

サイトランダムスピングラス模型の対称性と相転移

東工大理 尾関之康・野々村禎彦

スピングラス (SG) 理論は Edwards と Anderson(EA)[1] 以来、ボンドランダム模型 (EA 模型) を中心に研究されてきた。[2] 平均場レベルでは、位相空間の多谷構造に代表される理論的描像が確立されたが、この系の上部臨界次元は高く、現実の物理系ではこの描像は修正されることが予想される。SG 転移は三次元 Ising 模型では確認されているが、二次元 Ising 模型 [3] や三次元 Heisenberg 模型 [4,5] では否定されており、実験で見られる SG 転移は、理論的には Ising SG へのクロスオーバー [4,5] や Ising 的カイラル SG[6] に誘起されたものとして説明されている。最近、白倉と松原は、二次元と三次元のサイトランダム Ising 模型を数値的に研究し、二次元において SG 相の存在を示唆する結果を得た。[7] この性質は EA 模型とは大きく異なっている。ほとんどの SG 物質はサイトランダム型相互作用で表現されるので、この模型は、 $\pm J$ 模型などの EA 模型に比べて SG 物質に近く、ボンドランダムネスを基礎とした伝統的な SG 理論における問題点や困難を明らかにする契機になり得ると考えられる。この解説では、サイトランダム模型の特徴的な振る舞いを数値計算、解析理論の両面で紹介する。この模型は、 $\pm J$ 模型と異なりゲージ対称性を持たなが、[8,9] 我々は別の対称性を導き、これによって相図の構造に制限を加える。また、二次元基底状態の数値計算によって、強磁性 (FM) や反強磁性 (AF) の特徴的な秩序を見いだした。これらの結果は、SG に加え FM や AF 秩序の物理的解釈を与える。

ここで扱うサイトランダム模型は二種類の磁性イオン (A,B) から成り、これらが各サイトを $c:1-c$ の濃度比で占める。 d 次元格子上の最近接相互作用 Ising スピン系

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j \quad (S_i = \pm 1), \quad (1)$$

を考えよう。サイト i と j の間の交換相互作用は両端のイオンの種類で決まり、両方 B イオンならば $J_{ij} = -J$ 、それ以外なら $J_{ij} = +J$ と選ぶ。数学的には、各サイトにイオンの種類を表すランダム変数 ω_i を割り当て、 $\omega_i = 1$ と $\omega_i = -1$ をそれぞれ A イオンと B イオンとみなす。このとき、交換相互作用は

$$J_{ij} = \frac{J}{2}(1 + \omega_i + \omega_j - \omega_i \omega_j) \quad (2)$$

で与えられ、イオン配置による平均は $[\cdots]_c = \sum_{\{\omega_i = \pm 1\}} \cdots \prod_i P_c(\omega_i)$ で表される。ここで、

$$P_c(\omega_i) = c\delta(\omega_i - 1) + (1 - c)\delta(\omega_i + 1) \quad (3)$$

は、 ω_i の分布関数である。濃度 c が 1 (や 0) に非常に近いとき、二次元以上では FM (や AF) 相が低温に現れる。中間濃度 ($c \sim 1/2$) では、次元が上がれば SG 相が現れると予想される。

ある特定のプラケットがフラストレートする確率は $p_{FR} = 4c^2(1-c)^2$ である。フラストレーションの位置は独立ではないが、この式がフラストレーション濃度を非常に良く近似していることが、数値計算によって少なくとも二次元では確認された。同様に、ある特定のボンドが

$J_{ij} = +J$ になる確率は $p = 2c - c^2$ で表される。この式も $+J$ ボンドの濃度を非常に良く近似している。イオン濃度が $c = 1/2$ のとき p は $1/2$ より大きく、 $1/2$ になるのは $c = 1 - 1/\sqrt{2} \approx 0.293$ のときであることに注意する。これは、サイトランダム模型が $c = 1/2$ についての対称性を持たないことを示唆している。

$\pm J$ Ising 模型の相図は、FM 相と AF 相を同一視すれば $p = 1/2$ について対称である。これはハミルトニアンが、全てのサイトとボンドに関する連続した変換 $S_i \rightarrow (-1)^i S_i$ と $J_{ij} \rightarrow -J_{ij}$ に対して不変であることに起因する。($(-1)^i$ は、片方の副格子に負符号を与える。) この不変性によって、ボンド濃度 p での FM 相関関数は、 $1 - p$ における AF 相関関数に一致し、SG 相関が $p \leftrightarrow 1 - p$ の変換で不変であることが示される。

サイトランダム模型では、ハミルトニアンは全てのサイトに関する連続した三つの変換 $S_i \rightarrow (-1)^i S_i$, $S_i \rightarrow \omega_i S_i$, $\omega_i \rightarrow -\omega_i$ に対して不変である。(順序によらない。) 最初の変換は副格子反転を、次は B イオン上のスピン反転を、最後は A イオンと B イオンの入れ替えを表す。最後の変換では、イオン分布関数が $P_c(\omega)$ から $P_{1-c}(\omega)$ に変換されることに注意する。この不変性によって、自由エネルギーや SG 相関関数 $[\langle S_i S_j \rangle^2]_c$ が $c \leftrightarrow 1 - c$ の変換で不変であることが示される。一方、FM 相関関数 $[\langle S_i S_j \rangle]_c$ や AF 相関関数 $(-1)^{i-j} [\langle S_i S_j \rangle]_{1-c}$ にはこのような対称性は無く、実際

$$[\langle S_i S_j \rangle]_c = (-1)^{i-j} [\langle S_i S_j \rangle \omega_i \omega_j]_{1-c} \quad (4)$$

が成立する。SG 秩序変数は FM 相や AF 相でも消えないので、上述の対称性は、常磁性相の境界が $c = 1/2$ について対称で、FM 相と AF 相の領域が対称的でないときはその余分の領域が必ず SG 相になることを意味する。(図 1)

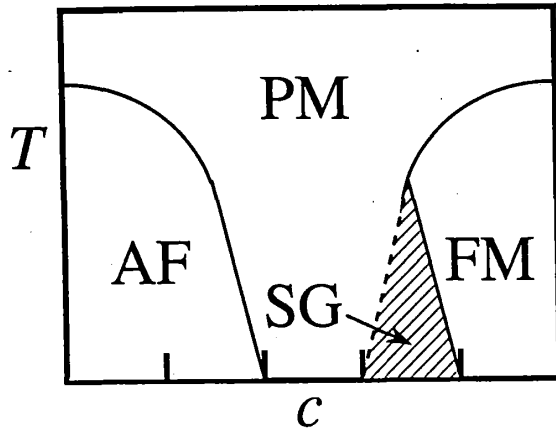


図 1:
FM 相と AF 相が非対称であることを仮定したサイトランダム模型の相図の模式的な例。斜線部分は、FM 相の外に在り、対応する AF 相が存在する余剰部分。この領域は、SG 相が必ず存在する。

以上の議論では、実際の相図の形を決めることはできない。そこで、臨界濃度を評価するために、数値的転送行列法 [11,12] によって、二次元の基底状態における defect energy を計算する。三種類の境界条件を用いる。すなわち、FM 秩序に共役な一様境界、AF 秩序に共役なスタガード境界、任意の秩序に共役なレプリカ境界 [13] である。各濃度では、有効剛性指数 $a_U(c)$, $a_S(c)$, $a_R(c)$ を defect energy $W_{U,L}(c)$, $W_{S,L}(c)$ and $W_{R,L}(c)$ から $W_L(c) \sim L^a(c)$ の漸近形で計算する。添え字 U, S, R は境界条件を区別し、 L は格子の幅を表す。各剛性指数は秩序相では $a > 0$ 、臨界点では $a = 0$ 、無秩序相では $a < 0$ と振る舞うことが予想され、[11,12] a_U , a_S , a_R の符号でその濃度に存在する相が特定される。計算は $L = 6, 8, 10, 12, 14, 16$ の正方格子につ

いて行った。各濃度では、 W_L がランダムに選ばれた 10000 – 70000 サンプルのイオン配置について平均される。剛性指数の濃度依存性を図 2 に示す。図から臨界濃度が $c_f \approx 0.63 \pm 0.01$, $c_a \approx 0.41 \pm 0.01$ と決定される。 $a_R(c)$ は全ての濃度領域で正であるから、 $0.41 < c < 0.63$ における SG 存在の可能性を得たことになる。(SG 相であるか否かはダイナミクスまで見ないと結論できないが、ここでの振る舞いは静的な意味では十分である。)

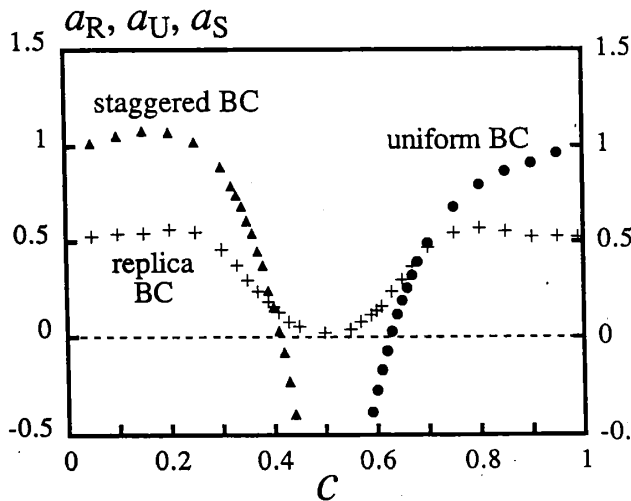


図 2:
濃度 c の関数としてプロットした、Stiffness exponents a_R , a_U and a_S 。これらの指数は、幅 $L = 6 \sim 16$ における、レプリカ、一様、スタガードの各境界条件で計算されている。

厳密に示したように、 $a_R(c)$ は $c = 1/2$ について対称になっている。一方、FM 相と AF 相の臨界濃度は微妙に非対称である。二つの相の濃度幅の違い 0.04 ± 0.02 は、僅かだが統計誤差に比べれば大きい。これは、 $0.59 < c < 0.63$ における SG 相の存在を示唆しており、 a_R の振る舞いとも矛盾しない。一般に、SG 相関の有限サイズ効果は FM 相関や AF 相関に比べて大きいので、数値的に得られた SG 相関等によって SG 相の存在を議論するときは慎重になる必要があるが、 a_U と a_S の非対称性から得られたここでの結論はより正確であると期待される。以上より、我々は二次元 Ising 系における SG 相の存在を示唆する結果を伝統的手段と新しい基準の両方で導いた。しかし、この点に関して我々はより慎重になるべきである。なぜなら、系の大きさはこのように微妙な問題を解決するには小さく、有限サイズ効果を把握しているとは言えないからである。

数値的に得られた FM 相や AF 相の領域は $\pm J$ マップのそれに比べて拡大されている。特に、AF 相は $c_a \approx 0.41$ まで存在するが、ここは $-J$ ボンドが $+J$ ボンドよりも少ない濃度である。臨界点 $c \approx 0.41$ において、B イオンの濃度 (≈ 0.59) は二次元のサイト過程の浸透閾値 0.592745[14] に非常に近い。 $-J$ ボンドは B イオン間のみ存在するので、 $c < 0.407255 = (1 - 0.592745)$ において、B イオンの反強磁性的無限浸透クラスターが残りの強磁性ボンドに囲まれている。残りのボンドからの影響を無視できるとすれば、サイト希釈系と等価になり、基底状態で AF 相が $0 \leq c \leq 0.407255$ に存在する。この「浸透クラスター描像」を適用する場合、考慮すべきはフラストレーションによるクラスター間の相互作用であるが(サイトランダム系では、フラストレーションはクラスター内には存在せず、クラスター間のみ存在する)、この効果は以下の理由でそれほど利かなくと考えられる。 $\pm J$ 模型では、FM 秩序が破壊されるのは、ボンド過程の浸透閾値(二次元正方格子では $1/2$)より遥かに速い $p = 0.89$ である。我々の系における

フラストレーションの強さは、 $\pm J$ 模型に比べると弱い。実際、 $p_{FR} \approx 4c^2(1-c)^2$ であるから、フラストレートしたプラケットの最大濃度は、 $c = 1/2$ における $p_{FR} = 1/4$ だが、 $\pm J$ 模型では $p = 1/2$ における $p_{FR} = 1/2$ at $p = 1/2$ である。 $\pm J$ 模型では、臨界点 ($p = 0.89$ や $p = 0.11$) においてさえ $p_{FR} = 0.317$ であり、我々の系の最大値 $p_{FR} = 1/4$ よりも大きい。よって、我々の系のフラストレーション濃度は、フラストレーションによって AF 秩序が破壊される $\pm J$ 模型の AF 臨界点での値に比べて小さい。

上の議論は、AF 領域の結果から導いたもので、FM 領域 ($c \approx 0.63$) に完全に当てはまるわけではないが、FM 相の濃度領域は $\pm J$ に比べればやはり拡大している ($c \approx 0.67$)。FM 領域と AF 領域の差の理由は明かではなく、将来解決すべき課題である。

二次元では、A イオンの無限クラスターが存在する濃度領域と、B イオンのそれに重なりは無い。三次元では、立方格子の浸透閾値が 0.3117,[14] であり、 $0.3117 < c < 0.6883$ の領域に、A イオンと B イオンの無限クラスターが共存する。この領域では、A イオンの FM 秩序と B イオンの AF 秩序が強く競合し、その結果 SG 相が現れるのではないかと考えられる。よって、仮に二次元に SG 相が存在するとしても、三次元の SG 相とは質的に異なるだろう。

サイトランダム系の熱力学的性質や臨界現象は、従来の SG 理論の基礎であったボンドランダム系とは極めて異なる。この方向での更なる研究が必要だと考える。

References

- [1] S. F. Edwards and P. W. Anderson, J. Phys. F5 (1975) 965.
- [2] K. Binder and A. P. Young, Rev. Mod. Phys. 58 (1986) 801.
- [3] R. N. Bhatt and A. P. Young, Phys. Rev. Lett. 54 (1985) 924; A. T. Ogielski and I. Morgenstern, Phys. Rev. Lett. 54 (1985) 928; R. R. P. Singh and S. Chakravarty, Phys. Rev. Lett. 57 (1986) 245.
- [4] J. A. Olive, A. P. Young and D. Sherrington, Phys. Rev. B34, (1986) 6341.
- [5] F. Matsubara, T. Iyota and S. Inawashiro, Phys. Rev. Lett. 67 (1991) 1458.
- [6] H. Kawamura, J. Phys. Soc. Jpn. 61 (1992) 1299.
- [7] T. Shirakura, F. Matsubara and K. Shindo, Sci. Rep. RITU A40 (1994) 267.
- [8] H. Nishimori, Prog. Theor. Phys. 66 (1981) 1169.
- [9] Y. Ozeki and H. Nishimori, J. Phys. A. 26 (1993) 3399.
- [10] Y. Ozeki and H. Nishimori, J. Phys. Soc. Jpn. 56 (1987) 3265.
- [11] Y. Ozeki, J. Phys. Soc. Jpn. 59 (1990) 3531.
- [12] Y. Ueno and Y. Ozeki, J. Stat. Phys. 64 (1991) 227.
- [13] Y. Ozeki, J. Phys. Soc. Jpn. 62 (1993) 2641.
- [14] D. Stauffer, *Introduction to Percolation Theory* (Taylor & Francis, London, 1985)