

サブゼミ：「ランダム磁性体の統計物理」 ... とは

福島 孝治

東京大学大学院総合文化研究科・広域科学専攻・相関基礎科学系

URL: <http://dbs.c.u-tokyo.ac.jp/~fukushima>
<mailto:hukusima@phys.c.u-tokyo.ac.jp>

August 11, 2003



まずは自己紹介か？

- 履歴

- 1968年 京都生まれ
- 1996年 筑波大学 博士課程物理学専攻 (スーパーバイザー：高山 一 先生)
- 2002年10月より，東京大学大学院総合文化研究科
- 専門： ランダム系の統計物理，計算物理手法の開発

まずは自己紹介か？

- 履歴

- 1968年 京都生まれ
- 1996年 筑波大学 博士課程物理学専攻 (スーパーバイザー：高山 一 先生)
- 2002年10月より，東京大学大学院総合文化研究科
- 専門： ランダム系の統計物理，計算物理手法の開発

- 夏の学校とのかかわり

- 1991年 36回：きっとM1のときにいったはず... テキストは残っていないし...
- 1992年 37回：サブゼミの世話人として (M2)
- 1993年 38回：当時はまだ当番校制度だった．筑波大のスタッフとして参加．
- ...
- 2001年 46回：研究室で隣の学生が校長
- 2002年 47回：夕方の何とか会に参加．女性問題について語る？
- 2003年 48回：サブゼミに呼ばれる．

まずは自己紹介か？

- 履歴

- 1968年 京都生まれ
- 1996年 筑波大学 博士課程物理学専攻 (スーパーバイザー：高山 一 先生)
- 2002年10月より，東京大学大学院総合文化研究科
- 専門： ランダム系の統計物理，計算物理手法の開発

- 夏の学校とのかかわり

- 1991年 36回：きっとM1のときにいったはず... テキストは残っていないし...
- 1992年 37回：サブゼミの世話人として (M2)
- 1993年 38回：当時はまだ当番校制度だった．筑波大のスタッフとして参加．
- ...
- 2001年 46回：研究室で隣の学生が校長
- 2002年 47回：夕方の何とか会に参加．女性問題について語る？
- 2003年 48回：サブゼミに呼ばれる．
- 2013年： きっと講師として...

アブストラクト

Newton 以来、我々は理想化された状況の模索とそこでの理論構成を好んできたように思われる。Newton 力学では、摩擦などの世の中の擾乱をかき分けて、その背後にある美しい理論体系を構築した。磁性体の研究でも、乱れのないモデルについて研究がなされ、相転移の臨界現象では、繰り込み群が普遍性の概念をつくり出すことに成功した。しかし、一方で、自然はそんなにきれいでないことを日常的に実感しているし、格子欠陥・不純物がない状況はなかなか現実的ではない。また、とても乱れた状況ではじめて現れる特異な現象もたくさん見付かっている。そこでは、乱れの効果を陽に採り入れた“理想的な状況”や“理論体系”が不可避となる。本セミナーでは、ランダム系の統計物理の代表であるスピングラス理論を、特にランダムネスの取扱い方に焦点をあてながら、初歩から解説する。

- 0. ランダムでない磁性体の臨界現象
 - 0-1. 磁性体相転移の平均場理論
 - 0-2. 繰り込み群の見方
- 1. スピングラスの平均場理論
 - 1-1. 位相空間的なアプローチ：レプリカ理論
 - 1-2. 状態方程式のアプローチ：TAP 理論
 - 1-3. 2つの整合性
- 2. 平均場理論を越えて

世話人の丸野さんからもらった宿題は.

- 「基本的にはランダムスピン系の定義や歴史、現状を知るための講義（サブゼミ）というよりは、ランダムスピン系の扱い方を知るための講義にしたいと思います。」
- 「ランダムネスが自然界において果たす役割など全体像をつかむ」

Outline

- ランダムネスを統計物理にどのように導入しているか. あるいはされていないか?
 - ランダムネスをどのように「扱う」か? スピン系を中心に.
 - 物理の問題として,
 - pure系の結果はランダムネスにどの程度影響を受けるのか? どの程度ロバストか?
 - pure系の結果を壊すくらいにランダムネスをいれたときに, どんなことが起こるか? ランダムネスが主動になる物理現象はあるか?
1. 統計力学とスピン模型の復習
 2. ランダムネスの導入 (考え方): みなさんと議論したいところ.
 3. 例題: 弱いランダムネスによる影響 (臨界現象におけるランダムネスの効果)
 4. 例題: 強いランダムネスによる影響 (ランダムネスが作る新しい秩序: スピングラス)

準備：統計力学

統計力学 ミクロな模型からマクロな性質を導く理論体系

- 空間 : Λ , 格子構造とか...
- 状態 : $S \in \Omega_\Lambda$
- Hamiltonian : $H_\Lambda(S)$ energy of state S

基本的な仮定 : (逆温度 β のときに, 系が State S をとる確率) $\propto \exp(-\beta H_\Lambda(S))$

期待値 :

- 観測する物理量 $A : S \in \Omega_\Lambda \rightarrow A(S) \in R$ 関数.
- 期待値 $\langle A \rangle_\Lambda = \frac{1}{Z_\Lambda} \sum_{S \in \Omega_\Lambda} A(S) e^{-\beta H_\Lambda(S)}$.
- 規格化定数 (分配関数) : $Z_\Lambda = \sum_{S \in \Omega_\Lambda} e^{-\beta H_\Lambda(S)}$

自由エネルギー : $f_\Lambda = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{|\Lambda|} \log Z_\Lambda(\beta)$

準備 2： スピンもけい...

スピン模型 簡単のため格子の上に定義されたスピン模型を考えることにする.

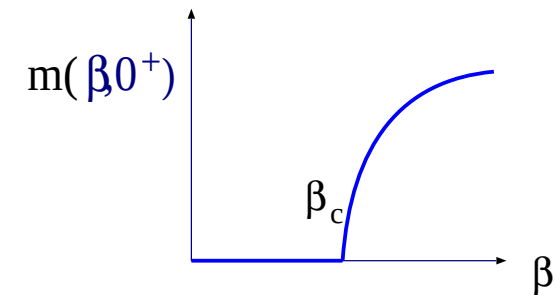
- 状態：スピン配位 $S = \{S_i | i \in \Lambda\} \in \Omega$
- model Hamiltonian : $H_\Lambda(S)$

Ising model :

- 状態 : $S_i \in \{-1, 1\}$, $\Omega = \{-1, 1\}^\Lambda$.
- $\mathcal{H}_\Lambda(S) = - \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i$
 - * 一様な相互作用 : $h_i = h$, $J_{ij} = J > 0$ 強磁性体
- 秩序変数

$$m_\Lambda(\beta, h) = \frac{1}{\Lambda} \sum_i \langle S_i \rangle_\Lambda(\beta, h) = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial h} \frac{1}{\Lambda} \ln Z_\Lambda(\beta, h)$$

- * 熱力学局限 ($\Lambda \rightarrow \infty$) での振る舞い



準備 3 : スピン模型 つづき

- model Hamiltonian の例

Potts model : 状態数の拡張

- 状態 : $S_i \in \{1, 2, \dots, q\}$, $\Omega = \{1, 2, \dots, q\}^\Lambda$.
- $\mathcal{H}_\Lambda(S) = -J \sum_{ij} \delta(S_i, S_j) - h \sum_i \delta(S_i, 1)$, $\delta(S_i, S_j)$: クロネッカーのデルタ

Heisenberg model : 連続変数 (多成分)

- 状態 : $\mathbf{S}_i = \{(S_i^x, S_i^y, S_i^z) \mid |\mathbf{S}_i| = 1\} \in R^3$,
- $\mathcal{H}_\Lambda(S) = -J \sum_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - h \sum_i S_i^z$

他にもいろいろ : 枚挙に暇なし

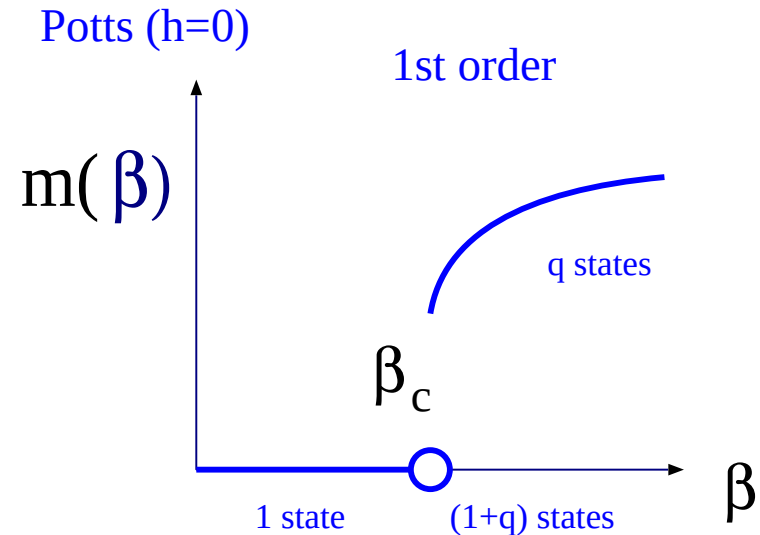
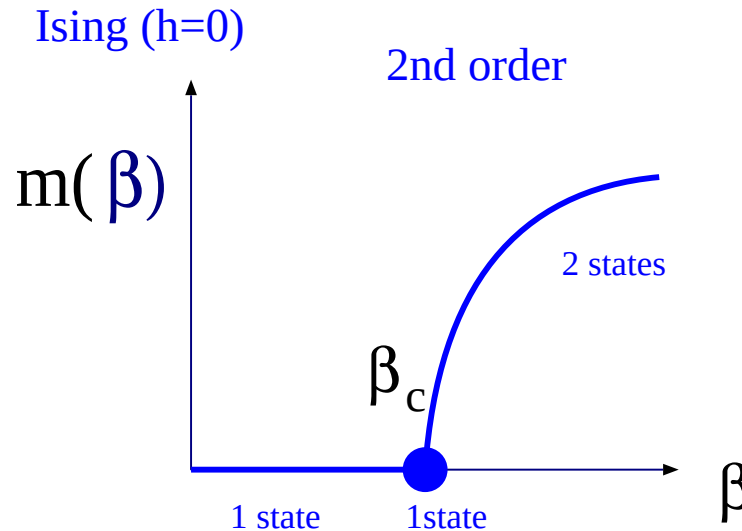
- 状態 S の空間
- 相互作用のレンジ : 相互作用のグラフ
- 相互作用の種類 : 2体だけでなく, 多体相互作用とか...
カッコいいモデルをつくれれば, 名前を残せる. 日本人の名前がついているモデルは, Kondo model くらいか.

準備 4 : 相転移

相転移 相転移点とは、熱力学局限をとった後の自由エネルギー $f(\beta, h)$ が解析的でないところであり、Gibbs states 空間の定性的な変化

1. 相転移の次数

- 自由エネルギーの微分で定義される物理量が全て連続的であるときに、その相転移は **2次相転移** という。
- ある物理量が非連続的であるときに、**1次転移** という。例えば、エネルギーが転移点で連続的でない等。



準備 5 : ユニバーサリティ

● 2 次転移の Univesality

- 臨界指数：物理量の特異性を現す方法として，臨界指数 $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta, \dots$ が用いられる．例えば，
 - 比熱 $C(T) \sim |T - T_c|^{-\alpha} \quad T \rightarrow T_c$
 - 秩序変数 $m(T) \sim |T - T_c|^\beta$
 - 帯磁率 $\chi(T) \sim |T - T_c|^{-\gamma}$
 - 相関関数 $\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \sim \frac{1}{|x|^{d-2+\eta}} \quad \text{at } T = T_c$
- Universality (信仰)：スケーリング理論，くりこみ群
 - * 臨界指数には関係式があり，独立な指数は2つだけ
 - * 秩序変数の対称性や空間次元，相互作用の距離にだけ依存している．
 - * (勿論健全な信仰には例外はある．)
- Upper and lower critical dimensions
 - * Upper: この次元より上では臨界指数は次元にすら依存せず，その値は平均場理論(無限大次元)の結果と同じ．
 - * Lower: この次元より下では有限温度で相転移は起きない．

準備 6 : 例

Heisenberg model

- 平均場 (無限大次元)
 - $\gamma = 1, \quad \beta = 1/2, \quad \alpha = 0.$
 - 3次元
 - 理論 : モンテカルロ法, (各種) くりこみ群
 - * $\gamma = 1.38 \sim 1.46, \quad \nu = 0.69 \sim 0.74, \quad \beta = 0.36 \sim 0.39$
 - 実験 : Ni, Fe, ... GdS,
 - * $\gamma = 1.30 \sim 1.45, \quad \beta = 0.34 \sim 0.45, \quad \alpha = -0.11 \sim -0.12$
 - Upper critical dimensions = 4
 - Upper critical dimensions ≤ 3 , (Mermin(-Wargner) theorem)
-

ランダムネスの考え方

- 現実の系は様々な欠陥を含んでいる。なかなか、綺麗な結晶はできそうもない。必ず**ゴミ**、**乱れ**として格子欠陥(点欠陥, 線欠陥, 面欠陥...)が入る。結晶成長過程で必然的に**ラフネス**が現れることもあるだろう。
- そうした**ランダムネス**らが、重要なのかを評価したり、欠陥を含まない系(pure系)での解析における欠陥の効果を調べることは重要(だろう)。
- **ランダムネス**を摂動的に考えたときに、**pure系**の安定性とか頑丈さはどんなものだろうか。例えば、非摂動的な効果がある例としては、
 - **Anderson 局在**: 電子系にランダムポテンシャル(欠陥)を導入すると、波動関数の非局在・局在相転移が起こる。→ ある種の金属・絶縁体転移
 - **ランダム磁場効果**(Imry-Ma): 2次元系の強磁性状態にランダム磁場を加えると、無限小の磁場で秩序状態が壊れる。
- 非摂動的に pure系が壊された後はどうなっているのか。乱れの効果で新たな物理現象はないか。→ 乱れを陽に採り入れた理論が必須。
- ランダムネスはないが、ガラス系のように結晶を組まないという点でランダムに見える系は?

ランダムネスの入れ方，理論模型の構築

- ランダムスピン模型の例: 簡単なモデル化としての磁性体
 - 数個の不純物ではなく，熱力学的に有為なランダムネスの効果を考える.
 - KEYはランダムネスを**確率変数**として扱うこと.

– サイトランダム

1. 希釈ランダム系：非磁性原子が混ざるモデル

$$\mathcal{H}(S, \{\epsilon_i\}) = -J \sum_{ij} \epsilon_i \epsilon_j S_i S_j$$

* S_i はスピン変数, (Ising, XY, Heisenberg...)

* $\epsilon_i \in \{0, 1\}$: (非)磁性原子のサイトは1(0)をとる. ϵ_i は**確率変数**.

$$P(\epsilon_i) = x\delta(\epsilon_i - 1) + (1 - x)\delta(\epsilon_i)$$

2. ABランダム置換系: A原子とB原子がランダムに混ざる系 ($\text{Fe}_x\text{Mn}_{1-x}\text{TiO}_3$)

$$\mathcal{H}(S, \{\epsilon_i\}) = -J \sum_{ij} \left(1 - 2 \frac{(\epsilon_i + \epsilon_j)^2}{4} \right) S_i S_j, P(\epsilon_i) = x\delta(\epsilon_i - 1) + (1 - x)\delta(\epsilon_i + 1)$$

ランダムネスの入れ方: つづき

- ランダムスピン系

- **ボンドランダム**: ボンドがランダム変数

$$\mathcal{H}(S, \{J_{ij}\}) = - \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j, \quad P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J) + (1 - p)\delta(J_{ij} + J')$$

* $J' = 0$: ボンド希釈系

* $J' > 0$: スピングラス系 ($\Rightarrow$ フラストレーション効果)

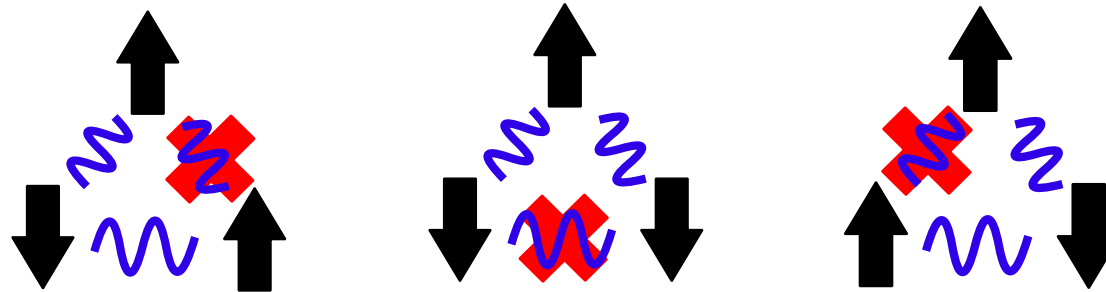
- **ランダム磁場**

$$\mathcal{H}(S, \{H_i\}) = -J \sum_{ij} S_i S_j + \sum_i H_i S_i, \quad P(H_i) : \text{Gaussian, bimodal dist.,}$$

- ランダム系の特徴: 並進対称性の破れ... 運動量(波数)空間移るのは 難しいなー.
- ランダムネス**は**独立**な確率変数として扱いのはよいことか? 線欠陥だと, 相関のある確率変数のようだ.

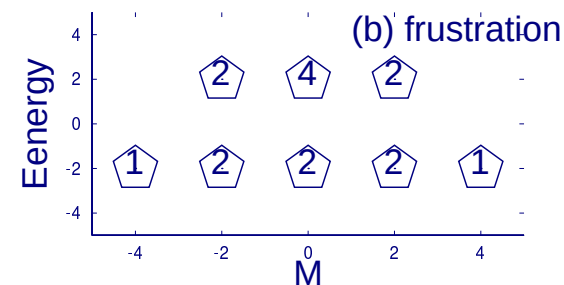
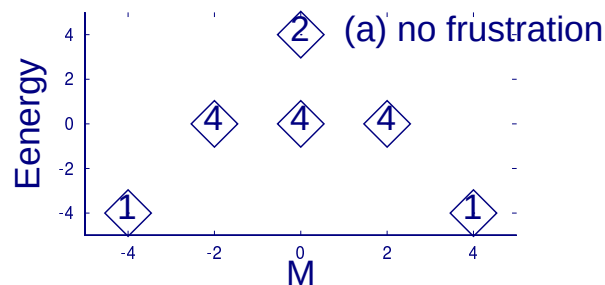
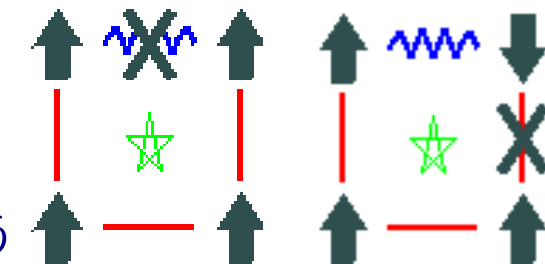
フラストレーションの効果

- フラストレーション：全ての相互作用も満足するスピン配置は存在しない
多すぎる制約条件のため、だれかが我慢する必要がある
- 3角格子反強磁性体：反強磁性相互作用は、隣合うスピンを反平行にそろえたがる



ランダムネス付随したフラストレーション

- 基底状態 (低エネルギー状態) の縮退が多い
- 高温になるために必要なエネルギーが低い
安定性が悪そう



ランダムネスの取扱い : ボンドランダム系を例に

$$\mathcal{H}(S, J) = - \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad P(J_{ij}) = x \delta(J_{ij} - J) + (1 - x) \delta(J_{ij}).$$

- アニール系 (焼き鈍し, 徐冷) : **ボンド変数 J** も **スピン変数 S** と同様に熱的に揺らげると考えると,

$$Z = \int D J_{ij} \text{Tr}_S e^{-\beta \mathcal{H}(S, J)} = \int D J_{ij} Z_J = \langle Z_J \rangle_J,$$

自由エネルギーは,

$$F_A = -\frac{1}{\beta} \ln \langle Z_J \rangle_J$$

- 自由度が増えた $\{S_i\} + \{J_{ij}\}$ スピン系とも見なせる.
- スピン系と協力?しながら, エネルギーの低い J_{ij} の配位のサンプルの重みが多いことになる.
- フラストレーションの解消

ランダムネスの取扱い 2

- クエンチ系 (急冷) :

- ボンド変数 J が固定された一つのサンプルで自由エネルギー, 物理量 E を評価,

$$F_J(\beta) = -\frac{1}{\beta} \ln Z_J(\beta), \quad E_J = \frac{1}{Z_J} \text{Tr}_s E(S, J) e^{-\beta \mathcal{H}(S, J)} = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F_J(\beta))$$

- J_{ij} はランダム変数と考える... 本当はランダムかどうかはわからないこともある. 例えば, 合金の場合は磁性原子は凝集しやすいこともある.
- 熱力学量の自己平均性: $\ln Z$ の平均が難しい (とされている)

$$F = \langle F_J(\beta) \rangle_J = -\frac{1}{\beta} \langle \ln Z_J(\beta) \rangle_J$$

$$E = \langle E_J(\beta) \rangle_J = \left\langle \frac{1}{Z_J} \text{Tr}_s E(S, J) e^{-\beta \mathcal{H}(S, J)} \right\rangle_J = \left\langle \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F_J(\beta)) \right\rangle_J$$

クエンチ系の扱い方

時間スケールの分離 現実的には..

(欠陥や非磁性原子が動く時間スケール) $\gg$ (スピン変数の動く時間スケール)

ランダムネスは**クエンチ変数**と見做す方がよい.

二重平均 : 平均をとる順番が問題

熱平均 スピン変数に関する和 : $\text{Tr}_{S_i} \dots$

ランダム平均 ランダム変数に関する和 : $\int D J_{ij} \dots$

1. 順方向 : 熱平均からランダム平均へ
 2. 逆方向 : ランダム平均から熱平均へ (どうやって順番を変えるかは後で..)
-

クエンチ系の料理の仕方：順方向

- 手順：できるだけランダム平均は後の方に...
 1. まず，ランダム変数を与えて，熱平均，すなわち物理量の解析をする．それぞれのサンプル $\{J_{ij}\}$ で何が起きているかがわかる． $A_{J_1}, A_{J_2}, \dots$
 2. その後で，ランダム平均をする．
- 手法
 1. 級数展開等の各種近似理論
e.g. 高温展開： $\chi(\beta) = \langle \chi_J \rangle_J = \langle f_0^J \rangle_J + \langle f_1^J \rangle_J \beta + \langle f_2^J \rangle_J \beta^2 + \dots$
 2. 数値計算：モンテカルロ法，数値的転送行列法，...

→ これらは，直接自由エネルギーを評価しているわけではないので，**一見**ランダム系であることの困難は見えない．
 3. 平均場模型については，状態方程式を解く．
スピングラスでの，TAP(Touless-Anderson-Palmer) 理論
→ こっちは結構解析は難しい

クエンチ系の料理の仕方: 逆方向

- まずランダム平均をとることができれば, 残りは pure 系の問題に.
- 手順 : レプリカ法を用いてランダム平均を先にとってしまう

$$\ln x = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{x^n - 1}{n}$$

$$\Rightarrow -\beta F = \langle \ln Z_J \rangle_J = \left\langle \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z_J^n - 1}{n} \right\rangle_J = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\langle Z_J^n \rangle_J - 1}{n}$$

- 良いところ: pure 系に焼き直せれば, 好きに解析ができる. これまでに pure 系で培われて来た技術が使える.
- 不安なところ:
 - * 焼き直した pure 系とはどんな系なのか?
 - * レプリカ局限 $n \rightarrow 0$ の問題