

スピングラスにおける有効場の分布関数を求める代数方程式について

三菱総研 福田 亙
東京電機大 桂 重俊

(Wataru Fukuda, Shigetoshi Katsura)

§1 スピングラス

1972年に磁性不純物を混入した希薄合金AuFeにおいて、零磁場帯磁率に鋭いカスプが発見され、スピングラスに関する研究の発端になった。

金属中の磁性原子間には、伝導電子を介しRKKY相互作用が働くが、これは原子間の距離によって正または負の値をとる。希薄合金中の磁性原子の配置はランダムであり、その結果として正負のランダムの相互作用が存在することになる。このことからスピングラス系は、強磁性的、反強磁性的相互作用がランダムに存在し、競合するスピン系であるといえることができる。そして、この相互作用の乱れのために各スピンの向きは、比較的短い時間では、それぞれ安定な方向（即ち、ランダムな方向）に凍結している。いわば、無数に乱れた容易軸ができ、その方向に秩序が生じているのである。しかし、ある転移温度 T_g 以下では、非常に長い緩和現象が観測されるなど、長い時間スケールにおいては、非平衡性が現われる。

このような複雑な様相を呈する混沌（カオス）とした系には、どのような熱力学的秩序が生じ、またそれがどのように記述されるのか、ということがスピングラスに関する基本的問題¹⁾である。

本章では、スピングラスの有効場の分布関数を、これがみたす積分方程式²⁾から求める。系の自由エネルギー、磁化、スピングラスのオーダーパラメータなどが、この分布関数によって与えられ、前述のスピングラスの基本的問題に対する一つの解答になるであろう。

§2 スピングラス系の有効場の分布関数のみたす積分方程式

本章で扱うモデルは、六角格子の近似として対クラスターのカクタス格子（最隣接原子数 $Z=3$, Fig. 1 参照）を考える。

k スピンから i スピンにかかる有効場を h_{ik} と表わし、一つ、及び二つのスピンに着目すると

$$H_1 = -\sigma_1 \sum_{k=1}^Z h_{1k} \quad (1)$$

$$H_{12} = -J_{12} \sigma_1 \sigma_2 - \sigma_1 \sum_{k=1}^{Z-1} h_{1k} - \sigma_2 \sum_{k=1}^{Z-1} h_{2k} \quad (2)$$

$$\sigma_i = \pm 1, \quad i=1,2$$

である。ここで、一体の密度行列 ($\exp [-\beta H_1]$) から求めた物理量と、二体の密度行列 ($\exp [-\beta H_{12}]$) から求めた物理量は等しい、という self-consistency を要請すると、有効場 h は、次のように与えられる。

$$h = \frac{1}{\beta} \tanh^{-1} \left(\tanh \beta J' \tanh \left(\beta \sum_{k=1}^{z-1} h_{2k} \right) \right) \quad (3)$$

最隣接相互作用 $J_{i,j}$ が、分布 $P(J_{i,j})$ をもつとき、有効場 h の分布 $g(h)$ のみたす積分方程式は、

$$g(h) = \int \delta \left[h - \frac{1}{\beta} \tanh^{-1} \left\{ \tanh \beta J' \left(\beta \sum_{k=1}^{z-1} h_{2k} \right) \right\} \right] P(J') dJ' \prod_{k=1}^{z-1} g(h_{2k}) dh_{2k}, \quad (4)$$

となり、 M 個ボンドの分布関数を

$$g^{(M)}(h') = \int \delta \left[h' - \sum_{k=1}^M h_{1k} \right] \prod_{k=1}^M g(h_{1k}) dh_{1k} \quad (5)$$

とおくと、

$$g(h) = \int \delta \left[h - \frac{1}{\beta} \tanh^{-1} \left\{ \tanh \beta J' \tanh \beta h' \right\} \right] P(J') dJ' g^{(z-1)}(h') dh', \quad (6)$$

と表わされ、これが解くべき方程式である。系の状態は、この積分方程式の解である有効場の分布関数によって記述さる³⁾。

§3 積分方程式の解

今、絶対零度、外部磁場零において、強磁性的相互作用と反強磁性的相互作用が、等しい確率でランダムに存在する場合、即ち、

$$P(J_{i,j}) = \frac{1}{2} \delta(J_{i,j} - J) + \frac{1}{2} \delta(J_{i,j} + J) \quad (7)$$

なる分布の場合 ($\pm J$ モデル) について考える。このとき先の積分方程式は、

$$\begin{aligned} g(h) = & \frac{1}{2} \int \delta \left[h - \frac{1}{\beta} \tanh^{-1} \left\{ \tanh \beta J' \tanh \beta h' \right\} \right] g^{(z-1)}(h') dh' \\ & + \frac{1}{2} \int \delta \left[h + \frac{1}{\beta} \tanh^{-1} \left\{ \tanh \beta J' \tanh \beta h' \right\} \right] g^{(z-1)}(h') dh', \end{aligned} \quad (8)$$

となる。

いま絶対零度 ($\beta \rightarrow \infty$) の場合を考え、有効場 h の分布関数 $g(h)$ (積分方程式(8)の解) を、 $2n+1$ 本の δ 関数の重ね合わせで表わす^{2), 4)}。

$$g(h) = \sum_{l=-n}^n U_l \cdot \delta(h - lJ/n), \quad l' = |l| \quad (9)$$

ただし、今は、スピングラス状態を記述する解だけを求めるために、 $g(h)$ は $h=0$ に関して、対称に分布するものとした。また、 U に対する規格化条件

$$\sum_{l=-n}^n U_l = 1, \quad l' = |l| \quad (10)$$

を課す。

解(9)を(5)及び(8)に代入し、 $\beta \rightarrow \infty$ の極限を考えると、この解が成り立つための U に対する条件を得る。この条件は、 U に関する代数方程式として次のように表わされる。

$$U_0 = \text{Coeff}(f_n^2, 1) \\ = U_0^2 + 2U_1^2 + \cdots + 2U_n^2,$$

$$U_1 = \text{Coeff}(f_n^2, X) \\ = 2U_0U_1 + \cdots + 2U_{n-1}U_n,$$

•
•
•

(11)

$$U_{n-1} = \text{Coeff}(f_n^2, X^{n-1})$$

$$U_n = \text{Coeff}(f_n^2, X^n) + \cdots + \text{Coeff}(f_n^2, X^{2n})$$

ここで、

$$f_n = U_n X^{-n} + U_{n-1} X^{-n+1} + \cdots + U_0 + \cdots + U_{n-1} X^{n-1} + U_n X^n$$

例えば、分布関数を5本の δ 関数の重ね合わせで表わすとき、 U に関する代数方程式は

$$\begin{aligned}
U_0^2 - U_0 + 2U_3^2 + 2U_2^2 + 2U_1^2 &= 0 \\
2U_1U_0 + 2U_2U_3 + 2U_2U_1 - U_1 &= 0 \\
2U_2U_0 + 2U_1U_3 - U_2 + U_1^2 &= 0 \\
U_0 + 2U_1 + 2U_2 + 2U_3 - 1 &= 0
\end{aligned} \tag{11'}$$

である。

ただし、近似を上げ、例えば四角クラスター等を用いた場合、これらの条件式はさらに複雑になる。

§4 Gröbner - Bases

前節では、有効場の分布関数を δ 関数の重ね合わせで表わし、解くべき方程式として δ 関数の振幅 U に関する代数方程式が得られた。この代数方程式は、系の種々の状態を記述する複数の解をもつため、それらをすべてもとめる必要がある。

代数方程式の根を求めるには、数値計算を用いる方法が一般的である。しかし、数値計算による求根の方法は、求まる根が初期値に依存し、特に変数が多い場合は、初期値の選び方が難しい。従って、方程式の全根を求めるのに、この方法は適さず、解析的な方法で解かなければならない。

代数方程式の解法として有力なものに Gröbner-Bases を用いた方法がある^{5), 6), 7)}。Gröbner-Bases の方法によれば、前述の変数 $U_0, \dots, U_n$ に関する連立代数方程式 $f_1 = 0, \dots, f_n = 0$ ((11)式) が与えられたとき、

$$\begin{aligned}
g_1(U_1) &= 0, g_2(U_1, U_1'_{-1}) = 0, \dots, g_n(U_1, U_1'_{n-1}) = 0 \\
1, 1'_{-1}, \dots, 1'_{n-1} &= 1, \dots, n.
\end{aligned} \tag{12}$$

なる代数方程式を得る。方程式 g_1 は、一つの変数 U_1 からなり、 $g_2, \dots, g_n$ は、 $U_1'_{-1}$ ($i = 1, \dots, n-1$) の一次と、 x_1 の二変数からなる。従って、 g_1 を解き、その値を残りの $g_2, \dots, g_n$ に与えることによって、連立代数方程式 $f_i = 0$ ($i = 1, \dots, n$) の全根を求めることができる。

§5 自由エネルギーとエントロピー

対近似において、1 サイト当たりの自由エネルギー F は、

$$F = (1-z)F^{(1)} + zF^{(2)}/2 \tag{13}$$

で与えられ、ここに

$$-\beta F^{(1)} = \overline{\ln \text{tr} \exp [-\beta H_1]} \quad (14)$$

$$-\beta F^{(2)} = \overline{\ln \text{tr} \exp [-\beta H_{12}]} \quad (15)$$

である。ただし、 $\overline{\quad}$ は有効場と交換相互作用の分布 $g(h)$, $P(J)$ による平均を表わす。従って、

$$-\beta F^{(1)} = \int \ln [2ch^{(1)}] g^{(1)}(h^{(1)}) dh^{(1)} \quad (16)$$

$$-\beta F^{(2)} = \int \ln [\exp(\beta(J_{ij}+h_i+h_j)) + \exp(\beta(J_{ij}-h_i-h_j)) + \exp(\beta(-J_{ij}+h_i-h_j)) + \exp(\beta(-J_{ij}-h_i+h_j))] P(J_{ij}) dJ_{ij} g^{(2)}(h^{(2)}_i) g^{(2)}(h^{(2)}_j) dh^{(2)}_i \times dh^{(2)}_j. \quad (17)$$

今、分布関数 $g^{(1)}(h^{(1)})$, $g^{(2)}(h^{(2)})$ は、 δ 関数の重ね合わせで表われており、 δ 関数の振幅 U に関する代数方程式（全節参照）が、解ければ分布関数が求まり、従って、(13), (16), (17) 式より自由エネルギーが得られる。

β が非常に大きい ($T \rightarrow 0$) として、自由エネルギーを

$$-\beta F = \beta A + B + O(1/\beta) \quad (18)$$

の形に展開すると、絶対零度におけるエネルギー E , 及びエントロピー S は、

$$E = A, \quad S/k_B = B \quad (19)$$

で与えられる。

§6 δ 関数の重ね合わせによる解

対クラスターのカクタス格子 ($z=3$) において、絶対零度、外部磁場零で、 $\pm J$ モデルの有効場の分布関数がみたす積分方程式が解析的に解かれた。得られた解は、 $2n+1$ 本 ($n=1 \sim 4$) の δ 関数の重ね合わせで表わされ、Fig. 2 に図示した (ただし、 $n=4$ の場合は Gebauer の計算をもとにした)。また、これらの解 (有効場の分布関数) から、1 サイト当りの自由エネルギー、及びエントロピーを求めた (Fig. 3~4 に記載)。

一般の n の値の場合に存在する解は、

$$[I] \quad n \text{ の値に依存せず, } g(0)=1, \quad g(h)=1/3 \quad (h=0, h=\pm J) \quad \text{なる解が必ず}$$

存在する。前者は常磁性状態の解であり、後者はスピングラス状態を表わす解である。

〔Ⅱ〕 ある n の場合の解には、 n' ($< n$) の場合のスピングラスの解が存在する。この n' は、

$$l/n = l'/n', \quad l=1, \dots, n-1, \quad l'=1, \dots, n'-1 \quad (19)$$

で与えられる（ただし、 l' 、 n' は互いに素な整数）。

〔Ⅲ〕 ある n の場合には、これら〔Ⅰ〕、〔Ⅱ〕以外の $g(h) \neq 0$ ($-J \leq h \leq J$) なるスピングラス状態を表わす解が、唯一存在する。

であることが分かる。

n が無限大の極限において、〔Ⅲ〕のタイプの解は、 $h=0, \pm J$ で δ 関数型のピークをもち、 $0 < h < |J|$ では連続した値をとり、 $g(h') > g(h'')$ ($|h'| < |h''|$) なる関係をみたすであろう (Fig. 5 参照)。Morita は⁸⁾、有効場の分布関数を δ 関数と連続関数の重ね合わせで表わし、連続関数部分をヒストグラムで近似することによって、そのような解を求めた (Fig. 6)。また、この解を解析的に求めることも行なわれた⁹⁾。

絶対零度におけるエントロピーは、 n が大きくなっても、Sherrington - Kirkpatrick モデルにおけるレプリカ法の結果にみられるような負の値にはならず、正の有限の値になる。

謝辞

Gröbner basis の計算に種々の点で御協力をいただいた萩田直史博士、Gebauer 博士、森継修一氏に、また御討議いただいた猪苗代盛教授に感謝する。

参考文献

- 1). 桂 重俊, フィジクス, 3 (1982) 17. 鈴木 増雄, 固体物理, 19 (1984) 387.
- 2). S. Katsura and S. Fujiki, J. Phys. C 12 (1979) 1087. S. Katsura, S. Inawashiro and S. Fujiki, 99A (1979). S. Inawashiro and S. Katsura, Physica, 100A (1980) 24. 桂重俊, 猪苗代盛, 松原史卓, 藤木澄義, 日本物理学会誌 印刷中.
- 3). 例えば, 桂 重俊, 数理科学, 242 (1983) 39. S. Katsura and I. Nagahara, J. phys. C 13 (1980) 4995. S. Katsura and A. Matsuno, Phys. stat. sol. (b) 119 (1983).
- 4). S. Inawashiro, private communication (1980).
- 5). B. Buchberger, CAMP-Publ-Nr83-29.0 (1983) Chap 6.
- 6). B. Buchberger, The Second RIKEN International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation by Computers, Edited by N. Inada and T. Soma, World Scientific (1985) 69.
- 7). 古川 照夫, 数式処理通信, 3 (1985) 15.
- 8). T. Morita, Physica, 125A (1984) 321.
- 9). S. Katsura, Physica 印刷中.

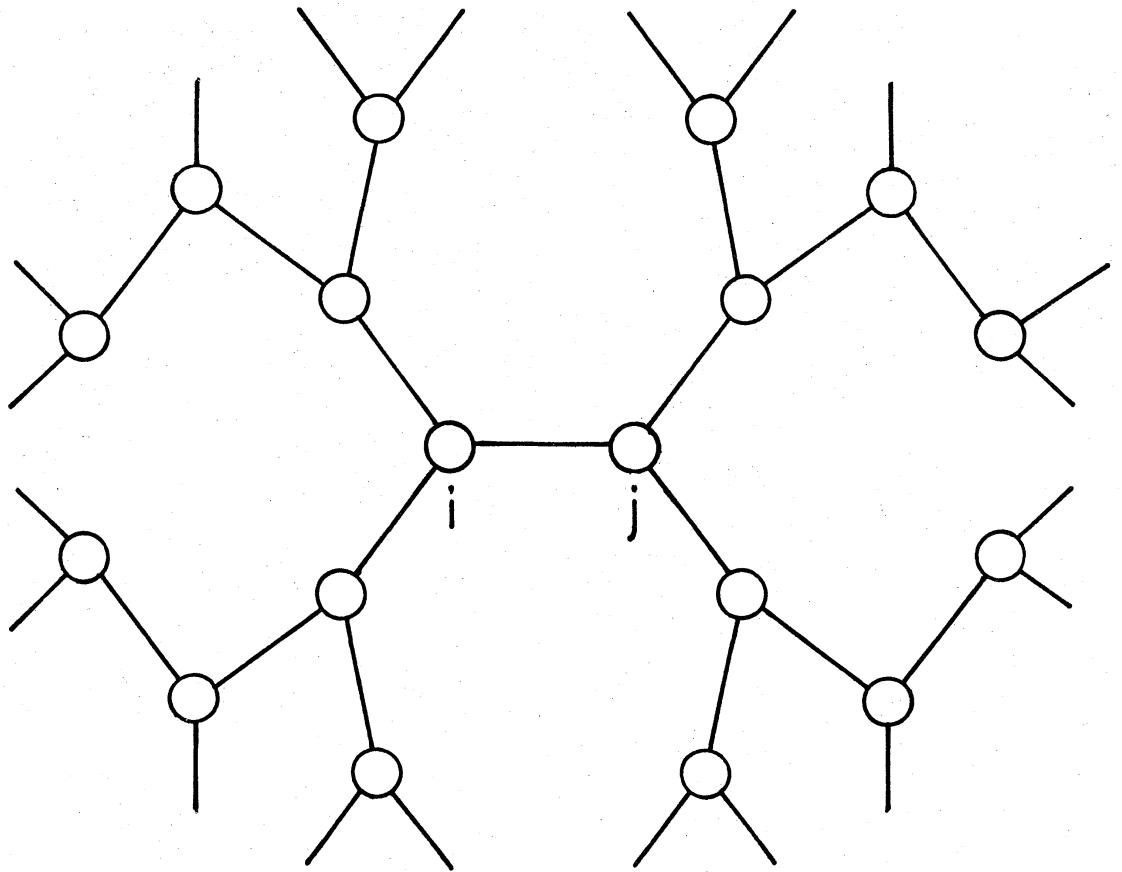


Fig. 1. 対クラスターのカクタス格子（最隣接格子数 $z_c=3$ ）.

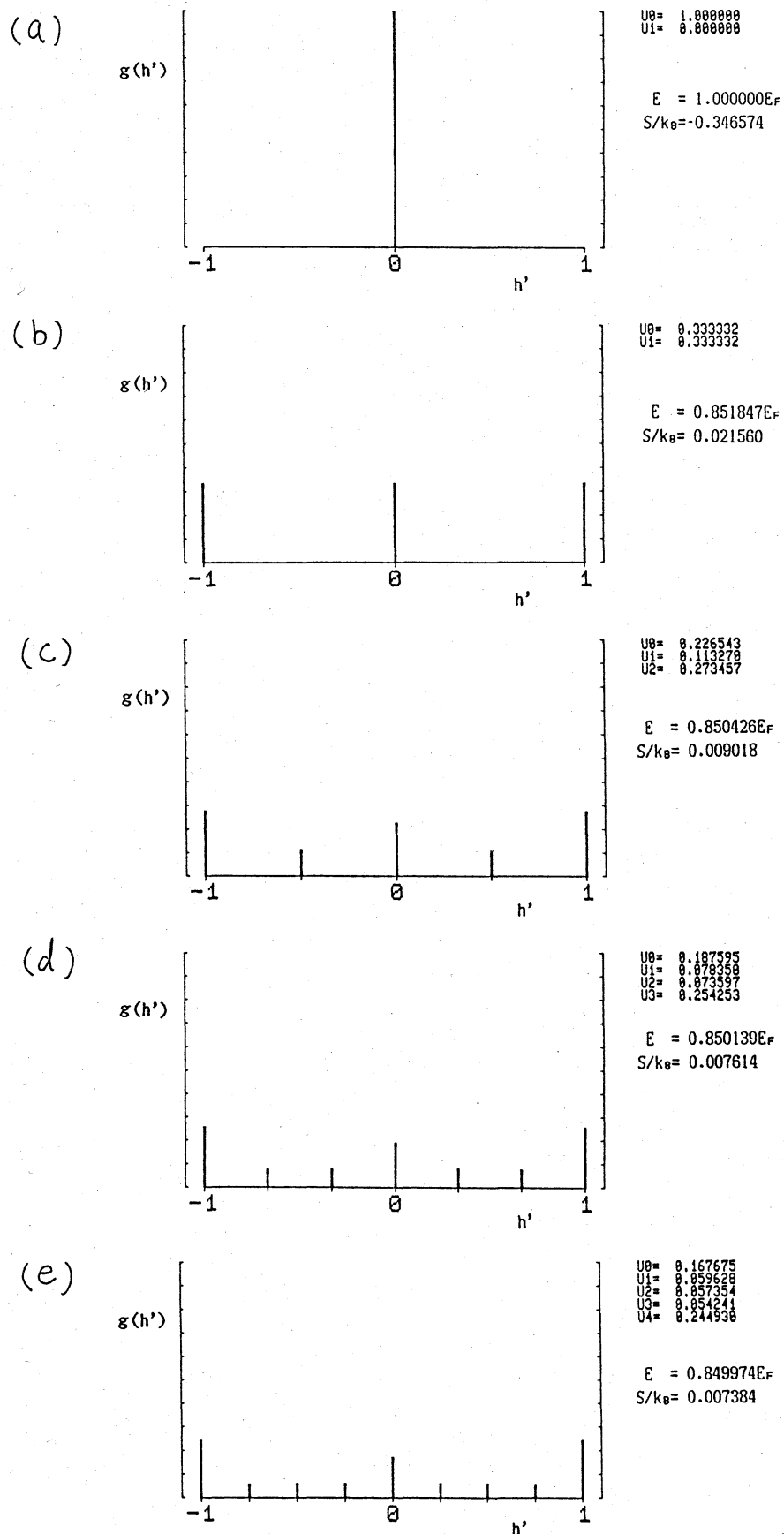


Fig. 2

Fig. 2 対近似における $\pm J$ ランダムイジングモデルの $T=0$ における有効場の分布.

- 1). $n=1$: (a), (b).
- 2). $n=2$: (a), (b), (c)
- 3). $n=3$: (a), (b), (d)
- 4). $n=4$: (a), (b), (c), (e)

(a) 常磁性状態, (b)~(e) スピングラス状態.

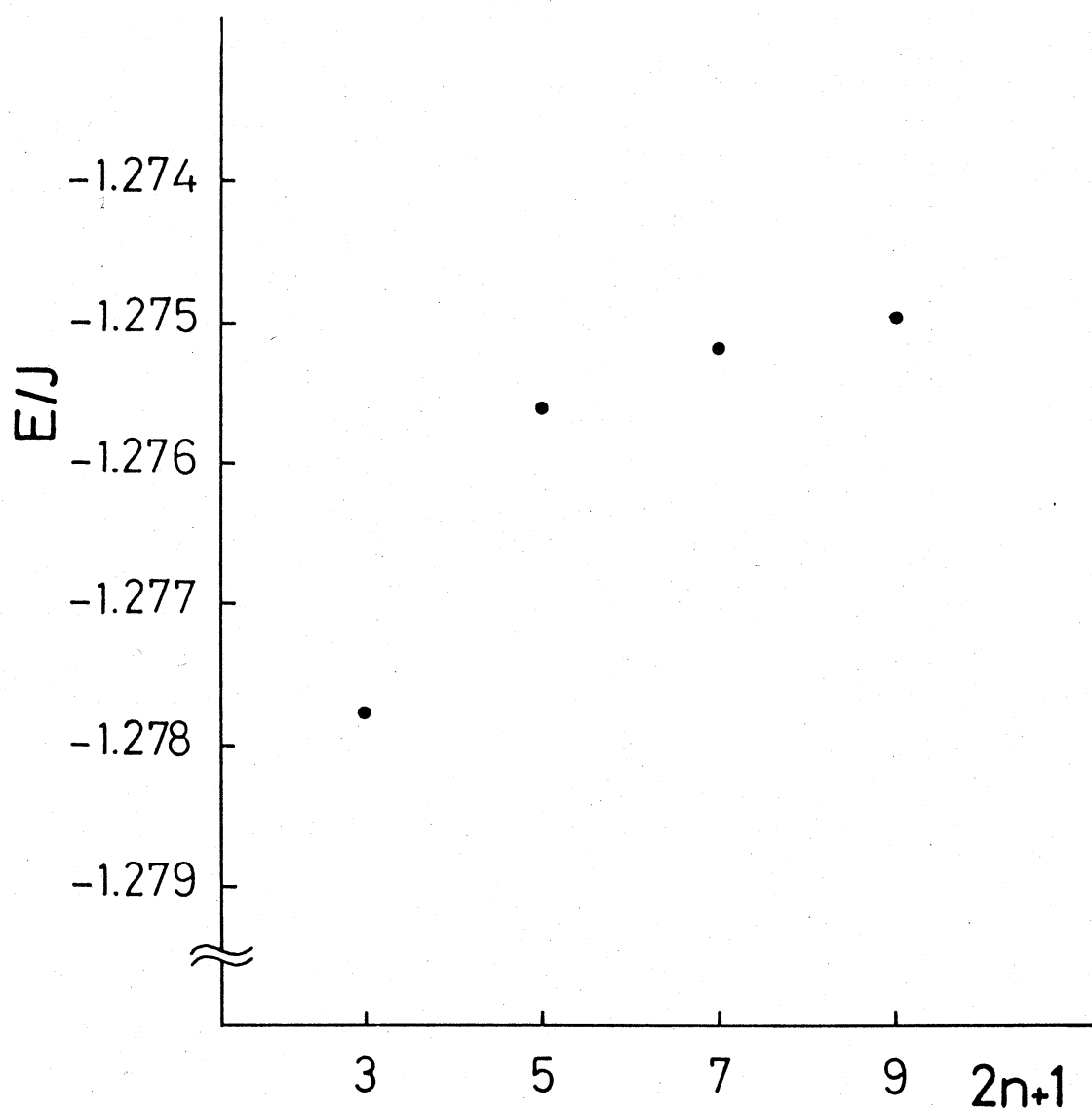


Fig. 3. 絶対零度における1サイト当たりのエネルギーと有効場の分布関数を表わす δ 関数の数($2n+1$).

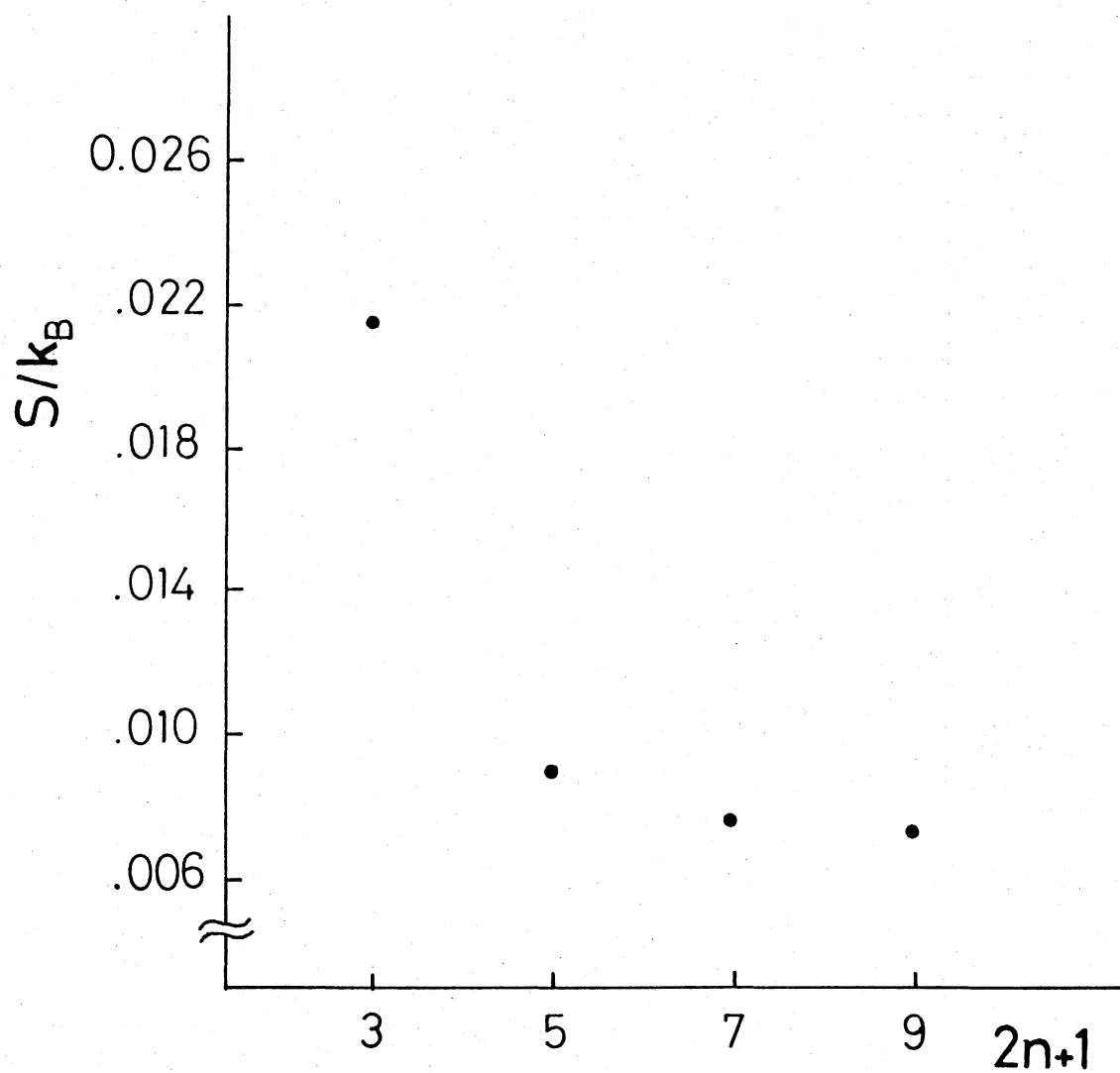


Fig. 4. 絶対零度における1サイト当たりのエントロピーと有効場の分布関数を表わす δ 関数の数($2n+1$).

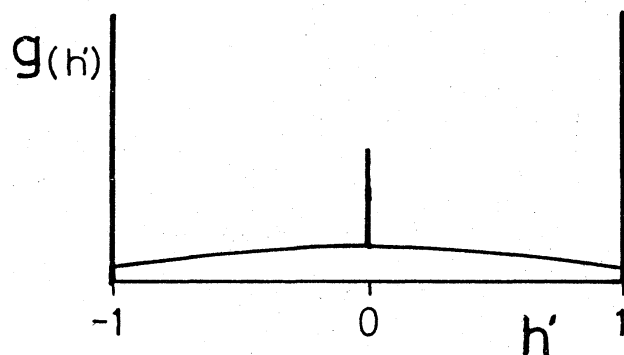


Fig. 5. n' 本 ($n' \rightarrow \infty$) の δ 関数の重ね合わせでスピングラス系の有効場の分布関数を表わすとき予想される分布.

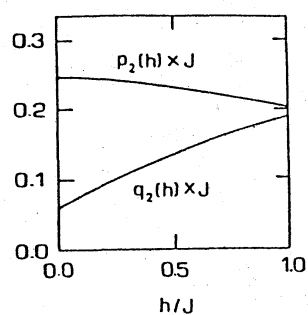


Fig. 6. δ 関数と連続関数の重ね合わせで表わしたスピングラス系の有効場の分布関数⁸⁾.