# 数値計算による3次元ハイゼンベルグスピングラス模型のカイラルグラス相転移の解析

東大物性研　　福島 孝治
阪大理　　川村 光

## 1　はじめに

スピングラス系での下部臨界次元について、イジング系は2と3の間に、ハイゼンベルグ模型等のベクトルスピン系は3以上であることが、理論的・数値計算から示唆されている。つまり、現実の3次元では有限温度スピングラス相転移を起こすのは、イジングスピングラス系だけということになる。一方で、実験的には様々な種類のスピングラス磁性体においてスピングラス平衡相転移が確認されており、また希薄磁性体のグループは磁気的異方性が非常に弱く、ほぼ等方的なハイゼンベルグ系が第ゼロ近似的には成り立つと考えられている。つまり、理論的に起こらないとされているハイゼンベルグ系でのスピングラス相転移が実験的に観測されているということになる。

この矛盾点に対して、これまでは弱いとされている異方性が系にイジング的な振舞を導き、実験的に観測されている相転移はイジングスピングラス型の相転移であると解釈されてきた。しかしながら、通常弱い異方性があるときに期待されるクロスオーバー現象が観測されないことや臨界特性がイジングスピングラスのそれと一致しないことなど、従来説は必ずしもな満足な解釈を与えていない。これに対して、最近川村によって提唱されてきたカイラリティ機構と呼ばれるもう一つのシナリオに注目する。カイラリティ機構の詳しい内容は、文献[1]を参照して頂くことにして、ここではカイラリティ機構に対する我々の数値計算による研究を最近をまとめることにする。

## 2　カイラリティ機構の検証

カイラリティ機構はスピングラス実験事実を矛盾なく説明する一つの魅力的なシナリオである。特に異方性の大きさを変えたときの相図の様子は従来説とに顕著な違いがあるが、実験的に異方性の大きさをコントロールしたり、カイラルグラス自身を直接観測することは大変困難である。我々の用いる計算物理的手法は、これらが容易に実現できるという点でこの問題に対する最も適したアプローチであると言える。また、カイラリティ機構が正しい場合に期待されるカイラルグラス相やそれに伴う臨界現象、イジングスピングラスとの相違点等を明らかにすることは理論的に興味のある問題であり、ここでも計算物理の方法は強力な手法となる。本研究では、我々は古典ハイゼンベルグスピングラス模型の性質をモンテカルロ法を用いて詳しく調べた。一般にスピングラス系は、実験でも観測されるように遅い緩和現象を示し、そのために熱平衡状態をモンテカルロ法で実現することが難しいが、交換法と呼ばれる新しい方法を用いることでこれまでの研究よりもより低温での計算が可能になった。

### 2.1　カイラルグラス相の存在

まず、図1に熱平衡状態で計算したスピン (左図) とカイラリティ (右図) の自己相関関数、

$$C_s(t) = \frac{1}{N}\sum_i \left[\langle \vec{S}_i(0)\cdot\vec{S}_j(t)\rangle\right], \quad C_\chi(t) = \frac{1}{N}\sum_i \left[\langle \chi_i(0)\chi_j(t)\rangle\right], \tag{1}$$

の時間発展を示す。交換法によって実現した熱平衡状態を初期条件として、通常のモンテカルロ法を用いて計算した。 これらの量は長時間極限で Edwards-Anderson の秩序変数になると期待されているので、高温相ではゼロになるはずである。実際にスピン自己相関関数 (左) は、観測した全ての温度で減少傾向を示し、この温度範囲ではスピングラス転移は起こっていないことがわかる。一方、カイラリティ自己相関関数 (右) は、ある温度を境に、低温側で下に凸の傾向が確認される。ちょうどその境界の温度 ($\sim 0.16J$) では巾的に緩和しており、転移点直上において期待される振舞である。すなわち、転移温度 $0.16J$ において、常磁性相からスピングラス秩序を伴わないカイラルグラス相への相転移が起きていることが示唆される。

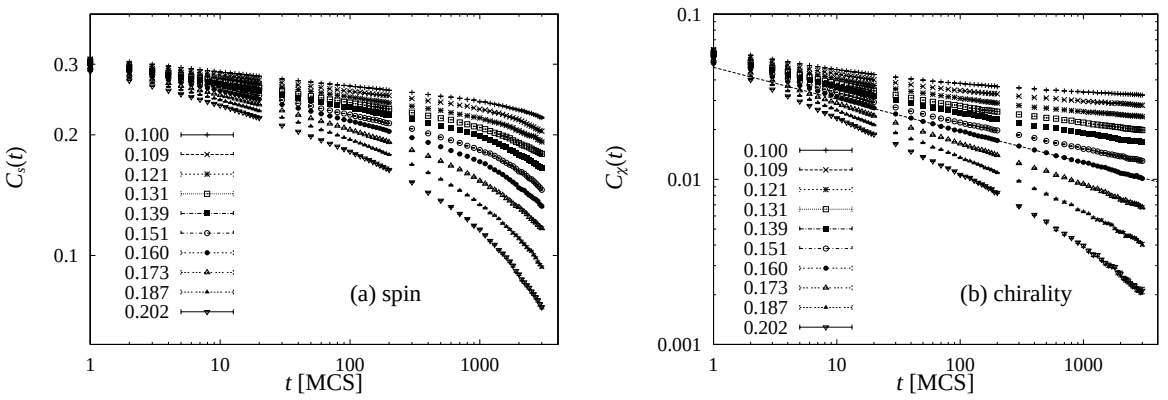


図 1: 異方性のないガウシアンハイゼンベルグ模型におけるスピン自己相関関数 (右) とカイラリティ自己相関関数。

### 2.2　カイラルグラス転移の臨界指数

次にカイラルグラス相転移の臨界現象、特に臨界指数が興味のあるところである。対称性の観点からイジングスピングラスと同じ臨界指数になることが想像されるが、調べてみるとそう単純ではなかった。臨界指数の決定の詳細は原論文 [2, 3] に譲ることにして、ここではその値について議論する。表1に我々の評価した指数とイジングスピングラスのものと対応する典型的な実験値をまとめた。すでに指摘されていたことであるが、イジングスピングラスの数値計算による値と典型的なイジングスピングラス物質である $\mathrm{FeMnTiO_3}$ の値はよく一致している。一方で、我々のカイラルグラスの指数はそれらとは有意に異なり、むしろ $\mathrm{CuMn}$ 等のハイゼンベルグスピングラス物質のそれに近いことがわかる。カイラリティ機構によれば、現実のハイゼンベルグスピングラスの性質はカイラルグラスのそれを見ていることになり、この結果は期待されるところである。ここでも、異方性の強い極限であるイジングスピングラス模型に頼っていた従来説では説明できなかった臨界指数の問題が、カイラルグラスの観点から自然に説明がつくことがわかる。

| | Simulations | | Experiments | |
|---|---|---|---|---|
| | Ising SG (EA model) | Heisenberg SG (Chiral Glass) | Ising SG ($Fe_{0.5}Mn_{0.5}TiO_3$) | Heisenberg SG CuMn & AgMn |
| $\beta$ | $\sim 0.77$ | $\sim 1.1$ | $\sim 0.54$ | 1.0(1) |
| $\gamma$ | 4.1(5) | $\sim 1.5$ | 4.0(3) | 2.2(1) |
| $\nu$ | 1.8(2) | $\sim 1.2$ | $\sim 1.7$ | $\sim 1.4$ |
| $\eta$ | $-0.26(4)$ | $\sim 0.8$ | $\sim -0.35$ | $\sim 0.4$ |

表 1: 実験および数値計算によって得られたスピングラス、カイラルグラス相転移の典型的な臨界指数

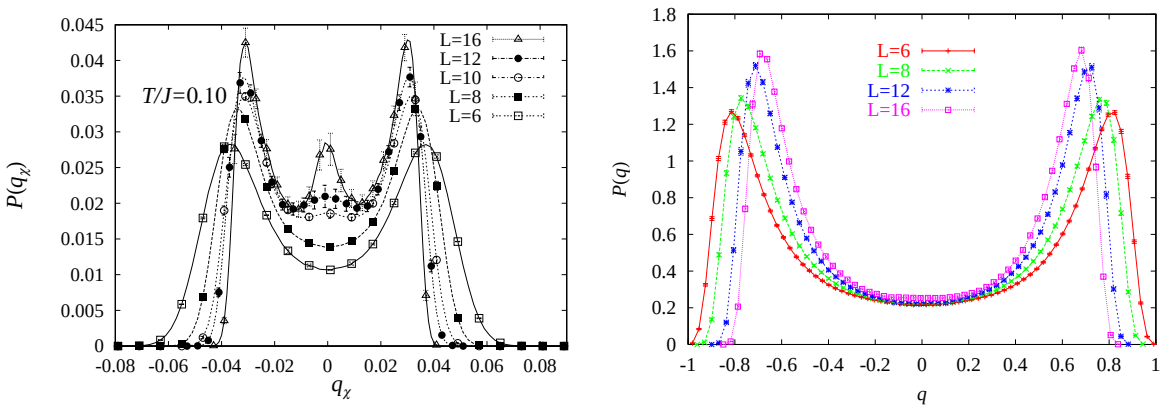


図 2: 秩序変数分布関数：左がハイゼンベルグ模型におけるカイラルグラス秩序分布関数、右がイジングスピングラス模型のスピングラス分布関数

## 2.3 カイラルグラス相の性質

秩序変数の分布関数は低温相の性質を表す特徴的な物理量であり、特にスピングラス理論では重要な役割をしており、レプリカ対称性の破れと直接関係する。図 2に低温相におけるカイラルグラス秩序の分布関数を示した。右図は、比較のためにイジングスピングラスの低温相における分布関数である。これらは有限サイズ系での計算であり、ここから熱力学極限での振舞を断定することはできないが、カイラルグラス分布関数には顕著な中央ピークがあることは確認できる。これはイジングスピングラス系ではこれまでに観測されていない性質である。中央ピークの存在は一段階レプリカ対称性の破れに特徴的であるが、その物理的起源は現在のところ不明である。ここで我々の主張したいことは、臨界現象だけでなく、低温相の性質もやはりイジングスピングラス的ではないことである。

## 2.4 異方性の効果：スピン–カイラリティ混成

さて、ここまでは異方性のない系について、カイラルグラス相が存在することを我々の数値計算を通して見てきたが、カイラリティ機構のもう一つの自明でない仮定は、異方性が入ることによってスピンとカイラリティの自由度が混成し、スピン変数の様子にカイラルグラスの性質が反映されるとすることである。我々は異方性のある系に対して、2.1章で示した自己相関関数を求めた。図 3に示すとおり、異方性の効果によって、スピン自己相関関数もカイラリティ自己相関関数と同様に相転移の傾向を示している。カイラリティ自己相関関数の振舞は異方性の効果をほとん

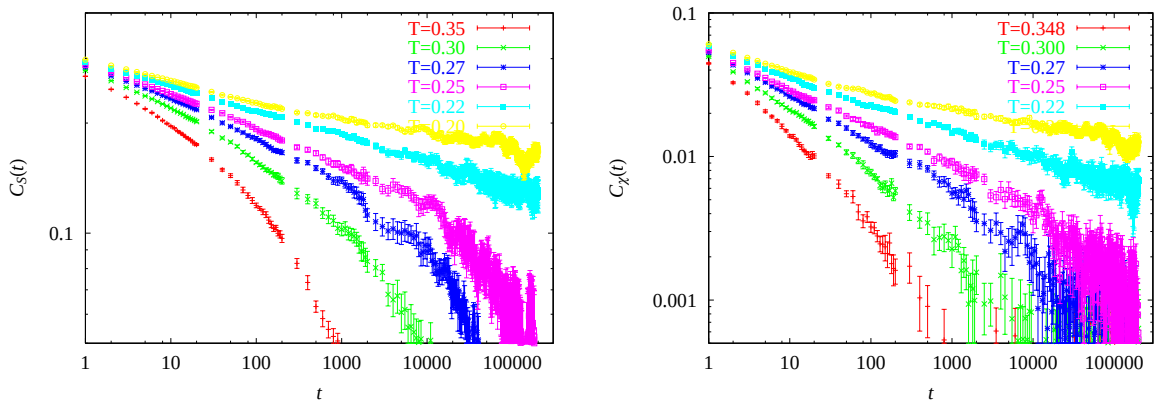


図 3: 異方性のある $\pm J$ ハイセンベルグスピングラス模型におけるスピン自己相 関関数 (右) とカイリティ自己相関関数。

ど受けていないことから、これはスピン–カイラリティ混成の帰結と考えることができる。

また、スピン変数の観測だけから臨界指数を決定することは現在進行中の課題であるが、弱い異方性のある系で松原らの評価した臨界指数 [4] は、我々が異方性がない系で評価したカイラルグラス転移の指数とよく一致しており、これは異方性の効果でスピン–カイラリティ混成が実現していることを示唆している。

## 3 まとめ

現実に観測されるスピングラス相転移描像のひとつであるカイラリティ機構に着目し、数値計算によってその幾つかの仮定、すなわち異方性のない系でのスピングラス秩序を伴わないカイラルグラス相の存在と異方性の効果によってスピンとカイラリティの自由度が混成することを検証した。また、カイラルグラス相転移の臨界現象およびその低温相の性質がイジングスピングラスのそれと異なることを数値計算によってはじめて明らかにした。一方で、カイラリティ機構の予言する多くの臨界特性 [1] に対する数値計算的検証はまだ始まったばかりで、今後ともその検証をとおして、スピングラスの相転移描像を確立していきたい。

## 参考文献


[1] 川村 光, 固体物理 **34** (1999) 485.; 本特集の川村による記事

[2] K. Hukushima and H. Kawamura, Phys. Rev. E **61**, (2000) R1008.

[3] H. Kawamura, Phys. Rev. Lett. **80**, (1998) 5421.

[4] F. Matsubara, T. Iyota, and S. Inawashiro, Phys. Rev. Lett. **67**, (1991) 1458.