Critical Points of Dilute Ferromagnets

阪大工　　東 崎 健 一

（3月13日受理）

Ising スピン系で強磁性 bond をスピン間の相互作用をもたないものや，反強磁性 bond でおきかえてゆくと相転移温度が降下する。Bond を濃度 p でうすめたとき，松平[1] はスピン平均とスピン相関が平衡状態で定常値をとる条件から遷移確率の平均を用いて濃度に依存する相転移温度 $T_c(p)$を逐次的に近似を改良する方法を見出した。本小論では遷移確率が相転移点で定まった値をとるという仮定から，遷移確率を平均する方法で濃度 p と相転移温度 T_c の関係式を求めた。この関係式に既に求まっている T_c（p=1）を代入して得られる臨界濃度 P_c は，級数展開など他の方法で求まっている値とよく一致している。

Ising 格子が与えられたとき，相転移温度と臨界濃度が決定される。Isingスピン系の動的扱いではスピン間の相互作用の強さはすべて遷移確率に反映されている。遷移確率が格子によって決まるある値に達したとき相転移がおこり，うすめた場合はまわりのスピンの寄与が effective にうすめない場合と等しい遷移確率を与えるときに相転移がおこることを仮定する―（仮定A）

一般にZ個の最近接格子点をもつ Ising スピン系で j 番目のスピンが σ_j をとる状態確率を $P(\sigma_j)$，単位時間に σ_j から $-\sigma_j$ に反転する遷移確率を $W_j(\sigma_j)$ とすれば，平衡状態でカノニカル分布をするように詳細釣合の条件[2]によって

$$\frac{P(\sigma_j)}{P(-\sigma_j)} = \frac{1+\sigma_j\ \mathrm{th}\,(K\sum_j{}'\sigma)}{1-\sigma_j\ \mathrm{th}\,(K\sum_j{}'\sigma)} = \frac{W_j(-\sigma_j)}{W_j(\sigma_j)} \tag{1}$$

ここでスピン変数は $\sigma_j = \pm 1$，$K=\frac{J}{kT}$．和 $\sum_j{}'$ は j 番目の格子点のまわりのZ個のスピンについて行う。遷移確率は

$$W_j(\sigma_j) = \frac{a}{2} \left[1+\sigma_j \ \mathrm{th} \left(K \sum_j{}' \sigma \right) \right] \tag{2}$$

スピン変数の状態平均をとったものを $\langle \sigma_j(t) \rangle = q_j(t)$ とおくと，スピン平均の方程式は

$$\frac{d}{dt} q_j(t) = -2 \langle \sigma_j(t) W_j [\sigma_j(t)] \rangle \tag{3}$$

$$\frac{d}{d(at)} q_j(t) = -q_j(t) + \langle \mathrm{th} \left[K \sum_j{}' \sigma(t) \right] \rangle \tag{4}$$

仮定Aより臨界点で(4)式右辺の第2項がうすめたときとうすめないときに同じ値をとらねばならない。

臨界点では上向き下向き対等な巨大クラスターが出現する。N.Ogita[3]らの2次元Isingモデルの計算機実験では温度を高温側から Tc に近づけてゆくと大きなクラスターが形成されるようになり，転移点の近傍ではクラスターの形は，安定だとはいえないが大きさはほぼ一定に保たれるという結果を得ている。臨界点でほとんどすべてのスピンがクラスターに含まれているとすれば，クラスターの堺界のスピン効果は無視して臨界現象を決めている遷移確率はクラスター内のスピンの遷移確率であるとすることができる一(仮定B)。 クラスター内ではまわりのスピンがすべてそろっているからうすまっていないとき，

$$\langle \mathrm{th} \left[K \sum_j{}' \sigma(t) \right] \rangle_c = \mathrm{th} (Z K_c) \tag{5}$$

Bond の濃度が p のとき 1次元 Ising 鎖で遷移確率の平均は

$$\langle \mathrm{th} \left[K \sum_j{}' \sigma(t) \right] \rangle_c = p^2 \mathrm{th}\ 2K + 2p(1-p) \mathrm{th}\ K \tag{6}$$

とできる，これを用いて求めた帯磁率は Quenched 系[4] のものによく似ていて，希薄効果を反映している。2次元正方格子で遷移確率の平均は，

$$\langle \mathrm{th} \left[K \sum_j{}' \sigma(t) \right] \rangle_c = p^4 \mathrm{th}\ 4K + 4p^3(1-P)\ \mathrm{th}\ 3K + 6P^2(1-P)^2\ \mathrm{th}\ 2K + 4P(1-P)^3 \mathrm{th} K \tag{7}$$

とする。遷移確率が T_c で等しい仮定から

$$P^4 \mathrm{th}\ 4K + 4P^3(1-P)\ \mathrm{th}\ 3K + 6P^2(1-P)^2\ \mathrm{th}\ 2K + 4P(1-P)^3\ \mathrm{th}\ K = \mathrm{th}\ 4K_c \quad (8)$$

$K_c = \dfrac{J}{kT_c(P=1)}$ に厳密に得られている値を代入して $K = \dfrac{J}{kT_c(P)}$ を求めると $\dfrac{T_c(P)}{T_c(P=1)}$ のグラフは図 1 になる。図の o 印は高温展開による値[5] である。

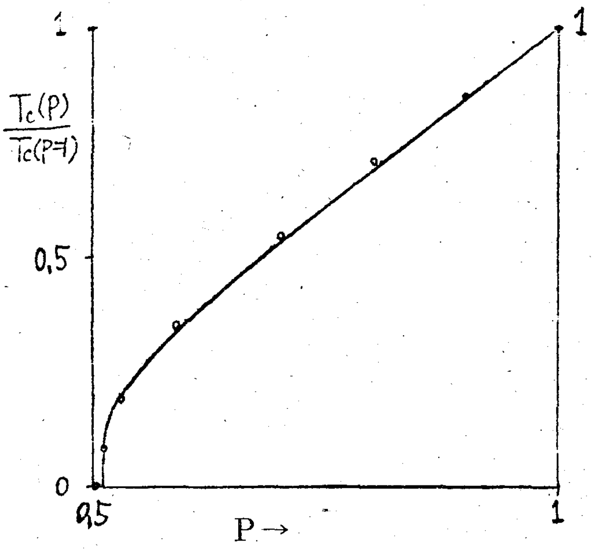

図 1

特に相転移温度 T_c が 0 になる濃度 P_c は(8)式で $K\to\infty$ とすれば得られる。

$$1-(1-P_c)^4 = \mathrm{th}\ 4K_c \quad (9)$$

一般に Z個の最近接格子点をもつときは,

$$\left\langle \mathrm{th}\left[K \sum_j{}' \sigma(t)\right]\right\rangle_{P_c} = 1-(1-P_c)^Z \quad (10)$$

$$(1-P_c)^Z = 1 - \mathrm{th}(ZK_c) \quad (11)$$

1次元のとき (11) は $K_c=\infty$, $P_c=1$ で満されている。 2次元, 3次元格子で K_c を与えたときの P_c の値を表 1 に示す。

格子形	Z	$P_c^{(1)}$	$P_c^{(2)}$	$P_c^{(3)}$	格子形	Z	$P_c^{(1)}$	$P_c^{(2)}$	$P_c^{(3)}$
h	3	0.664	0.653	0.648	d	4	0.440	0.388	0.374
k	4	0.5355		0.529	s・c	6	0.288	0.247	0.243
sq	4	0.511	0.500	0.500	bc.c	8	0.215	0.178	0.172
t	6	0.356	0.347	0.352	f.c.c	12	0.142	0.119	0.115
(A)	8	0.300		0.304	s.q×2	5	0.376	0.362[5]	

表 1　$P_c^{(1)}$ ；(11)式より求めた臨界濃度

$P_c^{(2)}$ ；級数展開及び厳密解[7]

$P_c^{(3)}$ ；庄司モデル[7]

(A)は，格子間に 2つの bond をもった正方格子[6]

うすめるかわりに強磁性 bond J_1 を反強磁性 bond J_2 でおきかえたとき，2次元正方形では $\alpha=\dfrac{J_2}{J_1}$ として

$$P^4\ \mathrm{th}\,[4K]+4P^3(1-P)\,\mathrm{th}\,[(3+\alpha)K]+6P^2(1-P)^2\mathrm{th}\,[2(1+\alpha)K]$$

$$+4P(1-P)^3\,\mathrm{th}\,[(1+3\alpha)K]+(1-P)^4\,\mathrm{th}\,[4\alpha K]=\mathrm{th}\,[4K_c] \qquad (12)$$

より P_c は α の値によって表 2 のようなとびとびの値をとる。

α	～	-3	～	-1	～	$-\frac{1}{3}$	～	0
P_c	0.993	0.986	0.927	0.899	0.796	0.746	0.589	0.511

表 2　α をかえたときの臨界濃度

以上の結果を導びくにあたって用いた仮定Aや臨界点近傍で遷移確率の果しうる役割，仮定Bの巨大クラスターの出現，遷移確率の平均操作の他の希薄方法との関係など深めるべき問題点がある。

本研究に際して有意義な示唆と議論をして下さいました庄司先生，ならびに笠井先生に深く感謝致します。

参 考 文 献

1）松平 昇，物性研究 19，(1972) 220.

2） R.J.Glauber ; J. Math. Phys. 4，(1963) 294.

3） N.Ogita, A. Veda. T. Matsubara, H. Matsuda, F. Yonezawa, ;J. Phys. Soc. Japan 26 Supplement (1969) 146.

4） S.Katsura. B. Tsujiyama; Critical Phenomena NBS Misc. Publ. (1965) 273.

5） S.Miyazima ; to be published.

6） Y.Kasai ; to be published.

7） J.W.Essam ; in " Phase Transitions and Critical Phenomena " Vol Ⅱ (1972) (C.Domb and M. S. Green eds) Academic Press ; London and New York 224.