

3次元 $\pm J$ ハイゼンベルグスピングラスモデルにおける スピングラス転移

東北大学 工学部 中村 統太,¹ 遠藤 新一

1 はじめに

実験で観測されるスピングラス現象が理論的に説明可能かどうか、という問題はこの現象の発見以来未だに解決を見ない問題である。多くのスピングラス物質がその磁性を担うスピンの等方的、つまりハイゼンベルグスピンとみなせるのに対し、これまで様々な理論計算によって、ハイゼンベルグスピングラスモデルにおいてはスピングラス転移は起きないというのが定説であったからである。この矛盾を解決すべく、川村はスピンのカイラリティ自由度に着目し、スピン秩序を伴わないカイラルグラス転移によって、スピングラス転移が二次的に引き起こされると言う「カイラリティ機構」を提案し、その後、この理論を裏付ける数値計算が行われた。[1]しかし、このカイラリティ機構が徐々に市民権を得て来た矢先に、今度は、カイラリティ機構に依らずともスピングラス転移は有限温度で起こり得るという計算が松原らによってなされ、[2]また話は振り出しに戻った感が出て来た。

松原らは、ひねり境界条件によるドメインウォール自由エネルギーのサイズ ∞ への外挿と、このスピングラス問題で伝統的に行われて来たスピングラス帯磁率の有限サイズスケーリングの二つの手法によってこの結論を引き出したのであるが、この後者の結果がこの問題の難しさを象徴し、かつ、これまでの数値計算自体に我々が疑問を投げかける契機となった。というのも、スピングラス帯磁率の有限サイズスケーリングによってスピングラス転移が起きないことが定説になっていたにもかかわらず、[3]同じ方法で全く逆の結果が得られたからである。この二つの論文の詳細を見てみると、両方で解析に用いた温度領域とサイズが微妙に異なる点に気がつく。つまり、どのデータを用いて解析するかと言う人為的なファクターによって、結果が大きく左右される危険性があるということである。この事は、従来の平衡シミュレーション法によるスピングラス研究には何か大事なことが抜けていたのではないかと思わせる。

そこで、我々はこの問題を扱うにあたり、スピングラス転移の有無を明白にするという目的とともに、この様な矛盾する結果が得られてきた理由をも明らかにすることを目的として研究を行う。[4]そして、従来の計算方法でやったのでは相矛盾する結果しか得られないだろうから、ちょっと違った計算手法を採用する。それが、「非平衡緩和法」[5]である。

¹E-mail: tota@camp.apph.tohoku.ac.jp

2 計算方法

「非平衡緩和法」は、シミュレーションで系が初期状態から平衡状態に向かう時の向かい方によって相転移を議論する方法であるが、近年の研究によって [6] スピングラスなどのスローダイナミクス系に特に有効な手段であることが明らかになってきた。一般には、スローダイナミクス系の性質が非平衡緩和部分の短い時間スケールでわかるというのはにわかには信じがたいが、以下のように説明すれば理解しやすい。

我々が最終的に知りたいのは時間 ∞ サイズ ∞ の熱力学的極限での性質である。しかし、同時にこの二つの極限はとれないので、まず時間 ∞ の極限を有限サイズの平衡状態を実現することによってとり、得られた物理量の有限サイズスケール解析によって、サイズ ∞ の極限をとる。これが従来からある平衡シミュレーションの手法である。一方、非平衡緩和法はこの手順を逆にしたものである。まず、サイズ ∞ の極限をとる。これは、十分大きなサイズの系を用意し、有限サイズ効果が現れる前にシミュレーションを止める事によって実現できる。乱数列を変えて何度も同じシミュレーションを行い、各時間の物理量の平均をこの異なる乱数列によるシミュレーションシリーズに関してとる。従って、平均操作は完全に独立なものの平均になっている。これは、重要。そして得られるのは、サイズ ∞ の系での非平衡緩和曲線である。これを有限時間スケール解析によって時間 ∞ の極限をとる。有限時間スケール法 [7, 6] は通常のサイズスケールをそっくりそのまま $\tau \sim L^z$ のダイナミクススケール関係式によって時間に焼き直したものである。この様に、単に極限操作のとり方を変えたと言うことに気づけば理解しやすい。そして、極限操作の順番に結果が依らないのであれば、どちらも同じ結果を導くはずである。では、どちらのアプローチがよりこの問題に適しているだろうか。

スローダイナミクス系では動的臨界指数 z が大きい。そのために平衡状態を実現するのに膨大な時間がかかる。平衡シミュレーション法では、この時間を乗り越えて平衡状態を作るため大きな z による影響をもろに受ける。一方、非平衡緩和法ではサイズ ∞ を先にとるため、それにかかる時間は L^d のファクターのみである。そして、大きな z の影響は時間スケールの際の外挿曲線の傾きに反映されるのみである。従って、 $z > d$ の時には非平衡緩和法の方が効率的であると言える。また、平均操作の時のサンプルの独立性に関してもアドバンテージがある。上記の通り非平衡緩和法ではこの独立性が保証されている。一方、平衡シミュレーションではエルゴード性を仮定して、アンサンプル平均を時間平均に置き換えているが、そもそもスローダイナミクス系ではエルゴード性が悪く、いくら長い時間のシミュレーションを行っても独立サンプル数は極端に少ない状況となっている。よって、統計誤差以上にコントロールが困難な系統誤差をデータが含んでいる可能性が高く、解析は慎重に行う必要がある。この系統誤差、具体的には有限サイズ効果の影響によって、平衡シミュレーション法による相矛盾する二つの結論が導かれたのだと我々は考えている。これまでは、スピングラスのスローダイナミクスにのみ注意がいて、サイズ効果はあまり気をとられていなかった。長い時間をかけて平衡状態を実現する代償として、非常に小さな系の計算しか行われていなかったが、これが矛盾の元だと考えられる。

2.1 具体的な計算手順

1. 初期条件は、完全パラ状態にとる。これは、相転移点に高温側から近付くことに対応している。有限系の基底状態を何らかの方法で求め、それを初期状態として自己相関関数の振舞いから解析する方法もあるが、基底状態を作る苦勞、待ち時間依存性、サイズを大きくとれない等の理由によってこの低温側からのアプローチは採用しない。実際、スピングラス状態があるのかわからないのか現時点ではわからないので、基底状態がスピングラス状態とは無縁の物である可能性もあるため、唯一 well-defined な完全パラ状態からスタートする。
2. 計算を行う温度領域は高温相に限定し、そこでのスピングラス帯磁率の非平衡緩和曲線を求める。この量は回転不変であるため、一様回転モードを引っかけの心配が無い。異なる初期状態のレプリカを 8 つ用意しこれらの間の 28 通りのレプリカ相関から求める。
3. 転移温度を有限時間スケーリングで求める。求められたスピングラス帯磁率の緩和曲線に $t^{-\gamma/z\nu}$ をかけて縦軸とし、横軸を時間 $t/\tau(T)$ とする、つまり各温度での相関時間 $\tau(T)$ で時間を割ってスケールする。こうしたときに、全ての緩和曲線が同一の曲線上に乗るように、上記の $\gamma/z\nu$ と各温度での $\tau(T)$ を求める。これが第一段階。次に、求められた各温度における相関時間 $\tau(T)$ が転移温度で $(T - T_c)^{-z\nu}$ と巾発散する事を利用して転移温度を見積もる。横軸を $T - T_c$ とし縦軸を $\tau(T)$ として対数プロットしたときに最も直線性が良くなる様に T_c を決めると良い。
4. 求められた転移温度直上で非平衡緩和をもう一度行い、スピングラス帯磁率が $t^{\gamma/z\nu}$ で臨界発散を示すか、またその指数がスケーリングの見積りと一致するかのチェックを行う。更に、ビンダーパラメータの非平衡緩和も行い、それが $t^{d/z}$ で発散するかをチェックし、その指数から動的臨界指数 z を単独で求める。これは、ビンダーパラメータが転移点直上でサイズ依存が無くなれば、それに体積をかけた量は L^d に比例し、ダイナミックスケーリングによって $t^{d/z}$ と振舞うことが期待されるからである。これによって、全ての臨界指数が求まり実験結果との整合性などの検証も行う。

この完全パラ状態からの非平衡緩和でスピングラス帯磁率やビンダーパラメータの振舞いをみる手法は、過去にも Ising スピングラスモデルにおいて適用例が複数ある。[8]

3 結果

3.1 2次元 Ising 強磁性体で検証

厳密に解かれているモデルで我々が用いる手法が正しい結果を導くことを検証する。

結果が図 1 である。生データでは、二つのサイズで計算を行い違いが無いことをチェックしたので、これは ∞ 系の緩和曲線である。スケーリングにおいては、臨界指数は厳密解を使用しているが、これを未知としてもほぼ 3 桁くらいの精度で同じ値が求まる。また、初期緩和部分はスケーリングには乗らないことがこれからわかる。よって、適宜、これを捨てないと行けないが、それがどれくらいの長さであるかは系の性質と初期状態のとり方に依るので、注意が必要。これは、この解析の唯一の曖昧

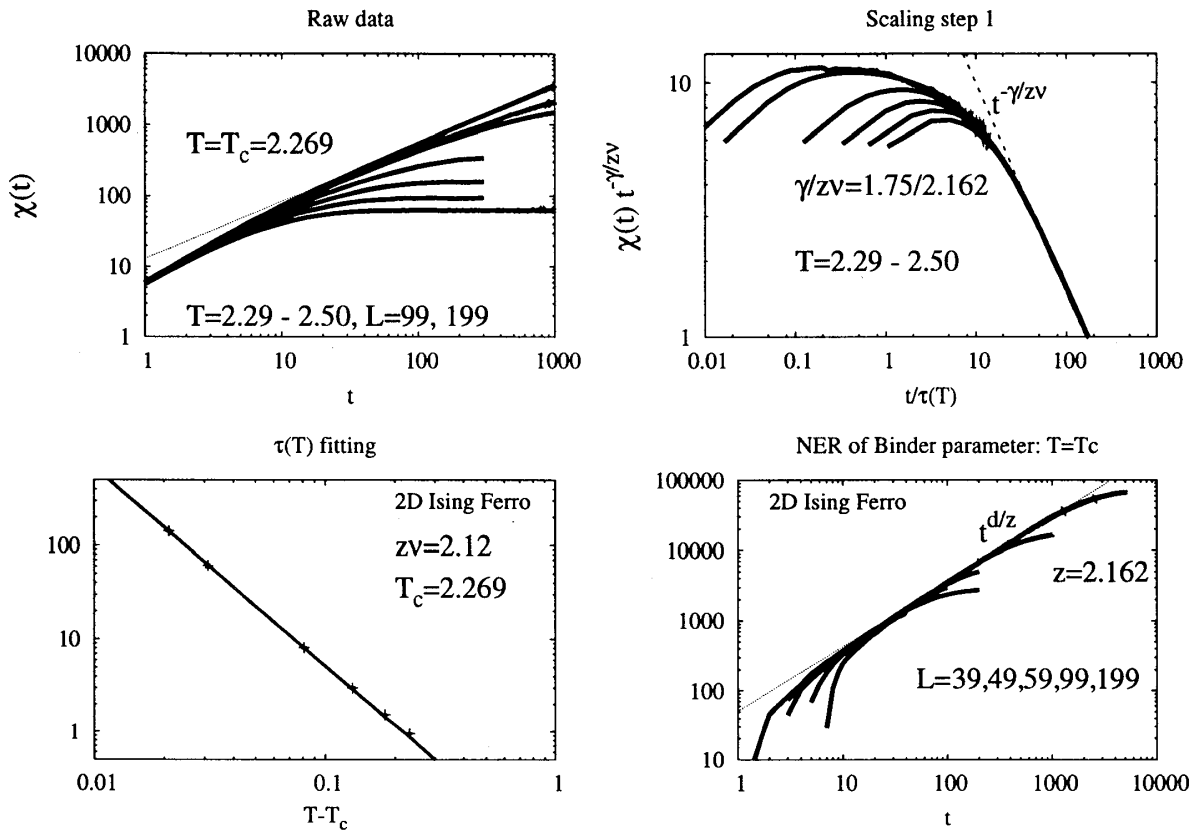


図 1: 2次元 Ising 強磁性体での非平衡緩和解析。左上が帯磁率の緩和曲線の生データ。右上は、それをスケールしたもの。左下は相関時間の発散から転移点を求めたもの。右下は求められた転移点直上での Binder パラメータの非平衡緩和。

な点である。 $\tau(T)$ fitting では、自乗誤差が最も小さくなるように T_c を求め、そのときの傾きが $z\nu$ となる。 $T = T_c$ でのチェックも綺麗に巾発散を再現している。帯磁率は生データの所にプロットしている。 Binder パラメータもサイズを変えてプロットすればその包絡線が直線となり動的臨界指数がちゃんと求まっている。

3.2 3次元 Ising スピングラスモデルでの検証

次に、厳密ではないがほぼ議論が収束している 3次元 Ising スピングラスモデルにおいて同様の計算を行い、スピングラスにも非平衡緩和法が適用可能かつ、非常に効率良く転移点を求められることを示す。結果は図 2。 $L=19$ の 5000 ステップまでのデータで解析した。この計算規模は非常に小さいが、それでも過去の研究と矛盾無い結果を導く。図には $\gamma/z\nu = 0.39$ のスケールリングプロットを示しているが、この値が少しずれても本データ精度の範囲内ではスケールリングは同様に成り立つ。それらの誤差も含めて転移温度と臨界指数を見積もると、

$$T_c = 1.17 \pm 0.04, \nu = 1.75 \pm 0.35, \gamma = 3.6 \pm 0.6, z = 5.5 \pm 0.5 \quad (1)$$

という結果が得られ、過去の平衡シミュレーションによる計算結果 [9] と一致する。求められた転移点での非平衡緩和のチェックは 400 万ステップまで行ったが、50 ステップから始まる臨界緩和がそ

のままずっと続いている様子が見てとれる。また、 $L=5$ 以上の格子サイズではみな、この臨界緩和を経験してから有限サイズ効果が現れている事に注意する。この $L=5$ 以上のサイズの平衡シミュレーションのデータを用いた有限サイズスケーリングでも同じ結果が得られているのである。一般に、非平衡緩和と平衡シミュレーションの二つの手法の結果が一致するのは、臨界緩和を経験した後に有限サイズ効果が現れるサイズのデータのみで有限サイズスケーリング解析する場合である。

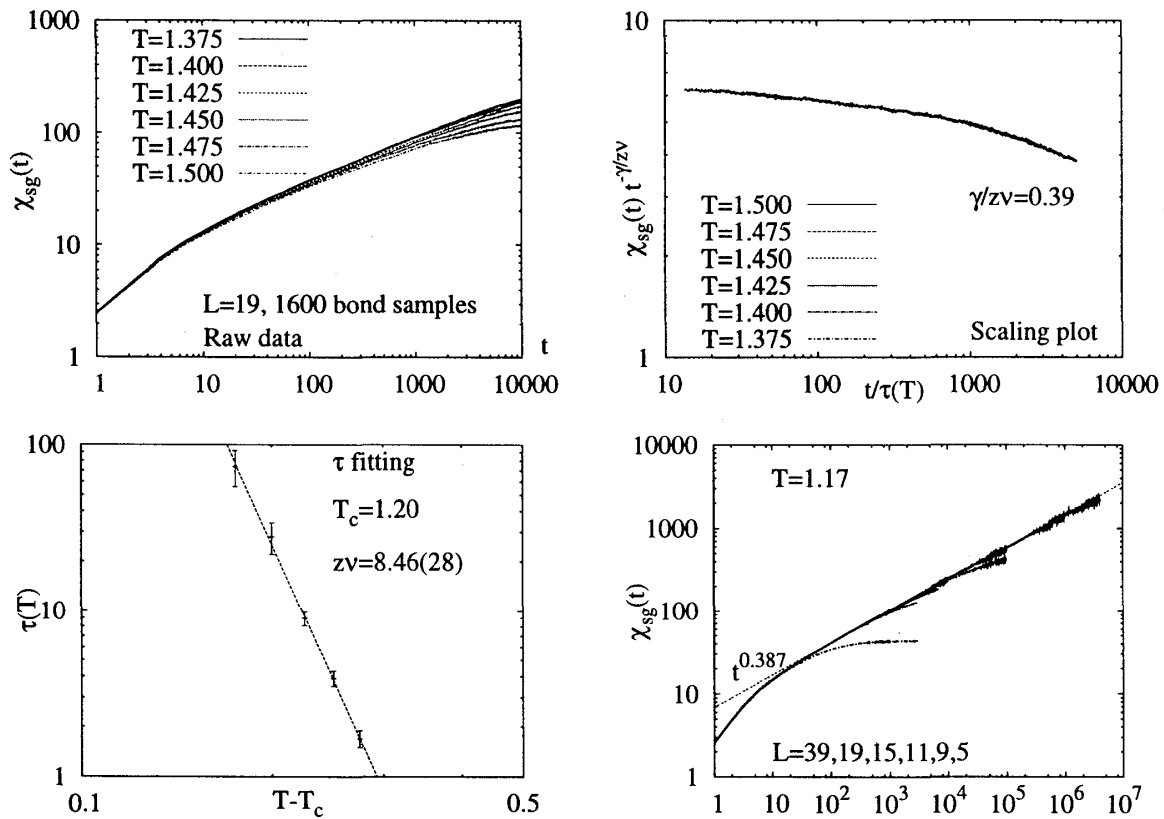


図 2: 3次元 Ising スピングラスモデルでの非平衡緩和解析。

3.3 3次元ハイゼンベルグスピングラスモデルの結果

以上で見て来たように非平衡緩和法はスピングラスの解析に非常に有用である。これを用いて本題であるハイゼンベルグスピングラスの相転移の有無に決着をつけることとする。計算規模は格子サイズが $L = 59$ で 70000 ステップまで。スピングラス帯磁率と同時にカイラルグラス帯磁率も計算し、両方の転移点を見積もる。結果を図 3 に示す。

生データを見ると Ising スピングラスに比べて初期緩和の長さが約 10 倍程長くなって、臨界緩和を示すのが数百から千ステップ以降になっている。この初期緩和の長さが計算を難しくしている。スケーリングプロットは $\gamma/z\nu$ の値を 0.34 から 0.48 まで変えたものを同時にプロットした。スケーリング自体は 0.34 から 0.44 までの間ならばほぼ同様にスケールされているので、これらの指数で各々転移点を求め、そのばらつき具合から転移温度の平均値と誤差を見積もることとする。カイラルグラス帯磁率のスケーリングも同様である。 τ fitting の例はスピングラスは $\lambda \equiv \gamma/z\nu = 0.36$ のもの、カ

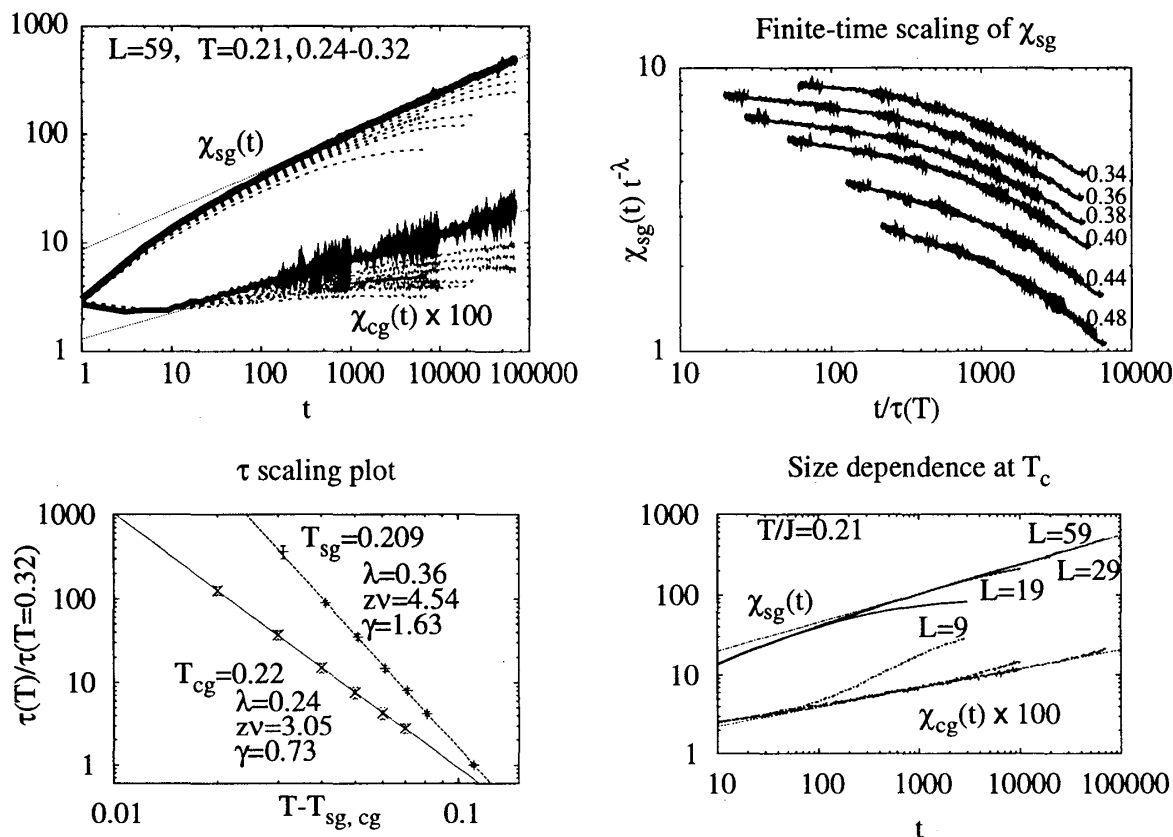


図 3: 3次元ハイゼンベルグスピングラスモデルでの非平衡緩和解析。

イラルグラスは $\lambda \equiv \gamma/z\nu = 0.24$ のものを示す。両者ともほぼ同じ温度で相転移する。これらの解析を総合して転移温度を見積もると、スピングラス、カイラルグラスともに $T_g = 0.21^{+0.02}_{-0.03}$ と誤差の範囲内で一致することがわかった。また、このカイラルグラス転移温度は、平衡シミュレーションで求められている温度とも完全に一致している。 [10]

求められた転移点直上での非平衡緩和もスケージングで求めた指数と同じ指数で臨界発散することが確認された。また、この時の有限サイズ効果の現れ方にも注意する。図を見てわかる通り、 $L = 9$ のサイズでは 100 ステップで、 $L = 19$ でも 1000 ステップで有限サイズ効果が出ている。これは、Ising スピングラスモデルと比べると圧倒的に早い。そして、平衡シミュレーションが行われている $L \sim 20$ 以下のサイズでは臨界緩和を経験する前にサイズ効果が出ているのである。我々は、この事が平衡シミュレーションでこれまでスピングラス転移が観測されなかった理由だと考えている。Ising スピングラスモデルの時の類推から、臨界緩和過程を経験してから有限サイズ効果が現れるサイズのデータのみを用いて有限サイズスケージング解析を行えば、非平衡緩和で今回求めた結果と同様の結果が得られるはずである。従って、 $L = 20$ よりも大きいサイズのみを用いた平衡シミュレーションと有限サイズスケージング解析が早急に行われることを期待する。

最後に転移点での Binder パラメータの非平衡緩和を示す。従来の研究では Binder パラメータが有限温度でクロスしないことが相転移無し の根拠になっていたからである。はたして図 4 をみると確かに $t^{d/z}$ で発散する振舞いを見せている。そこから見積もられる動的臨界指数は $z = 5.5 \pm 0.5$ で偶

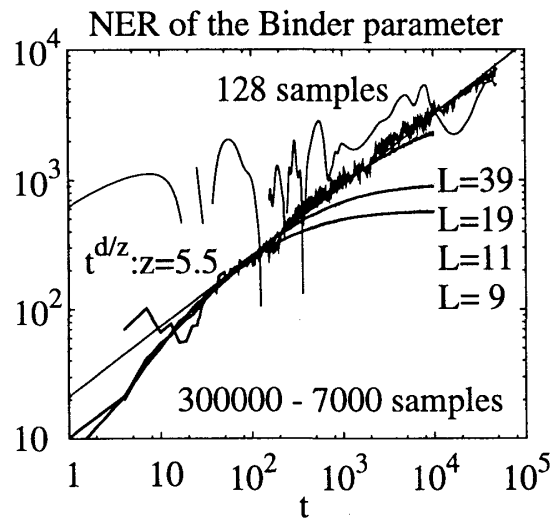


図 4: 3次元ハイゼンベルグスピングラスモデルの転移点直上でのピンダーパラメータの非平衡緩和。
 $L = 39$ の場合にサンプル数を 128 に限ったものも同時にプロットしている。

然か否か、Ising スピングラスモデルの場合と一致している。この z の見積もりにより ν が求まり全ての指数が計算できる。

$$T_{sg} = 0.21^{+0.02}_{-0.03}, \gamma_{sg} = 1.6^{+0.8}_{-0.2}, \nu_{sg} = 0.9^{+0.4}_{-0.2} \quad (2)$$

となる。これは、ハイゼンベルグ型絶縁体スピングラス物質である $\text{CdCr}_{2 \times 0.85} \text{In}_{2 \times 0.15} \text{S}_4$ の実験結果:[11] $\gamma = 2.3 \pm 0.4$, $\nu \sim 1.3$ と比較するとほぼ重なって、実験結果をも説明していることがわかる。また、サイズの増加と共に下から発散曲線に漸近する様は 2次元 Ising 強磁性体の場合と同じである。ではなぜ平衡シミュレーションではこの振舞いが観測できなかったか？

実は、このピンダーパラメータの臨界発散の振舞いを観測するためには独立なボンドサンプル数が数千から数十万と膨大な数を必要とする。それもサイズが大きくなればなるほど沢山のサンプルを必要とする。その結果が図に示したものである。もし、このサンプル数が 128 程度だとどうなるかも図中に示してある。データのばらつきが大きいのでスプライン処理をしているがそれでも大きく揺らぎ、かつ、系統的に上側にずれ、ほとんど臨界発散するようには見えない。確かに、ピンダーパラメータは 2次と 4次のキュムラント比であるので、4次のキュムラントを揺らぎから求める必要があり、膨大なサンプル数を必要とするのは想像に難くない。しかし、それ以上に重要なのはこれが二つの物理量の比であることに起因している。一般に、ガウス分布する二つの量の比は、サンプル数が有限のときには単純なガウス分布にはならず、正解のガウス分布に平均値がずれたところにローレンツ分布が乗ることが統計学で厳密に証明されている。そしてサンプル数 ∞ の極限で正解のガウス分布のみに収斂する。したがって、独立なサンプル数が小さな場合にはこのローレンツ分布による系統誤差が大きな影響を与える。平衡シミュレーションでは、スローダイナミクスにより時間平均のサンプル独立性が悪く、サイズと共に計算しているボンド配位数は少なくなっている。これでは、サイズと共に系統誤差の影響が増大し、本来見るべきものが見られなくなっていると考えられる。これが、今までピ

ンダーパラメータがクロスしない結果しか得られなかった理由ではないか。

4 最後に

物理学において、一つの現象が相矛盾する二つの見え方に見えるときには何らかの物理観のブレークスルーが潜んでいる事が多い。今回の研究においては、スピングラスのスローダイナミクスにのみ気をとられていては本質を見誤ってしまう事、および、そのスローダイナミクスの正体は有限サイズ効果かも知れないことが分かった。スピングラスにおいて ∞ 系の転移点直上の緩和は極めてシンプルである。約 1000 ステップの初期緩和の後には ∞ まで続く臨界緩和があるのみである。有限サイズ効果は極めて早く現れるが、サイズ効果が現れた後が非常に遅い。と、このようなシナリオが成り立つかもしれない。

非平衡緩和法がスピングラスのようなスローダイナミクス系で非常に強力な手段であることも明らかになった。スピングラスが扱えるのであれば、本研究会でテーマとなった「フラストレーション系」の相転移や数値計算の困難さ故に研究が滞っている複雑系一般にも応用できるはずである。この分野のますますの発展が期待される。

参考文献

- [1] H. Kawamura, Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 3785; H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1995) 26; K. Hukushima and K. Kawamura, Phys. Rev. E **61** (2000) R1008.
- [2] S. Endoh, F. Matsubara, and T. Shirakura, J. Phys. Soc. Jpn. **70** (2001) 1543; cond-mat/0011218.
- [3] J. A. Olive, A. P. Young, and D. Sherrington, Phys. Rev. B **34** (1986) 6341.
- [4] T. Nakamura and S. Endoh, cond-mat/0110017.
- [5] D. Stauffer, Physica A **186** (1992) 197; N. Ito, Physica A **196** (1993) 591.
- [6] T. Shirahata and T. Nakamura, Phys. Rev. B **65** (2002) 024402; T. Nakamura, cond-mat/0205252.
- [7] Y. Ozeki, N. Ito, and K. Ogawa, ISSP Supercomputer Center Activity Report 1999 (The University of Tokyo, 2000) 37.
- [8] D. A. Huse, Phys. Rev. B **40** (1989) 304; R. E. Blundell, K. Humayun, and A. J. Bray, J. Phys. A **25** (1992) L733.
- [9] N. Kawashima and A. P. Young, Phys. Rev. B **53** (1996) R484.
- [10] M. Matsumoto, K. Hukushima, and H. Takayama, cond-mat/0204225.
- [11] E. Vincent and J. Hammann, J. Phys. C **20** (1987) 2659.