２次元XYモデルとKT転移

寺原孝樹

香取研究室

はじめに

相転移の多くは臨界点で劇的な変化を示す。しかし、中には劇的な変化を見せない相転移も存在し、その一例が**KT転移**である。KT転移は**２次元XYモデル**によってその存在が確認される。以下ではそれを見ていく。

XYモデル

XY モデルはスピンを**大きさ１の任意の二次元ベクトル**で表したモデルである。これを2次元で考えると、そのハミルトニアンは**隣り合うスピンの内積の和**で書け

$$\mathcal{H} = -J \sum_{<i,j>} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$
$$= -J \sum_{<i,j>} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (1)$$

となる。ここで、$\langle i, j\rangle$は**最隣接の格子点**についての和を表し、Jは格子点間の相関の度合いを示す。今は$J > 0$とする。

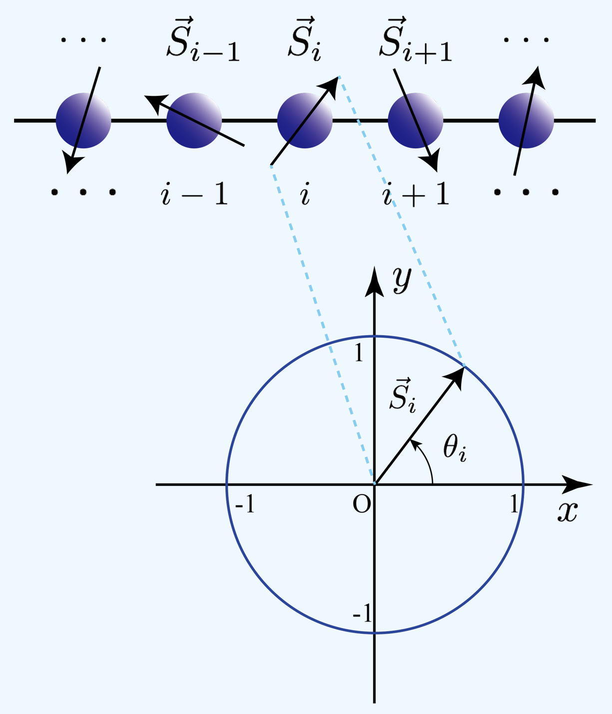

Figure: XYモデルのスピン

相関関数

まず、２次元XYモデルの分配関数を考える。

$$Z = \int \mathcal{D}\theta\, e^{-\beta\mathcal{H}} = \int \mathcal{D}\theta \exp\left[\mathcal{J}\sum_{\langle i,j\rangle}\cos(\theta_i - \theta_j)\right]$$

ここで、$\int \mathcal{D}\theta = \prod_k \int_0^{2\pi} d\theta_k,\ \mathcal{J} = \beta J$とした。
次に、離れた２つの格子点におけるスピンの相関関数Gを考える。

$$G(r) = \left\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+r} \right\rangle = \langle \cos(\theta_i - \theta_{i+r}) \rangle$$
$$= \frac{1}{Z}\int \mathcal{D}\theta \exp\left[J\beta \sum_{\langle i,j\rangle}\cos(\theta_i - \theta_j)\right] \cos(\theta_i - \theta_{i+r}) \quad (2)$$

と表せる。この相関関数の**高温展開**と**低温展開**をそれぞれ考え、それらの違いを見ることで相転移の存在を確かめる。

高温展開

高温展開は相関関数の高温での形を求めるため、$T \to \infty$ として考え近似する。その結果、

$$G(r) \sim \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right) \quad (3)$$

と計算される。ここでξは**相関長**である。この相関関数の距離rで**指数関数的に減衰していく振る舞いは常磁性体と同様**である。

スピン波近似

低温では系のエネルギーが下がる為に**隣のスピン同士のなす角が小さくなる**。すなわち$\theta_i - \theta_j \ll 1$となり、ハミルトニアン(1)式は

$$\mathcal{H} = -J \sum_{<i,j>} \cos(\theta_i - \theta_j) \sim -J \sum_{<i,j>} \left[1 - \frac{1}{2}(\theta_i - \theta_j)^2\right]$$
$$= J \sum_{<i,j>} \frac{1}{2}(\theta_i - \theta_j)^2 + const \quad (4)$$

となる。この近似を**スピン波近似**という。

低温展開

スピン波近似が成り立つ程の低温での相関関数を求める。

$$G(r) = \langle \cos(\theta_i - \theta_{i+r}) \rangle = \left\langle e^{i(\theta_i - \theta_{i+r})} \right\rangle \sim \left(\frac{r}{a}\right)^{-T/2\pi J}$$

ここで、aは格子定数である。この相関関数の減衰の形はちょうど臨界点付近で見られるものである。そして、この結果はスピン波近似が成り立つTであれば成り立つ。つまり、**臨界点が特定の温度ではなく低温の有限温度幅に広がっている**ことになる。これを**準長距離秩序**という。

KT転移(Kosterlitz-Thouless transition)

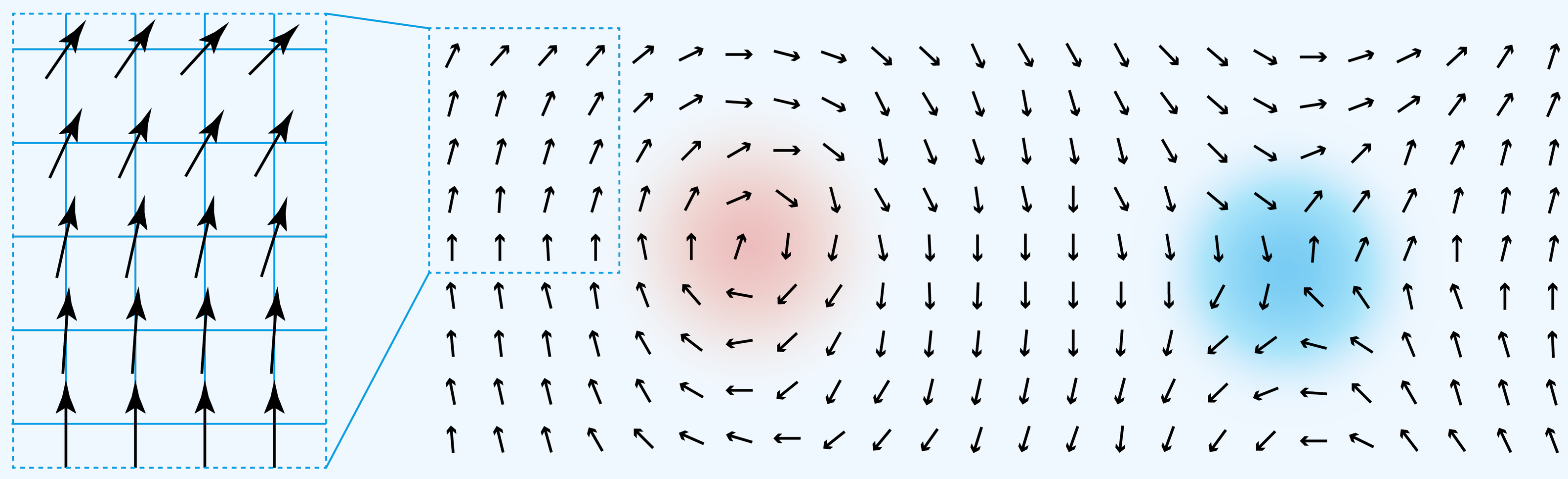

Figure: 緩やかなスピンの変化（右）と正負の渦対（左；赤:正,青:負）

準長距離秩序がある状態ではスピン同士のなす角度が急激に変化せずに**緩やかに変化している**(上図)。このような緩やかな変化は**スピン系の一部**を見たときの結果で、**全体を見るとスピンが渦を作る**ことが示唆される。そこで、渦の発生による自由エネルギーの変化を考えてみると

$$\Delta F = (\pi J - 2T)\log\left(\frac{R}{r_0}\right) + C. \quad (5)$$

ここで、Rは系の半径,r_0は渦の芯の半径である。
これよりT**が**$T_{KT} \equiv \pi J/2$**以上のとき**、渦の発生で自由エネルギーが下がるため**大量の渦が発生する**ことがわかる。自由な渦の周りはスピンの角度が激しく変化するため準長距離秩序が壊れてしまう。すなわち、$T = T_{KT}$で相転移が起こる。この転移を**KT転移**という。
またT_{KT}以下の相のことを**KT相**という。KT相では自由な渦は発生しないが、**単独の渦だけだとエネルギー的に損**なためそれを打ち消すような**逆の渦と対をなす**ことで安定な相を作っている(上図)。

最後に～2016年ノーベル物理学賞へ～

KT相でできる渦対を**空間に開いた穴**と捉えると、その**穴の数**がこの相転移を特徴付けているといえる。この考え方を**トポロジー**といい、そこから**トポロジカル相転移**という考えが生まれた。この考えのきっかけとなったのがまさにこのKT転移で、それらの成果が称えられ2016年にKT転移の名の由来になったKosterlitz氏とThouless氏にノーベル賞が与えられたのである。

参考文献

1. Giuseppe Mussardo,(2010)”Statistical Field Theory”,Oxford:Oxford University Press.
2. 西森秀稔,(2005)『相転移・臨界現象の統計物理学』,培風館
3. 熊野裕太,(2012)『2 次元 p 状態クロック模型における Berezinskii-Kosterlitz-Thouless 転移』 <http://bussei-kenkyu.jp/pdf/01/2/0021-012602.pdf>