

スピングラスにおける有効場のみ互斥積分方程式とその解法

東北大工 桂 直俊

1. 自由エネルギーと有効場の分布関数の積分方程式

N 個のイジングスピンを有する系を考えたその交換エネルギー J_{ij} の分布 $P(J)$ が与えられるとすると、この系の自由エネルギー F をキュラント展開すると

$$F = \overline{\sum F_i^{(0)}} + \overline{\sum F_{ij}^{(0)}} + \overline{\sum F_{ijk}^{(0)}} + \dots \quad (1.1)$$

ここには $F_i^{(0)}$, $F_{ij}^{(0)}$, $F_{ijk}^{(0)}$... は点, 点対, 三角クラスター... のキュラント自由エネルギーでそれぞれのクラスターの自由エネルギーから求めることが出来る。——は $P(J)$ および有効場の分布(後述)についての平均を示す。(1.1)の展開の第2項までとつたものが対近似(Bethe近似)である。

いま対近似を考えたスピンは御らく外場を H_i , そのとりの k スピンの場によるスピンは御らく有効場を h_{ik} とする。このとき1体および2体の密度行列 $\rho_i^{(1)}$ および $\rho_{ij}^{(2)}$ は

$$\rho_i^{(1)} = \exp(\beta H_i^{(1)} \sigma_i) \quad (1.2)$$

$$\rho_{ij}^{(2)} = \exp\{\beta(H_i^{(2)} \sigma_i + H_j^{(2)} \sigma_j + J_{ij} \sigma_i \sigma_j)\} \quad (1.3)$$

$$H_i^{(1)} = \sum h_{ik} + H_i \quad H_i^{(2)} = \sum_{k(\neq j)} h_{ik} + H_i \quad (1.3')$$

とりのキュラント自由エネルギーは

$$F_i^{(0)} = F_i^{(1)} = -\frac{1}{\beta} \ln \text{tr} \rho_i^{(1)} \quad (1.4)$$

$$F_{ij}^{(0)} = F_{ij}^{(2)} - F_i^{(1)} - F_j^{(1)} \quad (1.5)$$

$$F_{ij}^{(2)} = -\frac{1}{\beta} \ln \text{tr} \rho_{ij}^{(2)} \quad (1.6)$$

と与えられる。 ρ_1 および ρ_2 の規格化を $\hat{\rho}_i^{(1)}$ とし $\hat{\rho}_{ij}^{(2)}$ を j についての部分和をとると

$$\hat{\rho}_i^{(1)} = \frac{\exp(\beta H_i^{(1)} \sigma_i)}{2 \text{ch}(\beta H_i^{(1)})} \quad (1.7)$$

$$\text{tr}_j \hat{\rho}_{ij}^{(2)} = \frac{\exp\{[\beta H_i^{(2)} + \text{th}^{-1}(\text{th} \beta H_j^{(2)} + \text{th} \beta J_{ij})] \sigma_i\}}{2 \text{ch}[\beta H_i^{(2)} + \text{th}^{-1}(\text{th} \beta H_j^{(2)} + \text{th} \beta J_{ij})]} \quad (1.8)$$

(1.1)に(1.4~6)を入れ,有効場の分布関数 $G(h_{ik})$ で変分したものが定常という条件

また (1.7) と (1.8) とが平均として等しいという関係を要請し, (1.3') を用いて $H_i^{(1)}$ を消去すると, $H_i^{(2)}$ の分布関数 $G_T^{(2)}(H_i^{(2)})$ に対する積分方程式

$$G_T^{(2)}(H_i^{(2)}) = \int \delta(H_i^{(2)} - H - \frac{1}{\beta} \sum'_{k(\neq j)} th^{-1}(th\beta H_k^{(2)} + th\beta J_{ik})) \times \prod'_{k(\neq j)} [P(J_{ik}) dJ_{ik} G_T^{(2)}(H_k^{(2)}) dH_k^{(2)}] \quad (1.9)$$

が得られる。 \sum' , \prod' は最近接スピンの個のうち 1 個 (j) を除いた $z-1$ 個についてのみを指す。

(1.9) は Fourier 変換を用いると連立積分方程式

$$G_T^{(2)}(H^{(2)}) = \frac{1}{2\pi} \int dk \exp(ik(H^{(2)} - H)) [S(k)]^{z-1} \quad (1.10)$$

$$S(k) = \int \exp[-\frac{k}{\beta} th^{-1}(th\beta H^{(2)} + th\beta J)] P(J) dJ G_T^{(2)}(H^{(2)}) dH^{(2)} \quad (1.11)$$

となり $H^{(2)}$ の分布関数は (1.11) を使って求めた $S(k)$ を用いて

$$G_T^{(2)}(H^{(2)}) = \frac{1}{2\pi} \int dk \exp(ik(H^{(2)} - H)) [S(k)]^{z-1} \quad (1.12)$$

で与えられる。 $S(k)$ は単一ボンドにおける場 h の分布関数の Fourier 変換である

$$g(h) = \frac{1}{2\pi} \int dk \exp(ik(h - H)) S(k) \quad (1.13)$$

磁化 σ , Edwards-Anderson のオーダーパラメータ ρ , ROP のオーダーパラメータ ξ

$$\sigma = \int th\beta H^{(1)} G_T^{(1)}(H^{(1)}) dH^{(1)} \quad (1.14)$$

$$\rho = \int th^2 \beta H^{(1)} G_T^{(1)}(H^{(1)}) dH^{(1)} \quad (1.15)$$

$$\xi = \int |th\beta H^{(1)}| G_T^{(1)}(H^{(1)}) dH^{(1)} \quad (1.16)$$

で与えられる。

2. 一様帯磁率, スピンガラス帯磁率, 転移温度

(1.9) の両辺に $H_i^{(2)}$ をかけ, $dH_i^{(2)}$ で積分すると

$$\overline{H_i^{(2)}} = \int [H + \sum' th^{-1}(thK_{ij} + th\beta H_k^{(2)})] \prod' P(J_{ik}) dJ_{ik} G_T^{(2)}(H_k^{(2)}) dH_k^{(2)}$$

ここに帯磁性領域を考慮して $H_i^{(2)}$ の1次項として $\overline{H_i^{(2)}} = \overline{H_k^{(2)}}$ であることを用いると一様帯磁率 $\chi_u (= \partial th\beta H^{(1)} / \partial H \approx \beta \partial H^{(1)} / \partial H)$ は

$$kT\chi_u = \frac{1 + \overline{thk}}{1 - (z-1)\overline{thk}} \quad (2.1)$$

で与えられる。従って Curie 温度は

$$\overline{th\beta_c J} = \int th\beta J P(J) dJ = \frac{1}{z-1} \quad (2.2)$$

で与えられる。^(1,2)

一様磁化が厚くともスピオンが凍りついていなければ $\overline{\sigma^2} = \beta = \overline{th^2\beta H^{(1)}}$ は有限であり得る。 $\partial \overline{th^2\beta H^{(1)}} / \partial H^2 \approx \beta^2 \partial H^{(1)2} / \partial H^2$ でスピオンガラス帯磁率 χ_g を定義すると (2.2) と同様にして

$$(kT)^2 \chi_g = \frac{1 + \overline{th^2k}}{1 - (z-1)\overline{th^2k}} \quad (2.3)$$

とスピオンガラス転移温度 T_g は

$$\overline{th^2\beta_g J} = \int th^2\beta J P(J) dJ = \frac{1}{z-1} \quad (2.4)$$

で与えられる。^(1,2) この転移温度は $\chi_2 \equiv \partial^2 \sigma / \partial H^2$ の発散点として特徴づけられるとも出来る。^(5,6,7)

交換エネルギーが $J_A (>0)$ と $J_B (<0)$ でありその濃度が p_A と p_B である強磁性と反強磁性の二元ボンド混晶の場合には図1のような相境界が得られている。^(1,2) (スピオンガラス相と強磁性相, 反強磁性相の境界⁸⁾ については説明を省略した。) ⁸⁾

3. 二元混晶理論のその後の展開

積分方程式(1.9)はボンド混晶に対するものであったが、サイト混晶に対する有効場の分布を考へて定式化した積分方程式を求め、一様帯磁率、スリッカー帯磁率、スピオンガラス帯磁率を求めることが出来る。これから得られる転移温度は

$$1 - (z-1)(p_A t_{AA}^n + p_B t_{BB}^n) + (z-1)^2 p_A p_B (t_{AA}^n t_{BB}^n - t_{AB}^n t_{BA}^n) = 0 \quad (3.1)$$

により与えられることが分る。⁹⁾ ここに $t_{AA} \equiv th\beta J_{AA}$ 等の上号 $n=1$ が Curie 温度, 下号 $n=1$ が Néel 温度, 上号 $n=2$ がスピオンガラス転移温度を示す。 T_g が T_c, T_N より高ければサイトモデルでスピオンガラスが存在する可能性から生じる。この扱いは A と B のスピオンの大きさが異なる場合¹⁰⁾, 第2近接相互作用¹¹⁾ 存在する場合に拡張された。

強-反強磁性二元ボンドモデルの相図が図1のようにほぼ左右対称になるのに実験¹²⁾ は図2のようなものが多い。これは実験でスピオンガラス相の見出されるものが FCC 構造などの最近接相互作用のみでは反強

研究会報告

磁性相の存在しない結晶構造をもつことによるものと思われる。いまFCC格子で4個体ラスタまで考え、前節の方法を拡張すると図3の相図が得られる。^(13,14)なおFCC構造では強磁性ポイントが存在しなくとも稀薄反強磁性⁽¹⁷⁾でスピングラスが得られる。これは反強磁性交換エネルギーをもつFCC格子ではスピンはラスタレーションなしに配置できることが出来なからである。

$Eu_p Sr_{1-p} S$ はEuまたはSrがFCC格子を作り、Eu-Eu間が第一近接格子点であるとき強磁性的、第二近接格子点であるとき反強磁性的であるサイトスピングラス⁽¹⁵⁾の図4のような相図をもつ。これを第二近接相互作用までとり入れた四角ラスタ格子で近似して得られた相図が図5で定性的により一致を示している。^(16,17)

4. 積分方程式の変形と解法

前出の積分方程式(1.9)を標準形に変形しておく。これにより見通しがよくなる。(1.11)に(1.10)を代入すると

$$S(k) = \frac{1}{2\pi} \int dk' K(k, k') [S(k')]^{z-1} \tag{4.1}$$

$$K(k, k') = \int dH^{(2)} \int P(J) dJ e^{ik'(H^{(2)} - H)} e^{-i\frac{k}{\beta} th^{(2)}(th\beta J th\beta H^{(2)})} \tag{4.2}$$

$T=0$ に対しては

$$K(k, k') = \int dH^{(2)} \int P(J) dJ e^{ik'(H^{(2)} - H)} \times \exp[ik \operatorname{sgn}(H^{(2)}) \operatorname{sgn}(J) \min(|H^{(2)}|, |J|)] \tag{4.3}$$

となる。(4.3)において $P(J) = \delta(J - J_0)$ とおくと有限温度の強磁性のBethe近似の解における基本式を得る。

$T=0$ における積分方程式(1.9)は常磁性を示す $g(h) = \delta(h)$ とスピングラス相を示す $g(h) = \frac{1}{3} [\delta(h+1) + \delta(h) + \delta(h-1)]$ の解をもつことが^(3,4,22)正確に示され、スピングラス相のエントロピーはSherrington-Kirkpatrick⁽¹⁸⁾のそれがあるに反し、正に求められている。^(19,20) Inawashiro は3本以上の有限個のδ関数の重ね合わせの解の存在を示し、またMorita⁽²¹⁾は3本のδ関数と連続関数の重ね合わせの解をヒストグラムの数値計算により求めた。ここでは解析的に扱うことを考える。

$T \rightarrow 0$ の積分核 $K(k, k')$ は次のようになる。 $\operatorname{sgn}(J) \operatorname{sgn}(H^{(2)}) \min(|H^{(2)}|, |J|)$ は $(J, H^{(2)})$ 平面で図6のようになる。従って

$$K(k, k') = e^{-ik'H} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} P(J) dJ \int_{|J|}^{\infty} dH^{(2)} \exp(ik'H^{(2)} - ikJ) + \int_{-\infty}^{\infty} P(J) dJ \int_{-\infty}^{-|J|} dH^{(2)} \exp(ik'H^{(2)} + ikJ) \right\}$$

$$\begin{aligned}
 & + \int_0^{\infty} P(\tau) d\tau \int_{-\tau}^{\tau} dH^{(2)} \exp(i k' H^{(2)} - i k H^{(2)}) \\
 & + \int_{-\infty}^0 P(\tau) d\tau \int_{\tau}^{-\tau} dH^{(2)} \exp(i k' H^{(2)} + i k H^{(2)}) \quad (4.5)
 \end{aligned}$$

δ 関数に用いる公式

$$\int_0^{\infty} e^{ikx} dx = iP \frac{1}{k} + \pi \delta(k) \quad \int_{-\infty}^0 e^{ikx} dx = -iP \frac{1}{k} + \pi \delta(k)$$

を用いると

$$\begin{aligned}
 K(k, k') &= e^{-ik'H} \left\{ 2\pi \delta(k') \int_{-\infty}^{\infty} P(\tau) \cos k\tau d\tau \right. \\
 & - 2 \int_0^{\infty} \frac{\sin(k'-k)\tau}{k'} P(\tau) d\tau + 2 \int_{-\infty}^0 \frac{\sin(k'+k)\tau}{k'} P(\tau) d\tau \\
 & \left. + 2 \int_0^{\infty} \frac{\sin(k'-k)\tau}{k'-k} P(\tau) d\tau - 2 \int_{-\infty}^0 \frac{\sin(k'+k)\tau}{k'+k} P(\tau) d\tau \right\} \quad (4.6)
 \end{aligned}$$

以下外場 $H=0$, $P(\tau) = \frac{1}{2} \delta(\tau-1) + \frac{1}{2} \delta(\tau+1)$ のエジモントンの場合を考へる。単ボンド場の分布関数 $g(h)$ が偶関数なるとより $S(k)$ も偶関数となるから

$$K(k, k') = 2\pi \cos k \delta(k') - 2 \frac{\sin k'}{k'} \cos k + 2 \frac{\sin(k'-k)}{k'-k} \quad (4.7)$$

Bessel 関数の加法定理により

$$\frac{\sin(k'-k)}{k'-k} = \sum_{n=2}^{\infty} (1+2n) j_n(k) j_n(k') \quad (4.8)$$

と展開される。 $j_n(k)$ は Bessel 関数である。 $S(k)$ が偶関数のとき n は偶数のみをとってよい。また第2項も Bessel 関数であらうから以下 k, k' を x, y と記すと

$$K(x, y) = 2\pi \left\{ \cos x \delta(y) - \frac{1}{\pi} \cos x j_0(y) + \frac{1}{\pi} \sum (1+4n) j_{2n}(x) j_{2n}(y) \right\} \quad (4.9)$$

$S(x)$ を

$$S(x) = a + b \cos x + \sum_{\ell=2}^{\infty} c_{2\ell} j_{2\ell}(x) \quad (4.10)$$

と置く。 $a, b, c_{2\ell}$ は未定の係数である。(4.9) と (4.10) を (4.7) に入れて右辺の各項を積分し、両辺の対応する係数を等しいと置く。 $n=3$ の場合を考へる。

$$a = a^2 + \frac{b^2}{2} \quad (4.11)$$

$$b = 2ab + bc_0 + \frac{b^2}{2} + c_0^2 - \sum_{\ell} \sum_{m} c_{2\ell} c_{2m} I_{0, 2\ell, 2m}^{(3)} \quad (4.12)$$

$$C_{2n} = 2a C_{2n} + (1+4n) \sum_l C_{2l} I_{2l,2n}^{(4)} + (1+4n) \sum_l \sum_m C_{2l} C_{2m} I_{2l,2m,2n}^{(5)} \quad (4.13)$$

∴

$$I_{2l,2m}^{(4)} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \cos y j_{2l}(y) j_{2m}(y) dy$$

$$I_{2l,2m,2n}^{(5)} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} j_{2l}(y) j_{2m}(y) j_{2n}(y) dy$$

∴, 以下の期待値を用いた

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} j_0(y) dy = 1 \quad \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \cos y j_0(y) dy = \frac{1}{2}$$

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} j_l(y) j_m(y) dy = \delta_{lm} \frac{1}{1+2l}$$

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \cos y j_0(y) j_{2l}(y) dy = \frac{1}{2} \delta_{l0}$$

(4.10) を C_0, C_2 までとり C_4 以下 = 0 の近似を考へる. 必要は積分を計算すると

$$I_{00}^{(4)} = \frac{1}{2} \quad I_{02}^{(4)} = 0 \quad I_{22}^{(4)} = -\frac{7}{80}$$

$$I_{000}^{(5)} = \frac{3}{4} \quad I_{002}^{(5)} = \frac{1}{16} \quad I_{022}^{(5)} = \frac{1}{160} \quad I_{222}^{(5)} = \frac{9}{256} \quad (4.14)$$

(4.14) を用いると (4.13) の解で物理的に許されるものは

i) $a=1, b=0, C_{2n}=0$

ii) $a=\frac{1}{3}, b=\frac{2}{3}, C_{2n}=0$

iii) $a=0.10683, b=0.21843 \times 2, C_0=0.45631$
 $C_2=0.05759$

と求まる. i) は常磁性状態の解. ii) は先に求められている解^{3,4)} である. iii) の解は Morita が連続関数の解をヒストグラムで表わし, 数値計算で求めた解²⁾ と一致する. 図7にこれより得られた単ボンド有効磁場分布 $g(h)$ を示す.

	a	b/2	C ₀ /2
present solution	0.10683	0.21843	0.22816
Morita	0.10696	0.21854	0.22798

物理量の計算は現在行なっている. 計算の一部は坂井泰博君の協力を得た.

References

1. F. Matsubara and M. Sakata, Prog. Theor. Phys. 55 672 (1976).
2. S. Katsura and S. Fujiki, J. Phys. C. 12 1087 (1979).
3. S. Katsura, S. Inawashiro and S. Fujiki, Physica 99A 193 (1979).
4. S. Inawashiro and S. Katsura, Physica 100A 24 (1980).
5. S. Katsura, Prog. Theor. Phys. 55 1049 (1976).
6. M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. 58 1151 (1977).
7. S. Fujiki and S. Katsura, Prog. Theor. Phys. 65 1130 (1981).
8. S. Katsura, T. Suenaga and T. Imaizumi, Physica 116A 368 (1982).
9. S. Katsura, S. Fujiki and S. Inawashiro, J. Phys. C 12 2839 (1979).
10. S. Ohkuro and S. Katsura, J. Phys. A 13 1501 (1980).
11. S. Katsura and K. Konishi, phys. stat. sol. B 112 399 (1982).
12. B.R. Coles, B.V.B. Sarkissian and R.H. Taylor, Phil. Mag. 37 489 (1978).
13. S. Katsura and I. Nagahara, J. Phys. C 13 4995 (1980).
14. S. Katsura and A. Matsuno, Physica A 123 483 (1983).
15. H. Maletta and W. Feloch, Phys. Rev. B 20 1245 (1979).
16. S. Katsura and I. Nagahara, Z. Physik B 41 349 (1981).
17. S. Katsura and A. Matsuno, phys. stat. sol. b 119 73 (1983).
18. D. Sherrington and S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. 35 1972 (1975).
19. S. Inawashiro, private communication (1980).
20. S. Inawashiro et al, to be published.
21. T. Morita, Physica 125A 321 (1984).
22. S. Katsura, Physica 104A 333 (1980).

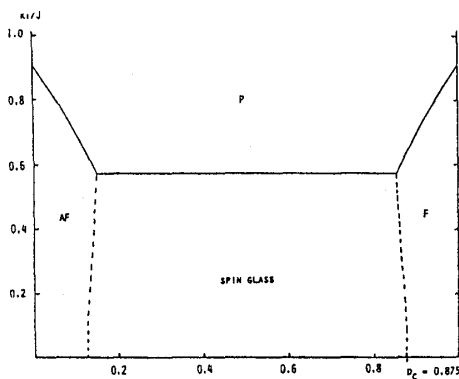


図1. 六角格子の強, 反強磁性
ボンド混晶の対称性による相図^{1, 2, 8)}

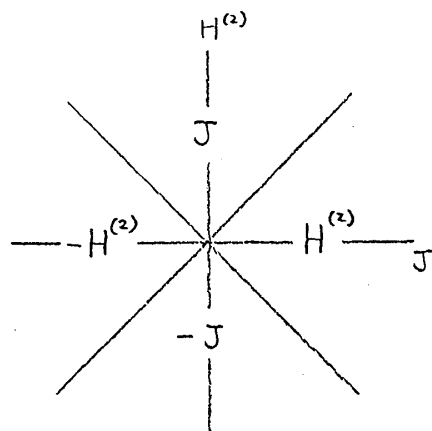


図6. (4.5)の積分領域

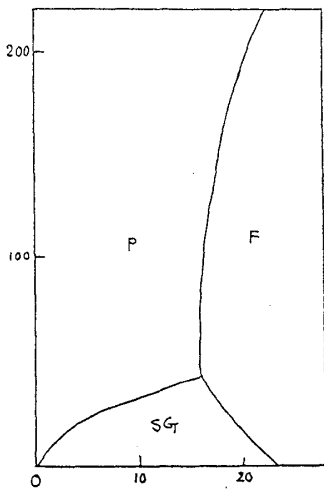


図2 AuFe合金のスピンガラス⁽¹²⁾

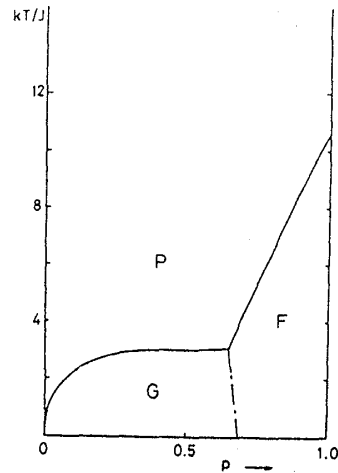


図3 FCC上の強、反強磁性ボン
ド混晶の四面体近似による相図^(13,14)

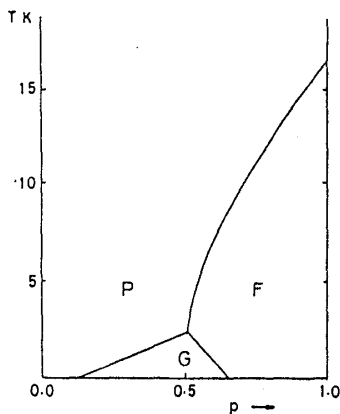


図4 $Eu_pSr_{1-p}S$ の相図⁽¹⁵⁾

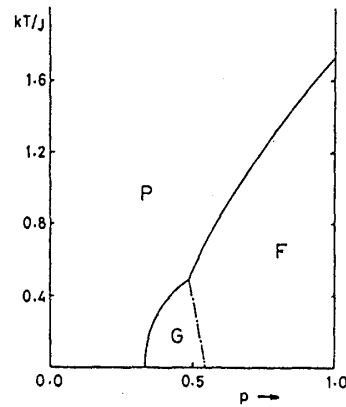
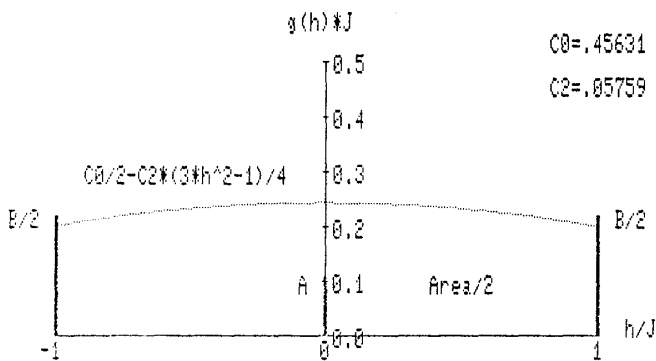


図5 $Eu_pSr_{1-p}S$ の相図(理論)^(16,17)



Solution: A=.18683 B/2=.21843 Area/2=.22816

Morita: A=.18696 B/2=.21854 Area/2=.22798

図7 4節の方法で得られた
単ボンド有効磁場分布関数
3本の δ -関数と2次曲線²
あらかせれる連続関数部分
の和よりなる。