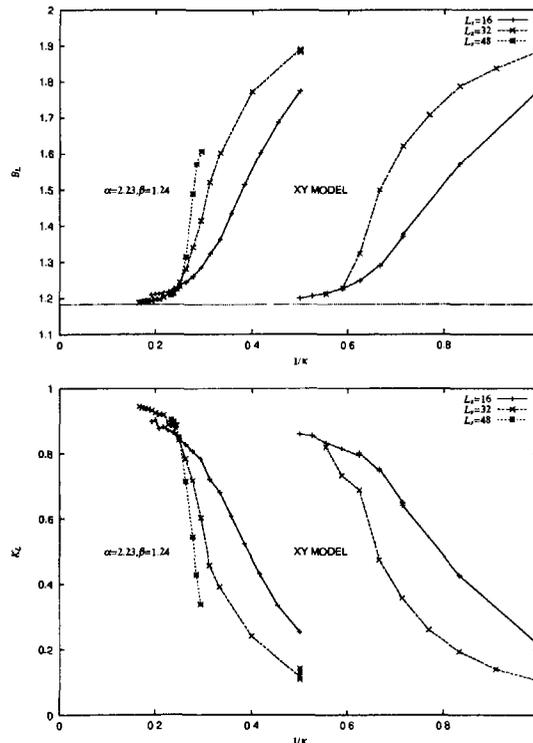


図 3: B_L, K_L のプロット

転移点でプロットが交差しているのが分かる。XYモデルの方はまだ低温の領域の計算を行っていないので交差が見えない。また図には示していないが、 $L_Z = 1$ の場合を計算すると、プロットが交差する温度よりも高い温度で B_L が最小値近くまで小さくなる。高温側の比熱のピークはこの秩序の形成によるものと思われる。

このことから、転移点では各 XY 面で渦は既に格子を組んでいて、Z 方向の相関が出来ることによって相転移が起こると考えられる。これは最近の Nonomura *et.al.* による entanglement による melting という説⁴ と consistent である。

B_L, K_L の流れ図を以下に示す。 $\alpha = 2.23, \beta = 1.24$ の場合のみについて

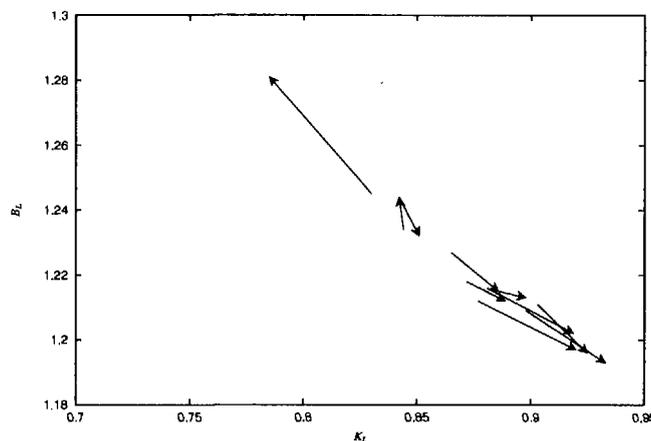


図 4: B_L, K_L の流れ図

てプロットしてある。XYモデルの場合もほぼ同じ場所になり、どちらがどちら側にあるかは判別出来なかった。流れの向きを判別するにはさらにサイズを大きくした計算が必要であると思われる。

今後の課題として、サイズを大きくすることが第一であるが、さらに低磁場の場合や柱状欠損のある場合に繰り込みの流れがどうなるかといった問題も興味のあるテーマである。

参考文献

- 1 E.Brezin, D.R.Nelson, and A.Thiaville, Phys.Rev. **B31**,7124 (1985).
- 2 A.A.Abrikosov, Zh.Eskp.Teor.Fiz.,**32**,1442 (1957).
- 3 X.Hu, S.Miyashita, and M.Tachiki, Phys.Rev.Lett. ,**79**,3498 (1997).
- 4 Y.Nonomura, X.Hu, and M.Tachiki, preprint