

Sherrington Kirkpatrick のスピングラス 理論をめぐって

東北大 工 桂 重 俊

1. Sherrington Kirkpatrick の理論

Edwards Anderson が dilute magnetic alloy においてスピンが凍結したスピングラスが存在することを示した直後 Sherrington Kirkpatrick は Solvable model of a spin glass という論文を発表した。exactly solvable と銘うってあるが根拠のあいまいな数学的処方を用いている為、物議をかもした。仮定と結論をまとめると、1) infinitely ranged exchange interaction 2) $S = \frac{1}{2}$ の Ising spin, $\mathcal{K} = -\sum_{(ij)} J_{ij} S_i S_j$, 3) exchange の分布は Gaussian $P(J_{ij}) = (1/2\pi J^2)^{1/2} \exp[-(J_{ij} - J_0)^2/2J^2]$, 4) $\log Z = \lim_{n \rightarrow 0} (Z^n - 1)/n$, の lim で状態和の対数を求める。5) n 個の考えている系と同種の系 (レプリカ) を考えて $Z^n = \prod_{\alpha} Z_{\alpha}$ を計算する。6) $J_0 = \tilde{J}_0/N$, $J = \tilde{J}/\sqrt{N}$ のスケーリングを行う。7) $e^{\lambda a^2} = (2\pi)^{-1/2} \int dx \exp[-x^2/2 + (2\lambda)^{1/2} ax]$ を用いて状態和を $n + \frac{n(n-1)}{2}$ 重の積分表示になおし鞍点法により積分を評価する。その結果、自由エネルギー F がスピンの平均値 $m = \langle S_i \rangle_J$ とスピンの自乗の平均値 $q = \langle S_i^2 \rangle_J$ で表わされ m と q をきめる coupled equation が得られ、これからスピングラス転移点の存在、転移点における帯磁率、比熱のカスプが示された。

2. 他の方法で SK の結果を導くこと

SK 理論は根拠の不十分な数学的方法に基づいていたため、多くの人により他の方法でその結果または似た結果を導いたという論文を発表された Southern, Kaneyoshi, Morita-Horiguchi, Klein, Thouless-Anderson-Palmer, Chalupa, Southern and Young, 等ここでは Klein の方法を紹介する。

前節 2) のハミルトニアン、3) の分布を考える。

$$H_i = \sum_j J_{ij} \langle S_j \rangle$$

とすれば、分子場理論によりスピンの平均値は

$$\begin{aligned}\langle S_i \rangle &= \int \prod dJ_{ij} P(J_{ij}) dH_i \tanh(\beta H_i) \\ &= \int dH_i \rho(H_i) \tanh(\beta H_i)\end{aligned}$$

で与えられる。

分子場の分布 $\rho(H_i)$ を求めよう

$$\begin{aligned}\rho(H_i) &= \int \prod [dJ_{ij} P(J_{ij})] \delta(H_i - \sum_j J_{ij} \langle S_j \rangle) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int d\rho_i e^{i\rho H_i} \prod_j \int dJ_{ij} P(J_{ij}) e^{-i\rho J_{ij} \langle S_j \rangle}\end{aligned}$$

$\int dJ_{ij}$ を実行すると

$$= \frac{1}{2\pi} \int d\rho_i e^{i\rho(H_i - J_0 \sum \langle S_j \rangle)} \prod_j e^{-\frac{\rho^2 J^2 \langle S_j \rangle^2}{2}}$$

$\sum \langle S_j \rangle \equiv Nm$ $\sum \langle S_i \rangle^2 \equiv Nq$ により m , q を定義し, 前節 6) の scaling を行くと

$$\begin{aligned}g(H_i) &= \frac{1}{2\pi} \int d\rho e^{i\rho(H_i - \tilde{J}_0 m) - \frac{\rho^2 \tilde{J}^2 q}{2}} \\ &= \left(\frac{1}{2\pi J^2 q}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{(H_i - \tilde{J}_0 m)^2}{2\tilde{J}^2 q}\right]\end{aligned}$$

これを () および $\langle S_i \rangle^2$ に対する式に入れれば SK の m , q に対する式を再現する

3. SK 理論の問題点

SK 理論について最大の問題点は entropy が負になることであるがこの原因がモデルによるものか, 方法論によるものか, 本質的なことであるのかについて多くの討議がなされている。方法論の問題としては 1) $n \rightarrow 0$ limit の根拠, 2) $N \rightarrow \infty$ と $n \rightarrow 0$ の limit の順位変更, 3) saddle point 法は適用条件をみたしているか, 4) $n \rightarrow 0$ の analytic continuation は unique か, 5) free energy minimum となっているか, 6) infinitely long ranged であることがおかしいことの原因になっているか, これらについての論のいくつかを紹介する。

Almeida and Thouless は 1 節の $\partial^2 g / \partial x^\alpha \partial x^\beta$, $\partial^2 g / \partial y^{(\alpha\beta)} \partial y^{(r\delta)}$, $\partial^2 g / \partial x^\alpha \partial g^{(r\delta)}$ から作られる $n(n+1)/2$ 次元の行列の固有値を explicit に計算し, 大部分の固有値は正であるが一つの固有値がスピングラス温度以下で負であることを見出し, 鞍点法を適用限界外に適用したことが entropy negative の原因としている。

Klein は $Z^n = Z_{sk}^n + Z' \sin 2\pi k n$ に対して $\lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} (Z^n - 1) = \log Z_{sk} - 2\pi k Z'$

となることから $n \rightarrow 0$ の analytic continuation が unique でないことを示した。

4. SK理論が infinitely long rangedであるのでこれを short rangeにした場合どうなるか, nearest neighbor相互作用をするランダムボンドモデルをBethe近似で $-\beta \mathcal{H} = \sum_{i,j=1}^z K_{ij} \sigma_i \sigma_j + C \sigma_i + \sum L_j \sigma_j$ を考える。このとき中心スピンの分布とまわりのスピンの分布が等しいことを要請するとeffective field分布関数 $g(l)$ ($l = \text{th } L$) について積分方程式

$$g(l'_i) = \int \delta(l'_i - \text{th} [C + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^z \text{th}^{-1} t_i l_j]) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^z [P(J_j) g(l_j) dJ_j dl_j]$$

が成立ちこの積分方程式から $g(l_i)$ が求まればスピンの平均値およびモーメントは

$$\overline{\sigma^n} = \int \text{th}^n [C + \sum_{j=1}^z \text{th}^{-1} t_j l_j] \prod_{j=1}^z P(J_j) g(l_j) dJ_j dl_j$$

と求まる。() より 1) $\overline{\sigma} \neq 0$, $\overline{\sigma} \rightarrow 0$, 2) $\overline{\sigma^2} \neq 0$, $\overline{\sigma^2} \rightarrow 0$, 3) $\overline{\sigma^2} \neq 0$, $\overline{\sigma} \rightarrow 0$,

を与えるところとして para-GLP の境界が $\overline{\text{th}^2 K} = 1/(z-1)$, Para-ferro

の境界かつ $\overline{\text{th} K} = 1/(z-1)$, ferro-GLP の境界が $2/\overline{\text{th} K} - 1/\overline{\text{th}^2 K} = z-1$

と求まる $P(J)$ として中心 J , 巾 2Δ の矩形分布をとった場合の Phase boundary は Fig.

のようになる。 $J = J_0/z$, $\Delta = \Delta_0/\sqrt{z}$ として $z \rightarrow \infty$ とすれば Bethe 近似は分

子場近似に tend し, 1) 2) の boundary は SK のそれと一致する。 Katsura, Katsura-Fujiki.

分子場の範囲でnearest neighborの項 Z を有限とすると, 積分方程式

$$g(\sigma) = \int \delta(\sigma - \text{th}(C + \sum_{i=1}^z K_i \sigma'_i)) \prod_{i=1}^z P(J_i) g(\sigma') dJ_i d\sigma_i$$

となる。exchangeの分布 $P(J)$ を gauss 分布で与え, スピンの分布 $g(\sigma)$ を Fourier 変換で求めることが猪苗氏により行われた。

5. SK理論における negative entropy は何であるかについて Thouless Anderson Palmer

は高温展開級数の resummation を行い, 高温では SK理論と一致し, $T=0$ で $S=0$

を得ている。そして Almeida and Thouless は saddle point による積分評価のとき負の

固有値があることが $T=0$ の $S<0$ の原因だとしている。 Kirkpatrick の 4 sample 500

spins の Monte Carlo simulation では $T \rightarrow 0$ で TAP の entropy とよい一致を示している。

これは SK の悪い計算法を negative entropy の原因に帰せしむる考えであるが, Matsu-

baraおよび Fisch and Harrisは d -次元 cubic lattice に対する spin glass susceptibility の高温展開級数を 10 次まで求め、 T_G 附近で発散の傾向が見られないことから q が熱平衡を記述する order parameter であることに疑問を投げかけている。これらについて進歩が期待される。

計算機実験の現状とこれから

東工大 理 小 野 昱 郎

スピン間の交換相互作用がランダムな磁性体の相転移や熱力学的性質、低温でのスピン配列状態等を調べるために、これまでに行われた計算機実験について報告し、問題点と将来の研究の方向について述べる。

計算機による数値実験には主として次の 3 つの型があると考えられる。

I. Monte Carlo simulation : スピンの確率論的運動から擬似正準集合を作り、物理量の統計平均値を計算する。

II. 素励起 (スピン波) のスペクトルを調べ、低温での物理量を求める。

III. 小さい有限系のスピンの力学的運動を数値的に調べ、無限系へ外挿する。

I の方法は相転移の研究に有力な方法で、特にイジング・スピン系は多くの研究がある。非磁性イオンによる希薄磁性体や、競合する相互作用の混合磁性体の磁化、エネルギー、比熱、帯磁率、スピン・ガラスのオーダー・パラメータの温度変化等が得られている。転移温度付近の臨界指数は一部を除き、信頼できる値は得られていない。微視的状态、つまり低温でのスピン配列状態やスピン対相関、格子構造による特長的な変化も報告する。磁化過程と微視的構造の変化についても述べる。また古典スピン系のシミュレーションについても報告する。

II の方法は RKKY 型の相互作用をもつ古典スピン系の基底状態での各サイトの分子場、スピン波の励起スペクトルが調べられている。III についてはランダム系はまだない。