

ランダム系の相転移

東大・工・伊藤伸泰 東工大・理・尾関之康

立方格子 $\pm J$ イジング模型の強磁性転移を非平衡緩和法により解析した。強磁性相互作用の密度 p が 1 と 3 重点 p_{mc} との間で静的指数は普遍的となることが確認され、3 次元ランダム固定点の値と一致した。動的指数は p に依存する振舞いがみられた。正方格子の p_{mc} は 0.8894(9) と評価され、西森・根本の予想 0.889972... と矛盾しない。

1 ランダム系の相転移と非平衡緩和法

理論的な物性研究では空間的に一様な模型に基づいた議論から出発することが多い。一方、現実の物質では格子の欠陥や不純物などの非一様性・乱雑性が不可避である。こうした乱雑性は相や相転移に対してどのような影響を及ぼすであろうか？不純物のごくわずかな存在など乱雑性の程度が小さい場合には一様な系とはほとんど違いがないので本質的には効かないだろうと思いがちだが、そうとも限らないのである。相互作用に乱雑性を入れた 2 次元イジング系の比熱が対数発散せずに滑らかに振舞うことを、1960 年代の終わりごろ McCoy と Wu とが示した [1]。続く 70 年代には一様な系の比熱の指数 α が正だと乱雑さにより指数が変化することが Harris により予想された [2]。この予想は、熱的なゆらぎと乱雑さの分布のゆらぎとを比較する現象論的な議論に基づいたもので、「Harris 基準」と呼ばれている。くりこみ法による理論解析により検証され、 α が正の系に乱雑さを導入すると、相転移は新しい固定点（ランダム固定点）により牛耳られるようになるとするシナリオが確立した [3, 4]。3 次元ランダム強磁性体の相関長、比熱、磁化の指数は、それぞれ $\nu \approx 0.67$ 、 $\alpha \approx -0.01$ 、 $\beta \approx 0.34$ と評価されている [4]。動的振舞いに関するくりこみ解析も試みられている [6]。さらにランダム系では $d\nu/2 \geq 1$ が成り立つことも証明された [5]。ここで d は系の次元を表わす。ハイパースケーリング関係式を使うと、この式は $\alpha \leq 0$ に他ならない。ランダム固定点はモンテカルロくりこみでも観察されている [7]。上記の 3 次元ランダム強磁性転移の指数は希釈強磁性体を使った実験でも検証されている [8]。計算機シミュレーションによる研究も希釈イジング系のモンテカルロシミュレーションによる解析を中心に進められてきた [9, 10, 11, 12, 13, 14]。初期の解析では、一様系との違いははっきりしなかったが [9]、まず乱雑性に依存する結果が観察され [10, 11]、ランダム固定点の予想する指数を確認するに至った [12]。他にランダム Ashkin-Teller 模型の解析もある [15]。

ランダム系の理論的研究では計算機シミュレーションが主要な解析手法の 1 つだが、相関時間の長さが障害となることが多い。適当な初期状態から始めたシミュレーションが平衡状態に緩和した後で物理量の平衡期待値を評価し、その期待値を解析することにより系の振舞いを探ろうとする「平衡状態法」が困難となるためである。このような場合、平衡状態への緩和の様子から系の振舞いを解析する「非平衡緩和法」が有効である事が多い。

平衡緩和過程に関する研究を非平衡緩和過程に推し進めたスケーリング理論 [16] 以来、非平衡緩和過程を動的モンテカルロくりこみ法による解析が 1980 年代を通じて進められた [17, 18]。また非平衡緩和過程に特有の指数 [19] や秩序相での様子 [20] の研究も興味深い。こうした研究の過程で非平衡緩和関数の漸近振舞いは予想以上に早い段階から明らかとなることが発見され [18]、平衡状態法の限界を非平衡緩和法により越える可能性が芽生えた。90 年代以降、非平衡緩和法はさまざまな問題に応用され続けている：強磁性転移のような基本的な問題 [21, 22, 23, 24, 25, 26]、ランダム系 [27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35]、XY 模型 [22, 36]、融解 [26, 37]、コンタクトプロセス [38]、量子系 [39] 等々。

本講演では、ランダム系の中でも特に重要なものであるスピングラス系、特に 3 次元 $\pm J$ イジング系 [40, 7, 41] の強磁性転移を非平衡緩和法により解析した結果を報告し、ランダム固定点シナリオと比較検討する事を目的とする（この問題の非平衡緩和法によるこれまでの研究が文献 [27, 28, 29, 30] にある）。

2 転移温度

相互作用エネルギー（温度因子 $\beta = 1/T$ も含めて）

$$-\beta E = \sum_{\langle i,j \rangle} K_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad \sigma_i = \pm 1 \quad J_{ij} = \begin{cases} K & \text{確率 } p \\ -K & \text{確率 } 1-p \end{cases} \quad (1)$$

をもつ $\pm J$ イジング模型を扱う。ここで i は立方格子の格子点を表わし、和 $\langle i, j \rangle$ は最近接格子点对に亘る。以下、温度は逆温度 $K = \beta J = J/T$ で表わす。 p ($0 \leq p \leq 1$) は強磁性相互作用の密度を表わす。

磁化の非平衡緩和関数 $f_m(t)$ の振舞いから、各温度 K 、密度 p での相を同定することができる。 $f_m(t)$ は

$$f_m(t) = \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i(t) \rangle \quad (2)$$

p	K_c	格子	$T_{\max.}$	$N_{\text{typ.}}$
1.00[26]	0.2216545(15)	$501 \times 501 \times 502$	2,000	200,000
0.95	0.249035(4)	$451 \times 451 \times 452$	5,000	1,000
0.90	0.285285(5)	$451 \times 451 \times 452$	20,000	6,000
0.85	0.337055(25)	$451 \times 451 \times 452$	5,000	2,500
0.80	0.4251(1)	$451 \times 451 \times 452$	5,000	4,000
0.78	0.4925(2)	$349 \times 349 \times 350$	50,000	11,000
$p_{\text{mc}} = 0.7673(3)[28]$	0.5966(8)	$161 \times 161 \times 162$	20,000	1,000

表1 立方格子 $\pm J$ イジング模型の強磁性転移逆温度 K_c の結果。「格子」、「 $T_{\max.}$ 」、「 $N_{\text{typ.}}$ 」の欄は、典型的な系の大きさ、最大ステップ数、サンプル数を示す。

で定義され、 $\sigma_i(t)$ はイジングスピン σ_i の時刻 t での値を、 N は格子点の数を表わす。 $\langle \cdot \rangle$ はモンテカルロ時間発展についての平均を表わす。初期条件としてすべてのスピンの状態を取ると便利である ($f_m(0) = 1$)。 $f_m(t)$ は常磁性相では指数関数的に0に、強磁性相では正の自発磁化の値に緩和する。Griffith 常磁性相では単純な指数関数よりはゆっくりとした緩和になるが [42]、その振幅は極めて小さく、何れにせよ遅緩和より速い。こうした振舞いは局所指数

$$\lambda_m(t) = -\frac{d \log f_m(t)}{d \log t}. \quad (3)$$

の振舞いから区別できる。局所指数を $1/t$ に対して描くと、 $1/t \rightarrow 0$ の極限で常磁性相では発散し、強磁性相では0に向かうからである。計算した限りでは常磁性相とも強磁性相とも判別しがたかった領域として、転移点を評価できる。

3次元 $\pm J$ イジング模型の強磁性転移点の結果を表1に示す。2副格子を使ったメトロポリス型遷移確率による1スピン更新のモンテカルロ法を使い、独立スピンコーディングと副格子ベクトル化を使ったプログラムを使った [43]。西森線 [40, 44] 上の転移密度を p_{mc} と書き表した。

2次元 $\pm J$ イジング模型の西森線上の転移密度の値も評価し、25,000MCS までで0.8894(9)を得た。以前の結果 [28] は750MCS までであった。この結果は西森・根本による予想 $p_{\text{mc}} = 0.889972 \dots$ [45] と矛盾しない。

3 指数

指数は、転移点における物理量の揺らぎの非平衡緩和関数の振舞いから評価することができる [23, 24, 25, 30]。そのためには $f_m(t)$ に加えて

$$f_{mm}(t) = N \left[\frac{\langle m(t)^2 \rangle}{\langle m(t) \rangle^2} - 1 \right], f_{me}(t) = N \left[\frac{\langle m(t)e(t) \rangle}{\langle m(t) \rangle \langle e(t) \rangle} - 1 \right], f_{ee}(t) = N \left[\frac{\langle e(t)^2 \rangle}{\langle e(t) \rangle^2} - 1 \right] \quad (4)$$

を使うのが便利である。ここで $e(t)$ は時刻 t でのエネルギーの値を表わす。局所指数

$$\lambda_I(t) = \frac{d \log f_I(t)}{d \log t} \quad (I = mm, me \text{ and } ee). \quad (5)$$

を使って、

$$z(t) = \frac{d}{\lambda_{mm}(t)}, \nu(t) = \frac{\lambda_{mm}(t)}{d \cdot \lambda_{me}(t)}, \beta(t) = \frac{\lambda_m(t)}{\lambda_{me}(t)} \text{ and } \alpha(t) = \frac{\lambda_{ee}(t)}{\lambda_{me}(t)}, \quad (6)$$

と定義すると、これらは $t \rightarrow \infty$ でそれぞれ、動的指数 z 、相関長・磁化・比熱の指数、 $\nu \cdot \beta \cdot \alpha$ に収束する。ただし指数が負となる場合や主要項と補正項とが近い指数を持つ場合には、正しい値を得ることは難しくなる。この系では比熱の α でこのような困難が顕著となった。

このようにして得られた結果を表2に示す。この結果から、 $p_{\text{mc}} < p < 1$ で静的指数は普遍的な値をもつこと、動的指数には密度依存性があるように見えることがわかる。静的指数の局所指数は、1,000MCS 程度までは密度依存性が顕著だが [30]、そのうち密度に依存しない値に向かう振舞いが見られた。これは一様な強磁性転移の固定点からランダム固定点へのクロスオーバーに対応した振舞いであろう。

p	z	ν	β	α	$N_{\text{typ.}}$
1.00[25]	2.055(10)	0.635(5)	0.325(5)	0.14(2)	1,000,000
0.90	2.16(4)	0.70(3)	0.36(1)	—	20,000
0.80	3.10(3)	0.69(2)	0.335(5)	—	9,000
0.78	3.75(5)	0.70(2)	0.34(1)	—	3,000
p_{mc}	5.1(1)	0.88(2)	0.41(1)	≤ 0	10,000

表2 3次元 $\pm J$ イジング模型の強磁性転移の指数。 $p=1$ の結果は $127 \times 127 \times 128$ の格子で1,000MCSまで、 $p < 1$ では $151 \times 151 \times 152$ の格子で2,000 MCSまで、 $N_{\text{typ.}}$ サンプル程度を平均した。

4 まとめ

$\pm J$ イジング模型の強磁性転移を非平衡緩和法により解析した。これまでの解析 [27, 28, 29] と比べ、さらに高い精度・確度で転移点を評価することができた。正方格子の p_{mc} の結果は西森・根本の予想と矛盾しない [45]。 $p_{\text{mc}} < p < 1$ で静的指数は $\nu = 0.70(2)$ および $\beta = 0.35(1)$ と評価され、3次元ランダム固定点の結果を確認した。一方、動的指数は密度に依存する振舞いを示した。 p_{mc} では一様系ともランダム固定点とも異なる普遍性を示した。

シミュレーションは統計数理研究所および東京大学物性研究所の日立 SR8000 で行った。本研究はネスレ科学振興会および文部科学省科学研究費補助金 (No. 13740235) による補助をうけて行われたものである。

参考文献

- [1] B. M. McCoy and T. T. Wu, Phys. Rev. Lett. **21** (1968) 549, Phys. Rev. **176** (1968) 631, Phys. Rev. **188** (1969) 982; B. M. McCoy, Phys. Rev. **188** (1969) 1014.
- [2] A. B. Harris, J. Phys. **C7** (1974) 1671.
- [3] A. B. Harris and T. C. Lubensky, Phys. Rev. Lett. **33** (1974) 1540, T. C. Lubensky, Phys. Rev. **B11** (1975) 3537, A. Aharony, Y. Imry, S.-K. Ma, *ibid.* **B13** (1976) 466, G. Grinstein and A. Luther, *ibid.* **B13** (1976) 1329, W. Kinzel and E. Domany, *ibid.* **B23** (1981) 3421, K. E. Newman and E. K. Riedel, *ibid.* **B25** (1982) 264, G. Jug, *ibid.* **B27** (1983) 609, K. Ohno and Y. Okabe, Phys. Rev. **B46** (1992) 5917 and A. Aharony, A. B. Harris and S. Wiseman, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 252.
- [4] I. O. Mayer, J. Phys. **A22** (1989) 2815.
- [5] J. T. Chayes, L. Chayes, D. S. Fisher and T. Spencer, Phys. Rev. Lett. **57** (1986) 2999.
- [6] G. Grinstein, S.-K. Ma and G. F. Mazenko, Phys. Rev. **B15** (1977) 258.
- [7] K. Hukushima, J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000) 631.
- [8] D. J. Birgeneau, A. R. King and V. Jaccarino, Phys. Rev. **B27** (1983) 6747, P. H. Barret, *ibid.* **B34** (1986) 3513, P. W. Mitchell, R. A. Cowley, H. Yoshizawa, P. Böni and Y. J. Uemura, *ibid.* **B34** (1986) 4719 and T. R. Thurston, C. J. Peters, R. J. Birgeneau and P. M. Horn, *ibid.* **B37** (1988) 9559.
- [9] D. P. Landau, Phys. Rev. **22** (1980) 2450.
- [10] J. Marro, A. Labarta and J. Tejada, Phys. Rev. **B34** (1986) 347.
- [11] H. O. Heuer, Phys. Rev. **B42** (1990) 6476.
- [12] H. O. Heuer, J. Phys. **A26** (1993) L333.
- [13] H. O. Heuer, J. Phys. **A26** (1993) L341.
- [14] H. G. Ballesters, L. A. Fernandez, V. Martin-Mayor, A. Munoz Sudupe, G. Parisi and J. J. Ruiz-Lorenzo, J. Phys. **A30** (1997) 8379, Nuclear Phys. **B512** (1998) 681 and Phys. Rev. **B58** (1998) 2740.
- [15] S. Wiseman and E. Domany, Phys. Rev. **E52** (1995) 3469 and **E58** (1998) 2938.
- [16] M. Suzuki, Phys. Lett. **A58** (1976) 435 and Prog. Theor. Phys. **58** (1977) 1142.
- [17] N. Jan, L. L. Moseley and D. Stauffer, J. Stat. Phys. **33** (1983) 1, C. Kalle, J. Phys. **A17** (1984) L801, J. Williams, *ibid.* **A18** (1985) 1781, M. Kikuchi and Y. Okabe, Phys. Rev. Lett. **55** (1985) 1220 and J. Phys. Soc. Jpn. **55** (1986) 1359.

- [18] N.Ito and M.Suzuki, Prog. Theor. Phys. **77** (1987) 1391.
- [19] D. A. Huse, Phys. Rev. B **40** (1989) 304
- [20] K. Humayan and A. J. Bray, J. Phys. **A24** (1991) 1915.
- [21] D. Stauffer, Physica A **186** (1992) 197, G. A. Kohring and D. Stauffer, Intern. J. Mod. Phys. **C3** (1992) 1165, J. Kertész and D. Stauffer, *ibid.* **C3** (1992) 1275, N. Ito, Physica **A192** (1993) 604, C. Munkel, D. W. Heermann, J. Adler, M. Gofman and D. Stauffer, *ibid.* **A193** (1993) 540, N. Ito, *ibid.* **A196** (1993) 591, Z. B. Li, U. Ritschel and B. Zheng, J. Phys. **A27** (1994) L837, Z. B. Li, L. Schülke and B. Zheng, Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 3396, P. Grassberger, Physica **A214** (1995) 547, U. Gropengiesser, *ibid.* **A215** (1995) 308, L. Schülke and B. Zheng, Phys. Lett. **A204** (1995) 295, D. Stauffer and R. Knecht, Intern. J. Mod. Phys. **C7** (1996) 893, J.-S. Wang, *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics XI*, ed. D. P. Landau, K. K. Mon and H.-B. Schüttler (Springer, Heidelberg, 1999) p. 125, A. Jaster, J. Mainville, L. Schülke and B. Zheng, J. Phys. **A32** (1999) 1395, B. Zheng, M. Schultz and S. Trimper, Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 1891, Y. Ozeki, N. Ito and K. Ogawa, Activity Report 1999 of the Supercomputer Center of ISSP (The University of Tokyo, 2000) 37, N. Ito and Y. Ozeki, Proc. of Asia Pacific Physics Conference ed. by Y.-D. Yao, H.-Y. Cheng, C.-S. Chang and S.-F. Lee (Academia Sinica, Taipei, Taiwan 2000, World Scientific, ISBN 981-02-4557-2) p. 277 and T. Shirahata and T. Nakamura, Phys. Rev. **B65** (2001) 024402.
- [22] N. Ito, *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics XI*, ed. D. P. Landau, K. K. Mon and H.-B. Schüttler (Springer, Heidelberg, 1999) p. 130.
- [23] N. Ito, K. Ogawa, K. Hukushima and Y. Ozeki, Prog. Theor. Phys. Suppl. **138** (2000) 555.
- [24] N. Ito, K. Hukushima, K. Ogawa and Y. Ozeki, J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000) 1931.
- [25] N. Ito and Y. Ozeki, *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics XIII*, ed. D. P. Landau, S. P. Lewis and H.-B. Schüttler (Springer-Verlag, Heidelberg, 2001) p.175.
- [26] N. Ito, S. Fukushima, H. Watanabe and Y. Ozeki, *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics XIV*, ed. D. P. Landau, S. P. Lewis and H.-B. Schüttler (Springer-Verlag, Heidelberg, 2002) p.27.
- [27] N. Ito, T. Matsuhisa and H. Kitatani, J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 1188.
- [28] Y. Ozeki and N. Ito, J. Phys **A31** (1998) 5451.
- [29] N. Ito, Y. Ozeki and H. Kitatani, J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999) 4547.
- [30] Y. Ozeki and N. Ito, Suppl. J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000) 193.
- [31] N. Ito and Y. Ozeki, *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics XV* ed. by D. P. Landau, S. P. Lewis and H. B. Schüttler (Springer-Verlag 2002).
- [32] H.-P. Ying and K. Harada, Phys. Rev. **E62** (2000) 174.
- [33] H. J. Luo, L. Schülke and B. Zheng, Phys. Rev. **E64** (2001) 036123.
- [34] Y. Ozeki and N. Ito, Phys. Rev. **B64** (2001) 024416.
- [35] Y. Ozeki, N. Ito and K. Ogawa, J. Phys. Soc. Jpn. **70** (2001) 3471.
- [36] K. Okano, L. Schülke, K. Yamagishi and B. Zheng, J. Phys. **A30** (1997) 4527 and **A32** (1999) 1395, H. J. Luo, M. Schulz, L. Schülke, S. Trimper and B. Zheng, Phys. Lett. **A250** (1998) 383, H. J. Luo, L. Schülke and B. Zheng, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 180, L. M. Jensen, B. J. Kim and P. Minnhagen, PRB **61** (2000) 15412, H.-C. Chu and G. A. Williams, PRL **86** (2001) 2585 and Y. Ozeki and N. Ito, "Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics XV" ed. D. P. Landau, S. P. Lewis and H. B. Schüttler (Springer-Verlag, 2002).
- [37] H. Watanabe, S. Yukawa, Y. Ozeki and N. Ito, to appear in Phys. Rev. **E**.
- [38] R. Dickman, Phys. Rev. **E60** (1999) R2441.
- [39] Y. Nonomura, J. Phys. **A31** (1998) 7939 and J. Phys. Soc. Jpn. **67** (1998) 5.
- [40] Y. Ozeki and H. Nishimori, J. Phys. Soc. Jpn. **56** (1987) 1568, 2992 and 3269.
- [41] N. Ito, *Computational Approaches in Condensed Matter Physics* ed. by S. Miyashita, M. Imada and H. Takayama (Springer-Verlag, 1992) p.236.
- [42] R. B. Griffiths, Phys. Rev. Lett. **23** (1969) 17 and A. J. Bray, *ibid.* **59** (1987) 586.
- [43] N.Ito and Y.Kanada, Supercomputer **5** No. 3 (1988) 31, **7** No. 1 (1990) 29, N. Ito and Y. Kanada, Proceedings of Supercomputing '90 (IEEE Computer Society Press, 1990, Los Alamitos) 753 and N. Kawashima, N. Ito and Y. Kanada, Intern. J. Mod. Phys. **C4** (1993) 525.
- [44] H. Nishimori, Prog. Theor. Phys. **66** (1981) 1169, **76** (1986) 305, J. Phys. Soc. Jpn. **55** (1986) 3305. and R. R. P. Singh, Phys. Rev. Lett. **67** (1991) 899.
- [45] H. Nishimori and K. Nemoto, J. Phys. Soc. Jpn. **71** (2002) 1198.