数理解析研究所講究録
第486巻 1983年 166-175

13. ランダムスピン系の統計力学における積分方程式

東北大工　桂　重俊[1)]　藤木澄義[2)]
末永敏幸[3)]　松野　明[4)]

1)Shigetoshi Katsura 2)Sumiyoshi Fujiki 3) Toshiyuki Suenaga
4) Akira Matsuno

§1. 序論

与えられた結晶格子の各ボンドの相互作用が，確率 p と $1-p$ でそれぞれ J または $-J$ をとるとする。この格子上の Ising モデルを考えると，ハミルトニアンおよび密度行列 ρ は

$$\mathcal{H}(\{J_{ij}\}) = -\sum J_{ij}\sigma_i\sigma_j \qquad J_{ij}=\pm J,\ \sigma_i=\pm 1 \tag{1}$$

$$\rho(\{J_{ij}\}) = \exp[-\beta\mathcal{H}(\{J_{ij}\})] \tag{2}$$

で与えられ，系の自由エネルギー F は

$$F = -kT\int \log \mathrm{tr}\,\rho(\{J_{ij}\}) \prod P(J_{ij})\,dJ_{ij} \tag{3}$$

$$P(J_{ij}) = p\,\delta(J_{ij}-J) + (1-p)\,\delta(J_{ij}+J) \tag{4}$$

となる。（ $P(J_{ij})$ は J_{ij} の分布関数 ）

このように相互作用に競合のある系においては，常磁性状態，強磁性状態，反強磁性状態のほかに，各のスピンがランダムではあるが凍りついているというスピングラス状態が存在する。ここではこれらの状態間の境界を求めることを考える。

§2. 積分方程式の導出[1)~3)]

(1)のハミルトニアンで(3)の自由エネルギーを正確に求めることは困難である。いま有効場をパラメータとしてもつ，一つの vertex と一つの cluster (pair, square, tetrahedron 等) の密度行列 $\rho^{(1)}$, $\rho^{(c)}$ を考える。後者の部分トレースをとったものが，前者に等しいという要請(これを reducibility という。これは自由エネルギーの定常性から導かれる。)より有効場の分布を定めることを考える。i にあるスピンに外から働らく1体およびクラスターの有効場を $H_i^{(1)}$ および $H_i^{(c)}$ とし，1体およびクラスター $ijkl\cdots$ の密度行列を $\rho_i^{(1)}$ および $\rho_{ijkl\cdots}^{(c)}$ とすると

$$\rho_i^{(1)} = \exp(\beta H_i^{(1)}\sigma_i) = A^{(1)}(1+l_i^{(1)}\sigma_i) \qquad (5)$$

$$\begin{aligned}\rho_{ijkl\cdots}^{(c)} &= \exp\left(\sum\beta J_{\mu\nu}\sigma_\mu\sigma_\nu + \sum\beta H_\mu^{(c)}\sigma_\mu\right)\\ &= A^{(c)}\prod(1+t_{\mu\nu}\sigma_\mu\sigma_\nu)\prod(1+l_\mu^{(c)}\sigma_\mu) \qquad (6)\end{aligned}$$

$$l_i^{(1)} \equiv \mathrm{th}\,\beta H_i^{(1)},\quad l_\mu^{(c)} \equiv \mathrm{th}\,\beta H_\mu^{(c)},\quad t_{\mu\nu} \equiv \mathrm{th}\,\beta J_{\mu\nu}$$

で与えられる。reducibility は

$$\mathrm{tr}_{jkl\cdots}\,\rho_{ijkl\cdots}^{(c)}/\mathrm{tr}\,\rho_{ijkl\cdots}^{(c)} = \rho_i^{(1)}/\mathrm{tr}\,\rho_i^{(1)} \qquad (7)$$

で与えられる。(7)を正しく解くことは，格子をいま考えているクラスターから作られる cactus tree lattice で近似

して，その系の正確解を求めることと等価である。(7)より$H_\mu^{(c)}$の分布関数$G(H_\mu^{(c)})$に対する積分方程式

$$G(H_i^{(c)}) = \int \delta(H_i^{(c)} - h_{ij'k'l'\cdots} - h_{ij''k''l''\cdots} - \cdots)$$
$$\times \prod_{\mu\nu} P(J_{\mu\nu}) dJ_{\mu\nu} \prod_\mu' G(H_\mu^{(c)}) dH_\mu^{(c)} \qquad (8)$$

が得られる。ここに$h_{ijkl\cdots}$はクラスター$ijkl\cdots$の内部より格子点iにかかる有効場である。(8)の$\delta(\quad)$のなかのhは，iにおいてクラスター$ijkl\cdots$につながれているクラスター（その数をz_c-1個とする）についてとる。$\prod_{\mu\nu}$はクラスター$ijkl\cdots$のつながれたすべてのボンド，$\prod_\mu'$は格子点$j,k,l,\cdots$についてとる。$h_{ijkl\cdots}$のexplicitな形は

$$h_{ijkl\cdots} = \frac{1}{2\beta} \ln \frac{\operatorname{tr}_{jkl\cdots} \exp(-\beta H_i^{(c)}) \rho^{(c)}(1, \sigma_j, \sigma_k, \sigma_l \cdots)}{\operatorname{tr}_{jkl\cdots} \exp(\beta H_i^{(c)}) \rho^{(c)}(-1, \sigma_j, \sigma_k, \sigma_l \cdots)} \qquad (9)$$

で与えられる。

(8)はhのFourier変換を用いて

$$G(H_i^{(c)}) = \frac{1}{2\pi} \int \exp(ikH_i^{(c)}) [S(k)]^{z_c-1} dk \qquad (10)$$

$$S(k) = \int \exp(-ikh_{ijkl\cdots}) \prod_{\mu\nu} P(J_{\mu\nu}) dJ_{\mu\nu}$$
$$\times \prod_\mu' G(H_\mu^{(c)}) dH_\mu^{(c)} \qquad (11)$$

と書ける。$G(H_i^{(i)})$ が解ければ1体の有效場の分布関数 $G^{(1)}(H_i^{(1)})$，磁化 σ，スピングラスのオーダーパラメータ q は

$$G^{(1)}(H_i^{(1)}) = \frac{1}{2\pi}\int \exp(ikH_i^{(1)})[S(k)]^{z_c} dk \qquad (12)$$

$$\left.\begin{array}{l}\sigma = \\ q = \end{array}\right\} \int th^{n}(\beta H_i^{(1)})\, G^{(1)}(H_i^{(1)})\, dH_i^{(1)} = \overline{th^{n}\beta H_i^{(1)}} \qquad (13)$$

で与えられる。(σ のとき $n=1$，q のとき $n=2$.)

§3. 転移温度

いまクラスターとして pair ij をとった場合を考えると，(9)より

$$\beta h_{ij} = th^{-1}(t_{ij}\, l_j^{(c)}) \qquad (14)$$

となる。これを(8)にいれ，$\overline{l_i^{(c)}}$ および $\overline{l_i^{(c)2}}$ をそれぞれが小さい場合について求めると

$$\overline{l_i^{(c)}} = \overline{th \sum_k{}' th^{-1}(t_{ik}\, l_k^{(c)})} \simeq \sum_k{}' \overline{t_{ik}}\ \overline{l_k^{(c)}} \qquad (15)$$

$$\overline{l_i^{(c)2}} = \overline{th^2 \sum_k{}' th^{-1}(t_{ik}\, l_k^{(c)})} \simeq \sum_k{}' \overline{t_{ik}^2}\ \overline{l_k^{(c)2}} \qquad (16)$$

となる。Curie 温度 T_c，スピングラス転移温度 T_g は

(15), (16) が零でない根をもちはじめる温度として

$$\overline{t_{ij}} = \frac{1}{z_c - 1} = (2p-1)t_c \qquad (17)$$

$$\overline{t_{ij}^2} = \frac{1}{z_c - 1} = t_g^2 \qquad (18)$$

によりあたえられる。($t_c \equiv \mathrm{th}(J/kT_c)$, $t_g \equiv \mathrm{th}(J/kT_g)$)
クラスターが立方体[4]、八面体[5] の場合 (9) および (14)-(18) に相当する計算を REDUCE で行った。

§4. 絶対零度

T=0 におけるスピングラス－強磁性転移点を求めるために、積分方程式 (9), (10) の解が強磁性ボンドの密度 p により、どう変化するかをしらべる。まず h の分布関数 g(h) を δ 関数の重ね合わせ

$$g(h) = \sum a_l \, \delta(h - lJ) \qquad (19)$$

すなわち

$$S(k) = \sum a_l \exp(-ilkJ) \qquad (19')$$

であらわす。(19) を (10) にいれると

$$G(H_i^{(i)}) = \sum b_m \, \delta(H_i^{(i)} - mJ) \qquad (20)$$

の形となり，b_m は $(\sum a_\ell x^\ell)^{z_c-1}$ の x^m の係数で与えられる。(20) を (11) にいれると新らしい $g(h)$ は (19) と同じ形となり，新らしい a_ℓ を a'_ℓ と記す。例えば square クラスターの場合には (19) の Σ は $\sum_{\ell=-2}^{2}$ で，a'_ℓ は

$$\sum_{mnqPQRS} b_m b_n b_q \, p^{(4+P+Q+R+S)/2} (1-p)^{(4-P-Q-R-S)/2} \times x^{[u_{mnqPQRS}(1)-u_{mnqPQRS}(-1)]/2} \tag{21}$$

の x^ℓ の係数で与えられる。ここに $m, n, q = -2, -1, \cdots 2$，$P, Q, R, S = -1$ and 1，でまた

$$u_{mnqPQRS}(\sigma_i) = \max_{\sigma_j\sigma_k\sigma_\ell}(P\sigma_i\sigma_j + Q\sigma_j\sigma_k + R\sigma_k\sigma_\ell + S\sigma_\ell\sigma_i + m\sigma_j + n\sigma_k + q\sigma_\ell) \tag{22}$$

である。b_m は a_ℓ で，a'_ℓ は b_m で表わされているから，

$$a'_\ell = a'_\ell(\{a_\ell\}) \tag{23}$$

とおくと，a_ℓ に関する代数方程式が得られる。未知数の数と項の数は等しく，数個であるが，(23) の右辺の一つの式の項の数は，四角形クラスターで 100 個，四面体クラスターで数千個のオーダーである。(23) を求めるのには，まず FORTRAN の文字出力を利用し，指数ごとにファイルを用意して (22) に従ってそれぞれのファイルに適当に書式を制御して，REDUCE のプログラムの形に出力させる。そ

の出力された項をREDUCEを用いて加え合わせ，ONFORTを用いてFORTRANプログラムの形で出力させる。このようにして得られた(23)の解をNewton-Raphson法を用いて求めた。

この解のうち，$0 \leqq a_\ell \leqq 1$，$\Sigma a_\ell = 1$ であるものが物理的に許されるが，解は中心ピークのδ関数（$a_\ell = 0$ ($\ell \neq 0$), $a_0 = 1$）（常磁性），非対称解（$a_\ell \neq -a_{-\ell}$）（強磁性），対称解（$a_\ell = -a_{-\ell}$）（スピングラス）に分れる。強磁性ボンドの密度を減少していったとき，非対称解が消失し，対称解に接続する濃度が，T＝0の転移濃度を与える。Fig. 1に4角クラスターによる平方格子のδ関数の振巾（対称性を見易くするため a_ℓ と $a_{-\ell}$ の和または差），Fig. 2に平方格子の相図を示す。

§5．結論と補足

以上，強－反強磁性ランダムボンドイジング混晶について常磁性相，強磁性相，スピングラス相間の転移を，有効場の分布関数のみたす積分方程式をREDUCEを用いてとくことによって求めた。この方法をランダムサイト稀薄混晶について適用することについては次の欧文論文にのべる。

1. F.Matsubara and M.Sakata, Prog.Theor.Phys. 55 672 (1976).

2. S.Katsura, S.Inawashiro and S.Fujiki, Physica 99A 193 (1979).

3. S.Katsura, T.Imaizumi and T.Suenaga, J.Phys.Soc.Japan 52 Suppl. 113 (1983).

4. S.Fujiki, Y.Abe and S.Katsura, Comp.Phys.Commun. 25 119 (1982).

5. S.Katsura, T.Suenaga and T.Imaizumi, Physica A 116 368 (1982).

6. S.Katsura and A.Matsuno, to be published.

7. S.Katsura and I.Nagahara, Z.f.Physik, 41 349 (1981).

8. I.Nagahara, S.Hosaka and S.Katsura, Comp.Phys.Commun. 27 113 (1982).

9. S.Katsura and A.Matsuno, to be published.

Fig. 1 The distribution function of the effective fields for the square lattice in the square cactus approximation as functions of concentration.

$x = p - 1/2.$

$G(H^{(4)}) = \sum_{m=-2}^{2} a_m \delta(H^{(4)} - mJ),$

$z = \frac{1}{2}(a_{-2} + a_2), \quad y = \frac{1}{2}(a_{-1} + a_1),$

$v = \frac{1}{2}(a_{-2} - a_2), \quad w = \frac{1}{2}(a_{-1} - a_1).$

Fig. 2 The phase diagram of the random bond ($\pm J$) Ising model on the square lattice, Bethe: pair cluster approximation, Square: square cluster approximation, P: paramagnetic state, SG: spin glass, F: ferromagnetic state.

Fig. 3 The phase diagram of the site-diluted Ising model on the square lattice, where $J_{nnn}=-J_{nn}/2$ (J_{nn}: ferromagnetic nearest neighbor interaction, J_{nnn}: antiferromagnetic next nearest neighbor interaction).

Fig. 4 Observed phase diagram of $Eu_pSr_{1-p}S$. (Maletta and Felsch 1980).

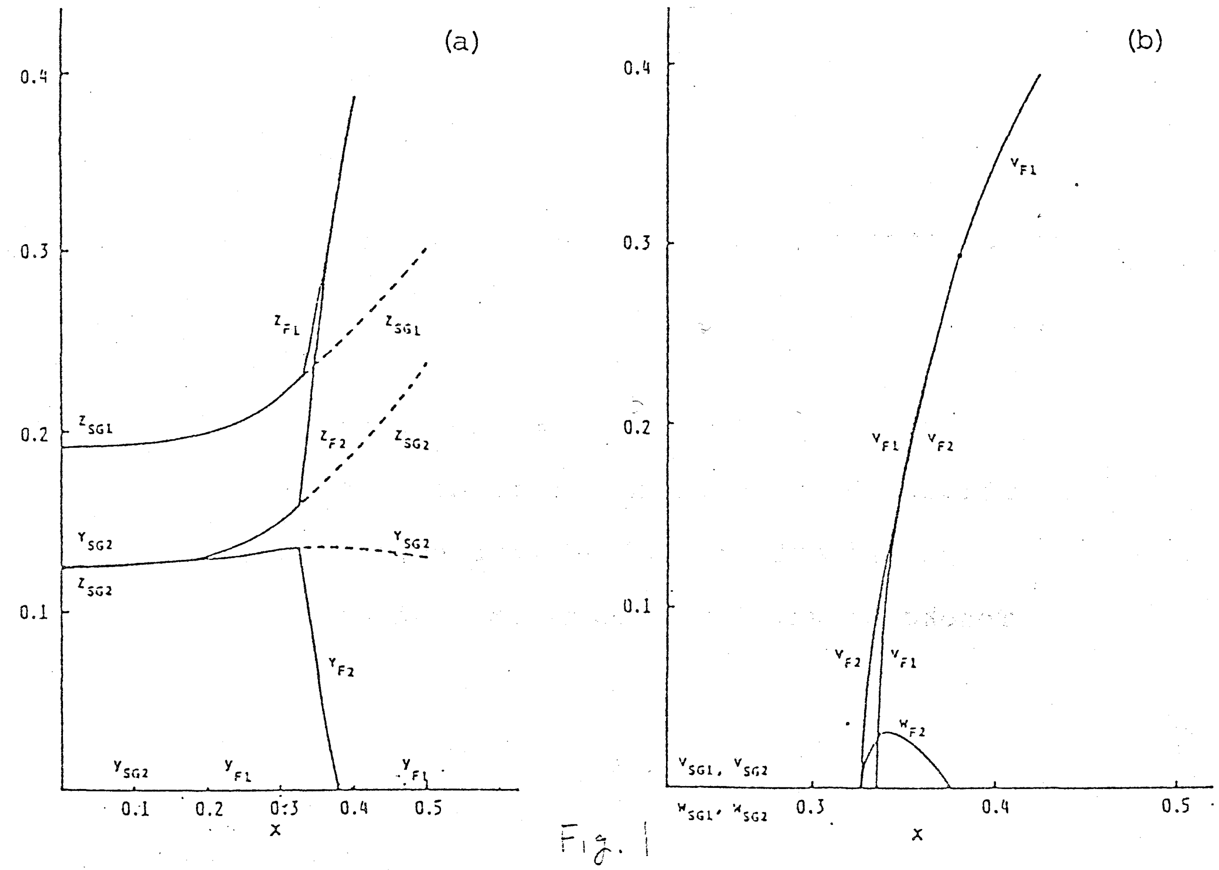

Fig. 1

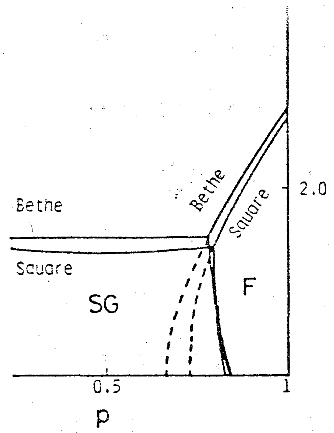

Fig. 2

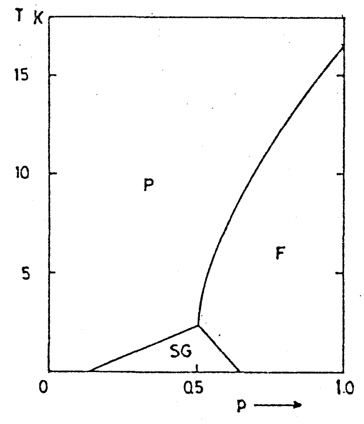

Fig. 4

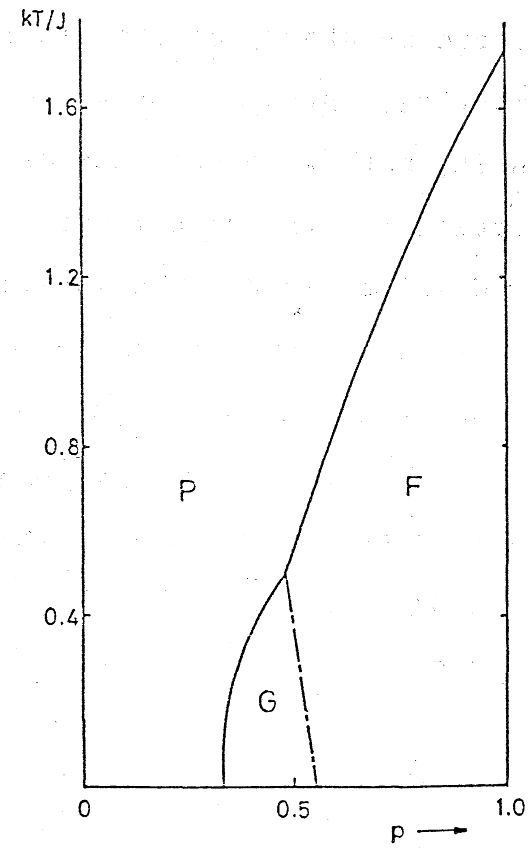

Fig. 3