

緩和過程のモードとしてのクラスター

慶大理工, 阪大理^A 高野 宏, 宮下 精二^A

1. 背景

ランダム・スピン系において、ランダム・スピン系の相転移温度 T_c^{random} より上のある温度範囲 (グリフィス相と呼ばれる) において緩和現象に異常が現れることが議論されている。¹⁻⁵⁾ これは、ランダム・スピン系においていくらかでも大きい“強磁性的”クラスターが有限の確率で存在し、クラスター内のスピンの緩和時間がこの温度範囲ではクラスターが大きくなると非常に長くなることのために生じる。

例えば、 d 次元の希釈強磁性イジング模型や $\pm J$ イジング模型の場合、ランダムでない強磁性イジング模型の相転移温度を T_c^{pure} とすると、 $T_c^{\text{random}} < T < T_c^{\text{pure}}$ の温度範囲がグリフィス相であり、この温度範囲においてスピン自己相関関数が

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

のように非指数関数的緩和を示すことが理論的に予想されている。これに対し、モンテカルロ・シミュレーションの結果は、希釈イジング模型、 $\pm J$ イジング模型に対して、 $q(t)$ の緩和は $q(t) \sim \exp[-Dt^\beta]$ ただし $0 < \beta < 1$. のように“引き伸ばされた指数関数”的に見えている。⁶⁻¹²⁾

(1) 式を導く理論の概略は以下の通りである。系がフラストレートしていない“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。 d 次元系で、スピン数 $n \sim n + dn$ のクラスターを考える。1つのスピがこのようなクラスターに含まれる確率を $P(n)dn$ 、クラスター中の最長の緩和時間 (クラスター全体の反転時間) を $\tau(n)$ 、クラスター内でのスピン1個当たりの“磁化”の大きさを $m(n)$ とする。このとき、 $q(t)$ は、

$$q(t) \simeq \int dn P(n) m^2(n) \exp[-t/\tau(n)]. \quad (2)$$

のように表される。 $P(n)$ 、 $\tau(n)$ 、 $m(n)$ は n の大きいところで

$$P(n) \sim \exp[-cn], \quad \tau(n) \sim \exp[\sigma n^{(d-1)/d}], \quad m(n) \sim m \quad (3)$$

のように振る舞うと予想される。これらの振る舞いを (2) に代入し、積分を鞍点評価することにより、(1) が得られる。

これまでに、ボンド濃度 p がパーコレーションのしきい値 p_c より低い2次元ボンド希釈イジング模型に対しモンテカルロ・シミュレーションを行ない、以下のことを明らかにした。⁸⁾ 系は有限のクラスターに幾何学的に分かれるが、各クラスター内の最長の緩和時間の分布が理論の予想と合うことがわかった。さらに、この緩和時間の分布から、 $q(t)$ の“引き伸ばされた指数関数”的緩和が説明できることがわかった。結局、理論の予想 (3) は正しいが、漸近形 (1) に対する補正が大きいと考えられる。

$p > p_c$ の希釈イジング模型の場合、独立に反転運動をするクラスターをどのように定義すればよいかは自明ではない。2次元 $\pm J$ イジング模型に対して、スピンごとに緩和時間を測定し、希釈イジング模型と同様の結果を得ているが、¹¹⁾ この場合にも、クラスターの定義がはっきりしない。

以下では、ランダムスピン系において緩和モードを見出す方法、¹²⁾ 遅い局在した緩和モードをクラスターと見なせること、¹²⁾ $\pm J$ イジング模型に対する結果¹²⁾ および $p > p_c$ のボンド希釈イジング模型に対する結果について報告する。

2. 緩和モードとしてのクラスター

以下では、シングル・スピン・フリップの動的イジング模型を考える。時刻 t にスピン配置 S をとる確率を $P(S; t)$ とするとき、マスター方程式は、

$$\frac{\partial}{\partial t} P(S; t) = \sum_i [-W_i(S)P(S; t) + W_i(F_i S)P(F_i S; t)] = - \sum_{S'} \Gamma(S|S')P(S'; t) \quad (4)$$

で与えられる。ここで、 $W_i(S)$ はスピン配置 S において i 番目のスピン S_i が反転する単位時間当たりの確率を表し、 $F_i S$ はスピン配置 S から S_i を反転して得られるスピン配置配置を表す。 $\Gamma(S|S')$ は系の時間発展演算子 (遷移行列) であり、確率保存の条件 $\sum_S \Gamma(S|S') = 0$ と、平衡分布 $P_{\text{eq}}(S)$ に関する詳細釣り合いの条件 $\Gamma(S|S')P_{\text{eq}}(S') = \Gamma(S'|S)P_{\text{eq}}(S)$ を満たす。

$\Gamma(S|S')$ に対する固有値方程式 $\sum_S \phi_n(S)\Gamma(S|S') = \lambda_n \phi_n(S')$, $\sum_{S'} \Gamma(S|S')\psi_n(S') = \lambda_n \psi_n(S)$ を考える。このとき、同じ固有値 λ_n に対する左固有関数 $\phi_n(S)$ と右固有関数 $\psi_n(S)$ の間には、 $\psi_n(S) = \phi_n(S)P_{\text{eq}}(S)$ の関係がある。平衡分布関数 $P_{\text{eq}}(S)$ は固有値 0 の左固有関数で、対応する右固有関数は 1 である。固有関数は規格直交関係 $\sum_S \phi_m(S)\psi_n(S) = \sum_S \phi_m(S)\phi_n(S)P_{\text{eq}}(S) = \langle \phi_m \phi_n \rangle = \delta_{m,n}$ を満たすように選ぶものとする。時刻 t で S' , 時刻 $t + \tau$ で S をとる条件付き確率は、 $T_\tau(S|S') = e^{-\Gamma\tau}(S|S')$ で与えられる。 $\phi_n(S)$, $\psi_n(S)$ は、 $T_\tau(S|S')$ の固有関数であり、積分形の固有値方程式 $\sum_S \phi_n(S)T_\tau(S|S') = e^{-\lambda_n\tau}\phi_n(S')$, $\sum_{S'} T_\tau(S|S')\psi_n(S') = e^{-\lambda_n\tau}\psi_n(S)$ を満たす。スピン配置の関数としての物理量 $A(S)$, $B(S)$ を固有関数を用いて $A(S) = \sum_n a_n \phi_n(S)$, $B(S) = \sum_n b_n \psi_n(S)$ のように展開すると、平衡での時間相関関数は $\langle A(t)B(0) \rangle = \sum_S \sum_{S'} A(S)T_t(S|S')B(S')P_{\text{eq}}(S') = \sum_n a_n b_n \exp(-\lambda_n t)$ で与えられる。特に、左固有関数 $\phi_n(S)$ の時間相関関数は $\langle \phi_m(t)\phi_n(0) \rangle = \delta_{m,n} \exp(-\lambda_n t)$ で与えられる。互いに直交し、指数関数的に緩和する関数として、 $\phi_n(S)$ を緩和モードと呼ぶことにする。

$p < p_c$ のボンド希釈イジング模型のグリフィス相においては、クラスターの磁化 m の相関関数 $\langle m(t)m(0) \rangle$ が指数関数的に緩和している。⁸⁾ $\pm J$ イジング模型のグリフィス相において、フラストレーションの無い領域をクラスターとして切り出すと、その領域の“磁化”(Mattis order)¹³⁾ m_M の時間相関関数 $\langle m_M(t)m_M(0) \rangle$ が指数関数的緩和を示す。¹¹⁾ いずれの場合も、クラスターの“磁化” m または m_M が緩和モードの良い近似になっている。これより、“磁化”に対応するような緩和モード (時間発展演算子の左固有関数) が局在していればクラスターと見なすことができることが示唆される。すなわち、動的性質からクラスターを見出す問題は、“磁化”に相当するような時間発展演算子の左固有関数 (緩和モード) を近似的に見出す問題になる。¹²⁾

3. 緩和モードの近似的計算法¹²⁾

前節に出てきた積分形の固有値方程式は、Rayleigh 商

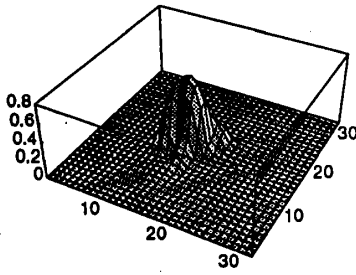


図 1

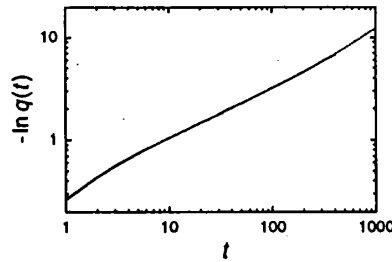


図 2

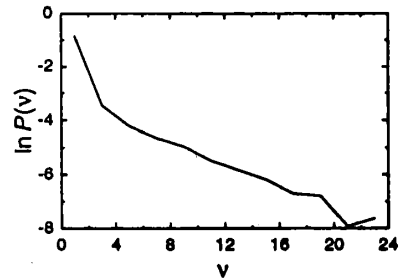


図 3

$$\mathcal{R} = \frac{\sum_{S,S'} \phi_n(S) T_i(S|S') \phi_n(S') P_{\text{eq}}(S')}{\sum_S \phi_n(S) \phi_n(S) P_{\text{eq}}(S)} = \frac{\langle \phi_n(t) \phi_n(0) \rangle}{\langle \phi_n \phi_n \rangle} \quad (5)$$

に対する変分問題に等価で、 \mathcal{R} の極値を与える ϕ_n が固有関数、 \mathcal{R} の極値が固有値 $\exp(-\lambda_n t)$ となる。緩和モードを近似的に求める方法として変分法を用いる。クラスターの“磁化”がスピンの線型結合で与えられることを参考にして、試行関数として、

$$\phi_n(S) = \sum_i f_{n,i} S_i \left(\frac{t_0}{2}; S \right) \quad (6)$$

を採用する。ここで、 $S_i(t; S) = \sum_{S'} S_i(S') T_i(S'|S)$ は配置 S から出発して時間 t 後の i 番目のスピンの期待値である。この試行関数を $\delta \mathcal{R} = 0$ に代入すると、変分パラメータ $f_{n,i}$ と固有値 $\exp(-\lambda_n t)$ を決める方程式として、一般化固有値方程式

$$\sum_j \chi_{i,j}(t+t_0) f_{n,j} = \exp(-\lambda_n t) \sum_j \chi_{i,j}(t_0) f_{n,j} \quad (7)$$

が得られる。ここで、 $\chi_{i,j}(t) = \langle S_i(t) S_j(t) \rangle$ はスピンの相関行列である。規格直交関係 $\langle \phi_n \phi_m \rangle = \delta_{n,m}$ は、 $\sum_i \sum_j f_{n,i} \chi_{i,j}(t_0) f_{m,j} = \delta_{n,m}$ となる。 $S_i(S)$ の固有関数展開 $S_i(S) = \sum_n \mu_{i,n} \phi_n(S)$ の係数は $\mu_{i,n} = \sum_S S_i(S) \phi_n(S) P_{\text{eq}}(S) = \langle S_i \phi_n \rangle$ で与えられるが、今の近似的固有関数を用いると、 $\mu_{i,n} = \sum_j \chi_{i,j}(t_0/2) f_{n,j}$ となる。この $\mu_{i,n}$ と緩和率 λ_n を用いれば、スピンの自己相関関数は $q_i(t) = \langle S_i(t) S_i(0) \rangle = \sum_n |\mu_{i,n}|^2 \exp(-\lambda_n t)$ のように表される。

4. 2次元 $\pm J$ イジング模型に対する結果¹²⁾

$L \times L$ 正方格子上的 $\pm J$ イジング模型を考える。因子 $-1/(k_B T)$ を含めたハミルトニアンは $-\mathcal{H}/(k_B T) = \sum_{\langle i,j \rangle} K_{i,j} S_i S_j$ で与えられる。 $\sum_{\langle i,j \rangle}$ は最隣接格子点の組に関する和を表し、各 $K_{i,j}$ は確率 p で $K > 0$ 、確率 $1-p$ で $-K$ という値をとる。純粋系 ($p=1$) の臨界点は $K_c \simeq 0.44$ であり、 $p=0.5$ の系では有限温度で転移はないと考えられている。 $L=32$, $K=0.6 > K_c$, $p=0.5$ の場合に、4個のサンプルに対してモンテカルロ・シミュレーションを行ない、 $\chi_{i,j}(t) = \langle S_i(t) S_j(0) \rangle$ を測定した。 $t=1, t_0=1$ として (7) を解き、 λ_n と $\mu_{i,n}$ を評価した。緩和の遅い順に ($\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3 < \dots$ となるように) モード番号 n をつける。図 1 は、 $n=1$ に対する $|\mu_{i,n}|^2$ の空間分布で、モードが局在しクラスターを形成していること

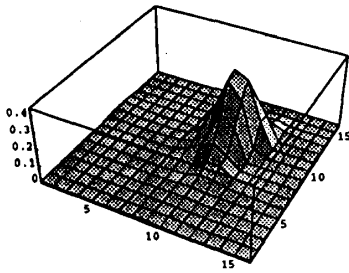


図 4

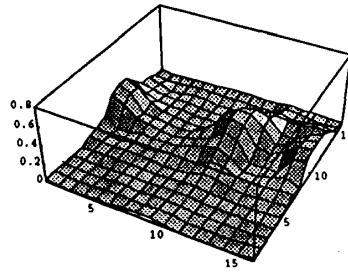


図 5

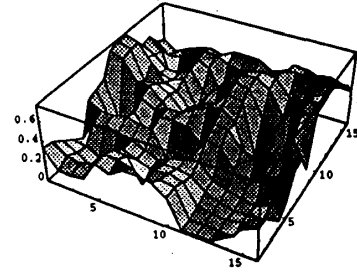


図 6

がわかる。図 2 は、評価した λ_n と $\mu_{i,n}$ から再構成した $q(t)$ (点線) を直接シミュレーションで評価した $q(t)$ (実線) とを比較したもので、よく一致している。同様に比較した $q_i(t)$ もよく一致していた。クラスター (緩和モード) の有効サイズ ν をその緩和時間 $\tau = 1/\lambda$ を用いて $\tau = \exp[\nu^{(d-1)/d}]$ で定義する ($d=2$)。この ν の分布関数 $P(\nu)$ を示したのが図 3 で、 ν の大きいところで $P(\nu) \sim \exp(-\gamma\nu)$ のように指数関数的に減衰していることがわかる。このことより、クラスターの描像に基づく理論の予想 (3) がよさそうであり、漸近形 (1) に対する補正が大きいためにシミュレーションでは (1) が見えないと考えられる。

5. 2次元ボンド希釈イジング模型に対する結果

同様の解析をボンド濃度 $p = 0.6 > p_c = 0.5$ の 16×16 正方格子上的ボンド希釈イジング模型に対して行なった。図 4,5,6 は結合定数 (温度の逆数) K を 0.4, 0.6, 0.8 としたときの一番遅い緩和モードの $|\mu_{i,n}|^2$ の空間分布である。高温相における局在したモード (図 4) が、温度をさげると複数つながり (図 5)、低温相では系全体に広がる (図 6) 様子がわかる。 $K = 0.6$ では、有効サイズの分布などを調べたところ、前節同様、グリフィス相でのクラスターの描像に基づく理論の予想と矛盾しない結果が得られた。

- 1) D. Dhar: *Stochastic Processes: Formalism and Applications*, ed. G.S. Agarwal and D. Dattagupta (Springer, Berlin, 1983) p.300.
- 2) A.J. Bray: *Phys. Rev. Lett.* **59** (1987) 586; *Phys. Rev. Lett.* **60** (1988) 720; *J. Phys.* **A22** (1989) L81.
- 3) A.J. Bray and G.J. Rodgers: *J. Phys.* **C21** (1988) L243; *Phys. Rev.* **B38** (1988) 9252.
- 4) D. Dhar, M. Randeria and J.P. Sethna: *Europhys. Lett.* **5** (1988) 485.
- 5) M. Randeria, J.P. Sethna and R.G. Palmer: *Phys. Rev. Lett.* **54** (1985) 1321
- 6) S. Jain: *J. Phys.* **C21** (1988) L1045.
- 7) S.G. Colborne and A.J. Bray: *J. Phys.* **A22** (1989) 2505.
- 8) H. Takano and S. Miyashita: *J. Phys. Soc. Jpn.* **58** (1989) 3871.
- 9) A.T. Ogielski: *Phys. Rev.* **B32** (1985) 7384.
- 10) K. Hukushima and K. Nemoto: *J. Phys: Condens. Matter* **5** (1993) 1389.
- 11) H. Takano and S. Miyashita: *J. Phys. Soc. Jpn.* **64** (1995) 423.
- 12) H. Takano and S. Miyashita: submitted to *J. Phys. Soc. Jpn.*
- 13) D.C. Mattis: *Phys. Lett.* **56A** (1976) 421.