

Ising Spin Glass のダイナミクス of ゲージ変換

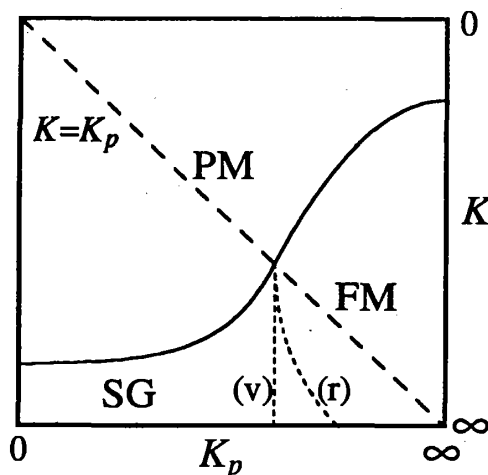
東工大理 尾関之康

1. はじめに

近年のスピングラス (SG) 理論の発展^{1,2)} は、Edwards-Anderson 型の短距離 Ising SG 模型に負うところが大きい。三次元以上の Ising SG の相図の構造は、概ね図のとおりである。ここで、FM-SG の境界は、リエントラント (r) か垂直 (v) になる事が、ゲージ変換の方法³⁾ で証明されている。さらに垂直性に関して、ランダムネスの分布が微妙に異なる模型群 (修正模型) を利用して、厳密ではないがもっともらしい議論⁴⁾ が得られているが、これは、他の方法⁵⁾ や Ising SG の実験結果⁶⁾ と一致した結論になっている。

ゲージ変換は、 $\pm J$ やガウス型の Ising SG を解析する強力な方法で、図中の破線上で比熱の上限やエネルギーを厳密に与える。多重臨界点を通るこの曲線は西森線³⁾ と呼ばれる。また、この方法は、様々な対称性を持つゲージグラス模型⁷⁾ にも拡張された。(いわゆるゲージグラスは $O(2)$ 対称性を持つが、ここでは拡張した意味で用いている。) このように様々な応用がなされている中で、ゲージ変換の方法が動的な系には適用された事はない。動力学は、「遅い緩和」に代表されるように、SG の最も重要な観点^{1,2)} の一つである。平均場理論では、⁸⁾ 凍結温度以下での非エルゴード性は、SG の本質を理解する上で欠く事ができない。一方、短距離系の動力学の研究⁹⁾ は、静的な性質の研究に比べると十分とは言えない状況である。

本解説では、Ising SG の動力学に関するゲージ変換を紹介する。ここでの目的は、(1) 静的なゲージ変換との整合性の確認、(2) 二種類の非平衡緩和過程 (飽和磁化状態と過冷却状態) が厳密に等価である事の証明、(3) FM - SG リエントラント転移の不在を示す事である。式導出の詳細は省略するので、文献 (10) を参照されたい。



図：Ising SG 模型の $K_p - K$ 面上における典型的な相図。ただし、 K_p はランダムネスを制御し、 $K = J/k_B T$ 。破線は西森線を表す。低温領域における可能な FM 相境界、垂直 (v) とリエントラント (r)、を点線で示す。

2. 動的 Ising 模型

ハミルトニアン $\mathcal{H} = J\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{S}, \{\omega\}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \omega_{ij} S_i S_j$ を考える。ただし、 $S_i, \omega_{ij} = \pm 1$ 、 $\mathbf{S} = (S_1, S_2, \dots, S_N)$ は全 N スピンの状態、 $\{\omega\}$ は全 N_B ボンドの状態を表す。格子の形や次元に制限は必要ないが、通常の立方格子を想定しても構わない。交換相互作用 $J_{ij} = J\omega_{ij}$ はランダム変数で、ガウス分布を扱う事も可能だが、ここでは $\pm J$ 分布について説明する。ランダム平均は、分布関数 $P(K_p, \{\omega\}) = e^{-K_p \tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{F}, \{\omega\})} / Y(K_p)$ によって、 $[\dots]_{K_p} = \sum_{\{\omega\}} \dots P(K_p, \{\omega\})$ と表す。ここで、 $\mathbf{F} = (+, +, \dots, +)$ は、すべてのスピンの上向き状態を表す。また、 $p = (1 + e^{-2K_p})^{-1}$ は $+J$ ボンドの濃度、 $Y = (2 \cosh K_p)^{N_B}$ である。 $K_p = 0$ と ∞ はそれぞれ、最もランダムな場合と非ランダムな場合に対応している。以下では簡単のため、スピン、ボンド、 K や K_p の依存性を各関数から省略する事がある。

Ising 系には固有の動力学が無いので、固定されたボンド配置でのマルコフ過程を考える。すなわち、状態密度の時間変化がマスター方程式¹¹⁾ $\frac{d}{dt} \rho_t(\mathbf{S}) = \sum_{\mathbf{S}'} W_{\mathbf{S}, \mathbf{S}'} \rho_t(\mathbf{S}')$ に従い、 $\rho_t(\mathbf{S}) = \sum_{\mathbf{S}'} (e^{t\mathbf{W}})_{\mathbf{S}, \mathbf{S}'} \rho_0(\mathbf{S}')$ で解が与えられる。行列 $W_{\mathbf{S}, \mathbf{S}'}$ は非負で、 $W_{\mathbf{S}, \mathbf{S}'} \rho_e(\mathbf{S}') = W_{\mathbf{S}', \mathbf{S}} \rho_e(\mathbf{S})$ と $\sum_{\mathbf{S}'} W_{\mathbf{S}, \mathbf{S}'} = 0$ の二つの条件を満たす。前者は、「詳細釣り合い」と呼ばれ、平衡分布 ρ_e の安定性を保証する。後者は、確率の保存に必要な式である。対称行列 $w_{\mathbf{S}, \mathbf{S}'}$ を用いて $W_{\mathbf{S}, \mathbf{S}'} = \frac{w_{\mathbf{S}, \mathbf{S}'}}{\rho_e(\mathbf{S})} - \delta_{\mathbf{S}, \mathbf{S}'} \sum_{\mathbf{S}''} \frac{w_{\mathbf{S}'', \mathbf{S}}}{\rho_e(\mathbf{S})}$ とすると、条件は自動的に満たされるが、 $w_{\mathbf{S}, \mathbf{S}'}$ は、動力学の詳細に依存し、例えば Metropolis 動力学¹²⁾ では $w_{\mathbf{S}, \mathbf{S}'} = w_0 \delta_1[\mathbf{S}, \mathbf{S}'] \rho_e(\mathbf{S})^{\theta(\Delta[\mathbf{S}, \mathbf{S}'])} \rho_e(\mathbf{S}')^{\theta(\Delta[\mathbf{S}', \mathbf{S}])}$ Glauber 動力学¹³⁾ では $w_{\mathbf{S}, \mathbf{S}'} = w_0 \delta_1[\mathbf{S}, \mathbf{S}'] \sqrt{\rho_e(\mathbf{S}) \rho_e(\mathbf{S}') / \cosh(\frac{K}{2} \Delta[\mathbf{S}, \mathbf{S}'])}$ となる。ここで、 $\delta_1[\mathbf{S}, \mathbf{S}'] \equiv \delta(1, \frac{1}{2} \sum_i 1 - S_i S'_i)$ は one-spin-flip 演算子、 $\Delta[\mathbf{S}, \mathbf{S}'] \equiv \tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{S}) - \tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{S}')$ はエネルギー差を表す関数である。二つの条件を満たす行列 $\mathbf{W}$ の固有値は、平衡分布に対応するゼロ固有値を除いて全て負の実数である事が証明され、¹¹⁾ 任意の初期状態から発展した状態は平衡分布に収束する。

系の熱力学的性質を調べるために、平衡自己相関関数 $[\langle S_i(0) S_i(t) \rangle_K]_{K_p}$ と非平衡残留磁化 $[\langle S_i(t) \rangle_K^F]_{K_p}$ を解析する。ただし、

$$\langle S_i(0) S_i(t) \rangle_K \equiv \sum_{\mathbf{S}, \mathbf{S}'} \rho_e(\mathbf{S}') (e^{t\mathbf{W}})_{\mathbf{S}, \mathbf{S}'} S_i S'_i \quad (1)$$

$$\langle S_i(t) \rangle_K^F \equiv \sum_{\mathbf{S}} (e^{t\mathbf{W}})_{\mathbf{S}, \mathbf{F}} S_i \quad (2)$$

である。ここで、 $\langle \dots \rangle_K$ は平衡状態における動的な平均を表し、静的な場合とは区別する。両者は同じ記号で表されているが、例えば $S_i(t)$ などの様に、変数に陽に時間依存が示されている事で区別できる。長時間の極限 ($t \rightarrow \infty$) では、 $\lim_{N \rightarrow \infty} [\langle S_i(0) S_i(t) \rangle_K]_{K_p}$ は、FM や SG 相で有限値を持つ Edwards-Anderson 型秩序変数^{1,2)} q_{EA} に収束する。式 (2) は、時刻 0 で完全な FM 状態 $\mathbf{F} = (+, +, \dots, +)$ にあった系が、時刻 t になったときのサイト磁化を表す。 $t \rightarrow \infty$ では、 $\lim_{N \rightarrow \infty} [\langle S_i(t) \rangle_K^F]_{K_p}$ は、自発磁化に収束する。さらに、同様の過程における非平衡エネルギー $[\langle \mathcal{H}(t) \rangle_K^F]_{K_p}$ も定義する事ができる。

3. 動力学のゲージ変換

S や $\{\omega\}$ の関数のゲージ変換は $U_{\{\sigma\}} : S_i \rightarrow S_i \sigma_i$ と $V_{\{\sigma\}} : \omega_{ij} \rightarrow \omega_{ij} \sigma_i \sigma_j$ で定義される。 $\{\sigma\} = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ は、任意の N スピン状態である。このときハミルトニアンは、 $U_{\{\sigma\}} V_{\{\sigma\}} \tilde{\mathcal{H}}(S, \{\omega\}) = \tilde{\mathcal{H}}(S, \{\omega\})$ の不変性を持ち、ボンド分布は $V_{\{\sigma\}} P(K_p, \{\omega\}) = e^{-K_p \tilde{\mathcal{H}}(\{\sigma\}, \{\omega\})} / Y(K_p)$ と変換される。⁷⁾ (スピン変数と温度が通常と異なる事に注意。)

上で定義した関数のゲージ変換を考察するためには、不変性

$$U_{\{\sigma\}} U'_{\{\sigma\}} V_{\{\sigma\}} (e^{t\mathbf{W}})_{S, S'} = (e^{t\mathbf{W}})_{S, S'}, \quad (3)$$

を示す必要がある。ここで、新たに S' に関する変換 $U'_{\{\sigma\}} : S'_i \rightarrow S'_i \sigma_i$ を導入した。詳細は文献 (10) に譲るが、式 (3) は、 $U_{\{\sigma\}} U'_{\{\sigma\}} V_{\{\sigma\}}$ に対する不変性を $w_{S, S'} \rightarrow W_{S, S'} \rightarrow (\mathbf{W}^n)_{S, S'}$ の順に証明して得られる。実際、上で説明した Metropolis や Glauber 動力学における $w_{S, S'}$ はこの変換に対して不変である。そこで、ここではそのような場合のみを考える事にする。

式 (3) 及び、 S と S' に関する和の不変性を考慮して、 $\langle S_i(0) S_i(t) \rangle_K$ が変換 $V_{\{\sigma\}}$ に対してゲージ不変である事が示される。我々は、「ゲージ不変」という言葉を $\{\omega\}$ の関数が $V_{\{\sigma\}}$ に対して不変であるときのみを使う。一方、 $\langle S_i(t) \rangle_K^F$ はゲージ不変ではなく、 $\{\omega\}$ に関する和の不変性 $\sum_{\{\omega\}} \dots = \sum_{\{\omega\}} V_{\{\sigma\}} \dots$ を利用して、

$$[\langle S_i(t) \rangle_K^F]_{K_p} = [\langle S_i(0) S_i(t) \rangle_K^{K_p}]_{K_p}, \quad (4)$$

が導かれる。ただし左辺は、 $\langle S_i(0) S_i(t) \rangle_K^{K_p} \equiv \sum_{S, S'} \rho_e(S', K_p) (e^{t\mathbf{W}})_{S, S'} S_i S'_i$ で定義される。関数 $\langle S_i(0) S_i(t) \rangle_K^{K_p}$ は、非平衡自己相関関数と呼ぶべきもので、平衡自己相関 (1) とは区別する。この関数では、 $t=0$ での温度は $J/k_B K_p$ だが、 $t>0$ では温度 $T = J/k_B K$ で時間発展する。同様に $[\langle \mathcal{H}(t) \rangle_K^F]_{K_p} = [\langle \mathcal{H}(t) \rangle_K^{K_p}]_{K_p}$ が導かれる。

4. 考察

始めに西森線 $K = K_p$ 上の振る舞いを考察する。このとき、非平衡緩和 $\langle \dots \rangle_K^{K_p}$ は、平衡緩和 $\langle \dots \rangle_{K_p}$ に一致する。式 (4) から、 $[\langle S_i(t) \rangle_K^F]_{K_p} = [\langle S_i(0) S_i(t) \rangle_K^{K_p}]_{K_p}$ が得られる。これは、FM 秩序と SG 秩序が等しい事を示しており、静的なゲージ変換の解析³⁾と同様に、西森線上に SG 相が存在しない事を証明している。初期状態 F の交換エネルギーは、 $-J \frac{\partial}{\partial K_p} \ln Y(K_p)$ であり、これは $K = K_p$ の場合の平衡エネルギー^{3,7)}に一致する。 $K = K_p$ の場合は、 $[\langle \mathcal{H}(t) \rangle_K^{K_p}]_{K_p}$ が時刻 t に依存せず、静的な平均値 $[\langle \mathcal{H}(t) \rangle_K^F]_{K_p} = -J \frac{\partial}{\partial K_p} \ln Y(K_p)$ に一致する。平衡エネルギーは温度の増加関数であるから、関数 $[\langle \mathcal{H}(t) \rangle_K^F]_{K_p}$ が西森線より高温で t の増加関数、低温で減少関数になる事が予想される。

次に、SG 相が存在するような非常にランダムネスが強く (K_p 小)、十分低温 (K 大) の領域を考察する。そのような領域では、 $[\langle S_i(0) S_i(t) \rangle_K^{K_p}]_{K_p}$ や $[\langle \mathcal{H}(t) \rangle_K^{K_p}]_{K_p}$ は、過冷却状態 (K_p で表される高温から K で表される低温への急冷状態) から発展した温度 $J/k_B K$ での非平衡緩和を記述する。(ここでは、過冷却状態の安定性については触れない。) 一方、 $[\langle S_i(t) \rangle_K^F]_{K_p}$ や $[\langle \mathcal{H}(t) \rangle_K^F]_{K_p}$ は、強磁場下から零磁場に置かれた系の残留磁化とエネルギーの非平衡緩和

を記述する。よって式(4)は、初期状態が「強磁場状態」と「過冷却状態」の二つの非平衡緩和が等価である事を証明している。

最後に非平衡自己相関関数 $[(S_i(0)S_i(t))_{K_p}^{K_p}]$ の漸近的振る舞いにを調べ、FM 相境界の垂直性を示す。このため次の二つの予想を提示する。このような相関関数の長時間極限は一種の秩序変数として振る舞うと予想されるので、(i)「その漸近的な振る舞いは、相図上における始点 (K_p, K_p) と終点 (K, K_p) での二つの相によって規定される。」修正模型^{4,7)}の解析によって、ある点 (K, K_p) におけるゲージ不変量の定量的振る舞いが、その点が FM 相に在るか否かに影響されない事が示される。関数 $(S_i(0)S_i(t))_{K_p}^{K_p}$ はゲージ不変なので (ii)「その漸近的振る舞いは、 (K_p, K_p) と (K, K_p) が FM 相に在るか否かによらない。」一方、式(4)より、この関数は FM 秩序変数に漸近する事が判っており、点 (K, K_p) が FM 相に在るか否かに依存している。一見するとこの事実は (ii) に矛盾するようであるが、西森線が多重臨界点を通り、それより低温で FM 相の境界が垂直であれば、両者は合い入れる事が判る。上記の二つの予想は、平均場理論で用いられた議論^{1,2,8)}を応用して確認する事ができる。¹⁰

結局、西森線上では、平衡緩和と非平衡緩和が等価であり、SG 相において、磁場中冷却された残留磁化緩和と過冷却状態からの動的構造因子の間は厳密な関係で結ばれ、FM 相境界の垂直性、すなわち、リエントラント転移の不在が示された。今後この方法は、磁化率等への適用や他の対称性を持つ模型への拡張が考えられる。

¹ K. Binder and A. P. Young, Rev. Mod. Phys. **58** 801 (1986).

² K. H. Fischer and J. A. Hertz, *Spin Glasses* (Cambridge University, 1991)

³ H. Nishimori, Prog. Theor. Phys. **66** 1169 (1981)

⁴ H. Kitatani, J. Phys. Soc. Jpn. **61** 4049 (1992).

⁵ Y. Ueno and Y. Ozeki, J. Stat. Phys. **64** 227 (1991).

⁶ D. H. Ryan, *Recent Progress in Random Magnets* ed. D. H. Ryan, (World Scientific, 1992) p.1.

⁷ Y. Ozeki and H. Nishimori, J. Phys. A. **26** 3399 (1993).

⁸ H. Sompolinsky and A. Zippelius, Phys. Rev. Lett. **47** 359 (1981).

⁹ A. T. Ogielski, Phys. Rev. B **32** 7384 (1985).

¹⁰ Y. Ozeki, 投稿中

¹¹ N. G. van Kampen, *Stochastic Process in Physics and Chemistry* (North-Holland, 1981).

¹² N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller and E. Teller, J. Chem. Phys. **21** 1087 (1953).

¹³ R. J. Glauber, J. Math. Phys. **4** 294 (1963).