

スピングラス球'模型'についての再考

北大理 物理 根本幸児

Sherrington と Kirkpatrick によって提出された、無限範囲に相互作用の及ぶ Ising スピングラス模型 (SK 模型) は¹⁾、スピングラス (SG) 系の分子場理論の一つの出発点になっていて、近年、その定式化と解析に多大な努力が払われてきた。この模型では有限温度 T_g で二次相転移を起すことが知られているが、厳密な意味での定式化は未だ完成してはおらず、唯一、Parisi 仮説に基づく手続きが²⁾一応矛盾のない（或いはまだ指摘されていない）結果を与えているにすぎない。SK 模型の解析を滞らせている最大の原因は、その自由エネルギー関数が、相当複雑な構造を持っていることにあるといえる。実際、Thouless, Anderson, Palmer (TAP) によって与えられた自由エネルギーは³⁾ SG 相で多くの極小点を持つことが示されている⁴⁾。この様子は、以前から SG 系の直観的議論にしばしば登場してきたことであり、SG 相がランダムな相互作用の競合性による相互拘束 (blocking) の効果の為に起る "微妙な" スピン凍結状態であることを反映するものと考えられる。しかし、この "微妙な" パラ $\leftrightarrow$ SG 相転移が、適切な SG 秩序パラメータで自由エネルギーを記述した時、どのような機構でその「最小条件」から示されるかは、納得ゆく考察が少くない。いったい、その自由エネルギーはどのような形をしているのか。

SK 模型のハミルトニアンは次の形をしている。

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i \quad (1)$$

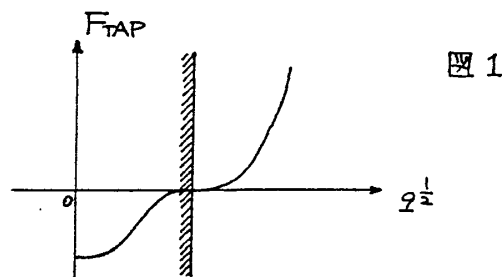
S_i は ± 1 の値をとり、 J_{ij} は全てのスピン対に対して、平均値 $\bar{J}/N$ 、分散 $\bar{J}^2/N$ の Gauss 分布に従うランダムな確率変数として各々独立に与えられる。 $(N$ は全スピンの数)。この模型の自由エネルギーを $\{J_{ij}\}$ と、各々のスピン磁化 $\{m_i = \langle S_i \rangle\}$ の関数として与えたのが TAP である。彼らの表式は、Legendre 変換、 $-\beta^{-1} \ln \text{Tr} e^{\beta H} + \sum_i h_i m_i$ の $\{J_{ij}\}$ についての展開の N に比例する部分とになっていることが示されているので⁵⁾ 熱平衡状態は、 $F_{\text{TAP}} - \sum_i h_i m_i$ を $\{m_i\}$ に関して最小にするようにして決定される。SG 秩序パラメータは、Edwards と Anderson (EA) の先駆的研究に従って⁶⁾

$$Q = [\langle S_i \rangle^2]_J = [m_i^2]_J = \frac{1}{N} \sum_i m_i^2 \quad (2)$$

と定義される。ここで $[\dots]_J$ はランダム平均 (配位平均) で、 $N \rightarrow \infty$ で空間平均に等しい。彼らの T_g 近傍の解析 ($T \leq T_g$) によれば³⁾ F_{TAP} は図 1 のような形をしている。すなわち解釈すれば $Q=0$ が最小点となるが、実はそこでは正しい自由エネルギーを表わしていない。彼らの表式には収束条件が付いており、図 1 の斜線より左側ではその条件が成り立たないのである。成り立つ部分に限って言えば、その境界点が最小値を与え、その点で $\partial F_{\text{TAP}} / \partial Q = \partial^2 F_{\text{TAP}} / \partial Q^2 = 0$ となっている。この点が真の最小値になっていけば、パラ $\leftrightarrow$ SG の相転

勢を示すことにはなるが、その真偽は斜線部
での正しい記述があって初めてわかること
である。現在、TAPの自由エネルギーの
収束条件は、

$$1 > \beta^2 \tilde{T}^2 [(1-m_i^2)^2]_{\tilde{T}} \quad (3)$$



であることが示されているが、⁵⁾それ以外の
領域での自由エネルギーの表式はまだ知られていない。Anderson の予想のとおり、³⁾SG
相において $\chi_{ij}^{-1} = \partial^2 F_{TAP} / \partial m_i \partial m_j$ がゼロ固有値をもつならば、(3)を等号として満たせば
そうなる) SG相は marginally stable 状態となるわけである。それを確かめる上でも全領域で自
由エネルギーを知ることは重要である。

この報告では、その前段階として、SK模型の球模型版について同様の議論を行う。こ
のSG球模型は、Kosterlitz, Thouless, Jones (KTJ) によって調べられており、厳密に解ける
ことが知られている。⁷⁾そのハミルトニアンは、SK模型と同1) (1)で与えられる。スピン
演算子は $\sum_i S_i^2 = N$ の球条件を満たしながら $-N^{1/2} < S_i < N^{1/2}$ の値をとることができ、この為
相互作用を対角化することができ、次のように変換できる。

$$1/d = - \sum_{\lambda} J_{\lambda} S_{\lambda}^2 - \sum_{\lambda} h_{\lambda} S_{\lambda} \quad (\sum_{\lambda} S_{\lambda}^2 = N) \quad (4)$$

ここで $J_{ij} = \sum_{\lambda} \langle \lambda | i \rangle J_{\lambda} \langle \lambda | j \rangle$, $S_{\lambda} = \sum_i \langle \lambda | i \rangle S_i$, $h_{\lambda} = \sum_i \langle \lambda | i \rangle S_i$, $\langle \lambda | i \rangle$ は $[J_{ij}]$ の固有ベクトル
であり、 $\sum_i \langle \lambda | i \rangle \langle \mu | i \rangle = \delta_{\lambda\mu}$, $\sum_{\lambda} \langle \lambda | i \rangle \langle \lambda | j \rangle = \delta_{ij}$ の規格直交性を持つ実ベクトルである。
以下、簡単の為 $\tilde{T}_0 = 0$ に議論を限る。ランダム行列の理論から、 $N \rightarrow \infty$ の時、その固有値
 $\{J_{\lambda}\}$ は、半円則と呼ばれる次の分布をもつことが知られている。

$$\rho(J_{\lambda}) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi\tilde{T}^2} (4\tilde{T}^2 - J_{\lambda}^2)^{1/2} & |J_{\lambda}| < 2\tilde{T} \\ 0 & |J_{\lambda}| > 2\tilde{T} \end{cases} \quad (5)$$

従って、ランダム平均は(5)を用いて $\frac{1}{N} \sum_{\lambda} \rightarrow \int dJ_{\lambda} \rho(J_{\lambda})$ と適時置き換えて行われる。この
系でのSG秩序パラメータは、最大固有値 $J_{\lambda} = 2\tilde{T}$ に対応する磁化 $m_S \equiv \sqrt{N} \langle S_{\lambda} \rangle$ となる。

さて、一様磁化 $m \equiv \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i \rangle$ と m_S の関数として自由エネルギーを求めることを考える。
その為には、次の“ミクロカノニカル的”な分配関数を計算すればよい。

$$Z(m, m_S) = \int \left[\prod_i ds_i \right] \delta(N - \sum_i S_i^2) \delta(Nm - \sum_i S_i) \delta(Nm_S - \sqrt{N} S_{\lambda}) e^{-\beta/d} \quad (6)$$

3つのデルタ関数はそれぞれ、球条件、 m , m_S の限定条件である。デルタ関数を Laplace 変換
表示 $\int_{c-i\infty}^{c+i\infty} dz e^{-xz/2\pi i} = \delta(x)$ を使ってトレースをとると

$$Z(m, m_S) = A \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{dz}{2\pi i} (z - i)^{1/2} e^{-N\beta \hat{f}(m, m_S; z)} \quad (7)$$

$$\hat{f}(m, m_s; z) = \frac{1}{2} \chi(z) m^2 + \frac{1}{2} \chi_s(z) m_s^2 - \tilde{T} z + \frac{1}{2\beta} \left[\frac{\tilde{T}^2}{2} \chi^2(z) - \ln \frac{\pi \chi(z)}{\beta} \right] \quad (8)$$

$$\chi(z) = \frac{1}{\tilde{T}} [z - (z-1)^{\frac{1}{2}}], \quad \chi_s(z) = \frac{1}{2\tilde{T}(z-1)} \quad (9)$$

但し、す z に(5)による平均をとってある。(7)は熱力学的極限で($N \rightarrow \infty$)、鞍点法による積分をすることが出来る。その鞍点方程式は、 $\partial \hat{f} / \partial z = 0$ より

$$\tilde{T} \chi(z) = \beta \tilde{T} \left(1 - m_s^2 - \frac{m^2}{1 - \tilde{T}^2 \chi^2(z)} \right) \quad (10)$$

この方程式の解 $z_s(m, m_s)$ を(8)に代入して、 m, m_s の関数として自由エネルギー $f(m, m_s) = \hat{f}(m, m_s; z_s)$ が求まる。転移点は(9)の χ_s が発散する点 $z_s = 1$ から、(10)に代入することによって $T_g = \tilde{T}^{-1}$ と知れる。重要なことは、 T_g 以下で(10)が解をもたない場合があるということである。詳しい解析により⁸⁾その時は $z_s = 1$ とした(8)で $f(m, m_s)$ が与えられることがわかっている。この現象は鞍点のstickingと呼ばれている。(10)の解が存在する条件は、

$$1 > \beta \tilde{T} (1 - m_s^2) \quad \text{または} \quad m \neq 0 \quad (11)$$

で与えられる。これを境に(8)の自由エネルギーの形が変わるので、鞍点のstickingがこの系の転移を支配しているといえる。(11)は、SK模型に対するTAP方程式の収束条件(3)に対応していると考えられる。

この表式からKTJの結果を再現することが出来るが、今興味あるのは、(8)の m, m_s のゼロのまわりでの振舞である。stickingによって、 $T_g \leq T$ で展開形が異なり、それゆえ

$$\beta f(m, m_s) = \beta f_{\text{para}} + \frac{1}{2} (m^2 + m_s^2) + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{B} m^4 + 2m^2 m_s^2 + B m_s^4 \right)$$

$$+ \frac{1}{8} \left(\frac{3B-2}{B^3} m^6 + 3 \frac{2B-1}{B^2} m^4 m_s^2 + 3m^2 m_s^4 + m_s^6 \right) + \dots$$

$$T_g < T \quad (12.a)$$

$$= \beta f_{\text{para}} + \frac{\beta \tilde{T}}{2} m^2 + \frac{\beta^2 \tilde{T}^2}{8(\beta \tilde{T} - 1)} m^4 + \frac{\beta^3 \tilde{T}^3 (3\beta \tilde{T} - 5)}{48(\beta \tilde{T} - 1)^3} m^6 + \frac{\beta^2 \tilde{T}^3}{8(\beta \tilde{T} - 1)} m^2 m_s^2 + \dots$$

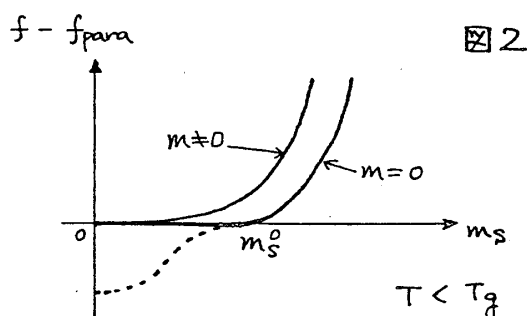
$$T_g > T \quad (12.b)$$

($\equiv z = B = 1 - \beta^2 \tilde{T}^2$)となる。特に $m = 0$ のとき(12.b)は βf_{para} になってしまう。これはstickingの為であり、(11)から、

$$m_s \leq m_s^0 = (1 - T/T_g)^{\frac{1}{2}} \quad (13)$$

まで一定となっている。(11)が成り立つ時の表式をそのままつけたのが図2の破線である(12.a)。この様子が図1と酷似して

いることに注意したい。ところでこの一定領域のどこが真の熱平衡値を与えるのだろうか



か。 $h=0$, $h_s(m_s \text{ 共役な磁場}) \rightarrow 0$ の極限をとれば、 $K T J$ と同じ $m_s = m_s^0$ と得る。 (しかし、図2にあるように $m \neq 0$ の場合最小点は $m_s = 0$ にあり、 $h_s = 0, h \rightarrow 0 (m \rightarrow 0)$ の極限で $m_s = 0$ が結論される。 後者の結果は、stickingが何らかの凝縮を要請するので、明らかに誤りである。 (しかし、熱力学的極限ではそれを区別できない。

実際、 T_g 以下で凝縮の起ることは、 m と (2) で与えられる $Q = N^{-1} \sum m_i^2 = N^{-1} \sum m_i^2$ の関数としての自由エネルギー $f(m, Q)$ を調べて確かめられる。 Q は演算子の期待値としてかけないで (6) のような手法は使えないが、Legendre変換 $-\beta^{-1} \ln \text{Tr} e^{-\beta H} + \sum h_i m_i$ (TAP自由エネルギーの球模型版) から、適当なランダム平均を経て $f(m, Q)$ を作ることはできる。 計算の詳細を省略して結果だけを示せば次のようになる。 ($N \rightarrow \infty$)

$$f(m, Q) = \frac{1}{2} \chi^{-1} [m^2 - (1 + \tilde{\gamma}^2 \chi^2) Q] + \frac{\beta \tilde{\gamma}^2}{4} (1 - Q)^2 - \frac{1}{2\beta} [1 + \ln 2\pi(1 - Q)] \quad (1 > \beta \tilde{\gamma}^2 (1 - Q)) \quad (14.a)$$

$$- \tilde{\gamma}^2 (1 - Q) + \frac{1}{2\beta} \left[\frac{1}{2} - \ln 2\pi \beta \tilde{\gamma}^2 \right] \quad (1 < \beta \tilde{\gamma}^2 (1 - Q)) \quad (14.b)$$

$$\tilde{\gamma}^2 \chi^2 = 1 - \frac{m^2}{Q} \quad (15)$$

2つの領域で表式が異なるのは、前に述べた鞍点のstickingによる。 熱平衡状態は、 $\partial f / \partial m = h$, $\partial f / \partial Q = 0$ ((15)の微分も含まれる) から決定され、その状態方程式はレゾリカ法によるのと同じである。 $f(m, Q)$ を $T < T_g$ で調べると図3のようになる。 前と同じように

$$Q_0 = 1 - T/T_g \quad (16)$$

を境に、(14.a), (14.b) が実線で示されている。

$m \neq 0$ の形からも明らかのように、 $h \rightarrow 0$ ($m \rightarrow 0$) の極限で $Q = Q_0$ となり、確かに凝縮が起っている。 (しかしながら $f(m=0, m_s)$)

と同じように、 $f(0, Q)$ は熱力学的極限で、 $0 < Q < Q_0$ に一定領域をもっていることがわかる。

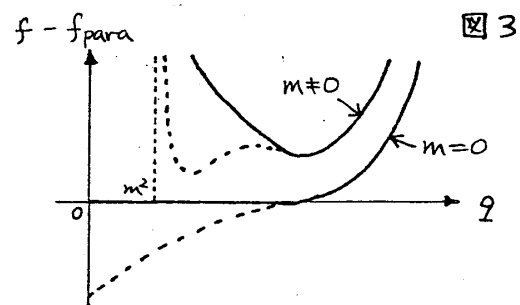


図3

そこで、 $h \rightarrow 0$ における $f(m, m_s)$ と $f(m, Q)$ から得られる結果はどう説明されるか。厳密な取り扱いではないが、大きな有限の N について考えた場合も、状態は鞍点方程式 (10) で与えられるとしてみる。 $h \sim O(N^{-1/2}) \alpha > 0$ の微小磁場を $T_g > T$ でかけた時、鞍点は $z = 1 + \delta$ ($\delta \ll 1$) とかくことができる。その時 (10) を各項の最大オーダーのみで表わすと

$$1 - T/T_g \sim \frac{T}{2N\tilde{J}\delta} + \frac{h^2}{2(2\delta)^{1/2}\tilde{J}^2} + \frac{h^2}{4N\delta^2\tilde{J}^2} \quad (17)$$

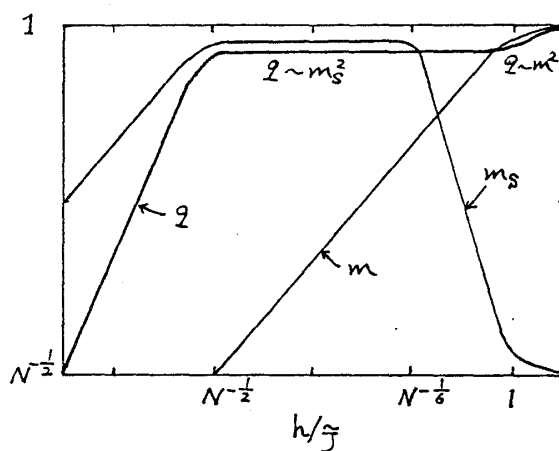
$$m \sim \frac{h}{\tilde{J}}, m_s \sim \frac{h}{2N^{1/2}\tilde{J}\delta}, q \sim \frac{h^2}{2(2\delta)^{1/2}\tilde{J}^2} + \frac{h^2}{4N\delta^2\tilde{J}^2} \quad (18)$$

となる。 α の変化に応じて(17)から δ が変化するが、右辺3項のうち何れが支配的かによって(18)の m, q の h 依存性が変わってくる。

その様子を両対数で表しているのが図4である。 $h \sim O(1)$ では、ほとんど m が q に寄与し、 m_s は $O(N^{1/2})$ に留まっているが、磁場を弱めると、 $m \propto h$ で線型におちるのに対し、逆に $m_s \propto h^3$ で大きくはりはじめ、 $h \sim O(N^{1/2})$ で $m_s \sim O(1)$ になりほぼ q の全てを担っている。さらに磁場を弱めて $h \sim O(N^{1/2})$ になると、 $m_s \propto h$, $q \propto h^2$ でおちていく。これは有限の N である為であり、

SG凝縮には $O(N^{1/2})$ の一樣磁場が必要であることを示している。逆に球模型では $O(N^{1/2})$ の磁場でSG凝縮が壊されるので、有限磁場では転移は起らないことが理解される。こういった構造は熱力学的極限ではつぶさししまい、正しく記述できないのは当然である。

図4



以上、SG球模型の自由エネルギーを、KTJ(EA)の秩序パラメータ $m_s(q)$ の関数として"制限なしに"書き下し、SG転移の構造について再考してみたのだが、実は、 T_g 以下で自由エネルギーに一定領域があることは、3次元正方格子強磁性球模型にもいえることである。⁹⁾しかし我々はここで、SG球模型は所詮球模型だというよりは、むしろ、SG系(少なくともSK模型)は球模型的様相を持ち合せているのだと考えたい。というの、SK模型とその球模型版に多くの類似性があるからである。今までの解析でわかったことは次のとおり。

- 1) $f(m, m_s), f(m, q)$ はそれぞれ $1 = \beta\tilde{J}(1 - m_s^2), 1 = \beta\tilde{J}(1 - q)$ を境に関数型を異にする。
- 2) $h=0, h_s=0, T < T_g$ での熱平衡値は、その境界上で与えられる。
- 3) その時平衡点では $\partial f / \partial m^2 = 0, \partial f / \partial q^2 = 0$ となっている。
- 4) 有限磁場では転移は起らず、"AT線"は $h=0, T < T_g$ で与えられる。
- 5) 熱力学的極限で $f_{SG} - f_{para} = 0$ である。従って自由エネルギー最小条件だけでは平衡値は決まらない。

またここでは解説しなかったが、次のことをTAPの自由エネルギーの球模型版から示すことができる。

- 6) $1 = \beta\tilde{J}(1 - N^{-1}\sum m_i^2)$ のとき $\chi_{ij}^{-1} = \partial^2 f / \partial m_i \partial m_j$ はゼロ固有値をもつ。

SK模型のTAPの自由エネルギーの収束条件(3)に対応しているのが1)である。(3)はAT

線¹⁰⁾と同じ"なの2", 2)~4)から, "球模型2"はPaT仮説"は正しい"といえる(SG領域は線に縮退しているけれども)。3), 6)から, SG相は"marginally stable"状態であることが再確認される。もし(本当にSK模型との対応があるのなら, 5)の結果は何か意味があるだろうか。SK模型の T_g 以下2"の f_{para} は知られていないが, f_{SG} との差が $O(N^{-r})$ $r > 0$ 2"である可能性もあり, blocking効果の"微妙さ"が現れているかも知れない。そうならば, SG転移の構造の本質は $O(N^{-r})$ に隠されているといえはしまいか。

References

- 1) D.Sherrington and S.Kirkpatrick, Phys.Rev.Lett. 35 1792 (1975)
S.Kirkpatrick and D.Sherrington, Phys.Rev. B17 4384 (1978)
- 2) G.Parisi, J.Phys. A13 L115 (1980)
- 3) D.J.Thouless, P.W.Anderson and R.G.Palmer, Philos.Mag. 35 (1977)
P.W.Anderson, Ill-condensed Matter, Les Houches 1978 session XXXI ed. R.Balian, R.Maynard and G.Toulouse (Amsterdam;North-holland)
- 4) A.J.Bray and M.A.Moore, J.Phys. C13 L469 (1980)
- 5) T.Plefka, J.Phys. A15 1971 (1982)
- 6) S.F.Edwards and P.W.Anderson, J.Phys. F5 965 (1975)
- 7) J.M.Kosterlitz, D.J.Thouless and R.C.Jones, Phys.Rev.Lett. 36 1217 (1976)
- 8) T.H.Berlin and M.Kac, Phys.Rev. 86 821 (1952)
- 9) J.S.Langer, Phys.Rev. 137 A1531 (1965)
- 10) J.R.L.de Almeida and D.J.Thouless, J.Phys. A11 983 (1978)
- 11) G.Parisi and G.Toulouse, J.Physique Lett. 41 L361 (1980)