스핀유리 모형

생성자	재 재환 김
태그	엔지니어링

1. 스핀유리 모형의 배경

스핀유리 모형은 초기에는 자성을 띠는 금속합금에서 발견된 복잡한 자성 구조를 설명하기 위해 개발되었습니다. 예를 들어, 철 원자가 불규칙하게 배치된 금속합금 내에서 자성 상호작용이 존재할 때, 어떤 스핀은 같은 방향으로 정렬하고자 하며(ferromagnetic 상호작용), 어떤 스핀은 반대 방향으로 정렬하려고 합니다(antiferromagnetic 상호작용). 이러한 상호작용의 무질서로 인해, 스핀들이 하나의 상태로 쉽게 정렬되지 못하고 복잡한 자성 상태에 빠지게 됩니다. 이러한 특성을 지닌 시스템을 **스핀유리 시스템**이라고 부릅니다.

스핀유리의 주요 특성

- **무질서**: 스핀유리 시스템 내에서는 상호작용이 무작위로 분포하여 서로 다른 상호작용이 공존합니다.
- **좌굴 또는 실망(Frustration)**: 상호작용의 결과로 인해, 일부 스핀들은 최적의 에너지를 가질 수 없고, 항상 일정한 수준의 긴장 상태에 놓이게 됩니다.
- **복잡한 에너지 지형**: 스핀유리는 많은 로컬 최소점을 가지는 복잡한 에너지 지형을 가지며, 시스템이 쉽게 하나의 상태로 수렴하지 않습니다. 이는 매우 다양한 안정 상태를 가지게 합니다.

2. 스핀유리 모형의 이론적 배경과 주요 개념

스핀유리 모형은 불규칙성과 좌굴이 포함된 상호작용 스핀 모델입니다. 스핀유리 상태를 기술하는 데는 주로 다음 두 가지 모델이 사용됩니다.

(1) 쇼킹턴-커클패트릭(SKP) 모델

쇼킹턴-커클패트릭 모델은 임의의 상호작용을 가지는 이진 스핀으로 구성된 시스템을 설명합니다. 각 스핀들은 서로 상호작용하며, 상호작용 강도 JijJ_{ij}Jij는 가우시안 분포를 따릅니다. 이 모델은 대칭 상호작용과 임의의 상호작용을 포함하며, 무질서와 좌굴을 내재적으로 갖게 됩니다.

(2) 랜덤 에너지 모형 (REM)

랜덤 에너지 모형은 매우 많은 수의 로컬 에너지 최소점을 가지는 시스템의 통계적 특성을 설명하는데 사용됩니다. 이 모형에서는 특정한 스핀 구성 상태에 따라 에너지가 무작위로 결정되며, 이는 매우 많은 상태들이 서로 다른 에너지를 가지게 합니다.

3. 스핀유리 모형의 수식과 에너지 함수

스핀유리의 에너지는 이징 모형과 비슷하지만, 상호작용 JijJ_{ij}Jij가 무작위 분포를 따릅니다. 따라서 전체 에너지 EEE는 다음과 같이 정의됩니다.

$$E = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i s_i$$

- E: 시스템의 총 에너지
- s_i: 스핀 i의 상태, `+1` 또는 `1`
- J_{ij}: 스핀 i와 j 사이의 상호작용 계수, 랜덤한 값으로 설정됨 (대개 가우시안 또는 이산 분포로부터 샘플링)
- h_i: 각 스핀에 가해지는 외부 자기장 (일반적으로 0으로 설정하여 외부 영향을 제외하기도 함)

상호작용 계수의 분포

상호작용 계수 J_{ij}는 보통 다음과 같은 분포 중 하나로 정의됩니다.

1. **가우시안 분포**: J_{ij}가 평균 0, 분산 σ^2의 정규 분포를 따름.
2. **이산 분포**: $J_{ij} = \pm J$의 값으로, 각각의 확률이 0.5인 경우.

   $J_{ij} = \pm J J_{ij} = \pm J$

이 상호작용이 무작위적이기 때문에, 시스템은 서로 다른 에너지 상태를 가지며, 전체 에너지를 최소화하는 특정 스핀 상태로 수렴하는 것이 매우 어려워집니다.

4. 스핀유리의 상태와 좌굴(Frustration)

스핀유리는 상호작용이 무작위이기 때문에 모든 스핀이 동시에 최적의 에너지 상태에 놓일 수 없는 좌굴(Frustration) 상태에 빠집니다. 예를 들어, 삼각형 모양의 세 개 스핀이 있을 때, 서로가 상반된 상호작용을 가지면, 세 스핀 중 적어도 하나는 항상 최적 상태에서 벗어나게 됩니다. 이는 시스템의 에너지가 단 하나의 전역 최소점으로 수렴하는 것을 방해하며, 매우 복잡한 에너지 지형(landscape)을 만듭니다.

5. 스핀유리 모형의 통계적 성질

스핀유리 모형에서 에너지를 최소화하는 스핀 배열을 찾는 것은 매우 어렵습니다. 이는 다음과 같은 특성 때문에 그렇습니다.

복잡한 에너지 지형

스핀유리의 에너지 지형은 매우 많은 로컬 최소점을 가지며, 이들은 서로 독립적으로 안정된 상태로 존재할 수 있습니다. 따라서 시스템이 하나의 전역 최소점에 수렴하기보다는 여러 로컬 최소점 중 하나에 머무르게 되며, 메타 안정성(metastability)을 가지게 됩니다.

스핀유리 상태의 자유 에너지와 엔트로피

스핀유리 시스템에서는 특정 상태에서 엔트로피가 매우 높은 것이 특징입니다. 이 시스템의 자유 에너지 FFF는 다음과 같이 정의할 수 있습니다.

$$F = -k_B T \ln Z$$

여기서 Z는 분배 함수로, 모든 가능한 스핀 배열의 에너지를 포함하는 파티션 함수입니다.

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta E}$$

- k_B: 볼츠만 상수
- T: 절대 온도
- $\beta = \frac{1}{k_B T}$: 온도에 대한 역수

이 자유 에너지는 매우 많은 상태들을 고려한 결과로, 높은 온도에서 자유 에너지가 크게 증가하며 엔트로피 역시 높은 상태가 됩니다.

6. 스핀유리 모형의 응용과 시뮬레이션 방법

최적화 문제에서의 응용

스핀유리 모형은 다양한 조합 최적화 문제에 적용될 수 있습니다. 예를 들어, **여행자 문제 (TSP)**, **그래프 색칠하기 문제**, **조합 최적화 문제** 등에서 로컬 최소점을 찾는 데 효과적으로 사용됩니다.

몬테카를로 시뮬레이션

스핀유리 모형의 시뮬레이션은 주로 **몬테카를로 방법**을 통해 수행됩니다. 몬테카를로 방법에서는 **확률적 접근**을 통해 각 스핀의 상태를 반복적으로 갱신하며, 전체 에너지가 최소화되는 방향으로 시스템을 수렴시킵니다.

어닐링 기법

스핀유리는 어닐링(annealing) 기법과 함께 사용될 수 있습니다. **어닐링**은 초기 고온 상태에서 시스템을 서서히 냉각시키며 에너지를 최소화하는 상태를 찾는 방법입니다. 이 과정에서 시스템은 전역 최소점에 가까운 상태에 도달할 확률이 높아지며, **모의 어닐링 (Simulated Annealing)** 방법이 주로 사용됩니다.