

3次元ハイゼンベルグスピングラスの低温相
東北大学大学院工学研究科応用物理学専攻

遠藤 新一

目次

第1章 序論	543
1.1 スピングラス	543
1.2 これまでの理論的研究	544
1.2.1 理論模型	544
1.2.2 理論模型の代表的な解析法	545
1.2.3 これまでの計算結果	548
1.3 理論的研究の再検討	552
1.3.1 モンテカルロ法による再検討	553
1.3.2 界面エネルギー法による再検討	555
第2章 研究目的	557
第3章 絶対零度での計算	558
3.1 境界条件の検討	558
3.2 Twisted Boundary Condition	558
3.3 計算結果	560
3.4 基底状態の性質	564
3.5 絶対零度の計算のまとめ	566
第4章 有限温度での計算 I	566
4.1 計算方法	566
4.2 交換モンテカルロ法	568
4.3 計算結果	569
4.3.1 計算方法の動作確認	569
4.3.2 ハイゼンベルグスピングラス模型への適用	571
4.4 有限温度での計算 I のまとめ	573
第5章 有限温度での計算 II	573
5.1 界面自由エネルギー	573
5.2 計算方法	573
5.3 計算結果	574
5.3.1 計算方法の動作確認	574
5.3.2 ハイゼンベルグスピングラス模型への適用	575
5.4 有限温度での計算 II のまとめ	576
第6章 まとめ	577
謝辞	577
参考文献	578

第1章 序論

1.1 スピングラス

スピングラスは通常の強磁性体や反強磁性体とは異なる奇妙な性質をもつことから、多くの物理学者が興味を示した物質である [1, 2, 3, 4, 5]。スピングラス中には強磁性と反強磁性の相反する相互作用がランダムに混在する。その結果、相互作用の競合 (フラストレーション) が起こり、低温では各スピンのランダムな方向を向いて凍結したスピン構造が実現される。このようなスピン構造を持つ磁性体がスピングラスで、「フラストレーション」と「ランダムネス」で特徴づけられる。

現在では、非常に数多くの物質においてスピングラス (相) が観測されている。1つのカテゴリーとして、希薄磁性合金のスピングラス (カノニカルスピングラス) がある。これは非磁性の貴金属母体に少濃度の磁性原子である遷移金属原子を混入した合金である。例として、 $\text{Au}_{1-x}\text{Fe}_x$ 、 $\text{Cu}_{1-x}\text{Mn}_x$ などがある。カノニカルスピングラスの場合、スピン間には主に RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida) 相互作用が働いていると考えられている。この相互作用は伝導電子を介する間接的な相互作用で、スピン間の距離の関数としてその符号が正 (強磁性的)、負 (反強磁性的) に振動しながら減衰するものである。2つのスピン $\mathbf{S}_i$ と $\mathbf{S}_j$ の間の相互作用 J_{ij} の距離 r_{ij} 依存性は、

$$J_{ij} \propto \frac{1}{r_{ij}^3} \cos(2k_F r_{ij}) \quad (1.1)$$

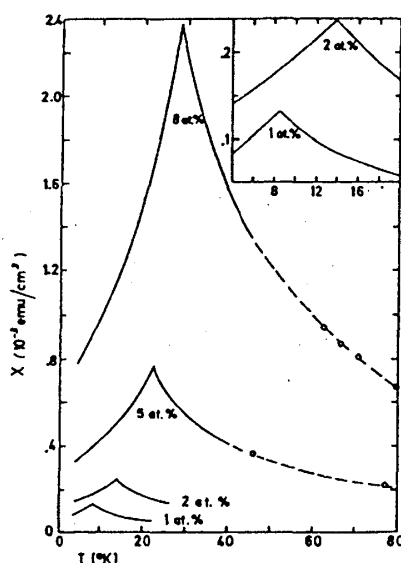
で与えられる。ここで、 k_F は伝導電子のフェルミ波数を表す。この RKKY 相互作用により、強磁性相互作用と反強磁性相互作用が混在し、強いフラストレーション効果が生じる。カノニカルスピングラスは磁気異方性が比較的弱く、等方的なハイゼンベルグ型に近いと考えられている。磁気異方性は程度の差はあるものの、磁性体中に必ず存在する。その原因として、Dzyaloshinski-Moriya 相互作用、双極子相互作用などがある。ただし、これらの相互作用は RKKY 相互作用に比べて 1~2 桁くらい小さいと考えられている。

他のカテゴリーとして、構成原子の構造自体が非晶質になっているアモルファススピングラスがある。例えば、 $\text{Al}_x\text{Mn}_{1-x}\text{Si}$ 、 $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{P}$ などがある。

以上が金属スピングラスの例であるが、金属に限らず絶縁体や半導体のスピングラスも多数存在する。例として、 $\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$ 、 $\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{TiO}$ などがある。これらはいずれも強磁性結晶と反強磁性結晶の混晶系である。特に、 $\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$ の場合、磁性イオンである Eu の間の相互作用は、最近接間では強磁性的、第2近接間では反強磁性的になっている。この状態にランダムに非磁性イオンである Sr をドーピングすることで、スピングラスが実現される。

歴史的に見て、スピングラス研究の出発点となった実験は、1972年の Cannella と Mydosh の実験である [6]。彼らは非磁性金属 Au に磁性原子 Fe を不純物として加えた希薄磁性合金 $\text{Au}_{1-x}\text{Fe}_x$ の磁気的性質について調べた。調べた Fe 原子の濃度範囲は 1~22at.% である。図 1.1 に交流帯磁率の測定結果を示す。帯磁率がある温度 T_g で非常に鋭いカスプ状のピークを示すことが見てとれる。この鋭いカスプ状の異常は、この系で相転移的な協力現象が起きていることを示唆しており、その実体の解明に多くの研究者が関心を持った。

もしこの現象が熱平衡相転移だとしたならば、転移温度付近では通常、比熱に何らかの異常が実験で観測される。スピングラスの T_g 付近での比熱の振る舞いについては、1975年に Wenger と Keesom によって調べられている [7]。彼らはカノニカルスピングラス $\text{Au}_{1-x}\text{Fe}_x$ を取り扱い、 T_g 付近では比熱に目立った異常は観測されないと報告している。この実験結果は帯磁率の実験結果とは対照的に、スピングラスの T_g における転移はスピンの協力現象による相転移と異なることを示唆している。

図 1.1: 希薄磁性合金 $\text{Au}_{1-x}\text{Fe}_x$ の交流帯磁率

以上の帯磁率と比熱の実験から、観測された異常が真の熱平衡相転移に対応するものなのか、それとも、見かけ上の相転移的な現象にすぎないのか、という問題が生じる。この問題を実験的にはっきりさせるために、中性子散乱の実験や残留磁化の測定などがこれまでに行われてきた。その精力的な研究により、有限温度でスピングラス相への熱平衡相転移を起こすことが明らかとなった。

1.2 これまでの理論的研究

スピングラスの実験的な研究と同時に、理論的な研究も精力的に行われてきた。スピングラスが示す物理現象を理論的に解析する際、ある種の理論模型から出発する必要がある。ここでは、今までに提唱されてきた理論模型とその理論模型に対するこれまでの研究について述べる。

1.2.1 理論模型

最も標準的な理論模型として、Edwards-Anderson(EA) 模型がある [8]。この模型では、磁性原子の位置の不規則性を捨象して、スピングラスの本質である正負の相互作用のランダムネスに重点を置いている。格子点には必ずスピンのあって、それらの間にランダムな相互作用 J_{ij} が働いているとすると、ハミルトニアンは次式で与えられる。

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.2)$$

ここで、 $\mathbf{S}_i$ は格子点上のスピン変数、 $\langle ij \rangle$ についての和は最隣接格子点のペアに関する和を表す。相互作用 J_{ij} は、あらかじめ与えられた統計分布に従って、各ボンドごとに独立な変数をとるものとする。よく用いられる分布として、Gauss 分布、 $\pm J$ 分布 (パイ

ナリー分布)があり、それらの分布関数は以下の式で与えられる。

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi J^2}} \exp\left(-\frac{J_{ij}^2}{2J^2}\right) \quad (1.3)$$

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{2} \{\delta(J_{ij} - J) + \delta(J_{ij} + J)\} \quad (1.4)$$

スピングラスの理論的研究では、この模型において相転移があるのかないのかを明確にすることが出発点となる。言い方を変え、下部臨界次元 (lower critical dimension) を求めることがこの研究に科せられた最初の課題である。ここで、下部臨界次元とはその次元以下では有限温度で相転移は起こらないことを示すものである。この課題は、のちの臨界指数の評価やスピングラス現象の解明につなげる意味で大変重要である。こうした理由から、熱平衡相転移の有無を調べる研究が、現在でも行われている。ただし、この理論模型に対する下部臨界次元は、まだ確定的に求まっていない。最近では下部臨界次元の評価に限らず、スピングラスのエージング現象やリエントラント転移についても調べられている。

1.2.2 理論模型の代表的な解析法

これまで相転移の有無を調べる際、最もよく用いられる方法として、(1) モンテカルロ法 と (2) 界面エネルギー法がある。

(1) モンテカルロ法

モンテカルロ法は、疑似乱数を用いて系全体をシミュレートし、熱平衡状態での系の振る舞いを推定する方法である。さまざまな系を比較的容易に取り扱うことができ、相転移の研究において広く用いられている手法である。具体的な手順として、あるサイズ L の系を用意し、空回しをすることで熱平衡状態を実現させる。その後で、エネルギー、比熱、帯磁率などの物理量の測定を行う。これを様々なサイズについて系統的に調べ、物理量の発散等から相転移の有無や特徴を見る。ただし、この方法では、臨界点近傍では相関時間が長くなり、十分なサンプリングを行うのが大変になる。いわゆる、「臨界緩和」の問題がある。また、フラストレーションの強い系やランダム系においては、緩和が非常に遅くなり、解析を困難にさせる問題もある。

モンテカルロ法では、有限の大きさの系しか取り扱うことができない。相転移を正しく議論するためには、熱力学的極限への外挿が不可欠となる。現在、最もよく用いられている外挿法として、有限サイズスケーリング法がある。この方法では、磁化 M や帯磁率 χ などの物理量は次式で表される。

$$M(T, L) = L^{-\beta/\nu} \tilde{M}(L^{1/\nu}(T - T_c)) \quad (1.5)$$

$$\chi(T, L) = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(L^{1/\nu}(T - T_c)) \quad (1.6)$$

ここで、 T_c は転移温度、 β 、 γ 、 ν はそれぞれ磁化、帯磁率、相関長の臨界指数を表す。また、 $\tilde{M}$ 、 $\tilde{\chi}$ はサイズ L によらないスケーリング関数である。

転移温度と臨界指数の求め方は、以下の通りである。まず、様々なサイズ L の物理量 $M(T, L)$ を求める。次に、 T_c 、 ν 、 β を仮定し、横軸を $L^{1/\nu}(T - T_c)$ 、縦軸を $L^{\beta/\nu} M(T, L)$ としてグラフを書く。このグラフが1本の曲線になるように、 T_c 、 ν 、 β を調節する。このとき得られる T_c 、 ν 、 β が、熱力学的極限における転移温度、臨界指数となる。

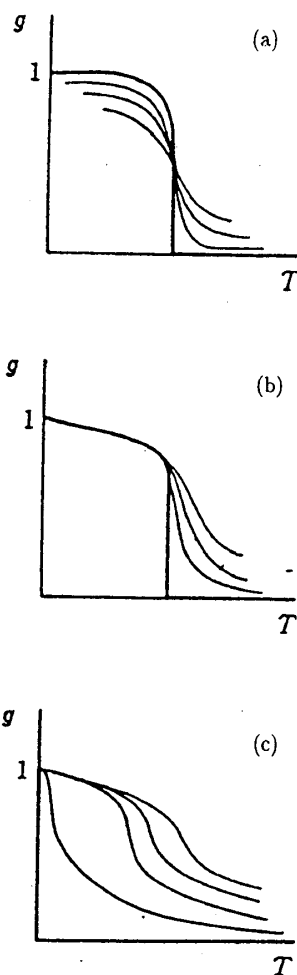


図 1.2: Binder 比の振る舞い (a) 相転移あり (b) 弱い秩序化 (c) 相転移なし

モンテカルロ法で相転移の有無を調べるパラメーターとして、Binder 比 g がある。Binder 比 g は、以下の式で定義される。

$$g \equiv \frac{1}{2} \left(3 - \frac{\langle Q^4 \rangle}{\langle Q^2 \rangle^2} \right) \quad (1.7)$$

ここで、 $\langle Q^2 \rangle$ 及び $\langle Q^4 \rangle$ はそれぞれ、オーダーパラメーター Q の 2 次と 4 次のキュムラントである。Binder 比 g は Q の分布関数が Gaussian ならば 0 の値をとり、2 本のデルタ関数の足し合わせならば 1 の値をとる。つまり、分布関数の形を 1 つの数で特徴づけるようにしたものである。この量の利点は、 g が無次元量であるので、有限サイズスケーリングによる解析の際に用いられる関数系が

$$g(T, L) = \bar{g}(L^{1/\nu}(T - T_c)) \quad (1.8)$$

となって、未知のパラメーターが T_c と ν の 2 つしか含まれないことである。磁化 M や帯磁率 χ では、式 (1.5)、(1.6) のように、この他に物理量の大きさをスケールするための指数が入り、未知のパラメーターは 3 つになっていることに留意されたい。これより、 g による解析の方が容易であることが分かる。

図 1.2 に典型的な Binder 比の振る舞いの模式図を示す。(a) は有限温度相転移の場合である。ちょうど $T = T_c$ の所で 1 点に交わり、その交点を要として両側では扇形に開いた

形になるのが特徴である。これに対する例外もあって、それが (b) である。高温側では扇形に開くが、低温側ではサイズ依存性がなくなり、すべての曲線が互いに重なって1本の曲線になるように見える。つまり、低温側で常に臨界的な相になっていることを意味する。これは2次元XY模型のKosterlitz-Thouless転移で知られている[9]。(c)は相転移がない場合で、サイズと共に g は単調減少する。このように、Binder比の振る舞いから相転移の有無を判定することができる。ただし、温度変化によって分布関数がGauss型から2本のデルタ関数型へと変化しない模型に対しては、必ずしも正しい振る舞いを示すとは限らないので注意を必要とする。

(2) 界面エネルギー法

もう一つの有力な方法として、界面エネルギー (Defect Energy) 法がある。この方法では相転移の様相を直接調べることはできないが、相転移の有無に関しては調べることが可能である。正確に言うと、基底状態の安定性が分かる。

この方法の概略について述べる。まず、相互作用の分布が全く同じ系 (以下、レプリカと呼ぶことにする) を2つ用意する (図1.3参照)。そのうち、一方のレプリカ (レプリカ1) には、境界条件として周期境界条件 (periodic boundary condition) を課す。もう一方のレプリカ (レプリカ2) に対しては、ある一方向に対しては反周期境界条件 (antiperiodic boundary condition) を課し、残りの方向には周期境界条件を課す。このような境界条件の下で、各レプリカ1,2に対する基底エネルギー E_P 、 E_{AP} をそれぞれ求め、そのエネルギー差の絶対値で界面エネルギーを定義する。すなわち、

$$\Delta E = |E_{AP} - E_P| \quad (1.9)$$

である。物理的には、周期境界条件を反周期境界条件に変えることで、系全体に歪みが生じると考える。この時のエネルギー損が界面エネルギーである。これがサイズ L と共にどう変化するかをみることによって、相転移の有無が判定できる。

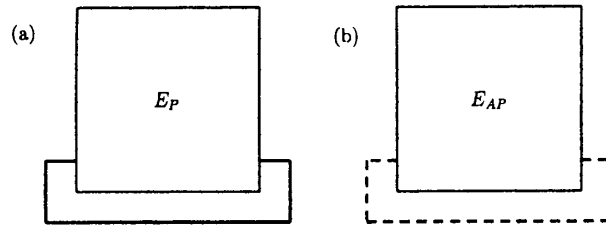


図 1.3: 周期境界条件 (a) と反周期境界条件 (b)

もしサイズと共にエネルギーが増加すれば、サイズ無限大の系では、界面エネルギーは無限大となる。これは系にとっては物理的に好まない状態となる。したがって、系全体には強い相関を持った秩序相が絶対零度において実現される。逆にサイズと共にエネルギーが減少すれば、サイズ無限大の系では、歪みのある状態とない状態が等確率で実現されることになるので、秩序相は現れない。このようにして、絶対零度において秩序相があるかないかを判定することができる。

具体例として、まず、 d 次元強磁性イジング模型を考える。レプリカ1においては、すべてのスピンが揃った状態が絶対零度で実現される。一方レプリカ2において、反周期境界条件を課すことは、周期境界条件として端と端を強磁性ボンドで繋いでいたものを反強磁性ボンドに置き換えることに相当する。このような条件下では、基底状態に上向きス

ピンと下向きスピンの接する部分 (磁壁) が入る。その磁壁のエネルギーの分だけエネルギーの高い状態が実現される。このとき、磁壁エネルギーは $O(L^{d-1})$ に比例したものになる。したがって、2、3次元の場合には、サイズと共に磁壁エネルギーは増加するので、2、3次元では絶対零度において長距離秩序があることが分かる。

次に d 次元強磁性 XY 模型を考える。レプリカ 1 においては、すべてのスピンの面内で揃った状態が実現されるのは自明である。レプリカ 2 においては、XY スピンは図 1.4 のように端から等角度で少しずつ回転しながら反転する。

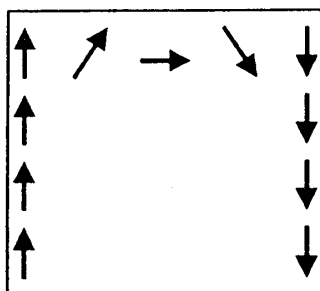


図 1.4: d 次元強磁性 XY 模型のスピンの角度変化

このとき、エネルギー損は

$$\Delta E = J[1 - \cos(\frac{\pi}{L})] \times L \times L^{d-1} \quad (1.10)$$

で与えられる。

したがって、 L が十分大きい場合には、

$$\Delta E \sim \frac{1}{2} \pi^2 J L^{d-2} \quad (1.11)$$

となる。1次元では、 L と共に ΔE は減少するので、長距離秩序がないことが分かる。逆に、3次元では、 L と共に ΔE は増加するので、長距離秩序がある。2次元では、 ΔE がほとんど一定になる。この時には他の解析から、ある種の準長距離秩序相が実現されていることが知られている。この相への転移が Kosterlitz-Thouless 転移である [9]。

強磁性体の場合には式 (1.9) において絶対値をとる必要はないが、スピングラスの場合には相互作用の分布がランダムであるために、 E_P 、 E_{AP} の大小関係は不明になる。したがって、スピングラスの界面エネルギーは絶対値をとって議論される。最近になって、この方法に対する物理的な曖昧さが指摘され、再検討の動きが起り始めた。この方法の再検討については 1.3.2 節で述べる。

この解析法では、基底状態のエネルギーを (近似的に) 求める手続きが必要となる。基底状態のスピンの配列を求める代表的な方法としては、数値転送行列法やスピנקエンチ (spin quench) 法、模擬徐冷 (simulated annealing) 法などがある。ただし、数値転送行列法はイジングスピン系にしか適用できない。

1.2.3 これまでの計算結果

ここでは、2、3次元の場合の計算結果を示す。相互作用の分布関数は Gauss 分布と $\pm J$ 分布の 2 つをまとめて取り扱う。相転移の普遍性を考慮すると、2 つの分布関数は本質的に同じであるからである。

まず、イジングスピングラス模型の結果について述べる。図 1.5 は 1984 年に Bray と Moore によって行われた界面エネルギーの計算結果である [10]。その結果は

$$[\Delta E(L)]_J \simeq JL^\theta \quad (1.12)$$

$$\theta = \begin{cases} -0.29 & (d=2) \\ 0.19 & (d=3) \end{cases} \quad (1.13)$$

である。ここで、 $[\]_J$ はサンプル平均を表す。この結果は下部臨界次元が 2 より大きく、3 より小さいことを示唆している。それと同時に、3 次元の秩序状態において端のスピンをすべて反転させたとしても、そのエネルギー損はたかだか $O(L^{0.19})$ のオーダーであることを意味している。これは強磁性体の場合のエネルギー損 $O(L^2)$ に比べて極めて小さく、かろうじて長距離秩序を保っていると考えられることができる。

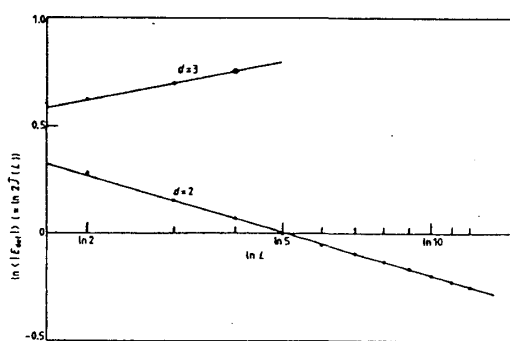


図 1.5: 2、3 次元イジングスピングラス模型の界面エネルギー

この界面エネルギー法の結果を受けて、この模型に対する大規模なモンテカルロシミュレーションが行われた。1985 年、Ogielski と Morgenstern がこの模型に対する相関関数を計算した [11]。各温度について得られた結果が 1 つのスケーリング関数に載るように相関長 ξ を選び、さらに、異なる温度で決められた ξ が

$$\xi = \xi_0(T - T_c)^{-\nu} \quad (1.14)$$

に合うように T_c と ν を決めるという手順を踏んで、 $T_c \simeq 1.2J$ 、 $\nu \simeq 1.2$ を得た。

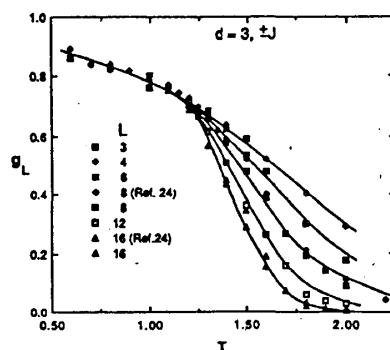


図 1.6: 3 次元イジングスピングラス模型の Binder 比

同じ年、Bhatt と Young は、直接相関関数を解析する代わりに、Binder 比 g を計算した [12]。彼らが計算した結果を図 1.6 に示す。 g がサイズに依らなくなる温度として $T_c \simeq 1.2J$

が得られ、その T_c を用いて g のサイズ依存性を解析することによって、 $\nu \simeq 1.4$ が得られた。この結果は、低温では臨界的な相が実現されていることを示唆している。

界面エネルギー法とモンテカルロ法共に「相転移あり」という点で結果が一致している。さらに、高温展開法からも同じ結果を与えることから、3次元イジング EA 模型の有限温度における相転移の存在が明らかとなった。

次に、スピン自由度の大きいベクトルスピン EA 模型の結果について述べる。この模型についてもモンテカルロ法や界面エネルギー法による数値解析によって詳しく調べられているが、多くの解析が下部臨界次元が 3 より大きいことを示唆している。すなわち、3次元では有限温度でスピングラス相転移は起こらないことを意味する。しかしながら、このベクトルスピン EA 模型においては、スピングラス秩序変数とは独立な新しいタイプの相転移の可能性が指摘されている [13, 14]。この相転移は「カイラル転移」と呼ばれている。

一般にフラストレーションの存在するベクトルスピン系においては、カイラリティと呼ばれる自由度が存在する [15]。例として、正方格子に XY スピンがある場合について考える (図 1.7 参照)。4 本のボンドのうち、3 本が強磁性ボンドで、残りの 1 本が反強磁性ボンドである場合、エネルギーを最低にさせるようなスピン配列としては、図 1.7 の 2 通りが考えられる。すなわち、この配列を格子に沿って時計まわりに見ると、1 つはスピンの向きが時計まわりに 1 回転する配列、もう 1 つは反時計まわりに 1 回転する配列である。この 2 つの配列を区別する自由度がカイラリティである。カイラリティはスピンの一様回転に対しては不変であるが、反転に対しては変更を伴うという性質をもつ。この自由度に関しての対称性の破れによる新しい相転移が「カイラル転移」である。

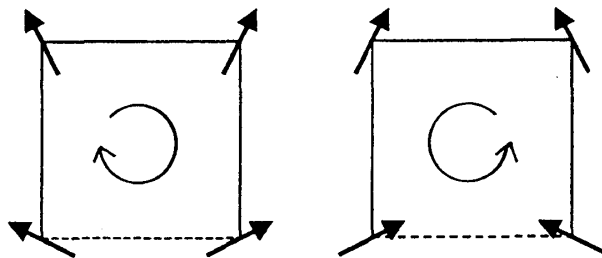


図 1.7: フラストレーションのあるベクトルスピン系におけるカイラリティ (実線は強磁性ボンド、破線は反強磁性ボンドを表す)

まず、界面エネルギー法から得られた結果について述べる。1992 年に、川村によって 2, 3 次元ハイゼンベルグスピングラス模型の界面エネルギーが計算された [13]。この計算には従来の方法とは少し異なった工夫が施されている。彼は、従来用いられてきた反周期境界条件では、界面エネルギーにスピン磁壁とカイラル磁壁の両方の寄与が入ってしまうことに留意し、これらを分離するような境界条件を導入して、スピン磁壁エネルギーとカイラル磁壁エネルギーを計算した。導入した境界条件は、鏡映境界条件 (reflection boundary condition) と回転境界条件 (rotation boundary condition) である。鏡映境界条件では、ある固定面に対して鏡映を取り、回転境界条件では、ある固定軸に対して 180 度回転させる。このような境界条件を用いて、彼はスピン磁壁エネルギー $W_s(L)$ とカイラル磁壁エネルギー $W_c(L)$ をそれぞれ以下の式で定義した。

$$W_s(L) = [(\epsilon_s - [\epsilon_s]_J)^2]_J^{1/2} \quad (1.15)$$

$$W_c(L) = [(\epsilon_c - [\epsilon_c]_J)^2]_J^{1/2} \quad (1.16)$$

ここで、 $\epsilon_c = E_{ref} - E_{rot}$ 、 $\epsilon_s = E_P - E_{rot}$ である。また、 $[]_J$ はサンプル平均を表す。

このように定義した理由は以下の通りである。鏡映境界条件 (あるいは回転境界条件) の下での基底エネルギーは周期境界条件 (あるいは反周期境界条件) の下での基底エネルギーより少し低い。すなわち、

$$[E_{ref}]_J = [E_{rot}]_J < [E_P]_J = [E_{AP}]_J \quad (1.17)$$

である。このことは彼が計算で分かったことである。鏡映及び反周期境界条件の間ではカイラリティの変更を伴わないので、式 (1.17) の不等号は、スピン磁壁エネルギーの寄与によるものであることが分かる。したがって、式 (1.15)、(1.16) のように定義すれば、スピン磁壁とカイラル磁壁の寄与を分離することができる。

スピン磁壁エネルギー $W_s(L)$ とカイラル磁壁エネルギー $W_c(L)$ のサイズ依存性を図 1.8 に示す。2次元では、 $W_s(L)$ 、 $W_c(L)$ がサイズ L と共に減少するのが見てとれる。これはスピン秩序とカイラル秩序が絶対零度で起こることを示唆している。一方、3次元では $W_s(L)$ の方はサイズと共に減少するが、 $W_c(L)$ の方は逆にサイズと共に増加する。これはスピン秩序が絶対零度で起こり、カイラル秩序が有限温度で起こることを示唆している。この計算より、彼は3次元ハイゼンベルグスピングラス模型におけるカイラル転移の可能性を指摘した。

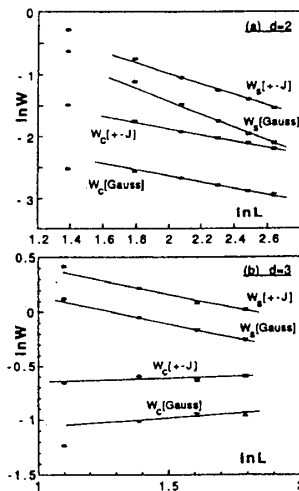


図 1.8: 3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の界面エネルギー

また、川村はモンテカルロ法でスピン及びカイラル秩序の有無について調べている [14]。スピン及びカイラリティに関する Binder 比をそれぞれ

$$g_{SG} = \frac{1}{2} \left(11 - q_{SG}^{(4)} / (q_{SG}^{(2)})^2 \right) \quad (1.18)$$

$$g_{CG} = \frac{1}{2} \left(3 - q_{CG}^{(4)} / (q_{CG}^{(2)})^2 \right) \quad (1.19)$$

と定義し、計算を行った。その結果を図 1.9 に示す。 g_{SG} は全温度領域でサイズ L と共に減少する。これはスピン秩序が絶対零度で起こることを示唆しており、界面エネルギー法の結果と一致している。一方、 g_{CG} の振る舞いは g_{SG} の場合と異なり、 g_{CG} の曲線がある有限温度のところで交差しているように見える。この結果から、彼は有限温度におけるカイラル秩序の存在を主張した。

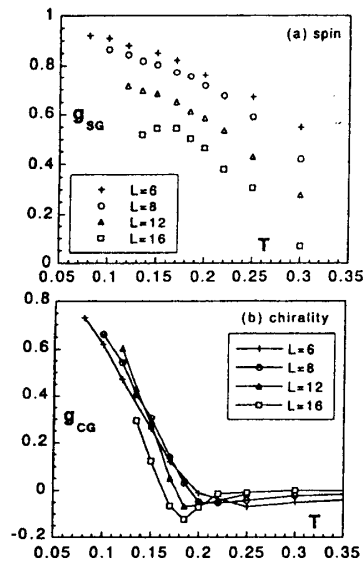


図 1.9: 3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の Binder 比

Edwards-Anderson 模型の相転移について整理する。モンテカルロ法と界面エネルギー法の両方の解析から、スピン自由度・系の次元と相転移の関係は表 1.1 のようにまとめることができる。ここで、○は相転移あり、×は相転移なしを表す。3次元イジングスピングラス模型では相転移はあるが、それ以外に対しては相転移はないと考えられている。

	2次元	3次元
Ising スピン	×	○
XY スピン	×	×
Heisenberg スピン	×	×

表 1.1: スピン自由度・系の次元と相転移の関係

1.3 理論的研究の再検討

最近、これまでの計算結果に対する再検討が行われた。その状況をまとめたものを表 1.2 に示す。特に、2次元イジングスピングラス模型と3次元 XY スピングラス模型では「相転移なし」と考えられていたものが、現在では「相転移あり」の可能性が指摘されている。ここでは、再検討が起こった背景とその具体的な方策について述べる。

	2次元	3次元
Ising スピン	$\times \rightarrow \bigcirc ?$	$\bigcirc$
XY スピン	$\times$	$\times \rightarrow \bigcirc ?$
Heisenberg スピン	$\times$	$\times$

表 1.2: 理論的研究の再検討

1.3.1 モンテカルロ法による再検討

近年新しいモンテカルロ法が開発され、低温までのシミュレーションが可能となってきた。この背景として、より大きいサイズの系での熱平衡状態について調べたいという願望があった。これまで提唱されてきた方法として、Swendsen and Wang によるクラスターフリップ法 [16]、福島と根本による温度交換の拡張アンサンブル法 (交換モンテカルロ法) [17]、小関と松原によるクラスター熱浴法 (CHB 法) [18] などが挙げられる。

1996 年、白倉と松原は CHB 法を 2 次元イジングスピングラス模型に適用し、相転移の有無について再検討を行った [19]。彼らは極低温 ($T \sim 0.2J$) で熱平衡状態を実現させるのに成功し、Binder 比の再計算を行った。その結果を図 1.10 に示す。Binder 比は $T \sim 0.3J$ で 1 点に交差するように見え、有限温度相転移を支持する結果となっている。これは従来の「相転移なし」という定説を覆す興味深い結果として注目された。

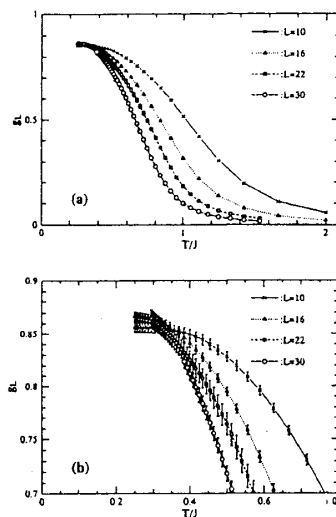


図 1.10: 2次元イジングスピングラス模型の Binder 比とその拡大図

モンテカルロ法による再検討は、3次元スピングラス模型に対しても行われた。3次元イジングスピングラス模型に関しては、1996年に川島とYoungによって Binder 比の再計算が行われた [20]。その結果を図 1.11 に示す。図 1.6 の Bhatt と Young の結果において、Binder 比が低温側でサイズ依存性がないように見えていたものが、図 1.11 では高温側と同様に開いていることが見てとれる。これより、スピングラスの低温相は臨界的な相ではなく、長距離秩序相であることが分かった。

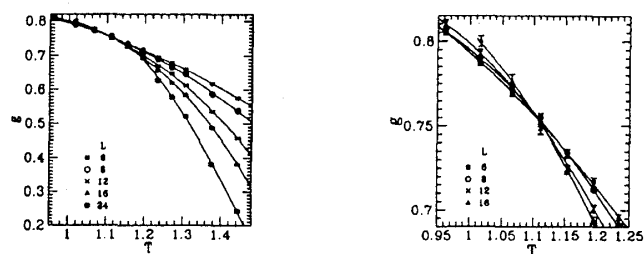


図 1.11: 3次元イジングスピングラス模型の Binder 比とその拡大図

また、3次元ハイゼンベルグスピングラス模型に対しても、川村と福島が交換モンテカルロ法を用いて、Binder 比の再計算を行った [21]。その結果を図 1.12 に示す。スピンに関しては Binder 比が 1 点で交わらないことから、有限温度でスピン秩序は起こらないことを示唆している。一方、カイラリティに関しては Binder 比が $T \sim 0.16J$ で交差するのが見てとれる。これはカイラル秩序が有限温度で起こることを示唆している。

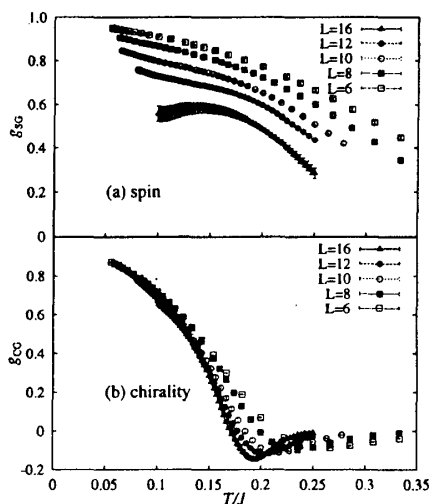


図 1.12: 3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の Binder 比

この計算では、Binder 比が交差するかしないかだけで相転移の有無を議論しているので、少々危険と考える。なぜならば、実際に Binder 比が交差しなくても相転移を示す模型が存在するからである。

また、川村と福島は、熱平衡状態におけるスピンとカイラリティの自己相関関数

$$C_s(t) = \frac{1}{3N} \sum_i [\langle \mathbf{S}_i(0) \cdot \mathbf{S}_i(t) \rangle] \quad (1.20)$$

$$C_\chi(t) = \frac{1}{3N} \sum_i [\langle \chi_i(0) \chi_i(t) \rangle] \quad (1.21)$$

の時間依存性についての計算も行った [21, 22]。

もし低温でスピンやカイラリティに長距離秩序があれば、自己相関関数は十分時間がたつとある値に漸近し、緩和曲線は両対数スケールでは下に凸になる。これに対し、高温では自己相関関数は指数関数的にゼロになるので、緩和曲線は上に凸になる。転移温度で

は、自己相関関数は巾的にゼロになるので、緩和曲線は漸近的に直線になる。図 1.13 より、スピンの自己相関関数はすべての温度で指数関数的な減衰を示し、スピン秩序が起きていないことを示唆している。一方、カイラリティの自己相関関数は、低温側では下に凸、高温側では上に凸、境目の温度 $T_{CG} \sim 0.16J$ では直線的な振る舞いを示している。これはカイラル相への相転移が起きていることを示唆している。

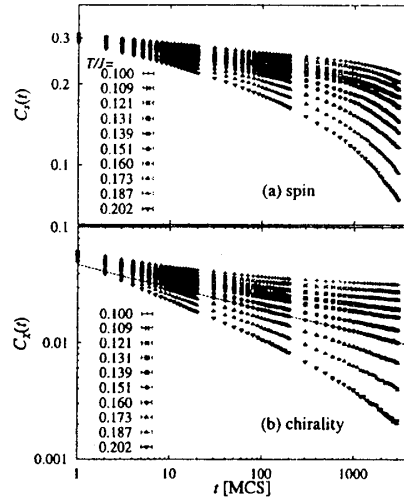


図 1.13: スピン (a) とカイラリティ (b) の自己相関関数の時間依存性

この計算では、系のサイズと実際に有効なモンテカルロステップ数の関係について調べられていないので、相転移の有無については慎重を要すると考える。

1.3.2 界面エネルギー法による再検討

1.2 節で界面エネルギー法の概略について述べたが、本当にこれで正しい値を評価しているのかについては疑問が残る。最近になって、界面エネルギー法の再検討の動きが起り始めた。ここでは、そのうちのいくつかの例について述べる。

まず、尾関によって提案された「レプリカ境界条件」について述べる [23]。この境界条件を説明するための例として、 $(L+1) \times L^{d-1}$ の d 次元イジング模型を考え、 $L+1$ 方向に垂直な両端を $\delta\Omega_a$, $\delta\Omega_b$ と記述することにする。「レプリカ境界条件」の模式図を図 1.14 に示す。 $\delta\Omega_a$ のスピンについてはスピン値をランダムに固定し、 $\delta\Omega_b$ のスピンについては、2つのレプリカが鏡映対称になるようにお互いに繋ぎ合わせる。レプリカの繋ぎ合わせ方として、以下の2通りを導入された。1つは $+J$ ボンドで繋ぐ方法 (replica parallel BC, RPBC)、もう1つは $-J$ ボンドで繋ぐ方法 (replica antiparallel BC, RABC) である。

それぞれの境界条件下における系のハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\pm} = - \sum_{\langle ij \rangle \in \Omega} J_{ij} (\sigma_i^{(1)} \sigma_j^{(1)} + \sigma_i^{(2)} \sigma_j^{(2)}) \mp J \sum_{i \in \delta\Omega_b} \sigma_i^{(1)} \sigma_j^{(2)} \quad (1.22)$$

と記述される。ここで、 $\mathcal{H}_{\pm}$ はそれぞれ RPBC, RABC を課した系のハミルトニアンである。このとき、界面自由エネルギーは以下の式で定義される。

$$\Delta F_L^{(R)} \equiv F_{-,L} - F_{+,L} \quad (1.23)$$

この界面自由エネルギーは、任意の温度、ボンド配位、サイズに対して、

$$\Delta F_L^{(R)} \geq 0 \quad (1.24)$$

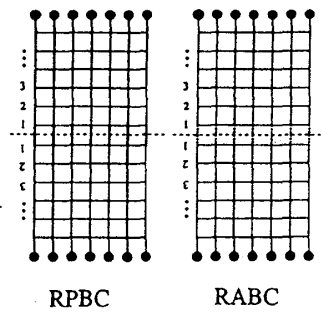


図 1.14: レプリカ境界条件 (黒丸印はランダムに固定したスピン、横の破線は鏡映面を表す)

が証明されている。

これはどんな場合においても界面が必ず入ることを意味している。よって、「レプリカ境界条件」は有限温度において有意な境界条件であると考えられる。この境界条件を用いて、2次元イジングスピングラス模型の界面エネルギーが調べられ、サイズ依存性はほとんどないと報告されている [23]。なお、「レプリカ境界条件」をハイゼンベルグスピングラス模型に適用したという報告例は今のところない。

次に、松原、白倉、塩見によって導入された Conjugate Boundary Condition について述べる [24]。彼らは2次元イジングスピングラス模型の相転移の有無について再検討を行った。彼らのとった方策とは、従来の反周期境界条件を課していた方向を開放端にすることであった。これにより、基底状態を作る際、その方向の歪みを除去することができる。こうして得られた基底状態をもとに、一端のスピンをすべて固定し、他端のスピンを反転することで、本来考えるべき界面エネルギーを計算した。彼らはこのエネルギーを Naive Defect Energy と呼んだ。反転させた後の基底状態のエネルギーは、反転させる前の基底状態のエネルギーよりも必ず高くなる。これは系に正しく界面が入ったことを意味し、この境界条件が有意であることを表している。彼らが計算した Naive Defect Energy のサイズ依存性を図 1.15 に示す。 $\pm J$ 模型に注目すると、従来の結果とは対照的にサイズ L と共に Naive Defect Energy が増加しているのが見てとれる。これより彼らは、先程のモンテカルロ法の結果と合わせて、この模型に対する有限温度相転移の存在を主張した。

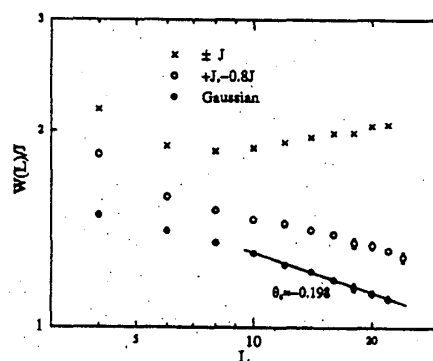


図 1.15: 2次元イジングスピングラス模型の Naive Defect Energy

最後に、1998年のKosterlitzとAkinoによって提唱された界面エネルギーの計算方法について簡単に触れる [25]。従来の界面エネルギー法では、体系のボンドと境界条件のボ

ンドを同時に与え、境界条件のボンドの符号の反転により界面を与えていた。彼らは、この界面の与え方を Random Twist(RT) と表現した。一方、彼らの方法では体系のボンドは固定されたものとし、境界条件のボンドに関しては様々な繋ぎ方を考える。その繋ぎ方の中でエネルギー最小を与える繋ぎ方を採用し、その時の境界条件下での基底エネルギー $E_0(L)$ を計算する。次に、境界条件のボンドの符号をすべて反転した条件下での基底エネルギー $E_{sD}(L)$ を計算する。このとき、彼らはスピンに関する界面エネルギー $\Delta E_s^{BT}(L)$ が

$$\Delta E_s^{BT}(L) = E_{sD}(L) - E_0(L) \quad (1.25)$$

で与えられると考え、この界面の与え方を Best Twist(BT) と表現した。この計算方法を3次元XYスピングラス模型に適用した結果を図1.16に示す。従来方法(RT)ではサイズ L と共に界面エネルギーは減少しているが、彼らの方法(BT)では、サイズ L と共に界面エネルギー $\Delta E_s^{BT}(L)$ は増加している。これより、彼らはこの模型における有限温度相転移の可能性を指摘した。

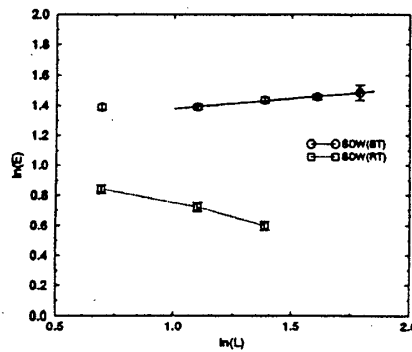


図 1.16: 3次元XYスピングラス模型の界面エネルギー

第2章 研究目的

3次元ハイゼンベルグスピングラス模型では、モンテカルロ法、界面エネルギー法の両方の解析から、スピングラス相転移は有限温度で起こらないと考えられてきた。しかしながら、これまでの研究にははっきりしない点が多い。モンテカルロ法による解析では、相転移の有無を調べるために、専ら Binder 比が用いられてきた。Binder 比の解析では、秩序変数の分布関数が Gauss 分布型とデルタ関数型の2つを仮定しているの、これら以外の分布関数が現れたとき、Binder 比自身意味を持たなくなる可能性がある。したがって、Binder 比だけから相転移の有無を考えるのは危険である。また、界面エネルギー法については、本当に正しい界面エネルギーを計算しているかどうかは確かではないので、信頼性に欠ける。本研究では、3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の相転移の有無について再検討することを目的とする。

本研究では、相互作用の分布関数を $\pm J$ 分布とし、界面エネルギー法をもとに相転移の有無について考える。特に、界面エネルギー法で最も重要である「境界条件」について十分な検討を行う。また、この系の低温での性質を解明するために、基底状態の安定性とスピン構造について調べる。さらに、有限温度における基底状態の安定性についても調べる。調べる項目は以下の通りである。

- 界面エネルギーの評価
- 基底状態におけるスピンの角度変化の評価
- 温度による基底状態からのズレの評価
- 界面自由エネルギーの評価

第3章 絶対零度での計算

本章では、3次元ハイゼンベルグスピングラス模型に界面エネルギー法を適用し、相転移の有無について再検討する。本章を含めそれ以降の計算では、すべて $J/k_B = 1$ としていることに留意されたい。

3.1 境界条件の検討

スピングラスのようなランダム系において、界面を有意に与える境界条件の取り方が重要であることは界面エネルギー法の再検討のところで述べた。ここでは、ハイゼンベルグスピン系の場合における有意な境界条件について考える。本研究では、2次元イジングスピングラス模型において成功をおさめた Conjugate Boundary Condition を採用した。この境界条件下では、イジングスピン系の場合、界面の与え方として一端のスピンをすべて固定し、他端のスピンをすべて反転させるだけで良い。この反転操作をそのままハイゼンベルグスピン系の場合に適用することを仮に考える。この場合、端のスピンをすべて反転させると、界面の中にはスピンの寄与のみならずカイラリティの寄与が入る。本研究ではスピンの秩序にのみ着目するので、カイラリティの寄与を取り除くような境界条件を考える必要がある。したがって、Conjugate Boundary Condition に若干の修正を加えなくてはならない。序論で述べたように、カイラリティはスピンを一様回転させる範囲内では不変である。このことに留意すると、界面の与え方として端のスピンを一斉に一様回転させることを考えればよい。この一様回転させる境界条件を Twisted Boundary Condition を呼ぶことにし、次の節でその具体的な方法について述べる。

3.2 Twisted Boundary Condition

一様回転させる方法はいろいろ考えられる。ここでは、Euler 角による一様回転を採用した。具体的な方法は以下の通りである。まず、 x, y 軸方向には周期境界条件、 z 軸方向には開放端境界条件を課す。この条件下での最低エネルギー E_G を求める。開放端境界条件を課す理由は基底状態において z 軸方向の歪みを除去するためである。次に、一端 ($z = 1$) スピンをすべて固定し、他端 ($z = L + 1$) のスピンの Euler 角による変換

$$\begin{pmatrix} \cos \theta \cos \phi \cos \psi - \sin \phi \sin \psi & \cos \theta \sin \phi \cos \psi + \cos \phi \sin \psi & -\sin \theta \cos \psi \\ -\cos \theta \cos \phi \sin \psi - \sin \phi \cos \psi & -\cos \theta \sin \phi \sin \psi + \cos \phi \cos \psi & \sin \theta \sin \psi \\ \sin \theta & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

を施し固定する。この条件下での最低エネルギーを求める。ただし、この一様回転で $z = L + 1$ 面上のスピンはすべて同じ角度動いているとは限らないので、実際スピンの角度

け動いたのかを表す尺度、すなわち、平均の角度を設ける必要がある。本研究では、平均の角度を πx とし、 x を次のように定義した。

$$\cos \pi x = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^{L^2} \mathbf{S}_i \tilde{\mathbf{S}}_i \quad (3.2)$$

ここで、 $\mathbf{S}_i$ と $\tilde{\mathbf{S}}_i$ はそれぞれ $z = L + 1$ 面上のひねる前と後のスピンを表す。

上述の角度 πx だけ一様回転させる境界条件が Twisted Boundary Condition である。これにより系全体に本来考えるべき界面を与えることができる。以下では、この界面のエネルギーを Naive Defect Energy と呼ぶことにする。一様回転させた後の基底エネルギーを $E(x)$ とすると、Naive Defect Energy は以下の式で定義される。

$$\Delta E(x) = E(x) - E_G \quad (3.3)$$

この Naive Defect Energy がサイズ L と共にどう変化するかを調べれば、基底状態の安定性が議論できる。ただし、ハイゼンベルグスピン系の場合にはあらゆる x について調べる必要がある。もし、ある x に対して $\Delta E(x)$ が減少する傾向が見られた場合、その「ひねり」の方向に向かってスピン構造の不安定が生じるからである。したがって、すべての x に対して $\Delta E(x)$ に増加傾向が見られた時、基底状態は安定であると言える。

このように一様回転による Naive Defect Energy を計算すればよいのだが、問題が1つある。それはどういう「ひねり」を与えるのかという問題である。「ひねり」を与える変換行列 (3.1) は無数にあるので、さまざまな「ひねり」が可能となる。しかし、すべての可能な「ひねり」を調べることは不可能である。そこで、本研究では各角度 πx に対して 200 回の「ひねり」を行い、その中で最もエネルギーの低いものをその角度における基底エネルギーとした。念のため、 z 軸のまわりに一様回転させた場合の計算も行い、この両者の結果から基底状態の安定性を調べることにした。

なお、基底状態のスピン配列はスピנקエンチ法を用いた。この方法では、基底状態のエネルギーは

$$\mathbf{S}_i = \mathbf{h}_i / |\mathbf{h}_i| \quad (3.4)$$

$$\mathbf{h}_i = \sum_{j(\text{neighbours to } i)} J_{ij} \mathbf{S}_j \quad (3.5)$$

の繰り返しにより得られる。ただし、この方法では局所最小のエネルギーを求めてしまう可能性がある。したがって、多くの初期状態を与えてクエンチさせ、その中から最もエネルギーの小さいものを基底エネルギーとみなすことにした。

系のサイズ L	初期状態の数	繰り返しの数
3	50	100
4	100	300
5	200	500
6	400	1000
7	1200	1400

表 3.1: スピנקエンチ法の計算条件

スピンクエンチ法の計算条件をまとめたものを表 3.1 に示す。系のサイズが $L = 8$ の場合には、模擬徐冷法を用いて基底状態のスピン配列を求めた。具体的には数 100 個の初期状態を用意し、各状態に対して温度 $T = 4.0J$ から $T = 0.1J$ までアニールを行った後クエンチさせる。そのうちエネルギー最小のものを基底状態として採用した。

3.3 計算結果

まず、 z 軸のまわりに一様回転させた時の Naive Defect Energy の結果を図 3.1 に示す。サンプル数は計算したサイズ L に対し約 1000 である。Naive Defect Energy ΔE は、計算した角度領域すべてにおいて、 L と共に増加する傾向が見られた。これは基底状態が安定に存在することを示唆しており、従来の説とは異なる大変興味深い結果を得た。

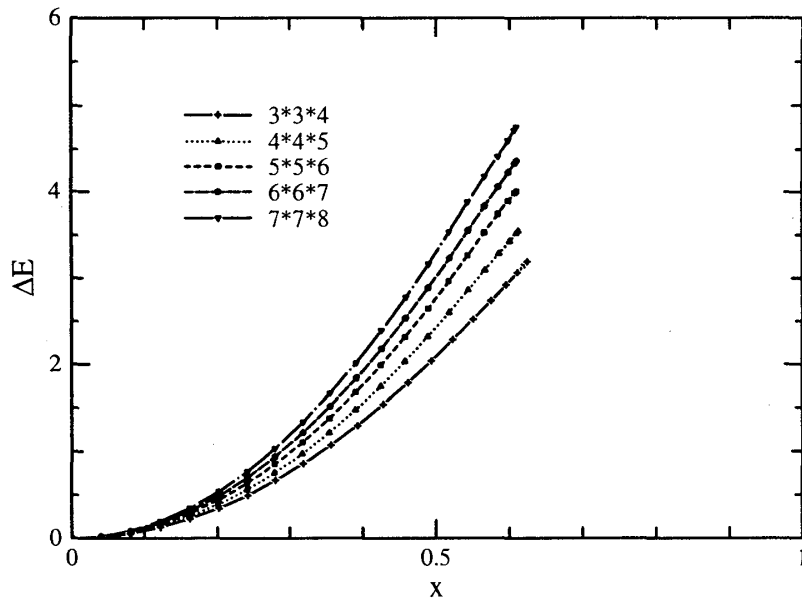


図 3.1: 3次元ハイゼンベルグスピングラスの Naive Defect Energy (z 軸のまわりの一様回転の場合)

ここで、 x の取り得る範囲について考える。まず、 $x = 1$ まで到達しないことについて考える。 $x = 1$ の状態は、端 ($z = L + 1$) のスピンをすべて反転させた状態のことであり、「一様回転」ではスピンを「反転」させることはできないことを表している。このことは、変換行列 (3.1) を

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

とさせるような Euler 角が存在しないことから分かる。

次に、 $x \sim 0.6$ で止まることについて考える。「ひねり」を加える前のスピン $\mathbf{S}$ を

$$\mathbf{S} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) \quad (3.7)$$

と指定すると、 z 軸のまわりに 180 度一様回転させた後のスピン $\tilde{\mathbf{S}}$ は

$$\tilde{\mathbf{S}} = (-\sin \theta \cos \phi, -\sin \theta \sin \phi, \cos \theta) \quad (3.8)$$

となる。よって、 $\mathbf{S}$ と $\tilde{\mathbf{S}}$ のなす角を πx とすると、

$$\cos \pi x = \mathbf{S} \cdot \tilde{\mathbf{S}} = \cos^2 \theta - \sin^2 \theta \quad (3.9)$$

となる。

今、スピンが等方的に分布しているという仮定の下で $\cos \pi x$ の平均を考えると、

$$\langle \cos \pi x \rangle = \frac{\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) \sin \theta d\theta}{\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta} \quad (3.10)$$

となる。これより、

$$\langle x \rangle = \frac{1}{\pi} \cos^{-1} \left(-\frac{1}{3} \right) \sim 0.6 \quad (3.11)$$

を得る。

よって、 z 軸のまわりの一様回転では、 $x \sim 0.6$ が最大値となることが分かる。

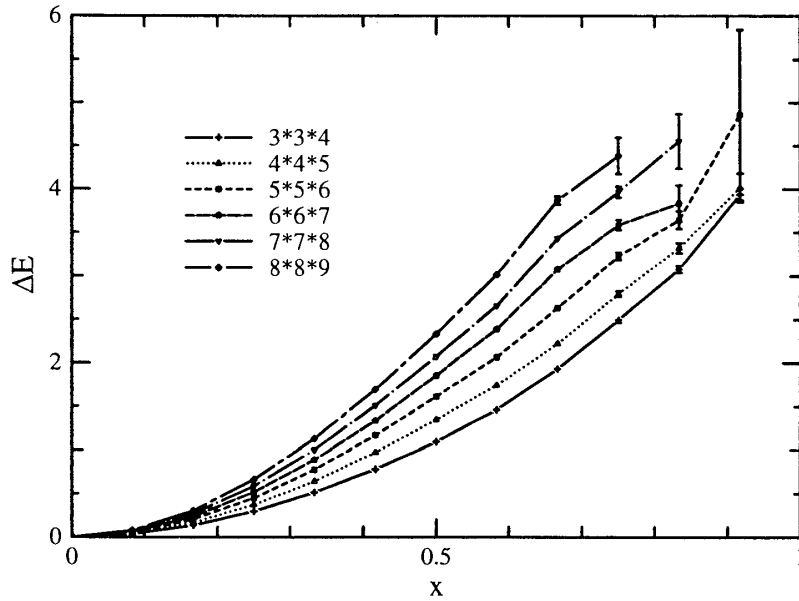


図 3.2: 3次元ハイゼンベルグスピングラスの Naive Defect Energy (エネルギー最小を与える一様回転の場合)

次に、エネルギー最小を与える一様回転の場合の Naive Defect Energy の結果を図 3.2 に示す。サンプル数は 1000 ~ 2000 である。この結果も $x = 1$ までグラフが到達していない。その理由は z 軸のまわりの一様回転の場合と同様である。図 3.1 での考察から x が意味をもつのは $x \sim 0.6$ までと述べたが、これは図 3.2 にも当てはまると考える。なぜならば、 $x \sim 0.6$ より大きい x に対しては統計誤差が大きく、 ΔE のサイズ依存性を把握することができないからである。 $x \sim 0.6$ までのすべてのデータにおいて、Naive Defect Energy はサイズ L と共に増加する傾向が見られた。

図 3.1 と図 3.2 をもとに、Naive Defect Energy のサイズ依存性について考える。図 3.3 は、(a) $x = 0.08$ 、(b) $x = 0.16$ 、(c) $x = 0.25$ の時の Naive Defect Energy のサイズ依存性 (両対数プロット) を表す。random がエネルギー最小を与える一様回転、uniform が z 軸のまわりの一様回転である。図 3.3 より、 ΔE の大小関係は uniform の方が random より必ず大きいことが確認できる。この関係はサイズ L が十分大きい場合にも成立すると考えられる。注目すべき点は、uniform の ΔE が下に凸の曲線で変化するのにに対し、random の ΔE は直線で変化するところである。ここで、uniform の ΔE に関しては定量的な議論をする必要がないことを付記する。なぜならば πx 一様回転させたものをすべて考慮に入れていないからである。今、各 x に対して random の ΔE が

$$\Delta E \sim L^\theta \quad (3.12)$$

で表されるとして、 θ の値の評価を行った。その結果、図 3.3 の (a) から (c) のすべてに対し、 $\theta \sim 0.8$ であることが分かった。

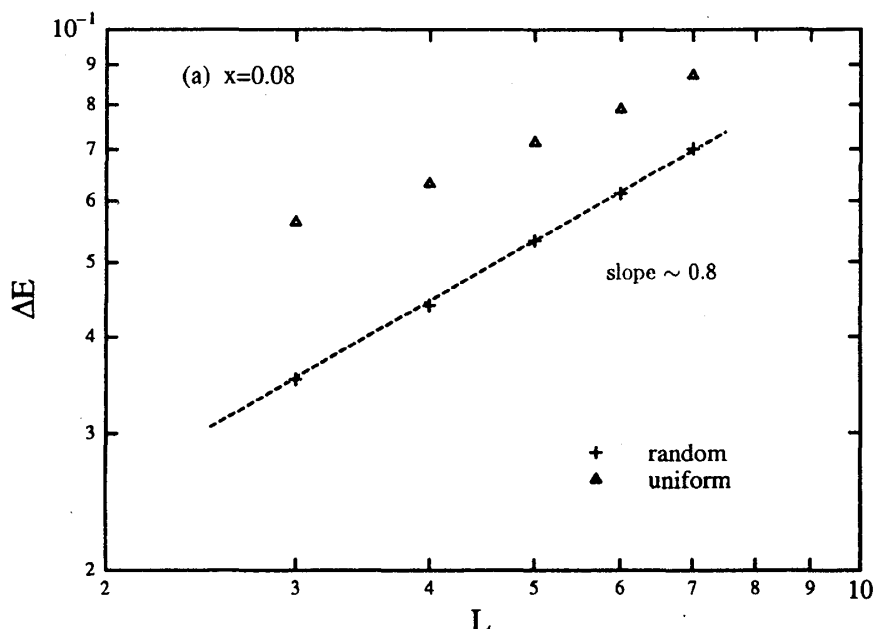
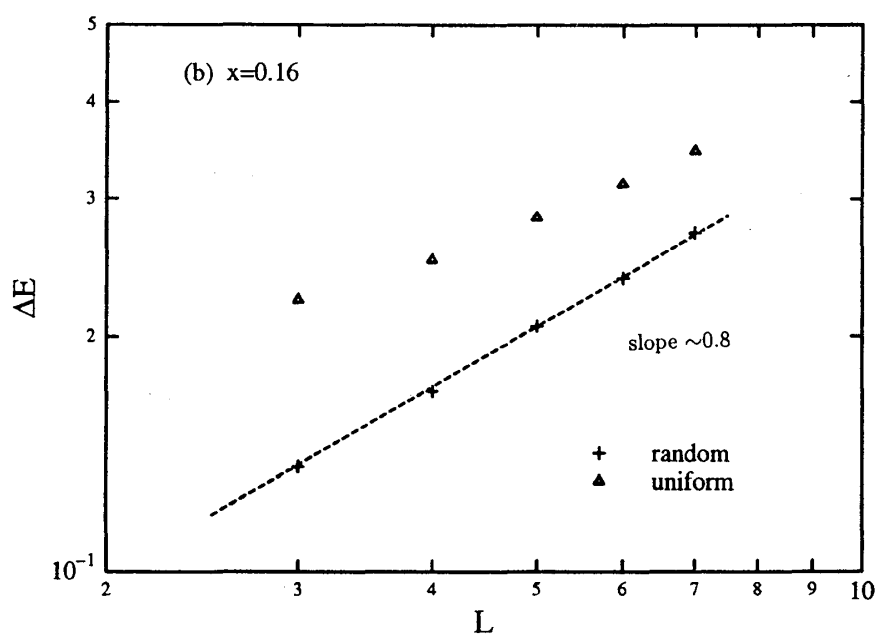
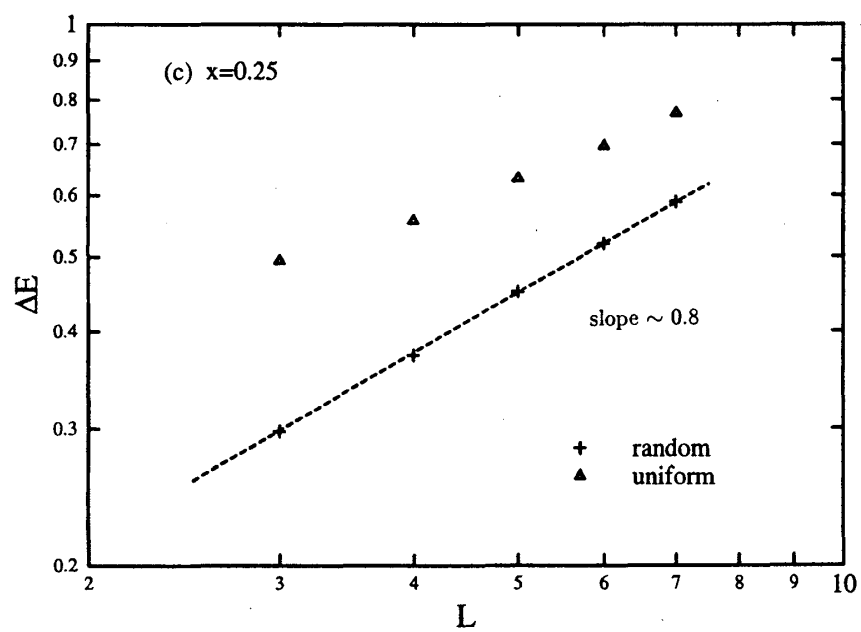


図 3.3: Naive Defect Energy のサイズ依存性 (a) $x = 0.08$ のとき



(b) $x = 0.16$ のとき



(c) $x = 0.25$ のとき

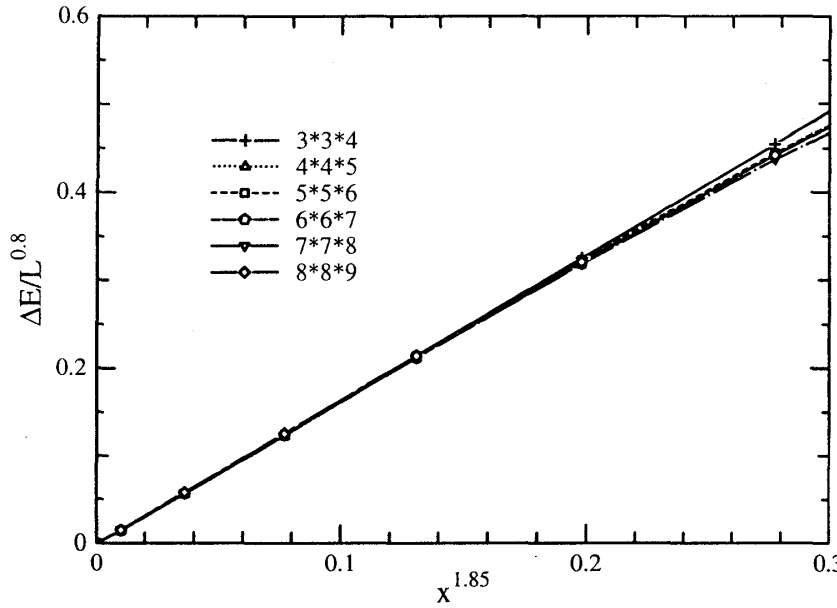


図 3.4: 3次元ハイゼンベルグスピングラスの Naive Defect Energy のスケーリング

さらに x の方も考慮に入れると、図 3.4 に示すようにすべてのデータ点が

$$\Delta E \sim Ax^\alpha L^\theta \quad (3.13)$$

のスケーリング式に載るという驚くべき結果が得られた。ここで、 α 、 θ 、 A の値はそれぞれ $\alpha \sim 1.85$ 、 $\theta \sim 0.8$ 、 $A \sim 0.14J$ である。式 (3.13) を 3次元強磁性ハイゼンベルグ模型における Defect Energy の表式

$$\Delta E \sim \frac{1}{2}\pi^2 Jx^2 L \quad (3.14)$$

と比較すると、 α 、 θ の値が非常に近いことが分かる。これはハイゼンベルグスピングラス模型が強磁性体と似た側面をもつ可能性があることを示唆している。

以上のことをまとめると、基底状態に「ひねり」を加えたときの歪みエネルギーはいろいろな「ひねり」に対してサイズと共に増加することが分かった。これは有限温度相転移を示唆した大変興味深い結果である。

3.4 基底状態の性質

ここでは「ひねり」を加えた後の内部のスピンの角度変化について調べ、基底状態がもつ性質について考察する。もし基底状態が強磁性体と類似の角度変化を示すならば、内部のスピンは順次等角度でひねられた方向に回転していることになる。この描像がハイゼンベルグスピングラス模型で見られるかどうかを調べる。また、内部のスピンの角度変化をみることは界面が系全体に入ったかどうかを確認することにもなる。ひねる軸を z 軸に限定し、 z 軸のまわりに $\phi^{(L+1)} = 15, 30, 60, 90$ 度一様回転させた時の $z = \ell$ 面上のスピンの方位角の変化を $\phi_i^{(\ell)}$ と表す。このとき、各 $z = \ell$ 面での $\phi_i^{(\ell)}$ の平均量 $\phi^{(\ell)}$ と標準偏差 $\Delta\phi^{(\ell)}$ を以下の式

$$\phi^{(\ell)} = \frac{1}{L^2} \sum_i \phi_i^{(\ell)} \quad (3.15)$$

$$\Delta\phi^{(\ell)} = \sqrt{\frac{1}{L^2} \sum_i \left(\phi_i^{(\ell)} - \phi^{(\ell)} \right)^2} \quad (3.16)$$

で定義する。

これらのサンプル平均 $[\phi^{(\ell)}]_J$ 及び $[\Delta\phi^{(\ell)}]_J$ の結果をそれぞれ図 3.5、3.6 に示す。ここで横軸を $r = (\ell - 1)/L$ とし、 $z = 1$ 面の位置を $r = 0$ 、 $z = L + 1$ 面の位置を $r = 1$ と表した。平均量に関しては、それぞれのひねり角 $\phi^{(L+1)}$ に対しすべてのデータ点が $r = 0.5$ を対称としたある 1 本の普遍的な曲線上に載っているように見える。この結果より、サイズが十分大きいデータ点もこの曲線上に載ることが期待される。特に注目すべき点は、小さい $\phi^{(L+1)}$ の場合には平均量の振る舞いがほとんど直線的であるところである。今回の計算では、方位角の変化のみならず θ 方向の角度変化も計算しており、この結果はほとんどゼロであるということを付記する。これらの結果を考慮すると、内部のスピンは z 軸のまわりにほとんど等角度で回転していることになる。以上より、内部のスピンの角度変化という点において、3次元ハイゼンベルグスピングラス模型と強磁性体模型が類似しているという大変興味深いことが分かった。この類似性を指摘したのは本研究が初めてである。

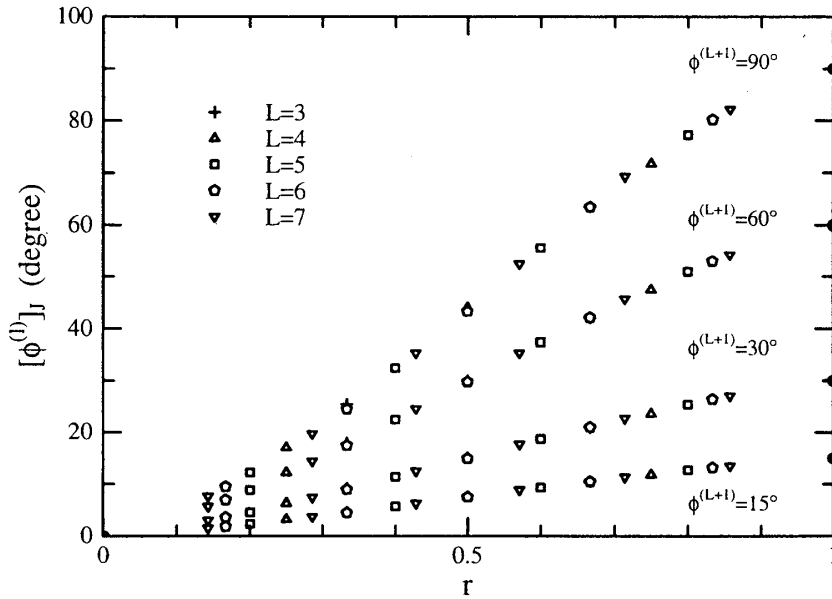


図 3.5: 内部のスピンの角度変化の平均量

標準偏差に関しては、グラフが $r = 0.5$ に関して対称である。これは当然の結果と考える。端に近いスピンほど固定されたスピンの影響を受けやすいので、標準偏差は小さい。逆に、内部のスピンほどその影響は小さくなるので標準偏差は大きい。大きい $\phi^{(L+1)}$ の場合には、サイズ L と共にばらつきが大きくなるように見える。これは z 軸のまわりに $\phi^{(L+1)}$ だけ回転させたといっても、実際にはサンプルによって $\phi^{(L+1)}$ だけ回転したものもあれば、 $\phi^{(L+1)}$ の半分くらいしか回転しないものもあるからである。一方、小さい $\phi^{(L+1)}$ の場合には、ばらつきはサイズ L によらずある 1 本の普遍的な曲線上に載っているように見える。この結果も平均量と同様に、スピン構造の安定性を裏づけるものと考えられる。

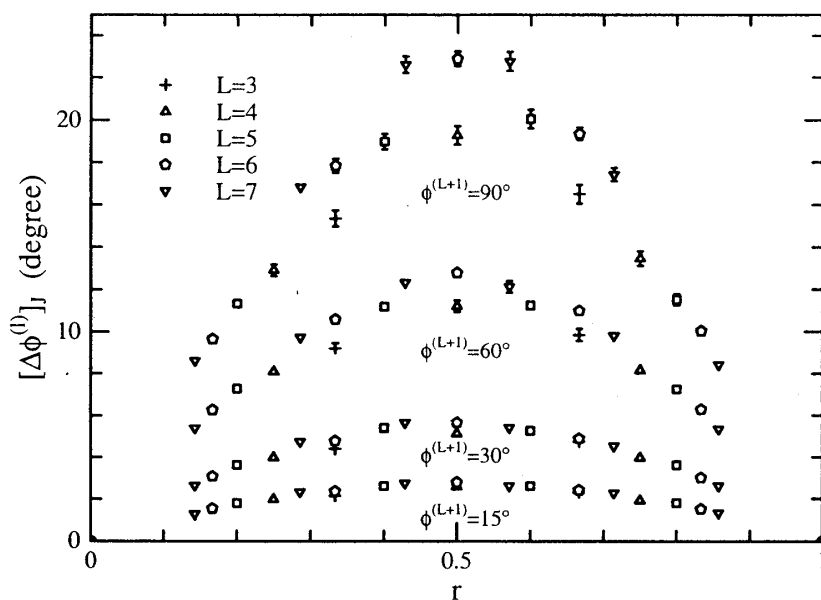


図 3.6: 内部のスピン の 角度変化の標準偏差

3.5 絶対零度の計算のまとめ

本章では、3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の基底状態の安定性について調べた。基底状態に角度 πx の「ひねり」を加えた時の歪みエネルギー $\Delta E(x)$ を評価した。その結果、一様回転できる角度領域内でサイズ L と共に歪みエネルギーは増加した。しかも、そのエネルギーは

$$\Delta E(x) \sim Ax^{1.85}L^{0.8} \quad (3.17)$$

でスケールされることが分かった。これは、有限温度でスピングラス相転移が起こることを示唆しており、従来の説とは異なる大変興味深い結果である。さらに、この基底状態の性質をみるために、内部のスピン構造について調べた。その結果、強磁性体模型と類似のスピン構造が見られた。

以上のことをまとめると、3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の基底状態は、強磁性体模型の基底状態と似た側面をもつ安定な相であることを示唆している。

第4章 有限温度での計算I

本章では、有限温度における基底状態の安定性を調べ、転移温度の評価を行う。

4.1 計算方法

本研究では、有限温度における基底状態の安定性を調べる方法を考案したので、その方法について述べる。まず、 $z=1$ 面と $z=L+1$ 面の基底状態のスピン配列 $\{\mathbf{S}_i^{(1)}\}$, $\{\mathbf{S}_i^{(L+1)}\}$ を決定する。次に、 $\{\mathbf{S}_i^{(1)}\}$ はすべて固定し、 $\{\mathbf{S}_i^{(L+1)}\}$ に対しては一様回転を許すような

条件下で、シミュレーションを行う (図 4.1 参照)。

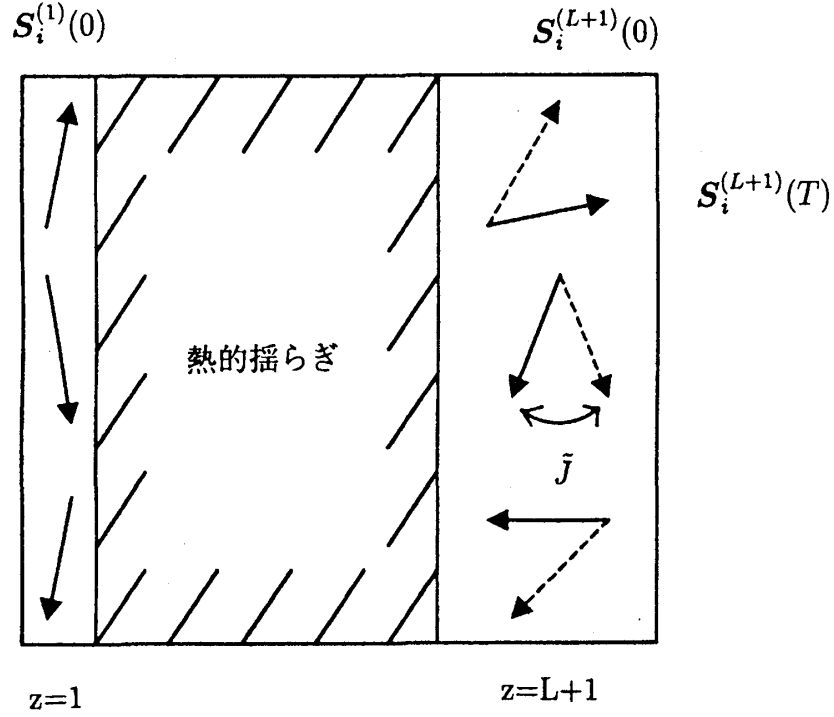


図 4.1: シミュレーションの概略図

このとき、有限温度における基底状態の安定性は端 ($z=L+1$) のスピンの基底状態からのズレで議論できると考えられる。この基底状態からのズレ (以下、スピンオーバーラップと呼ぶ) を、以下の式

$$\langle \mathbf{S}_{L+1}(0) \cdot \mathbf{S}_{L+1}(T) \rangle = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^{L^2} \mathbf{S}_i^{(L+1)}(0) \cdot \mathbf{S}_i^{(L+1)}(T) \quad (4.1)$$

で定義する。この物理量は絶対零度で1の値を取り、温度上昇と共に単調減少し0に向かう。もしある温度 T に対して、このズレがサイズ L と共に1に近づけば、その温度で基底状態は安定と考えられる。逆に、サイズ L と共に減少すれば基底状態は不安定と考えられる。このように、スピンオーバーラップのサイズ依存性から有限温度における基底状態の安定性を議論することができる。このサイズ依存性が入れ替わる温度が転移温度である。

上述のスピンオーバーラップは0と1の間の値しか取ることができないので、見にくいものになる。したがって、 L が十分大きい場合、どういう振る舞いを示すのかを知るのが容易でない。そこで、スピンオーバーラップが1の値を取るときに無限大となる物理量を考える。本研究では、その候補として、端 ($z=L+1$) のスピンの基底状態のスピンの基底状態と粘着しているかを表す量である $\tilde{J}$ を考える (図 4.1 参照)。 $\tilde{J}$ は以下の式で定義されるもの考える。

$$\langle \mathbf{S}_{L+1}(0) \cdot \mathbf{S}_{L+1}(T) \rangle = \mathcal{L}(\tilde{J}/T) \quad (4.2)$$

ここで、 $\mathcal{L}(x)$ は Langevin 関数で、 $\mathcal{L}(x) = \coth(x) - 1/x$ で与えられる。 $\tilde{J}$ は一様磁場中の1スピンの問題と同等の扱いで得られる物理量である。以下では $\tilde{J}$ のサイズ依存性を調べ、有限温度における基底状態の安定性を考える。

4.2 交換モンテカルロ法

モンテカルロシミュレーションでは、端のスピンに関するサンプリング効率を上げ、統計誤差を小さくするために、福島と根本によって開発された交換モンテカルロ法を用いた[17]。ここでは、交換モンテカルロ法の概略を説明する。

取り扱う系として、相互作用のない M 個のレプリカからなる合成系を考える。 m 番目のレプリカは、ハミルトニアン $\mathcal{H}(X)$ で記述され、逆温度 β_m の熱浴に接しているとする。便宜上、逆温度は $\beta_m < \beta_{m+1}$ を満足するものとする。拡張アンサンブルの状態が $\{X\} = \{X_1, X_2, \dots, X_M\}$ で表されるとすると、分配関数は

$$Z = \text{Tr}_{\{X\}} \exp\left(-\sum_{m=1}^M \beta_m \mathcal{H}(X_m)\right) = \prod_{m=1}^M z(\beta_m) \quad (4.3)$$

と与えられる。ここで、 $z(\beta)$ はもともとの系の分配関数である。

これより、状態 $\{X\}$ を見出す確率は

$$P(\{X, \beta\}) = \prod_{m=1}^M P_{eq}(X_m, \beta_m) \quad (4.4)$$

となる。

但し、

$$P_{eq}(X, \beta) = z^{-1}(\beta) \exp(-\beta \mathcal{H}(X)) \quad (4.5)$$

交換モンテカルロ法でマルコフ過程を実現させるために、 n 番目と m 番目のスピン配列を交換する確率を表す遷移行列 $W(X, \beta_m | X', \beta_n)$ を設ける。系の熱平衡状態を保証するためには、以下の詳細釣り合いを満足しなければならない。

$$\begin{aligned} & P(\cdots; X, \beta_m; \cdots; X', \beta_n; \cdots) W(X, \beta_m | X', \beta_n) \\ &= P(\cdots; X', \beta_m; \cdots; X, \beta_n; \cdots) W(X', \beta_m | X, \beta_n) \end{aligned} \quad (4.6)$$

式(4.4)、(4.5)、(4.6)より、

$$\frac{W(X, \beta_m | X', \beta_n)}{W(X', \beta_m | X, \beta_n)} = \exp(-\Delta) \quad (4.7)$$

但し、

$$\Delta = (\beta_n - \beta_m)(\mathcal{H}(X) - \mathcal{H}(X')) \quad (4.8)$$

したがって、メトロポリス型の遷移確率を採用すれば、

$$W(X, \beta_m | X', \beta_n) = \begin{cases} 1 & \text{for } \Delta < 0 \\ \exp(-\Delta) & \text{for } \Delta > 0 \end{cases} \quad (4.9)$$

となる。

実際のモンテカルロ法の手続きとしては、以下の2つのステップを交互に実行すればよい。

1. 通常のモンテカルロ法で、それぞれのレプリカをカノニカルアンサンブルとして、同時かつ独立にシミュレートする。
2. 2つの配列 X_m, X_{m+1} を確率 $W(X_m, \beta_m | X_{m+1}, \beta_{m+1})$ で交換する。

ここで、レプリカ交換の比率 (acceptance ratio) が $\beta_m - \beta_n$ と共に指数関数的に減少するので、 $n=m+1$ の場合に限定した。

なお、物理量 A のカノニカル平均は次式で与えられる。

$$\langle A \rangle_{\beta} = \frac{1}{N_{MCS}} \sum_{t=1}^{N_{MCS}} \sum_{m=1}^M A(\tilde{X}_m(t)) \delta_{\beta, \beta_m(t)} \quad (4.10)$$

4.3 計算結果

4.3.1 計算方法の動作確認

まず、本研究で考案した方法を強磁性体模型に適用し、うまくいくかどうかを確かめた。適用した模型は3次元ハイゼンベルグ模型で、転移温度 T_c は $T_c \sim 1.45$ と分かっている。

ここに計算条件を記す。シミュレーション方法は前節の交換モンテカルロ法で、スピンの状態更新の仕方として熱浴法を用いた。温度範囲は $1.05 \leq T \leq 1.80$ で、これを16等分に分割して計算を行った。計算条件をまとめたものを表4.1に示す。端のスピンの一様回転については、1モンテカルステップにつき5000回の更新操作を施した。

系のサイズ	全ステップ数	緩和ステップ数
3	110000	10000
4	110000	10000
5	110000	10000
6	170000	20000
7	170000	20000
8	230000	30000
9	350000	50000

表 4.1: 計算条件

スピンオーバーラップの結果を図4.2に示す。サイズの小さい系はサイズ効果が大きいために特異な振る舞いを示すが、それ以外のデータはほとんど1点で交わっている。その交わる点での温度が転移温度になっている。転移点より低温側ではサイズ L と共に増加し、高温側では L と共に減少する。このように、スピンオーバーラップのサイズ依存性が異なることから有限温度で秩序の変化が起こっていることが分かる。

また、スピンオーバーラップより評価した $\tilde{J}$ の結果を図4.3に示す。低温側ではサイズ L と共に $\tilde{J}$ が増加していることから、長距離秩序相 (強磁性相) が実現されていることが分かる。一方、高温側ではサイズ L と共に $\tilde{J}$ が減少していることから、長距離秩序相が存在しないことが分かる。 $\tilde{J}$ の振る舞いが入れ替わる温度が転移温度 $T_c \sim 1.45$ になっている。

これらの結果から、この方法は相転移の有無を調べるのに有力なものであることが確認できた。

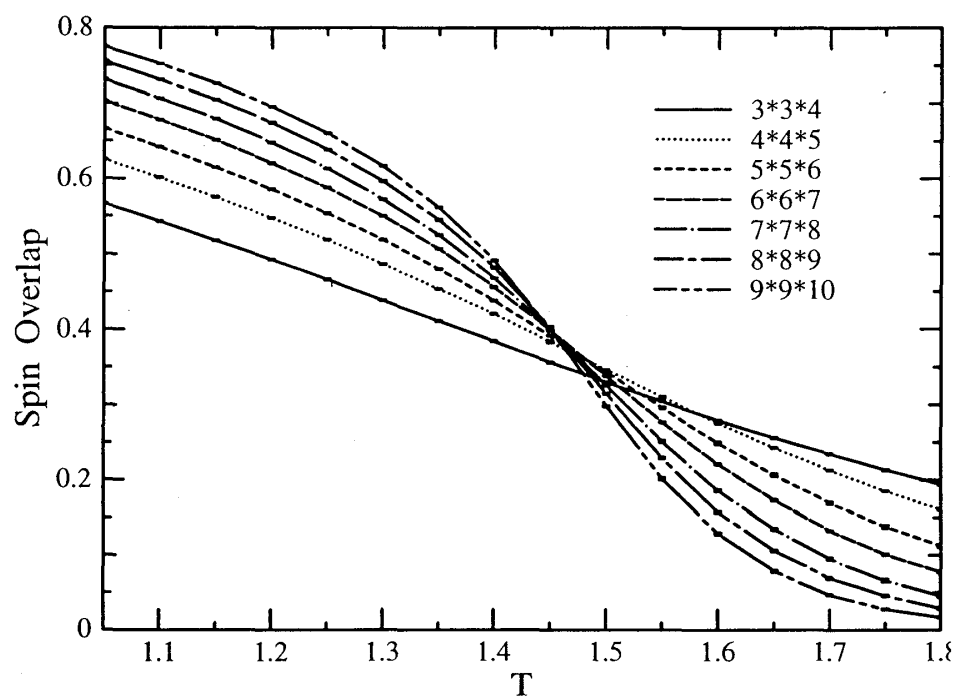


図 4.2: 3次元強磁性ハイゼンベルグ模型のスピノーバーラップ

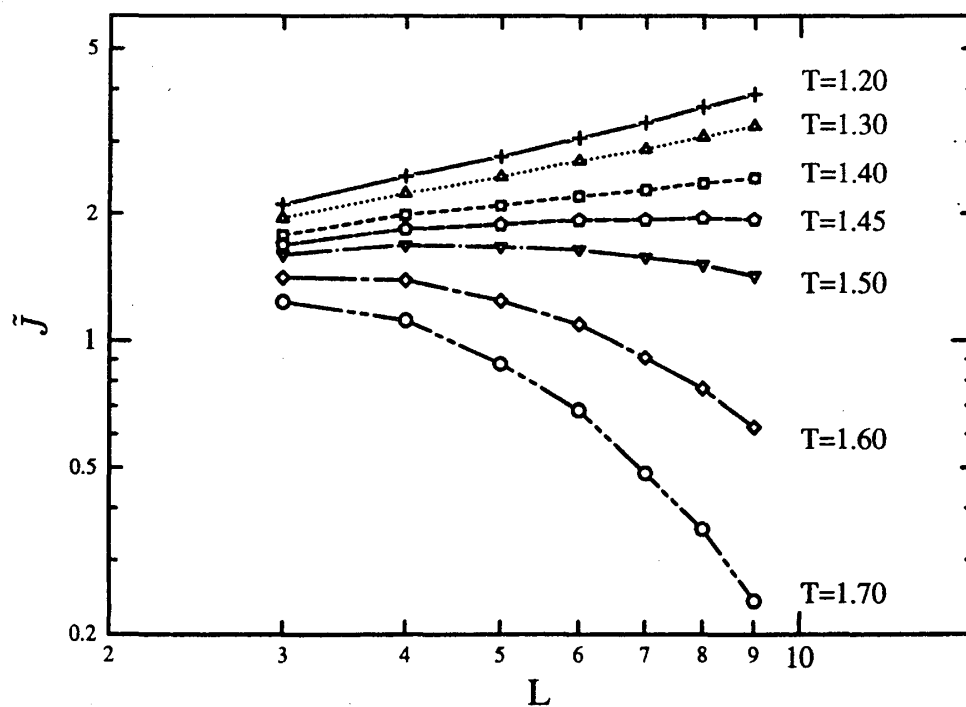


図 4.3: 3次元強磁性ハイゼンベルグ模型の $\tilde{J}$

4.3.2 ハイゼンベルグスピングラス模型への適用

本研究で考案した方法を、ハイゼンベルグスピングラス模型に適用した結果について述べる。

まず計算の条件について述べる。基底状態のスピンの求め方は第3章と同様である。シミュレーション方法は前節の交換モンテカルロ法で、スピンの状態更新の仕方として熱浴法を用いた。温度範囲は $0.04 \leq T \leq 0.50$ で、これを24等分に分割して計算を行った。サンプル数、全モンテカルロステップ数、緩和ステップ数に関しては表4.2の通りである。

系のサイズ	サンプル数	全ステップ数	緩和ステップ数
3	1600	110000	10000
4	1600	110000	10000
5	1600	120000	20000
6	1600	170000	20000
7	1600	170000	20000
8	1600	230000	30000
9	1600	350000	50000

表 4.2: 計算条件

なお、端のスピンの一様回転についてはサンプリング効率を上げるために、1モンテカルロステップにつき5000回の更新操作を施した。

スピンオーバーラップの結果を図4.4に示す。これより明らかに分かることは、低温側と高温側でサイズ依存性が異なることである。具体的には、低温側でサイズ L と共に1に近づき、高温側で L と共にゼロに向かう。これは有限温度でスピンの秩序が起こることを示唆している。転移温度については温度が0.2から0.3付近でデータが見にくくなっているため、スピンオーバーラップから評価するのは困難である。よって、これについては $\bar{J}$ の方で考える。

図4.5は3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の $\bar{J}$ の計算結果である。強磁性体模型の時と同様に、 $\bar{J}$ は低温側で L と共に増加し、高温側で L と共に減少する。これはスピングラス相転移の存在を示唆している。

次に転移温度について考える。中間温度領域に着目すると、 $T=0.28$ では、サイズ L が8になってはじめて $\bar{J}$ が減少する傾向が見られた。よって、 L が十分大きい場合には $\bar{J}$ はゼロになることが予想される。一方、 $T=0.22$ では、 $\bar{J}$ の伸びは小さいが明らかに増加している。これより、 L を十分大きくしても $\bar{J}$ は減少することはないと考える。したがって、本研究では、転移温度として $T=0.22$ と $T=0.28$ の間、すなわち、 $T_{SG} \sim 0.25$ と推論する。

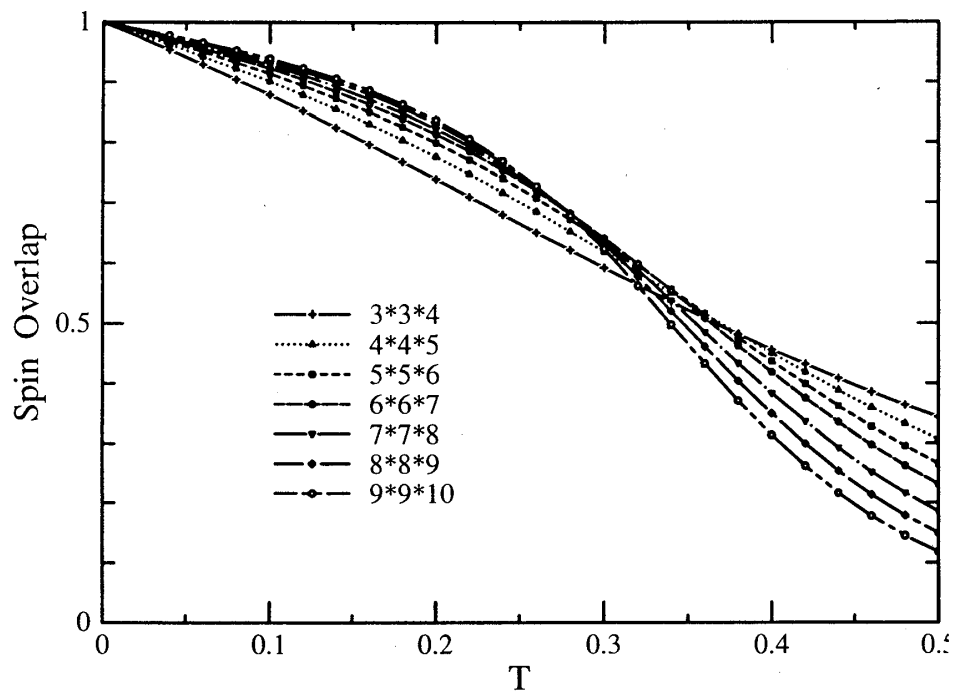


図 4.4: 3次元ハイゼンベルグスピングラス模型のスピノバーラップ

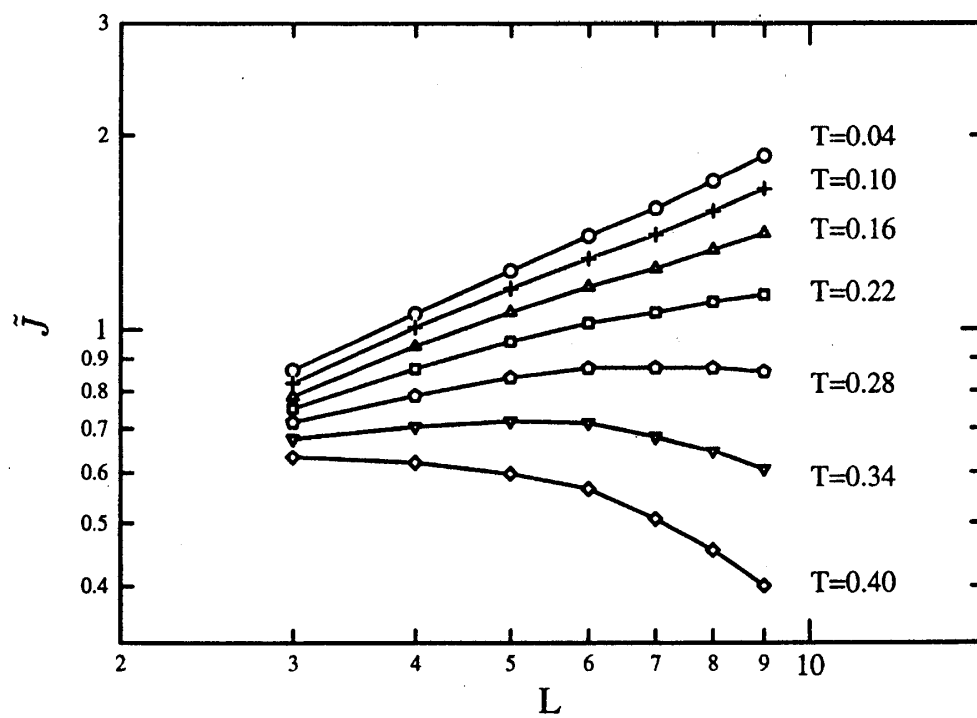


図 4.5: 3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の $\tilde{J}$

4.4 有限温度での計算Iのまとめ

本章では、3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の転移温度 T_{SG} の評価を行った。その評価にあたって、有限温度における基底状態の安定性について調べた。安定性をみるための物理量として、基底状態からのズレ、これを発展させたものである $\tilde{J}$ を考え、それらの計算を行った。 $\tilde{J}$ のサイズ依存性について調べたところ、 $\tilde{J}$ は低温側でサイズと共に増加し、高温側で減少することが分かった。これは、有限温度でスピングラス相転移が起こることを表している。転移温度として、 $\tilde{J}$ のサイズ依存性が入れ替わる温度、すなわち、 $T_{SG} \sim 0.25$ と見積もった。

この計算においては、方法自身新しく、これで本当にいいのかと疑問視する声がある。これに対しては、強磁性体模型で事前にうまく機能することを確かめているので、問題はないと考える。ただ、転移温度の評価に関しては慎重に行わなければならないので、1つの解析方法にとどまらず、様々な方法からこれについて調べる必要があると考える。

第5章 有限温度での計算II

前章において、3次元ハイゼンベルグスピングラス模型は、 $T_{SG} \sim 0.25$ で相転移を起こすと推論した。しかし、この結果は従来の説 $T_{SG} = 0$ を覆すほど十分な説得力をもたない。よって、別の解析方法から転移温度について調べ、前章の結果を支持するものを得る必要がある。本章では、界面自由エネルギーの計算を行った。

5.1 界面自由エネルギー

まず、界面自由エネルギー (Defect Free Energy) とは何か、また、この物理量を調べることで何が分かるのかについて述べる。序論で界面エネルギーについて述べたが、この物理量は絶対零度における相の安定性を表すものである。すなわち、界面エネルギー ΔE がサイズ L と共に増加傾向を示せば安定な相が存在することを意味し、減少傾向を示せば安定な相は存在しないことを意味する。界面自由エネルギーはこの界面エネルギーをそのまま有限温度に拡張したもので、有限温度における相の安定性を表す。

スケーリングの議論によると、界面自由エネルギーは

$$\Delta F(T) \sim L^{a(T)} \quad (5.1)$$

と記述される [26]。ここで、 $a(T)$ は剛性指数 (stiffness exponent) と呼ばれる量で、秩序相の堅さの度合いを表す。系の温度が十分高い場合には常磁性状態が実現されているので、 $L \rightarrow \infty$ で $\Delta F(T) = 0$ である。すなわち、 $a(T)$ は負の値を取る。この状態から温度を下げると、もし相転移があれば $a(T)$ が負の値から正の値へと変化する。なぜならば、 $T = T_c$ で秩序相への転移が起これば、 $T < T_c$ のとき、 $L \rightarrow \infty$ で $\Delta F(T) \rightarrow \infty$ となるからである。もし相転移がなければ $a(T)$ は負の値のままである。このように、界面自由エネルギーを各温度について計算し $a(T)$ の温度変化を調べることによって、転移温度の見積もりが可能となる。

5.2 計算方法

界面自由エネルギーを計算するにあたって、ハイゼンベルグスピングラス模型に課す条件について述べる。境界条件として、 x, y 軸方向には周期境界条件、 z 軸方向には開放端

境界条件を課す。これは絶対零度の場合と同様のもので、本来考えるべき界面自由エネルギーを計算するためである。計算の手順は、まず両端の基底状態のスピン配列を決定する。次に、両端を基底状態のスピン配列で固定した下での自由エネルギー F_1 を計算する。また、一端を基底状態のもので固定し、もう一端を z 軸のまわりに 90 度一様回転させたもので固定した下での自由エネルギー F_2 を計算する。一様回転させた目的は、絶対零度の計算と同様に、カイラリティの寄与を取り除きスピンの寄与だけを取り出すことである。

このとき、界面自由エネルギー (これを Naive Defect Free Energy と呼ぶことにする) は、以下の式

$$\Delta F = F_2 - F_1 \quad (5.2)$$

で定義される。これを各温度について計算し、サイズ依存性を調べれば転移温度が分かる。

ここで、自由エネルギーの計算の仕方について考える。統計力学によれば、自由エネルギー F は

$$F = -T \log Z \quad (5.3)$$

で与えられる。ここで、 Z は分配関数である。イジングスピン系のような離散系の場合には、取り得る状態が限られているので、 Z の計算は比較的容易である。しかし、ハイゼンベルグスピン系のような連続系では、取り得る状態が無数にあるので、 Z は多重積分の形になる。この積分の計算は、系が複雑になればなるほど困難になる。

本研究では、上野の方法を用いた [27]。この方法は、統計力学的温度 T の定義

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} \quad (5.4)$$

を基礎としている。ここで、 E はエネルギー、 S はエントロピーを表す。

熱力学によると、自由エネルギーは

$$F = E - TS \quad (5.5)$$

と記述される。

これより、温度一定の時の自由エネルギーの変化 $\Delta F(T)$ は

$$\Delta F(T) = \Delta E(T) - T \Delta S(T) \quad (5.6)$$

となる。

式 (5.6) の $\Delta E(T)$ はモンテカルロ法で求めることができる。また、 $\Delta S(T)$ は、式 (5.4) より、

$$\Delta S(T) = \frac{\Delta E(T_0)}{T_0} + \int_{T_0}^T \frac{d\Delta E(T')}{T'} \quad (5.7)$$

となり、計算可能である。ここで、 T_0 は $\Delta F(T_0) = 0$ を満足する高い温度である。

この方法を用いることで、ハイゼンベルグスピン系の界面自由エネルギーの計算を比較的容易に行うことができる。

5.3 計算結果

5.3.1 計算方法の動作確認

ΔF がきちんと計算できるかどうかを確かめるために、上野の方法を 3 次元強磁性ハイゼンベルグ模型に適用した。この模型の転移温度は $T_c \sim 1.45$ と分かっている。まず計算

の条件について述べる。 $T_0 = 5.0$ 、温度間隔 $\Delta T = 0.05$ として、温度を下げながらモンテカルロ法で ΔE の計算を行い、式 (5.6)、(5.7) を用いて ΔF を求めた。モンテカルロステップ数は 30000 で、そのうち 10000 ステップ数を空回しに用いている。計算結果を図 5.1 に示す。様々なサイズのグラフが転移温度 T_c で交差するのが見てとれる。 T_c より低温側では、サイズ L と共に増加することから長距離秩序相 (強磁性相) があるのに対し、高温側では、サイズ L と共に減少することから長距離秩序相がないことが分かる。以上より、 ΔF の計算方法がうまく機能していることが分かった。

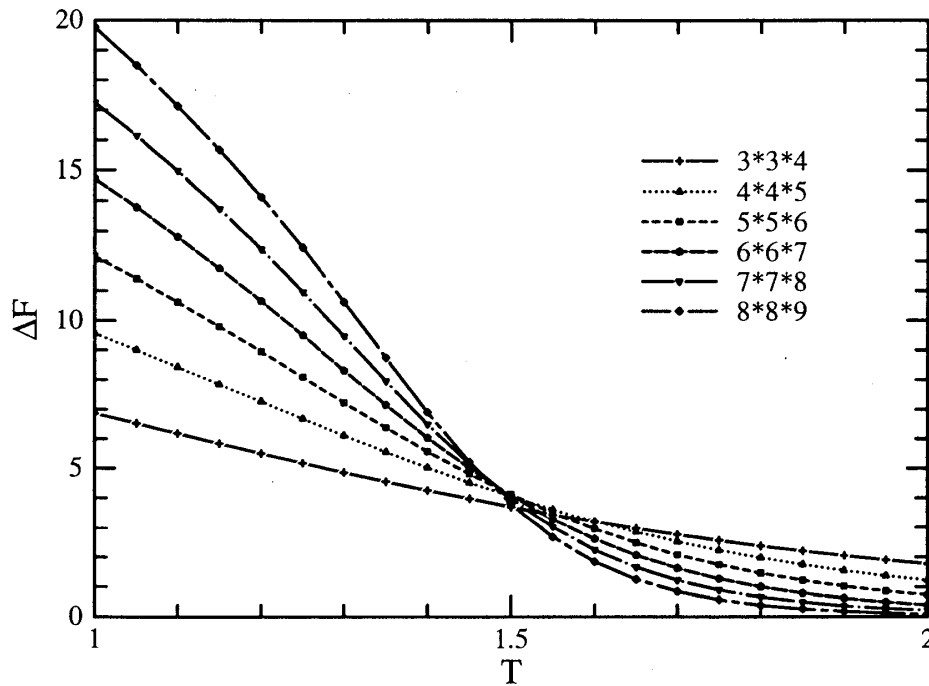


図 5.1: 3次元強磁性ハイゼンベルグ模型の界面自由エネルギー

5.3.2 ハイゼンベルグスピングラス模型への適用

図 5.2 に 3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の界面自由エネルギーの結果を示す。

はじめに計算の条件について述べる。基底状態のスピンの配列の求め方は第3章と同様である。また、 $T_0 = 2.0$ 、温度間隔 ΔT を $0.3 \leq T \leq 2.0$ では $\Delta T = 0.05$ 、 $0.1 \leq T \leq 0.3$ では $\Delta T = 0.01$ として、温度を下げながらモンテカルロ法で ΔE を計算し、式 (5.6)、(5.7) を用いて ΔF を求めた。モンテカルロステップ数は 30000 で、そのうち 10000 ステップ数を空回しに用いた。なお、サンプル数は約 1000 である。

今回の計算では転移温度の評価まで至ることができなかった。なぜならば、 ΔF にサイズ効果が見られるからである。言いかえると、サイズ L を大きくした時に L のグラフと $L+1$ のグラフの交差点が低温側へシフトするのが見られるからである。しかしながら、低温側と高温側で ΔF のサイズ依存性が異なることははっきりと見てとれる。これは有限温度でスピングラス相転移が起こる可能性があることを表している。

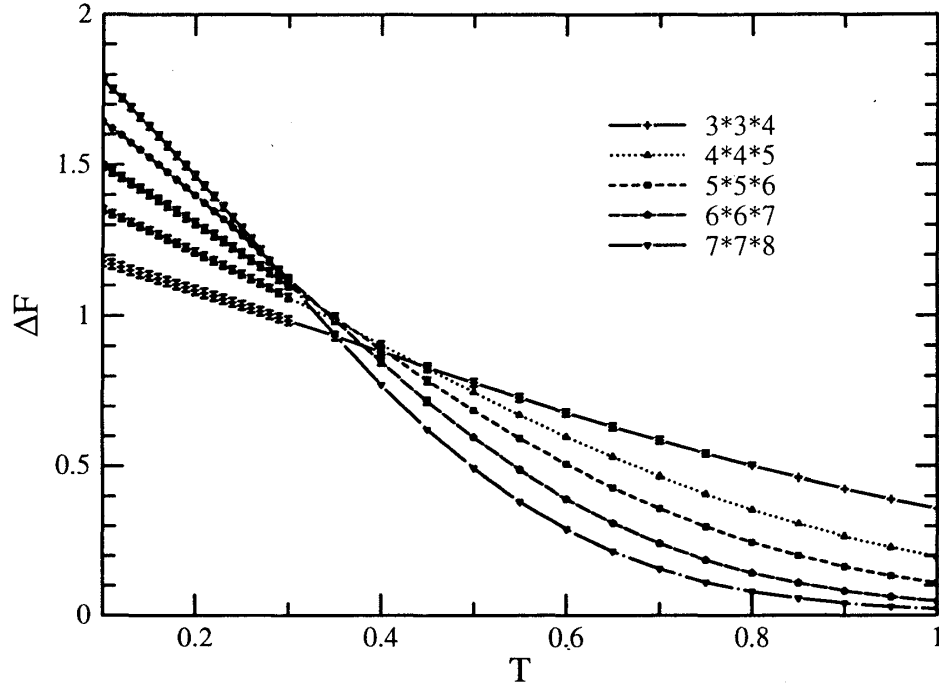


図 5.2: 3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の界面自由エネルギー

ここで、本章での計算結果を前章での計算結果と比較する。図 5.2 の $L=6$ と $L=7$ のグラフの交差点での温度 $T \sim 0.28$ は、前章で求めた転移温度 $T_{SG} \sim 0.25$ とほぼ近い値になっている。これを考慮に入れると、まだ ΔF にサイズ効果が見られるものの両者は矛盾しないものとする。よって、本章の計算は前章の計算結果を支持するものとする。

5.4 有限温度での計算IIのまとめ

本章では、3次元ハイゼンベルグスピングラス模型の転移温度を評価するために、別のアプローチとして界面自由エネルギーの評価を行った。その結果、低温側と高温側で明らかに ΔF の振る舞いが異なることが分かった。これは有限温度でスピングラス相転移が起こることを表している。なお、転移温度 T_{SG} については、 ΔF にサイズ効果が残っているためにきちんと評価することができなかった。しかし、 ΔF のサイズ依存性が入れ替わる温度と、前章の転移温度 T_{SG} は矛盾しないことが確認できた。したがって、 ΔF の計算結果は前章の計算結果を支持するものとする。

第6章 まとめ

3次元ハイゼンベルグスピングラス模型では、モンテカルロ法と界面エネルギー法の両方の解析から、有限温度でスピングラス相転移は起こらないと考えられてきた。しかし、これまでの研究にははっきりしない点があるために、この説が正しいものかどうか分からない。本研究ではこの模型における有意な「境界条件」を考え、界面エネルギー法をもとに相転移の有無について再検討を行った。

まず、基底状態の安定性について調べた。基底状態に角度 πx の「ひねり」を加えたときの歪みエネルギー $\Delta E(x)$ を評価したところ、サイズ L と共に増加した。 $L \gg 1$ での $\Delta E(x)$ の振る舞いをみるために、 $\Delta E(x)$ のサイズ依存性を調べた。その結果、驚くべきことに

$$\Delta E(x) \sim Ax^{1.85}L^{0.8} \quad (6.1)$$

でスケールされることが分かった。これは基底状態が安定な秩序相であることを示唆しており、従来の説とは異なる大変興味深い結果である。また、基底状態の性質について詳しく調べたところ、「ひねり」を加えた後のスピン構造が強磁性体模型のそれと類似していることが分かった。

次に、有限温度における基底状態の安定性について調べ、転移温度 T_{SG} の評価を行った。本研究では安定性をみるための物理量として、(1) 基底状態からのズレ、(2) 界面自由エネルギーを調べた。(1)、(2) のサイズ依存性を調べたところ、基底状態は低温側で安定に存在し、高温側で不安定になることが分かった。これは有限温度でスピングラス相転移が起こることを表している。(1)、(2) のサイズ依存が入れ替わる温度、すなわち、転移温度として $T_{SG} \sim 0.25J$ を得た。

本研究から $T_{SG} \sim 0.25J$ でスピングラス相転移が起こり、低温相は強磁性体模型と類似した安定な相であるという可能性を見出した。モンテカルロ法から、この模型の相転移の有無について詳しく調べられることが望まれる。

謝辞

本研究のテーマの選択から論文の書き方、発表の方法に至るまで、数多くの御指導、御助言をして下さった松原史卓教授に深く感謝いたします。また、白倉孝行助教授(岩手大)には、共同研究者として多くのことを学ばせていただきました。ここに深く感謝いたします。

本論文を審査するにあたり、審査員として有益な御助言を頂きました宮崎照宣教授、小池洋二教授、佐々木一夫助教授に深く感謝いたします。特に、佐々木一夫助教授には、研究室で大変お世話になりました。ここに深く感謝いたします。

本研究を行うにあたり、日頃から幅広い御助言を頂きました中村統太助手、鈴木伸夫助手に心より感謝いたします。また、修士1年次に、本研究に関して数多くの議論をして下さいました塩見治典氏に感謝いたします。最後に、いろいろな相談にのって下さいました研究室の佐藤博氏、金田亮氏、平山隆介氏に感謝いたします。

参考文献

- [1] 高山 一:スピングラス (パリティ物理学コース クローズアップ) (丸善、1991)
- [2] 小口 武彦:物理学最前線 **8**, 共立出版 (1984)
- [3] 西森 秀稔:物理学最前線 **21**, 共立出版 (1988)
- [4] 川島 直輝:固体物理 **31**, No.6, 557(1996)
- [5] 川村 光:固体物理 **34**, No.6, 485(1999)
- [6] V.Cannella and J.A.Mydosh: Phys.Rev.B **6**, 4220(1972)
- [7] L.E.Wenger and P.H.Keesom: Phys.Rev.B **11**, 3497(1975)
- [8] S.F.Edwards and P.W.Anderson: J.Phys.F **5**, 965(1975)
- [9] J.M.Kosterlitz and D.J.Thouless: J.Phys.C **6**, 1181(1973)
- [10] A.J.Bray and M.A.Moore: J.Phys.C **17**, L463(1984)
- [11] A.T.Ogielski and I.Morgenstern: Phys.Rev.Lett.**54**, 928(1985)
- [12] R.N.Bhatt and A.P.Young: Phys.Rev.B **37**, 5606(1987)
- [13] H.Kawamura: Phys.Rev.Lett.**68**, 3785(1992)
- [14] H.Kawamura: J.Phys.Soc.Jpn.**64**, 26(1995)
- [15] J.Villain: J.Phys.C **10**, 4793(1977)
- [16] J.-S.Wang and R.H.Swendsen: Physica.A **167**, 565(1990)
- [17] K.Fukushima and K.Nemoto: J.Phys.Soc.Jpn.**65**, 1604(1996)
- [18] O.Koseki and F.Matsubara: J.Phys.Soc.Jpn.**66**, 322(1997)
- [19] T.Shirakura and F.Matsubara: J.Phys.Soc.Jpn.**65**, 3138(1996)
- [20] N.Kawashima and A.P.Young: Phys.Rev B **53**, R484(1996)
- [21] K.Fukushima and H.Kawamura: cond-mat/0001127
- [22] H.Kawamura and K.Fukushima: cond-mat/0001126
- [23] Y.Ozeki: J.Phys.Soc.Jpn.**62**, 2641(1993)
- [24] F.Matsubara, T.Shirakura and M.Shiomi: Phys.Rev.B **58**, R11 821(1998)
- [25] J.M.Kosterlitz and N.Akino: Phys.Rev.Lett.**82**, 4094(1998)
- [26] M.H.Baber: *in Phase Transition and Critical Phenomena*,
eds. C.Domb and J.L.Lebowitz(Academic,New York,1983) Vol.8, p.146
- [27] H.Shioda and Y.Ueno: J.Phys.Soc.Jpn.**62**, 970(1993)