

ランダム系のクラスター展開Ⅱ

(阪大・教養) 植山 宏

(11月4日受理)

前稿に続いて、平均のハミルトニアンで書かれる系より出発するクラスター展開の性質を調べる。

§ 5. 展開パラメーターと摂動展開

§ 3の結果(15)は次のように書かれる。

$$\begin{aligned} \tilde{M}(t) = \exp_{+L} \sum_n \alpha \{ (1-c) \exp_{+} \left[-ci \int_0^t V_n(t') dt' \right] \\ + c \exp_{+} \left[(1-c) i \int_0^t V_n(t') dt' \right] - 1 \} \end{aligned} \quad (15')$$

この式は、摂動展開を行うと

$$\tilde{M}(t) = \exp_{+L} \sum_n \alpha \left\{ \sum_{s=1}^{\infty} Q_s(c) \frac{i^s}{s!} \int_0^t \cdots \int_0^t dt_1 \cdots dt_s O[V_n(t_1) \cdots V_n(t_s)] \right\} \quad (19)$$

となる。こゝに

$$Q_s(c) = c(1-c) \{ (1-c)^{s-1} - (-c)^{s-1} \} \quad (20)$$

従って、クラスター展開

$$\begin{aligned} \tilde{M}(t) = 1 \\ + \alpha \sum_n \sum_{s=1}^{\infty} Q_s(c) \frac{i^s}{s!} \int_0^t \cdots \int_0^t dt_1 \cdots dt_s O[V_n(t_1) \cdots V_n(t_s)] \\ + \alpha^2 \sum_{(n, m)} \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{s'=1}^{\infty} Q_s(c) Q_{s'}(c) \frac{i^{s+s'}}{s! s'!} \int_0^t \cdots \int_0^t dt_1 \cdots dt_{s+s'} \\ O[V_n(t_1) \cdots V_n(t_s) V_m(t_{s+1}) \cdots V_m(t_{s+s'})] \\ + \cdots \end{aligned} \quad (21)$$

は、展開パラメータを $c(1-c)$ とする展開である事が分る。

低濃度展開

$$M(t) = \exp_{+L} c \sum_n \{ \exp_{+} (i \int_0^t V_n(t') dt') - 1 \} \quad (6)$$

と比較すれば，平均の不純物ポテンシャルを取入れる再規格化によって，展開パラメーターが c より $c(1-c)$ に変わったとってよい。

今，キュムラント函数 $K(t)^{(5)}$ を考える。定義によって

$$M(t) = \exp_{+} K(t) \quad (22)$$

$$K(t) = \langle \exp_{+} (i \int_0^t H_1(t') dt') - 1 \rangle_c$$

$$= \sum_n \langle \exp_{+} (i \int_0^t \rho_n V_n(t') dt') - 1 \rangle_c$$

$$= \sum_n \sum_{s=1}^{\infty} p_{-s}(c) \frac{i^s}{s!} \int_0^t \dots \int_0^t dt_1 \dots dt_s O\{V_n(t_1) \dots V_n(t_s)\} \quad (23)$$

$$p_s(c) \equiv \langle \rho^s \rangle_c \quad (24)$$

(22) 式の $\exp_{+}$ を展開する方法

$$M(t) = 1 + K(t) + \frac{1}{2!} O\{K(t)^2\} + \dots \quad (25)$$

が，ダイアグラム法で通常考えられている^{(2),(4)} “低次” のダイアグラムに相当する。この展開では，上の再規格化は(23)の $s=1$ の項が落ちる以外に影響はなく， $R_s(c)$ の函数形は変らない。

§ 6 自由エネルギー

こゝでは，§ 3 の展開を自由エネルギーの展開へ拡張する。この方法は，単に不純な系の格子振動や電子状態に限らず，異種のスピンを含むスピン系，固体水素等に適用出来るものと期待出来る，非磁氣的な不純物を含むスピン系を例にとって書くと，

$$H = \sum_{(ij)} \rho_i \rho_j J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (26)$$

ρ_i は, 1 及び 0 をとる (独立な) ランダム変数と仮定する。(26) を次のように分解する。

$$H = H_0 + H_1$$

$$H_0 = \sum_{(i,j)} r_{ij} S_i S_j \quad (27)$$

$$H_1 = \sum_{(i,j)} (\rho_i \rho_j - r) J_{ij} S_i S_j = \sum_{\alpha} \tau_{\alpha} V_{\alpha}$$

こゝに $J_{ij} S_i S_j$ を簡単に V_{α} と書いた。ランダム変数 τ_{α} が, H_1 にだけ含まれる事が重要である。

系の自由エネルギーは

$$-\beta F = \ell_n Z_0 + \ell_n \langle \exp + (-\int_0^{\beta} H_1(\lambda) d\lambda) \rangle \quad (28)$$

こゝに

$$Z_0 = \text{Tre}^{-\beta H_0}$$

$$\langle \dots \rangle = \text{Tre}^{-\beta H_0} \dots / Z_0 \quad (29)$$

(28) の右辺・第二項を Generalized Cumulant expansion Theorem (5)

によって書き直す。

$$\langle \exp + (-\int_0^{\beta} H_1(\lambda) d\lambda) \rangle_c$$

$$= \langle \exp + \sum_{\alpha} [\exp + (-\int_0^{\beta} d\lambda \tau_{\alpha} V_{\alpha}(\lambda)) - 1] - 1 \rangle_c$$

$$= \sum_{\alpha} \ell_n \langle \exp + (-\int_0^{\beta} d\lambda \tau_{\alpha} V_{\alpha}(\lambda)) \rangle$$

$$+ \sum_{(\alpha\beta)} \ell_n \frac{\langle \exp + (-\int_0^{\beta} d\lambda (\tau_{\alpha} V_{\alpha} + \tau_{\beta} V_{\beta})) \rangle}{\langle \exp + (-\int_0^{\beta} d\lambda \tau_{\alpha} V_{\alpha}) \rangle \langle \exp + (-\int_0^{\beta} d\lambda \tau_{\beta} V_{\beta}) \rangle} \quad (30)$$

+

次に, 変数 τ_{α} について平均をとるのだが, この為に, $\rho_{\alpha} = \tau_{\alpha} + r = \rho_i \rho_j$

が, 0 と 1 という二つの値しか取らない事を利用して $\langle \dots \rangle$ の外へ出して

おく。 結局,

$$-\beta \bar{F} = \ell_n Z_0$$

$$+ \sum_{\alpha} \{ \bar{\rho}_{\alpha} \ell_n \langle \exp_+ [- \int_0^{\beta} d\lambda (1-r) V_{\alpha}] \rangle + (1-\bar{\rho}_{\alpha}) \ell_n \langle \exp_+ [+ \int d\lambda r V_{\alpha}] \rangle$$

$$+ \sum_{(\alpha\beta)} \{ \bar{\rho}_{\alpha} \rho_{\beta} \ell_n \langle \exp_+ [- \int d\lambda (1-r) V_{\alpha} - r V_{\beta}] \rangle$$

$$+ \overline{\rho_{\alpha} (1-\rho_{\beta})} \ell_n \langle \exp_+ [- \int d\lambda ((1-r) V_{\alpha} - r V_{\beta})] \rangle$$

$$+ \overline{(1-\rho_{\alpha}) \rho_{\beta}} \ell_n \langle \exp_+ [- \int d\lambda (-r V_{\alpha} + (1-r) V_{\beta})] \rangle$$

$$+ \overline{(1-\rho_{\alpha}) (1-\rho_{\beta})} \ell_n \langle \exp_+ [+ \int d\lambda r (V_{\alpha} + V_{\beta})] \rangle$$

$$- \bar{\rho}_{\alpha} \ell_n \langle \exp_+ [- \int d\lambda (1-r) V_{\alpha}] \rangle - (1-\bar{\rho}_{\alpha}) \ell_n \langle \exp_+ [+ \int d\lambda r V_{\alpha}] \rangle$$

$$- \bar{\rho}_{\beta} \ell_n \langle \exp_+ [- \int d\lambda (1-r) V_{\beta}] \rangle - (1-\bar{\rho}_{\beta}) \ell_n \langle \exp_+ [+ \int d\lambda r V_{\beta}] \rangle \}$$

$$+ \dots\dots$$

(31)

この展開は、 $r=0$ 又は 1 の時、Lifshitz - Stepanova (7) の低濃度展開に還元するが、 $r=c^2$ と取る事によって、ハミルトニアンの段階で平均した系より出発するクラスター展開とする。展開パラメーターはやはり $c(1-c)$ と予想され、ほぼすべての濃度領域で最初の数項で十分と予想されるが、詳細及び応用については別の機会に譲りたい。

(7) I. M. Lifshitz and G. I. Stepanova *Soviet phys. - JETP* 3

(1956), 656. 及び A. Maradudin " *Theory of Lattice*

Dynamics in Harmonic Approximations " ed by Seitz - Turnbull

P. 198.