$\pm J$イジング模型のグリフィス相における緩和現象

高野 宏, 宮下 精二†

慶應義塾大学理工学部, 京都大学人間·環境学研究科†

1992 年 11 月 11 日

1 問題とすること

希釈強磁性スピン系において, $T_c^{\text{dil}} < T < T_c^{\text{pure}}$ の温度範囲で, 系の長時間での緩和現象に異常が現れることが議論されている.[1–6] ここで, T_c^{dil}は希釈された系の転移温度, T_c^{pure}は希釈されていない系の転移温度をあらわす. 互いに強磁性的に結合したスピンの集合をクラスターと呼ぶことにすると, 希釈強磁性スピン系においては, いくらでも大きいクラスターが有限の確率で存在する. T_c^{pure}より低い温度では, ひとつのクラスター内における最長の緩和時間はクラスターの大きさが大きくなると, 非常に長くなる. この結果, スピンの長時間での緩和に異常が現れる. この遅い緩和は, グリフィス異常性[7]が系の動的性質に現れたものと考えられ, この温度範囲はグリフィス相と呼ばれている.

例えば, d 次元希釈強磁性動的イジング模型に対して, $T_c^{\text{dil}} < T < T_c^{\text{pure}}$ の温度範囲でスピン自己相関関数が次のような非指数関数的緩和を示すことが予想されている.[1, 2, 5)]

$$q(t) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} q_i(t) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle S_i(0)S_i(t)\rangle \sim \exp[-C(\ln t)^{d/(d-1)}]. \tag{1}$$

ここで, $S_i(t)$ は時刻 t におけるスピン, Nは全スピン数, $\langle\cdots\rangle$ は平衡状態における平均を表す. イジング・スピングラス模型においても, 同様な振舞いが見られるということが議論されている.[8]

このような理論的な予想に反し, 希釈イジング模型 (2 次元, 3 次元) および$\pm J$ イジング・スピングラス模型 (2 次元, 3 次元) に対して行なわれたモンテカルロ・シミュレーションの結果では, $q(t)$ が

$$q(t) \sim \exp[-Dt^{\beta}] \tag{2}$$

(ただし $0 < \beta < 1$) のように, "引き伸ばされた指数関数" 的に緩和してみえている.

これまでの研究で, 2 次元希釈イジング模型に対し, $q(t)$ の "引き伸ばされた指数関数" 的緩和 (2) が, クラスターごとの緩和時間の分布から説明でき, 真の漸近形が (1) 式で与えられるという理論的予想と矛盾しないことを示してきた. 本報告では, $\pm J$ イジング模型における $q(t)$ の "引き伸ばされた指数関数" 的緩和 (2) が, 希釈イジング模型と同様に, クラスター的描像で理解できるかどうかを調べる. 扱った系は正方格子上の$\pm J$ イジング模型であり, シングル・スピン・フリップで熱浴型遷移確率のモンテカルロ・シミュレーションを行なった結果について報告する.

2　理論

本節では, (1) のような $q(t)$ の緩和を導く議論について紹介する.

d 次元のランダム・イジング系を考える. 温度は, ランダムな系の転移温度より上, ランダムでない系の転移温度より下であるとする ($T_c^{\mathrm{random}} < T < T_c^{\mathrm{pure}}$). この系が, フラストレーションのない“強磁性的”クラスターに分けられ, 系の長時間の振舞いが, これらのクラスターが独立に反転する運動で決ると仮定する. スピン数 $n \sim n + \mathrm{d}n$ のクラスターを考える. ひとつのスピンがこのクラスターに含まれる確率を $P(n)\mathrm{d}n$, このクラスターの最長の緩和時間を$\tau(n)$ とする. この$\tau(n)$ は, ほぼスピンの向きのそろったクラスターが全体として反転する時間と考えられる. $\tau(n)$ より短い時間で見ると, クラスター内のスピンはほぼ定まった方向を向いており, クラスターの磁化に相当する量をを考えることができる. その磁化の大きさを $m(n)$ とする. このとき, $q(t)$ は次のように表せる.

$$q(t) \geq \int \mathrm{d}n P(n) m^2(n) \exp[-t/\tau(n)]. \tag{3}$$

n の大きいところでは, $P(n)$ は

$$P(n) \sim \exp[-cn] \tag{4}$$

のように振舞うと考えられる.[5, 13] 例えば, サイト希釈の強磁性体を考え, あるサイトにスピンが存在する確率 (スピンの濃度) を p とする. スピン数が n 個のクラスターが存在するためには, その n 個のサイトにスピンが存在しなければならず, その確率は p^n となり (4) 式を与える. $P(n)$ に対するそのほかの補正は, これより弱い n 依存性しか与えないと考えられる.

クラスター内のスピンがほとんど+にそろった状態から, −にそろった状態にうつるためには, シングルスピンフリップの場合, スピンの半分が+で半分が−の状態を経過しなければならない. このような状態で, 最も自由エネルギーの増加の少ないのは, クラスターがスピンが+の領域と−の領域ふたつの領域に分かれる場合である. スピン数 n の d 次元クラスターでは, 領域間の界面の大きさは $n^{(d-1)/d}$の程度であり, 自由エネルギーの増加は $n^{(d-1)/d}$に比例する. これより, クラスター内のスピンがほとんど+にそろった状態から, −にそろった状態にうつる緩和時間$\tau(n)$ は

$$\tau(n) \sim \exp[\sigma n^{(d-1)/d}], \tag{5}$$

と振舞うと予想される.

n が十分大きくなれば $m(n)$ の n 依存性は小さいと考えられる.

$$m(n) \sim m. \tag{6}$$

(3) 式に (4), (5), (6) 式を代入し, 積分を鞍点評価すると, (1) 式の結果が得られる.

3　希釈イジング模型に対するこれまでの結果

$L \times L$ 正方格子上のボンド希釈イジング模型を考える. ハミルトニアンは

$$-\beta H = \sum_{\langle i,j \rangle} K_{i,j} S_i S_j \tag{7}$$

で与えられる. ここで, $S_i = \pm 1$ は i 番目のイジングスピン, $\sum_{\langle i,j \rangle}$ は最隣接スピンの組に関する和を表している. 隣接スピン間の相互作用 (ボンド) $K_{i,j}$ の分布は

$$P(K_{i,j}) = p\delta(K_{i,j} - K) + (1-p)\delta(K_{i,j}) \tag{8}$$

で与えられるとする. これは, ボンドが存在する確率が p であることを表している.

$L = 96$, $K = 0.6$ および 0.7, $p = 0.4$ の場合にモンテカルロ・シミュレーションを行った. この K の値は, 臨界点 $K_c \simeq 0.44$ より大きく, 臨界温度より下の温度に相当する. p の値はパーコレーションのしきい値 $p_c = 0.5$ より小さく, 系は有限のクラスターに分解できる.

$q(t)$ を測定したところ, (1) 式よりは (2) 式のように緩和して見えた.

前節の理論との関係を調べるために, 系をクラスターに分解し, 各クラスターごとに最長の緩和時間 τ を測定した. クラスターの緩和時間を決めているのは, クラスター内で, 互いに結合したスピンが密に存在する部分の大きさであると考えられる. 前節の (5) 式の中の n は, このスピンが密に存在する部分のスピン数と考えられる. そこで, (5) 式を使って, 緩和時間 τ から, 各クラスターの有効サイズ ν を次のように定義する.

$$\nu = (\ln \tau)^{d/(d-1)} \tag{9}$$

ここでは, $d = 2$ を考えている. この ν はスピンが密に存在する部分のスピン数 n と

$$\nu \ \sim \ \sigma(T)^{d/(d-1)} n \tag{10}$$

の関係にあると考えられる.

クラスターごとの有効サイズ ν の分布を調べたところ,

$$P(\nu) \propto \exp[-\gamma\nu] \tag{11}$$

のように指数関数的に減少していると見なせることがわかった. これは, 理論で使った式 (4) と同じである.

次に, この緩和時間の分布から次のように $q(t)$ を再構成してみた.

$$\tilde{q}(t) = \frac{A \int \mathrm{d}\nu \exp(-\gamma\nu)\nu \exp[-t\exp(-\nu^{(d-1)/d})]}{\int \mathrm{d}\nu \exp(-\gamma\nu)\nu} \tag{12}$$

$\tilde{q}(t)$ は $q(t)$ と半定量的に一致し, $q(t)$ の振舞いが, この緩和時間の分布から理解できることがわかった. (12) 式は, 理論で用いている式と同じであり, 同じ漸近形 (1) を持つ. シミュレーションで, この漸近形が見えていないのは, 漸近形に対する補正が大きいためと考えられる.

さらに, 異なる温度に対して ν を調べたところ, $\nu \ \sim \ \sigma(T)^{d/(d-1)} n$ に対応して,

$$\text{有効サイズ}\nu \ \sim \ (\text{温度依存性をもった係数}) \times (\text{幾何学的大きさ}) \tag{13}$$

とみなせることがわかった.

4　$\pm J$イジング模型に対する結果

$L\times L$ 正方格子上の $\pm J$ イジング模型を考える．ハミルトニアンは

$$-\beta H=\sum_{\langle i,j\rangle}K_{i,j}S_iS_j, \tag{14}$$

隣接スピン間の相互作用 (ボンド)$K_{i,j}$の分布は

$$P(K_{i,j})=p\delta(K_{i,j}-K)+(1-p)\delta(K_{i,j}+K) \tag{15}$$

で与えられる．ここで, p は+ボンドの濃度を表している．

$p=0.5$, $L=96$ に対して, 臨界温度より上の $K=0.3$ および臨界温度より下の $K=0.6, 0.7$ の場合にモンテカルロ・シミュレーションを行った．平衡化のために最初の10^4MCS(モンテカルロ・ステップ) を捨てた後, 2×10^5MCS を平衡状態における平均の計算に用いた．個々のスピンの自己相関関数 $q_i(t)=\langle S_i(0)S_i(t)\rangle$, その系全体での平均 $q(t)=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N q_i(t)$ を測定した．

$q(t)$ と $q_i(t)$ の t 依存性を片対数プロットでみると, 個々の $q_i(t)$ は長時間で指数関数的緩和に近づいている (緩和時間はそれぞれ異なる) のに対し, それらの平均である $q(t)$ は指数関数的緩和に近づいているようには見えないことがわかる (図 1)．また, $\ln q(t)$ 対 $(\ln t)^2$ のプロットでは, 直線的には見えず, (1) 式のようには見えていないことがわかる (図 2)．それに対し, $\ln(-\ln q(t))$ 対 $\ln t$ のプロットは, 直線的に見え, (2) 式のように見えることがわかる (図 3)．

緩和の遅いスピンがクラスター構造を形成しているかを調べるために, 各スピンの自己相関関数 $\ln q_i(t)$ 対 t の長時間での傾きから各スピンの緩和時間τ_iを評価した．希釈イジング模型の場合と同様に, τ_iそのものでなく有効サイズ$\nu=(\ln\tau)^{d/(d-1)}$を用いる ($d=2$)．$(\ln\tau_i)^2$のヒストグラムをみると, 裾をひいていることがわかる．$(\ln\tau_i)^2$の空間分布をみると, 緩和の遅いスピンがクラスターを形成していることがわかる (図 4)．さらに, ボンド配置 (フラストレーション) とクラスター構造との関係を調べると, 上記のクラスターはフラストレーションのないプラケットのクラスターの一部分になっている．

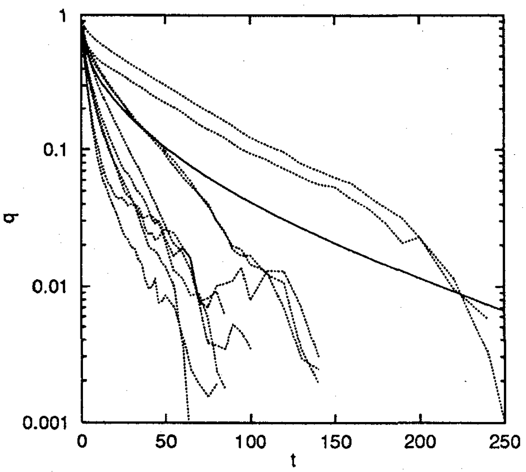

図 1.　$q(t)$ の t 依存性．実線は $q(t)$, 点線は, いくつかのスピンに対する $q_i(t)$ を表す．$K=0.6$ の場合．

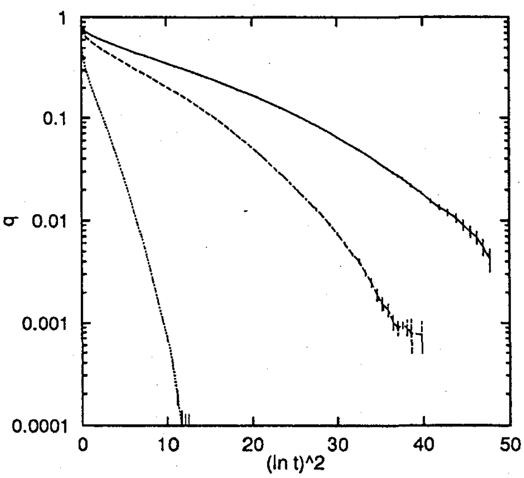

図 2.　$q(t)$ 対 $(\ln t)^2$の半対数プロット．点線, 破線, 実線はそれぞれ $K=0.3$, 0.6, 0.7 の場合に対応する．

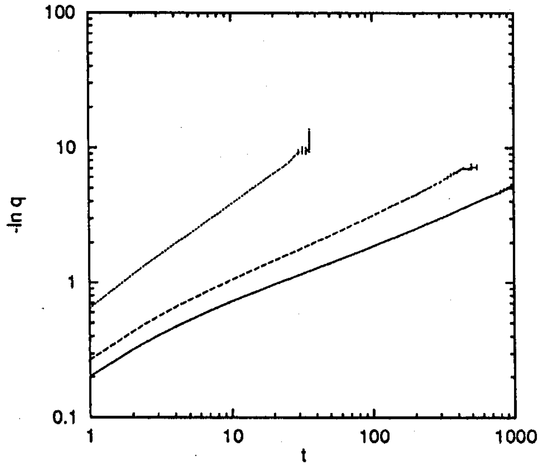

図 3. $-\ln q(t)$ 対 t の両対数プロット. 点線, 破線, 実線はそれぞれ $K=0.3$, 0.6, 0.7 の場合に対応する.

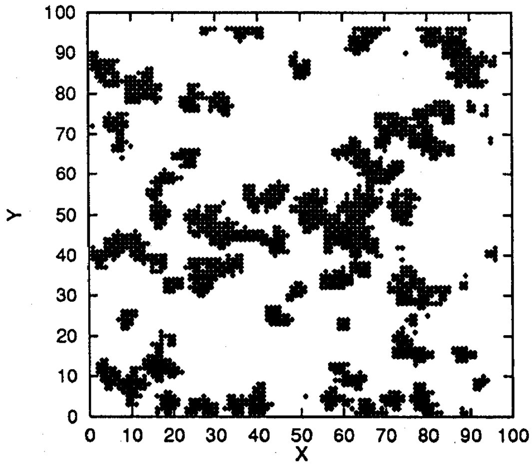

図 4. $(\ln\tau_i)^2>24$ のサイト. $K=0.7$ の場合.

次に希釈イジング模型と同様のシナリオで $q(t)$ の振舞いを説明できるかを考える. まず, 有効サイズνの分布を調べる. (ある有効サイズのスピン数)/(有効サイズ) $\propto$(その有効サイズのクラスター数) と考え, ln(有効サイズνのクラスター数) 対 ν のプロットをみると, $\nu=(\ln\tau)^2$の大きいところで,

$$(\text{有効サイズ}\nu\text{のクラスター数}) \propto \exp\left[-\gamma\nu\right] \tag{16}$$

と考えてもよさそうである (図 5). そこで, 希釈イジング模型の場合と同様に

$$\tilde{q}(t)=A\int_{\nu_{\min}}^{\nu_{\max}} \mathrm{d}\nu \exp(-\gamma\nu)\nu\exp[-t\exp(-\nu^{(d-1)/d})] \tag{17}$$

$(d=2)$ を計算してみた. この$\tilde{q}(t)$ と $q(t)$ と比較したところ, $q(t)$ の長時間の振舞いは説明できそうである (図 6). すなわち, 希釈イジング模型と同様のシナリオでよさそうである.

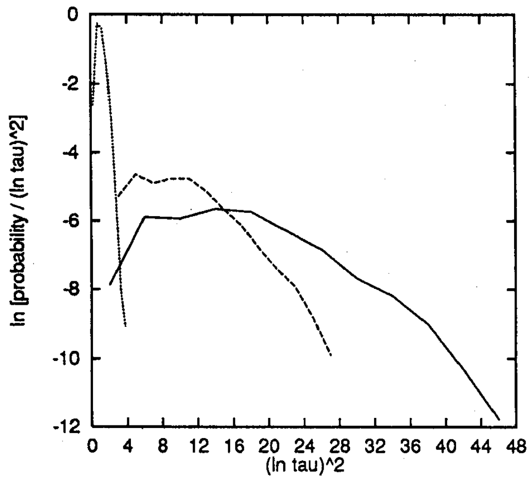

図 5. ln(有効サイズνのクラスター数) 対ν. 点線, 破線, 実線はそれぞれ $K=0.3$, 0.6, 0.7 の場合に対応する.

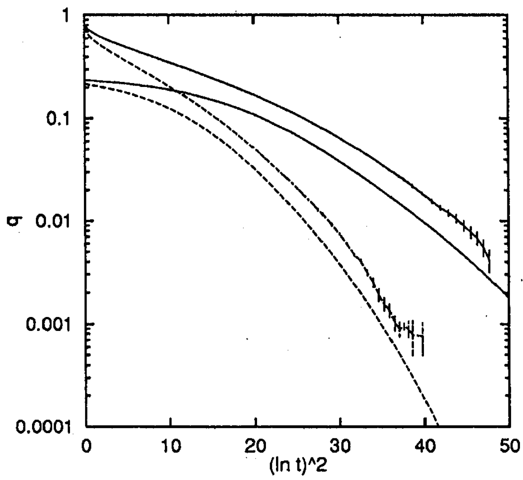

図 6. $q(t)$ 対 $(\ln t)^2$の半対数プロット. 破線, 実線はそれぞれ $K=0.6$, 0.7 の場合に対応する. 破線, 実線とも, 下側の線は (12) 式で計算した$\tilde{q}(t)$.

では, 緩和の遅いスピンは, 本当に "強磁性的" クラスターとして反転しているのであろうか. $p=0.5$, $L=32$, $K=0.6$ の場合に, 試みにクラスターを定義してみて, "強磁性的" クラスターの "磁化"(staggered magnetization m) の緩和 (クラスター全体の緩和) と個々のスピンの緩和とを比較してみた. $\langle m(0)m(t)\rangle$ とそのクラスター内の $q_i(t)$ の t 依存性の片対数プロットをみると次のことがわかる. (i) $\langle m(0)m(t)\rangle$ は指数関数的緩和に近い (緩和の良いモードになっている). (ii) その緩和時間は, $q_i(t)$ の長時間での振舞いを決めている. これより, この "強磁性的" クラスターが全体として運動しており, $q_i(t)$ の長時間での振舞いはこのクラスターの運動で決まっていると考えられる.

さらに, $\nu \sim \sigma(T)^{d/(d-1)}n$ に対応して, 有効サイズ$\nu\sim$ (温度依存性をもった係数)$\times$(幾何学的大きさ) とみなせるかを考える. 各スピンごとの異なる温度におけるν_iの相関をプロットしてみたところ, $\nu_i(K=0.6)\propto\nu_i(K=0.7)$ で, 比例定数はスピンによらないという傾向がわかった. これは, (13) 式のように見なしてもよさそうなことを示唆している.

5 まとめ

2 次元$\pm J$イジング模型のグリフィス相での緩和現象を調べ, 次のことを明らかにした.

1. 緩和の遅いスピンがクラスターを形成している.
2. そのクラスターにはフラストレーションがない.
3. そのクラスター内のスピンの長時間での振舞いは, クラスター全体が反転する緩和時間で決まる.
4. 緩和時間は, 希釈イジング模型の場合と同様の分布をしているようである.
5. この緩和時間の分布から, $q(t)$ の長時間での振舞いを説明できそうである.

これらのことは, 2 次元$\pm J$イジング模型のグリフィス相での緩和現象を, 希釈イジング模型の場合と同様のクラスター的描像でも理解できることを示唆している.

今後の方向としては, より精度良く緩和時間の分布を決定すること, 緩和時間分布とボンド分布との関係を明らかにすることが重要である. さらに, いろいろな濃度 p, 温度 K^{-1} に対して, 同様の解析を行ない, クラスター的描像の有効性を明らかにしていく必要がある.

参考文献

1) D. Dhar: *Stochastic Processes: Formalism and Applications*, ed. G.S. Agarwal and D. Dattagupta (Springer, Berlin, 1983).
2) A.J. Bray: Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 720.
3) A.J. Bray and G.J. Rodgers: J. Phys. **C21** (1988) L243.
4) A.J. Bray and G.J. Rodgers: Phys. Rev. **B38** (1988) 9252.
5) D. Dhar, M. Randeria and J.P. Sethna: Europhys. Lett. **5** (1988) 485.
6) A.J. Bray: J. Phys. **A22** (1989) L81.
7) R.B. Griffiths: Phys. Rev. Lett. **23** (1969) 17.
8) M. Randeria, J.P. Sethna and R.G. Palmer: Phys. Rev. Lett. **54** (1985) 1321
9) S.G. Colborne and A.J. Bray: J. Phys. **A22** (1989) 2505.
10) H. Takano and S. Miyashita: J. Phys. Soc. Jpn. **58** (1989) 3871.
11) A.T. Ogielski: Phys. Rev. **B32** (1985) 7384.
12) H. Takano, H. Nakanishi, S. Miyashita, T. Saito and Y. Kimizuka: unpublished.
13) S. Miyashita and H. Takano: Prog. Theor. Phys. **73** (1985) 1122.