

13. ランダムスピンの統計力学における積分方程式

東北大工 桂 重俊¹⁾ 藤本澄義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

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

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

で与えられ、系の自由エネルギー F は

$$F = -kT \int \log \rho(\{J_{ij}\}) \Pi P(J_{ij}) dJ_{ij} \quad (3)$$

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

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、各のスピンがランダムではあるが凍りついていく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⁽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み、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。これにあるスピンの外から働らく 1 体およびクラスター ^{$i, j, k, l, \dots$} 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 ^{$i, j, k, l, \dots$} の密度行列を $\rho_i^{(1)}$ および $\rho_{ijkl\dots}^{(c)}$ とすると

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

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

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

で与えられる。reducibility は

$$\text{tr}_{ijkl\dots} \rho_{ijkl\dots}^{(c)} / \text{tr} \rho_{ijkl\dots}^{(c)} = \rho_i^{(1)} / \text{tr} \rho_i^{(1)} \quad (7)$$

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

レて、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

$$G(H_i^{(c)}) = \int \delta(H_i^{(c)} - h_{ij'k'l'...} - h_{ij''k''l''...} - \dots) \times \Pi_{\mu\nu} P(J_{\mu\nu}) dJ_{\mu\nu} \Pi'_\mu G(H_\mu^{(c)}) dH_\mu^{(c)} \quad (8)$$

が得られる。ここには $h_{ij'k'l'...}$ はクラスター $i; j'k'l'...$ 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 $i; j'k'l'...$ 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。 $\Pi_{\mu\nu}$ はクラスター $i; j'k'l'...$ のつながれたすべてのボンド、 Π'_μ は格子点 $j, k, l, \dots$ についてとる。 $h_{ij'k'l'...}$ の explicit な形は

$$h_{ij'k'l'...} = \frac{1}{2\beta} \ln \frac{t_{i; j'k'l'...} \exp(-\beta H_i^{(c)}) \rho^{(c)}(1, \sigma_j, \sigma_k, \sigma_l, \dots)}{t_{i; j'k'l'...} \exp(\beta H_i^{(c)}) \rho^{(c)}(-1, \sigma_j, \sigma_k, \sigma_l, \dots)} \quad (9)$$

と与えられる。

(8) は h の Fourier 変換を用いて

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

$$S(k) = \int \exp(-ik h_{i; j'k'l'...}) \Pi_{\mu\nu} P(J_{\mu\nu}) dJ_{\mu\nu} \times \Pi'_\mu G(H_\mu^{(c)}) dH_\mu^{(c)} \quad (11)$$

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

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

$$\begin{aligned} \sigma &= \int +h^n(\beta H_i^{(1)}) G_T^{(1)}(H_i^{(1)}) dH_i^{(1)} = \overline{+h^n \beta H_i^{(1)}} \\ q &= \end{aligned} \quad (13)$$

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

$$\beta h_{ij} = +h^{-1} (t_{ij} l_j^{(c)}) \quad (14)$$

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

$$\overline{l_i^{(c)}} = +h \sum_k' t_{ik}^{-1} (t_{ik} l_k^{(c)}) \simeq \sum_k' t_{ik} \overline{l_k^{(c)}} \quad (15)$$

$$\overline{l_i^{(c)2}} = +h^2 \sum_k' t_{ik}^{-1} (t_{ik} l_k^{(c)})^2 \simeq \sum_k' t_{ik}^2 \overline{l_k^{(c)2}} \quad (16)$$

となる。Curie 温度 T_c , スピニングラス転移温度 T_g は

(15), (16) が零でない根をもちはじめの温度として

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

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

により与えられる。($t_c \equiv \tanh(J/kT_c)$, $t_g \equiv \tanh(J/kT_g)$)
 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 ρ 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 ρ 関数の重ね合わせ

$$g(h) = \sum a_\ell \delta(h - \ell J) \quad (19)$$

を仮定す

$$S(k) = \sum a_\ell \exp(-i\ell k J) \quad (19')$$

であらわす。(19)を(10)にいれろと

$$G(H_i^{(0)}) = \sum b_m \delta(H_i^{(0)} - mJ) \quad (20)$$

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

$$\sum_{mngpqrs} b_m b_n b_g p^{(4+p+q+r+s)/2} (1-p)^{(4-p-q-r-s)/2} \\ \times \chi [u_{mngpqrs}(1) - u_{mngpqrs}(-1)]/2 \quad (21)$$

の x^ℓ の係数で与えられる。ここに $m, n, g = -2, -1, \dots, 2$, $p, q, r, S = -1$ and 1 , または

$$u_{mngpqrs}(\sigma_i) = \max_{\sigma_j, \sigma_k, \sigma_\ell} (p\sigma_i\sigma_j + q\sigma_j\sigma_k \\ + r\sigma_k\sigma_\ell + S\sigma_\ell\sigma_i + m\sigma_j + n\sigma_k + g\sigma_\ell) \quad (22)$$

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

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

とみると, 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-で 100 個, 四面体クラスタ-で数4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, ON
FORT 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, $0 \leq a_l \leq 1$, $\sum a_l = 1$ であるものが物
理的に許されるが, 解は中ベピークの δ 関数 ($a_l = 0$ ($l \neq 0$),
 $a_0 = 1$) (常磁性), 非対称解 ($a_l \neq -a_{-l}$) (強磁性),
対称解 ($a_l = -a_{-l}$) (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 角ラスタースによる平方格子の δ 関数の振巾 (対称
性を見易くするため a_l と a_{-l} 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論文論文にのべる。

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
¹¹³
Suppl. (1983).
4. S.Fujiki, Y.Abe and S.Katsura, Comp.Phys.Comm. 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.Comm.
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 $\text{Eu}_p\text{Sr}_{1-p}\text{S}$. (Maletta and Felsch 1980).

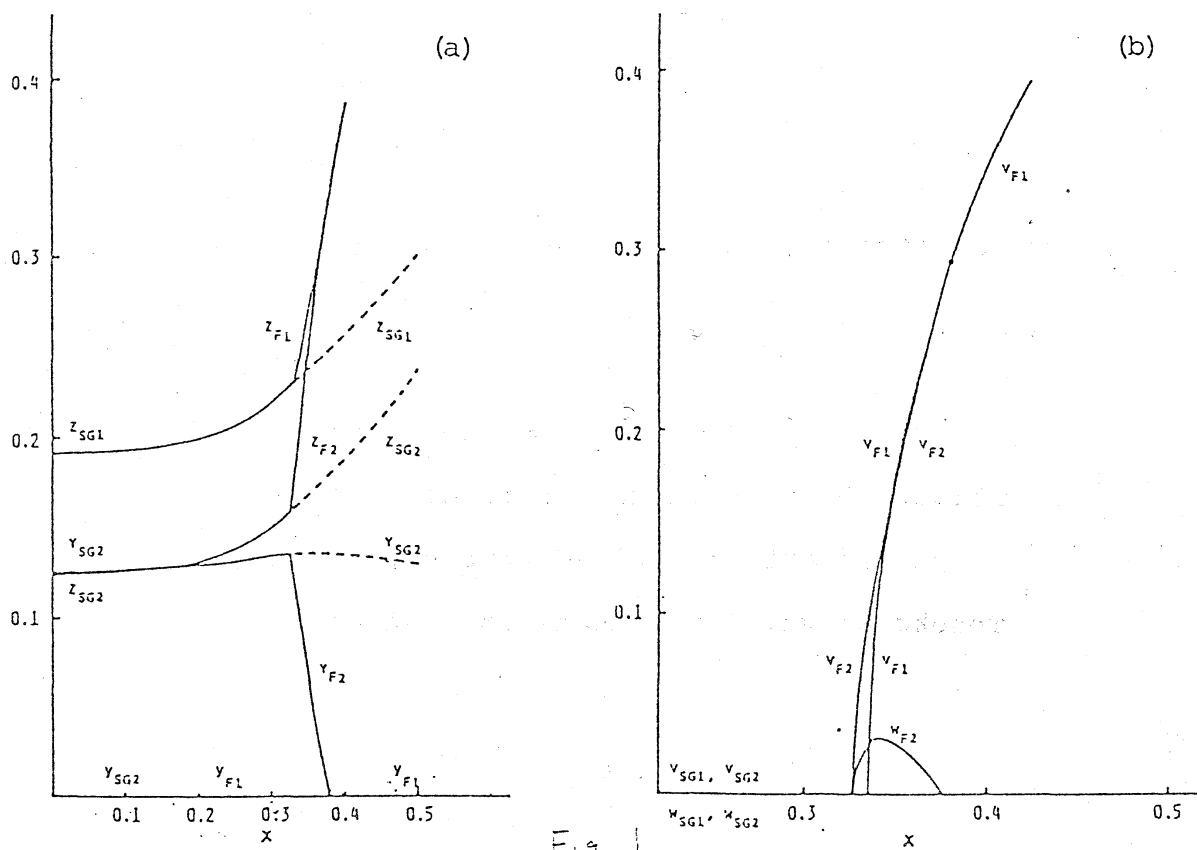


Fig. 1

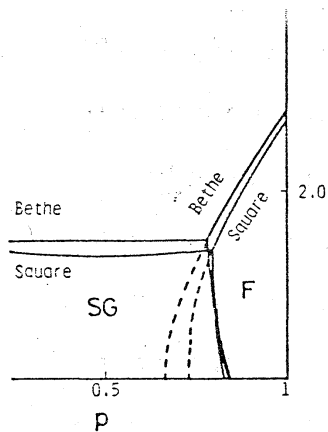


Fig. 2

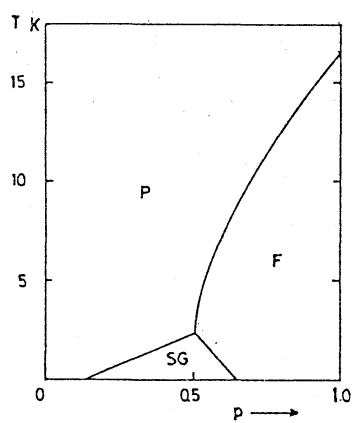


Fig. 4

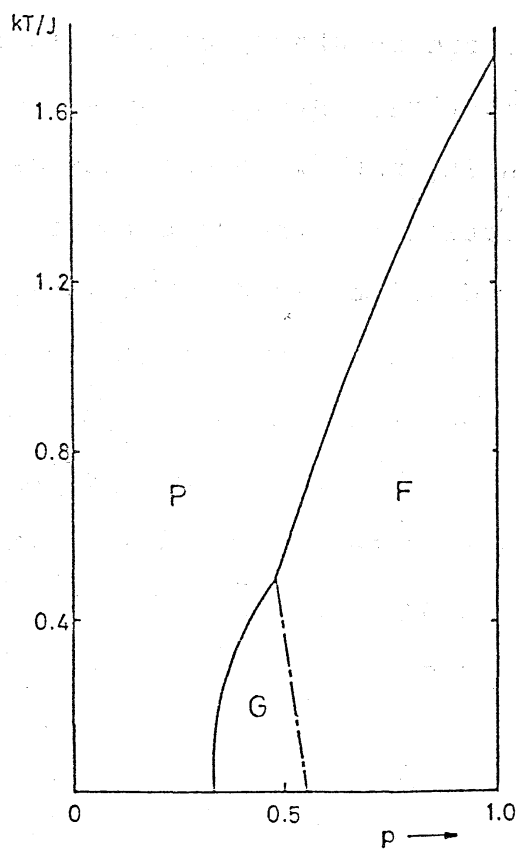


Fig. 3