

3次元ハイゼンベルグスピングラスのスティッフネス

東北大工 遠藤 新一, 松原 史卓
岩大人社 白倉 孝行

3次元ハイゼンベルグスピングラスモデルでは有限温度でスピン秩序は起こらないと考えられている [1, 2, 3]。その根拠の1つに、欠陥エネルギーが格子サイズと共に減少することが挙げられる。我々は従来の欠陥エネルギー法とは異なる新しい評価方法を考案し、その方法を用いてスピン秩序の有無について再調査を行った。その結果、温度 $T \sim 0.2J$ より低温側で基底状態は安定に存在することが分かった。このことは有限温度でスピン秩序が起こる可能性があることを示唆している。

1 絶対零度におけるスティッフネスの評価

絶対零度における系のスティッフネスを調べる方法として、欠陥エネルギー法が広く用いられてきた [1]。この方法では、周期境界条件が課された系と反周期境界条件が課された系を用意し、それぞれの系の最低エネルギー E_P , E_{AP} を求める。このとき、系の欠陥エネルギー ΔE は $\Delta E = |E_{AP} - E_P|$ で定義される。この方法は強磁性体模型においては問題はないが、スピングラスのようなランダム系において本当に正しい欠陥エネルギーを評価しているかどうか自明ではない。

今回、我々は従来の方法とは異なる新しい欠陥エネルギーの評価方法を考案した [4]。その手順を以下に述べる。(1) $L \times L \times (L+1)$ の格子を用意する。 $L+1$ 方向を z 方向とし、残りの方向を x, y 方向とする。(2) x, y 方向には周期境界条件、 z 方向には開放端境界条件を課し、その条件下での基底エネルギー E_L^G と対応するスピン配列を求める。(3) $z = 1$ 面上のスピンを固定し、 $z = L+1$ 面上のスピンを固定軸のまわりに一様回転させ固定する。 $z = L+1$ 面上のスピンはすべて同じ角度だけ回転していないので、以下の式で定義されるような平均の角度 ω を導入する。

$$\cos \omega = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^{L^2} \mathbf{S}_i^{(L+1)} \tilde{\mathbf{S}}_i^{(L+1)} \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{S}_i^{(L+1)}, \tilde{\mathbf{S}}_i^{(L+1)}$ はそれぞれ一様回転する前と後の $z = L+1$ 面上のスピンを表す。このときの系の最低エネルギー $E_L(\omega)$ を求める。(4) 回転(ひねり)による系のエネルギーの増加分 $\Delta E_L(\omega)$ を

$$\Delta E_L(\omega) = E_L(\omega) - E_L^G \quad (2)$$

より求める。この $\Delta E_L(\omega)$ がさまざまな角度 ω に対して格子サイズ L と共に増加すれば、基底状態は安定と考えられる。

この方法に対して、3つのコメントをしておく。(1) $z = L + 1$ 面上のスピンを一斉に一様回転させているのでカイラリティは変更されない。よって、 $\Delta E_L(\omega)$ の中にはスピンの寄与のみが入る。(2) 一様回転の前後では $z = 1, L + 1$ 面上のエネルギー E_1, E_{L+1} は変わらないので、内部のスピンのエネルギーの増加だけを見ることが出来る。(3) 平均の角度 ω は最大で $\omega_{max} \sim 0.6\pi$ の値までしかとれないので、これより小さい角度領域で $\Delta E_L(\omega)$ を調べればよい。

計算結果について述べる。1サンプルにつき200通りの角度 ω の回転を施し、その中で最もエネルギーの低いものをその角度 ω における最低エネルギーとみなした。基底状態のスピンの配列はアニーリングを加えたスピントラップ法で決定した。図1は3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の $\Delta E_L(\omega)$ の結果である。 $\Delta E_L(\omega)$ は $\omega \leq \omega_{max}$ の範囲内で格子サイズ L の約0.8乗で増加する傾向にあることが分かった。

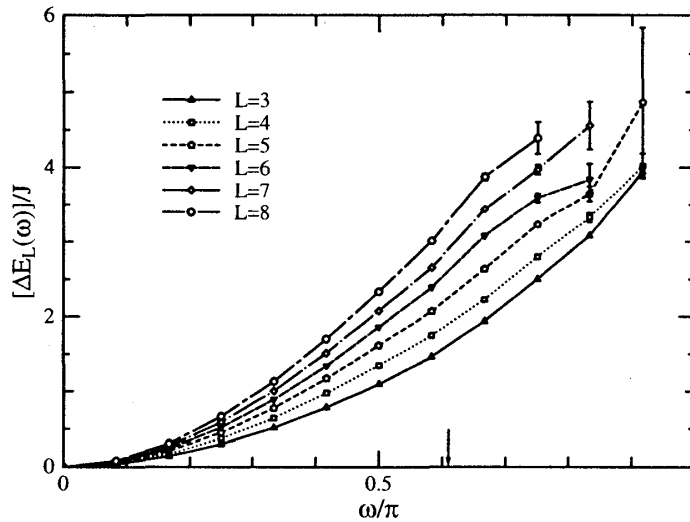


図1: 3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の $\Delta E_L(\omega)$ 。矢印は ω_{max} の位置を表す。

さらに、角度 ω の方も考慮に入れると、図2に示すように ω_{max} 以下のデータ点がすべて

$$\Delta E_L(\omega) \sim 0.14J\omega^{1.9}L^{0.8} \quad (3)$$

という関数形でスケールされることが分かった。式(3)は3次元強磁性ハイゼンベルグ模型の $\Delta E_L(\omega)$

$$\Delta E_L(\omega) \sim \frac{1}{2}\pi^2 J\omega^2 L \quad (4)$$

と類似している。このことは、3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の「ひねり」に対する応答が3次元強磁性ハイゼンベルグ模型のそれと類似していることに起因していると考えられる。実際、「ひねり」に対して内部のスピンの順次ほぼ等角度で変化することを確認した。

$z = L + 1$ 面上のスピンを「回転」ではなく「反転」させた場合の $\Delta E_L(\omega)$ も計算し、格子サイズ L の約0.35乗で増加する傾向にあることが分かった。

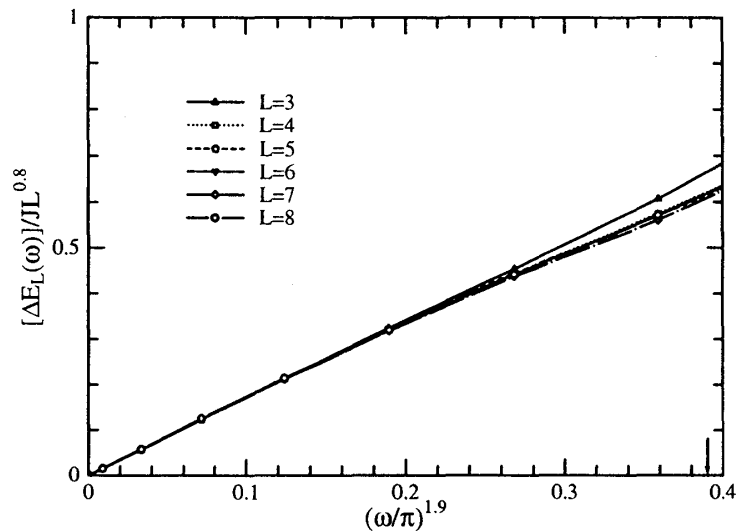


図 2: 3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の $\Delta E_L(\omega)$ のスケーリング。矢印は ω_{max} の位置を表す。

2 有限温度におけるスティッフネスの評価

絶対零度での計算結果を踏まえて、我々は有限温度における系のスティッフネスの評価を行った。ここでは、「回転」による系の自由エネルギーの増加分 ΔF_L をモンテカルロひねりの方法で計算した [5]。図 3 に、ある固定軸 (z 軸) のまわりに 90 度回転させた場合の ΔF_L の結果を示す。 ΔF_L は低温側では格子サイズ L と共に増加するのに対し、高温側では L と共に減少していく様子が見てとれる。この結果は低温で基底状態が安定に存在することを示唆している。

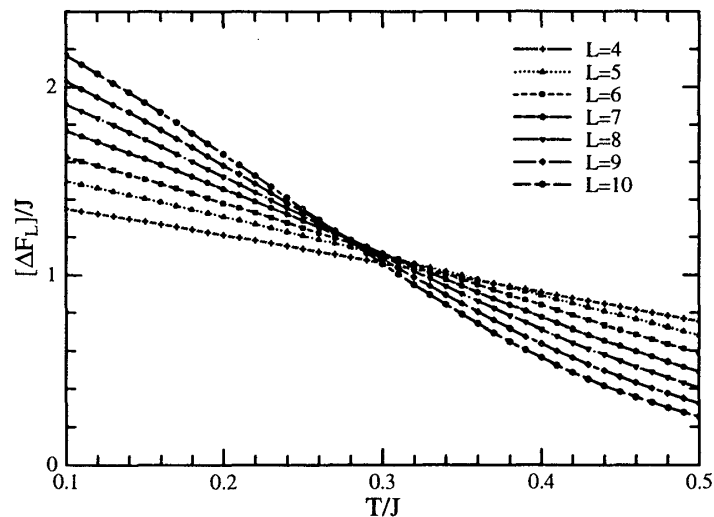


図 3: 3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の ΔF_L の温度依存性

基底状態が安定か不安定になるかの境目の温度を評価するために、 ΔF_L と ΔF_{L+1} の交点の収束性を調べた。図 4 に示すように、 ΔF_L と ΔF_{L+1} の交点を $1/L$ で外挿したところ、温度として

0.2J 付近に収束する結果が得られた。

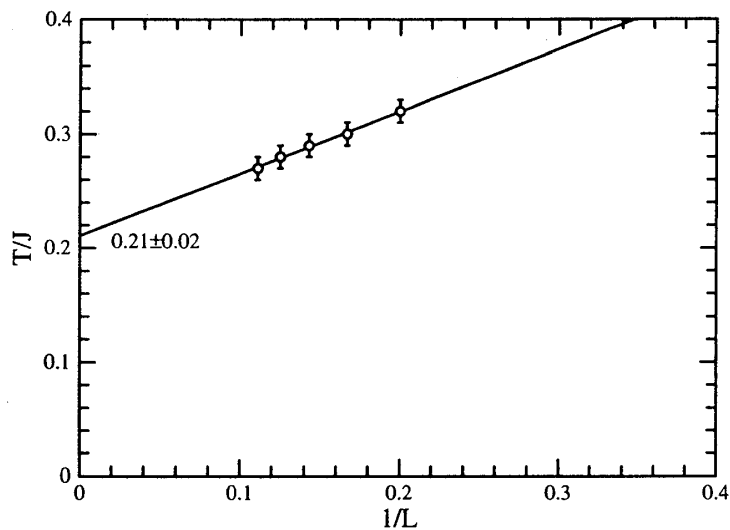


図 4: 3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の ΔF_L と ΔF_{L+1} の交点の $1/L$ 依存性

「回転」ではなく「反転」による自由エネルギーの増分も計算したところ、低温側と高温側で異なるサイズ依存性が見られた。 ΔF_L と ΔF_{L+1} の交点を $1/L$ で外挿した結果、温度として 0.2J 付近に収束することが分かった。

3 まとめ

欠陥エネルギーの新しい評価方法を考案し、その方法を用いて 3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の「回転」及び「反転」に対するスティッフネスを調べた。温度 $T \sim 0.2J$ より低温側で基底状態は安定に存在することが分かった。この結果は有限温度でスピン秩序が起こる可能性があることを示唆している。今後、さまざまな方向からこの問題について再検討を行う必要があると考える。

参考文献

- [1] W. L. McMillan, Phys. Rev. B **31** (1985), 342
- [2] J. Olive, A. P. Young, and D. Sherrington, Phys. Rev. B **34** (1986), 6341
- [3] K. Fukushima and H. Kawamura, cond-mat/0001127
- [4] F. Matsubara, S. Endoh and T. Shirakura, J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000), 印刷中
- [5] H. Shioda and Y. Ueno, J. Phys. Soc. Jpn. **62** (1993), 970.