

スピングラスにおける有効場のみなる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の系を考えたその交換エネルギー J_{ij} の分布 $P(J)$ が与えられているとする。この系の自由エネルギー F をキュラント展開すると

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

ここに $F_i^{(0)}$, $F_{ij}^{(0)}$, $F_{ijk}^{(0)}$... 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項までとったものが対近似 (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 , そのとなりの k スピンの場と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

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

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

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

となりキュラント自由エネルギーは

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

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

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

で与えられる。 ρ_1 および ρ_2 の規格化を $\hat{\rho}_i^{(1)}$ と $\hat{\rho}_{ij}^{(2)}$ をそれぞれ部分和をとると

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

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

(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

または (1.7) と (1.8) とから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

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

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

(1.9) は Fourier 変換を用いると連立積分方程式

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

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

となり $H^{(1)}$ の分布関数は (1.11) を使って求めた $S(k)$ を用いて

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

で与えられる。 $S(k)$ は単一ボンドによる場 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 は

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

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

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

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

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

ここに 2 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 $\chi_u (= \partial \text{th} \beta H^{(1)} / \partial H \approx \beta \partial H^{(1)} / \partial H)$ 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 $\overline{\sigma^2} = g = \overline{th^2\beta H^{(1)}}$ は有限であり得る。 $\partial \overline{th^2\beta H^{(1)}} / \partial H^2 \simeq \beta^2 \partial H^{(1)2} / \partial H^2$ でスピングラス帯磁率 χ_g を定義すると (2.2) と同様にして

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

となりスピングラス転移温度 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ことも出来る。^(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) (スピングラス相と強磁性相, 反強磁性相の境界⁸⁾ については説明を省略した。)

3. 二元混晶理論のその後の展開

結合方程式(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えた定式化した結合方程式を求め、一様帯磁率、スラッガード帯磁率、スピング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った。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 Neel 温度, 上号 $n=2$ がスピング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ングラスが存在する可能性から生じることはある。この扱いは A と B のスピ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では図2のようなタリタのものが¹²⁾ 多い。これは実験でスピングラス相の見出されているものが FCC 構造などの最近接相互作用のみでは反強

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面体クラスターまで考え、前節の方法を拡張すると図3の相図が得られる。^(13,14) 尚、FCC構造では強磁性ボンドが存在しなくとも稀薄反強磁性相⁽¹⁷⁾でスピンガラスが得られる。これは反強磁性交換エネルギーをもつたFCC格子ではスピンはフラストレーションなしに配置することが出来なからである。

$\text{Eu}_p\text{Sr}_{1-p}\text{S}$ 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2近接格子点であるとき反強磁性的⁽¹⁵⁾であるサイトスピンガラス⁽²⁾ 図4のような相図をもつ。これを第2近接相互作用までとり入れた四角クラスター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

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

$$K(k, k') = \int dH^{(2)} \int P(J) dJ e^{ik'(H^{(2)} - H)} e^{-i\frac{k}{\beta} \text{th}^{(1)}(\text{th}\beta J \text{th}\beta H^{(2)})} \quad (4.2)$$

$T=0$ に対しては

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

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 $g(h) = \delta(h)$ とスピンガラス相を示す $g(h) = \frac{1}{3}[\delta(h+1) + \delta(h) + \delta(h-1)]$ の解をもつことが^(3,4,22) 正確に示された。スピンガラス相のエントロピーは Sherrington-Kirkpatrick⁽¹⁸⁾ のそれが真であるに反し、正に求められている。^(19,20) Inawashiro⁽²¹⁾ は3本以上の有限個のS1割枝の重ね合わせの解の存在を示し、また Morita⁽²¹⁾ は3本のS1割枝と連続1割枝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。 $\text{sgn}(J) \text{sgn}(H^{(2)}) \min(|H^{(2)}|, |J|)$ は $(J, H^{(2)})$ 平面で図6のようになる。従って

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

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

δ関数に因る公式

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

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 $H=0$, $P(\tau) = \frac{1}{2} \delta(\tau-1) + \frac{1}{2} \delta(\tau+1)$ のエドモントンの場合を
 考える。単ボンド場の分布関数 $g(h)$ が偶関数なことをより $S(k)$ 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

$$\frac{\sin(k'-k)}{k'-k} = \sum_{n=0}^{\infty} (1+2n) j_n(k) j_n(k') \quad (4.8)$$

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 関数であらわして以下 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

$$S(x) = a + b \cos x + \sum_{\ell=0}^{\infty} c_{2\ell} j_{2\ell}(x) \quad (4.10)$$

と置く。 $a, b, c_{2\ell}$ は未定の係数である。(4.9) と (4.10) を (4.1) に入れて右辺の
 各項を積分し、両辺の対する係数を等しいと置く。 $\Sigma=3$ の場合を考える。

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

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

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

∴ ∴ ∴

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

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

で、また次の関係を用いた

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

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} j_{\ell}(y) j_m(y) dy = \delta_{\ell m} \frac{1}{1+2\ell}$$

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \cos y j_0(y) j_{2\ell}(y) dy = \frac{1}{2} \delta_{\ell 0}$$

(4.10) を C_0, C_2 まじり C_4 以下 $= 0$ の近似を考へる。必要は積分を計算すると

$$\begin{aligned} I_{00}^{(4)} &= \frac{1}{2} & I_{02}^{(4)} &= 0 & I_{22}^{(4)} &= -\frac{7}{80} \\ I_{000}^{(5)} &= \frac{3}{4} & I_{002}^{(5)} &= \frac{1}{16} & I_{022}^{(5)} &= \frac{1}{160} & I_{222}^{(5)} &= \frac{9}{256} \end{aligned} \quad (4.14)$$

(4.14) を用いると (4.13) の解で物理的に許されるものは

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

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

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

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²¹⁾と一致する。図7にこれより得られた平均有効磁場分布 $g(h)$ 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 122 483 (1983).
15. H. Maletta and W. Felsch, 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).

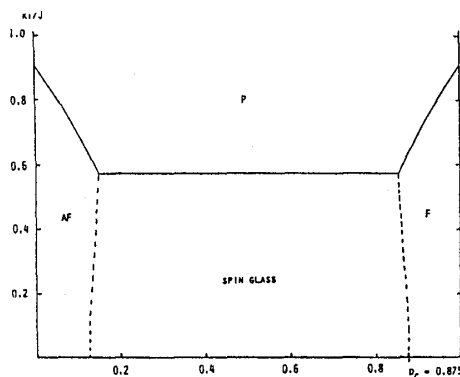


図1. 六角格子上の強, 反強磁性
ボンド混晶の対称性による相図^{1,2,8)}

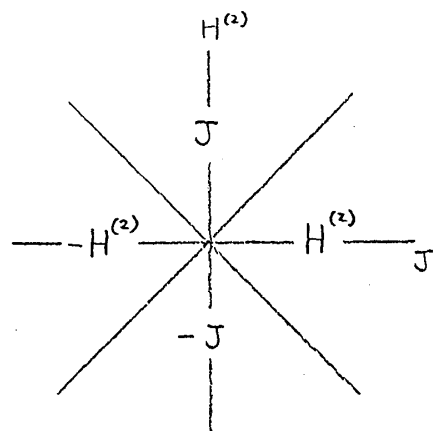


図6. (4.5) の積分領域

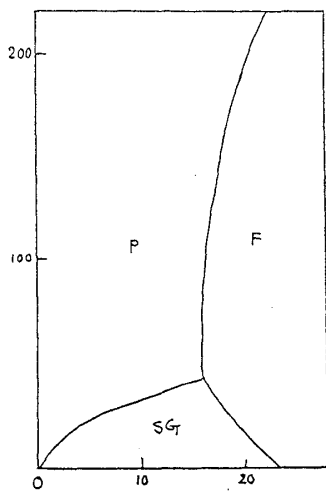


図2 AuFe合金のスピンガラス⁽¹²⁾

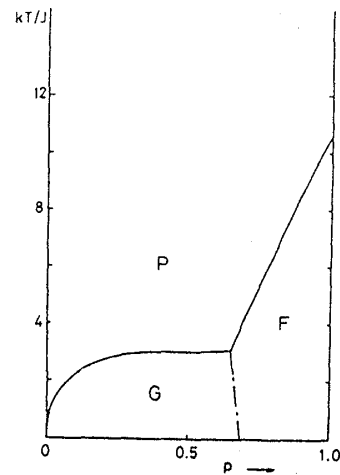


図3 FCC上の強、反強磁性ボンド混晶の四面体近似による相図^(13,14)

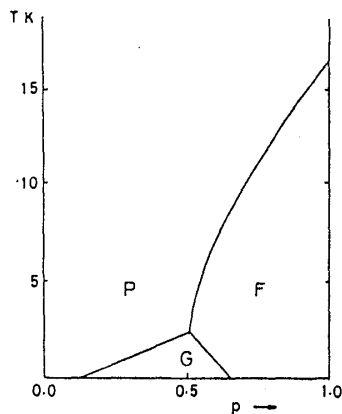


図4 $\text{Eu}_p\text{Sr}_{1-p}\text{S}$ の相図⁽¹⁵⁾

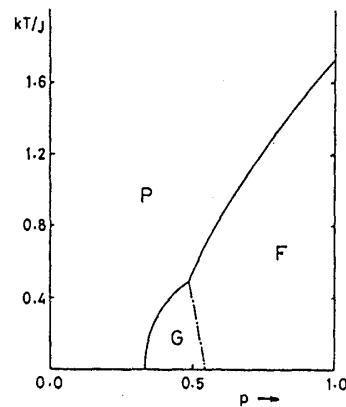
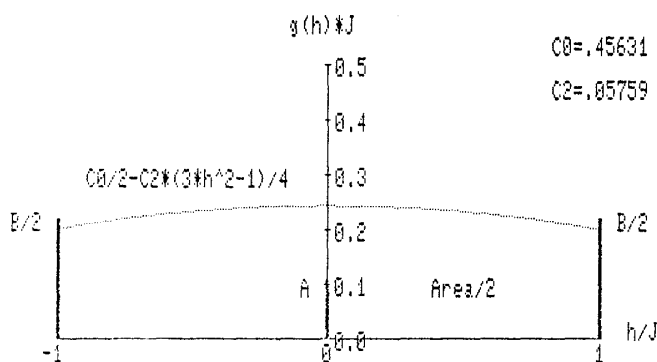


図5 $\text{Eu}_p\text{Sr}_{1-p}\text{S}$ の相図(理論)^(16,17)



Solution: A=.10683 B/2=.21843 Area/2=.22816

Morita: A=.10696 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
あらわされる連続関数部分
の和よりなる。