

量子 Blume-Emery-Griffiths 模型の 解析

東京工業大学 大学院理工学研究科 物性物理学専攻

長内 淳樹*

概要

本論文では、量子 Blume-Emery-Griffiths(BEG) スピングラス模型の相転移について議論する。その目的は一次転移に対する、量子揺らぎとランダムネスの影響を明らかにすることにある。ここでは上記の課題を解明するために、平均場理論および実空間繰り込み群の方法を用いた解析を行う。BEG 模型は $S = 1$ の Ising 模型とも呼ばれ、平均場理論や実空間繰り込み群による解析から一次転移と二次転移の二種類の相転移が起きる模型として知られている。

一次転移点では、複数の状態の共存状態が実現している。また、それらの状態間にはポテンシャル障壁が存在する。系が有限温度にある場合は、ポテンシャル障壁を熱揺らぎによって飛び越えることで一次転移が起きるが、低温領域ではこのような機構での相転移は起きない。その一方で、低温では量子揺らぎが有意となり、ポテンシャル障壁で隔てられた状態間をトンネル効果によって遷移することが可能となる。このような背景から、一次転移がある系に量子揺らぎを加えたときに、その一次転移がより強固なものになるか破壊されるかは非常に興味深い問題と言える。よって、一次転移が存在する模型の代表として、量子 BEG スピングラス模型を扱うのである。

このような系の定性的な性質を知るためには、無限次元の系を表す平均場理論が有効である。よって、まず平均場理論を用いた解析を行う。量子スピン系の解析の困難性の一つは、スピン演算子の非可換性にある。そこで、経路積分の方法を用いることで、 d 次元量子系を $(d+1)$ 次元古典系へと変換して解析を行う。 $+1$ 次元の効果は量子揺らぎに由来するもので、秩序変数の虚時間依存性という形で現れる。その上で、まず秩序変数の虚時間依存性を無視するという静的近似を用いた解析を行う。次に、量子揺らぎの効果を適切に考慮するために、秩序変数の虚時間依存性を部分的に取り込んだ解析を行う。それらの結果の比較から、静的近似が相図上の特定の領域ではよい近似となっていることが明らかとなった。一般に、静的近似は低温では有効ではない。しかし、本論文の結果はそれが有効な例として非自明なものと言うことが出来る。また、量子揺らぎの加え方によって、一次転移に対する影響が異なることが明らかとなった。

*email: atsukiosanai@gmail.com

次に、有限次元系の性質を調べるために、 $\pm J$ ボンドランダムネスを加えた 3 次元横磁場 BEG スピングラス模型を、実空間繰り込み群の方法を用いて解析する。量子系における繰り込み群を構成するために、本論文では切断近似を導入する。切断近似は半古典的な近似ということが出来、有限次元系の量子揺らぎを解析するための最も初等的な近似と言うことが出来る。本論文では、上記の手法を用いることで得られる相図を提示する。また、スケーリング指数の評価を行うことで、ランダム系に対しても転移の次数を特定する。これらの解析から、純粋系においては横磁場の下でも一次転移が存在することが明らかとなった。しかし、その一次転移はランダムネスの増加に伴い急激に破壊され、二次転移へと移行することが分かった。これより、有限次元において一次転移は横磁場に対しては安定であるが、ランダムネスに対しては不安定であると結論付けられる。

目 次

1	序論	8
1.1	相転移・臨界現象	8
1.2	磁性体の相転移	9
1.3	スピングラス	11
1.4	一次転移と量子揺らぎ	14
1.5	有限次元におけるスピングラス	15
1.6	本論文の構成	17
2	平均場古典スピングラス模型の相転移	17
2.1	自己平均性とランダム平均	18
2.2	SK 模型のレプリカ対称解	19
2.3	GS 模型のレプリカ対称解	23
3	横磁場 SK 模型と横磁場・横結晶場 GS 模型の相転移	25
3.1	スピン系の経路積分表示	26
3.2	横磁場 SK 模型の相転移	27
3.3	横磁場・横結晶場 GS 模型の解析	36
4	実空間繰り込み群とランダムスピン系への応用	47
4.1	繰り込み群の一般論とスケーリング則	47
4.2	Migdal-Kadanoff の繰り込み群	52
5	$\pm J$ 横磁場 Ising 模型の実空間繰り込み群による解析	59
5.1	1 次元横磁場 Ising 模型の繰り込み	59
5.2	$d \geq 2$ 次元における横磁場 Ising 模型の繰り込み	60
5.3	3 次元 $\pm J$ Ising 模型の相転移	62
5.4	3 次元横磁場 $\pm J$ Ising 模型の相転移	64

6	± J 横磁場 Blume-Emery-Griffiths 模型の実空間繰り込み群による解析	66
6.1	横磁場 BEG 模型の繰り込み群方程式	67
6.2	不連続固定点におけるスケーリング場	68
6.3	純粋系における横磁場 BEG 模型の相転移	71
6.4	± J 横磁場 BEG 模型の相図	73
7	結論と今後の課題	76
A	スピンコヒーレント状態	79
B	指数分解公式	82
C	虚時間方向の相関関数	83
C.1	横磁場 SK 模型	83
C.2	横磁場 GS 模型	85
C.3	横結晶場 GS 模型	87
D	ランダム系における臨界指数	88
E	一次転移に対するスケーリング	92

1 序論

相転移はミクロな粒子から構成されたマクロな系で起こる興味深い協力現象である。われわれの身近なものでは、水の状態変化やドライアイスの昇華なども相転移の一種である。このように相転移には様々なものがあるが、多くのものは最も単純な磁性体の理論を用いて説明することが出来る。そこで、本章では磁性体の相転移に関する基本的な描像を解説する。また、本論文の主要なテーマである不規則性による新しい秩序、スピングラスについて解説した後に、本研究の目的である一次転移と量子揺らぎの関係について述べる。

1.1 相転移・臨界現象

温度や圧力を変化させたとき、ミクロな粒子同士の協力現象によって系のマクロな性質が急激に変化する現象がある。この現象を相転移という。統計力学の目的は、系のミクロな性質から系のマクロな性質を解明することであり、相転移はその中でも最も興味深い研究対象である。

様々な相転移が存在する中で、最も馴染み深いのは水の相転移であろう。水は温度、圧力の値によって、気体・液体・固体の三つの状態を持つ。温度、圧力など外部から制御可能なパラメータを軸として、系がどのような状態にあるかを表した図を相図という。ここで、水の相図を図1に示す。

図1における点 TP は三つの状態が共存する点であり、三重点と呼ばれる。点 C は気体と液体を区別出来ない点を表し、臨界点と呼ばれる。図1中の実線は相境界を表し、それらは転移点と呼ばれる。

水の相転移には大きく二つの種類がある。一つ目は図1の経路 (a) のように温度を変化させた場合である。このときは系の密度やエネルギーが不連続に変化する。二つ目は図1の経路 (b)

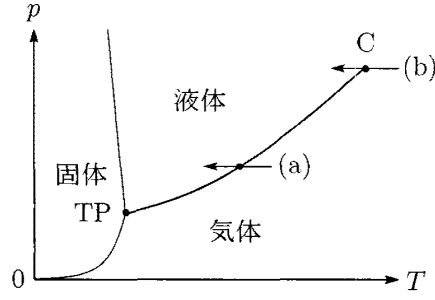


図 1: 水の相図。横軸は温度 T ，縦軸は圧力 p を表す。

に従い，温度を臨界点 C を横切るように変化させた場合である。このようにパラメータを変化させたときは，臨界現象と呼ばれる異常な現象が起きる。臨界現象は密度やエネルギーの不連続な変化では特徴付けられない，系の揺らぎによる現象である。例えば水の場合は臨界点 C において，密度の分散が無限大へと発散する。

これらの現象は水だけで起きるものではなく，様々な物質で同様に観察されるものである。特に，臨界点における現象の本質的な部分は，物質の詳細に依らず系の次元や対称性のみで決まると考えられている。つまり，相転移を記述する適切かつ簡易な模型があれば，その模型の解析を通して種々の相転移現象を理解出来るのである。このような背景から，水よりも理論的にも取り扱いやすい磁性体の研究が現在でも盛んに行われている [1]。そこで，次節では磁性体の相転移について解説する。

1.2 磁性体の相転移

磁性体の相転移は相転移の最も基本的な描像をわれわれに与える。磁性体の中でも，相互作用の強さが均一な系は純粋系と呼ばれる。本節では純粋系の磁性体を例として，その描像を見ていく。

磁性体はスピンを持つ粒子が多数集合することで構成された物質である。基本的な磁性体として，強磁性体と反強磁性体がある。強磁性体ではスピンの向きを揃えようとする相互作用，反強磁性体では反平行にしようとする相互作用が働く。これらを理論的に解析するための模型として Ising 模型がある。Ising 模型のハミルトニアンは次式で定義される。

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (1)$$

ここで σ_i は格子点 (サイト) i にあるスピンを表し， ± 1 の値を取る。 $\langle i,j \rangle$ は最近接のスピンについて取る。また， J_{ij} はサイト i と j にあるスピン間に働く相互作用であり， h はスピンに作用する外部磁場である。ハミルトニアンが与えられると，あるスピン配位 $\{\sigma_i\}$ が実現される確率 $P(\{\sigma_i\})$ は次の Boltzmann 分布で与えられる。

$$P(\{\sigma_i\}) = \frac{\exp(-\beta H)}{Z}, \quad (2)$$

$$Z = \text{Tr}_{\{\sigma_i\}} \exp(-\beta H) \quad (3)$$

ここで $\beta = 1/k_B T$ である。以降では断りがない限り， $k_B = 1$ とする。

強磁性 Ising 模型 ($J_{ij} = J > 0$) を例として、磁性体の相転移描像を見ていく。まず、次のような秩序変数 m を導入する。

$$m = \frac{1}{N} \frac{\text{Tr} \sum_i \sigma_i \exp(-\beta H)}{Z} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \sigma_i \rangle \quad (4)$$

ここで $\langle \dots \rangle$ は与えられたハミルトニアンに対する熱平均を表す。秩序変数 m はスピンの揃う程度を表す量であり、磁化と呼ばれる。外部磁場がない状況を考えると、高温 ($\beta J \ll 1$) では全てのスピン配位が同じ確率で実現されることが (2) 式から分かる。これは熱揺らぎの効果によって、各スピンが様々な方向を向くことを表している。よって、系全体としてもスピンの秩序は存在しない。このような相を常磁性相といい、 $m = 0$ で特徴付けられる。一方で、低温 ($\beta J \gg 1$) ではエネルギーが低い状態が高確率で実現する。これは相互作用が有意となり、スピンの向きが揃うことを意味している。このような磁性を持つ相を強磁性相といい、磁化 m は 0 でない値を持つ (図 2)。

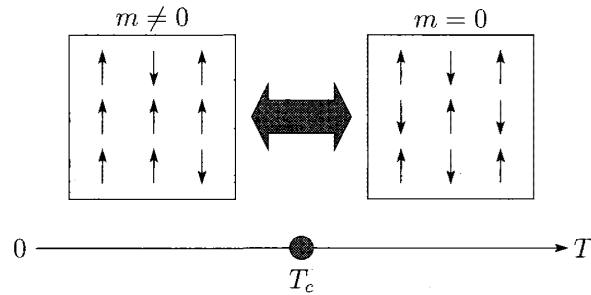


図 2: 強磁性・常磁性相における Ising 模型の振る舞い。横軸は温度 T を表す。転移点より高温側ではスピンの向きに秩序がない状態を取るのに対し、低温側ではスピンの揃い秩序が形成される。

Onsager は二次元 Ising 模型の厳密解を求め、比熱が転移点 T_c において発散するという特異な振る舞いを示した [2]。さらに、温度を $T < T_c$ に保ち磁場の強さを変化させると、 $h = 0$ において磁化が不連続となる。これらの特異性は、比熱や磁化といった物理量が自由エネルギーの何階微分で得られるかにより特徴付けられる。ここで、自由エネルギー F は次式で定義される。

$$-\beta F = \log Z \quad (5)$$

比熱は自由エネルギーの二階微分で与えられるため、Ising 模型は温度に対して二次の相転移を起こす。また、磁化は自由エネルギーを磁場で一階微分したものであるから、磁場に対しては一次転移が起きる (図 3)。

自由エネルギーの一階微分から得られる物理量には、内部エネルギー E やエントロピー S がある。また、二階微分に対しては比熱 C の他にも磁化率 χ などがある。二次転移を含めたスピンの揺らぎが大きくなる転移は、一般に連続転移と呼ばれる。

以上の物理量の転移点における典型的な振る舞いを図 4 に示す。一次転移の場合は転移点において、エネルギーやエントロピーが不連続に変化する。一方で二次転移の場合はエネルギーやエントロピーは連続であるが、比熱や磁化率といったスピンの揺らぎを表す物理量が発散する。

このように Ising 模型を用いた強磁性体の理論は、われわれに相転移に関する多くの知見をもたらした。しかし、現実には相互作用が不均一な系が存在する。次節ではその中でも、多くの興味深い性質が発見されたスピングラスについて見ていく。

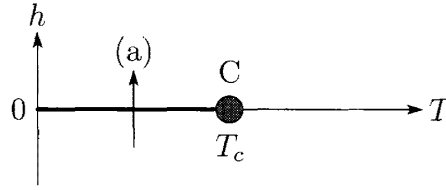


図 3: $T-h$ 平面における Ising 模型の相転移。点 C では温度に対する二次転移が起きる。また、磁場を経路 (a) に沿って変化させると $h=0$ で一次転移が起きる。

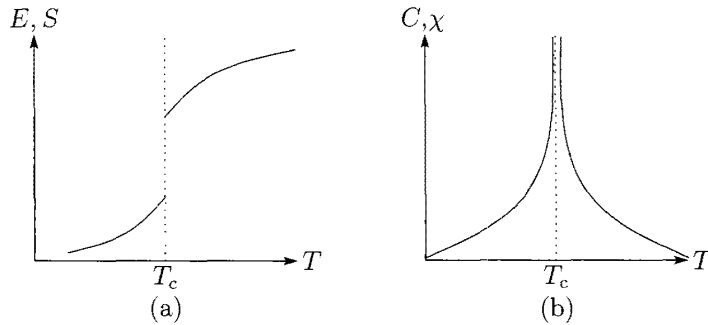


図 4: 転移点における物理量の典型的な振る舞い。(a) は一次転移, (b) は二次転移を表す。

1.3 スピングラス

現実の物質には、不純物や欠陥を伴ったものが数多く存在する。このような系をランダム系という。現在、統計力学は純粋系に限らず、ランダムな磁性体にもその適用範囲を広げている。その中でもランダム系特有の秩序であるスピングラスは、ランダムネスと秩序という一見相反する概念が共存する興味深い現象として、現在でも盛んに研究が行われている [3][4][5]。そこで、本節ではスピングラスに関する実験事実とその理論模型について解説する。

スピングラスの研究の発端となったのは、Cannella と Mydosh によって行われた実験である。彼らは非磁性物質である金に磁性原子である鉄を混ぜた希薄合金 AuFe を用いて磁化率を測定した [6]。また、Brodale らは希薄合金 CuMn を用いて比熱の測定を行った [7]。彼らの実験から、これらの希薄合金が次のような性質を持つことが明らかとなった (図 5)。

- 磁化率は温度 T_g において鋭いとがり (カスプ) を持つ。
- 比熱は T_g よりも高温側に広いピークを持つ。

これらの実験事実から、希薄合金中のスピンのような性質を持つことが分かる。磁化率はスピンの磁場に対する応答のし易さを表す。そのため、 T_g より高温で磁化率が低い理由は、熱揺らぎによりスピンが無秩序な方向を向くためであると分かる。よって、希薄合金の場合も高温領域では常磁性相である。一方で、 T_g より低温では、相互作用の影響によりスピンが凍結し、磁場へ応答しにくくなっているものと考えられる。この相互作用によるスピンの凍結状態が、後に述べるスピングラスの大きな特徴である。低温で磁場に応答しにくいという性質は純粋系でも同様に見られる。しかし、純粋系では転移点において磁化率が発散するという特異性が現れる。また、純粋系では転移点で比熱が発散する振る舞いが見られる。しかし、希薄合金

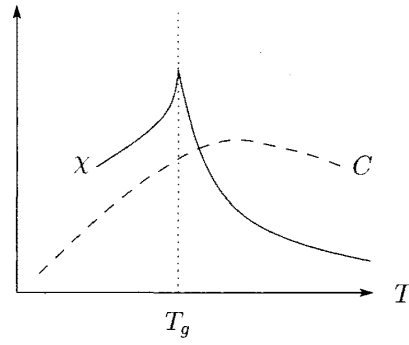


図 5: 希薄合金における磁化率と比熱の温度依存性。横軸は温度 T を表す。実線、破線はそれぞれ磁化率および比熱を表す。

の磁化率および比熱の振る舞いは純粋系のそれと全く異なるため、このような系では温度 T_g において何か新しい型の相転移が起きているものと考えられる。

以降ではこれら一連の現象をスピングラス現象と呼ぶことにする。これらの現象を理論的に説明することが、スピングラス理論の大きな目標である。そのためには、スピン間にどのような相互作用が働いているかが重要となる。それは Ruderman らによって明らかにされており、希薄合金中の磁性原子間には伝導電子を介して次のような相互作用が働くことが知られている [8][9][10]。

$$J_{ij} \propto \frac{\cos(2k_F r_{ij})}{r_{ij}^3} \quad (6)$$

ここで、 k_F は伝導電子のフェルミ波数、 r_{ij} は磁性原子間の距離である。この相互作用は Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida 相互作用と呼ばれる。(6) 式で重要なのは、スピン間の距離に応じて相互作用の強さや符号が変化することである。よって、希薄合金中にランダムに配置されている磁性原子間には、それぞれランダムな相互作用が働くことになる。

Edwards と Anderson は相互作用がスピン対毎に正負ランダム of 値を取ることが、スピングラス現象の本質であると考え、(1) 式の J_{ij} がスピン対毎に正負ランダムな値を取る Edwards-Anderson 模型 (以下 EA 模型) を考えた [11]。そして、スピングラスをランダムな相互作用によって、各スピンがばらばらな向きを持って凍結する現象であると考えたのである。このようなスピングラス相を特徴付けるためには、(4) 式の磁化だけではなく新たな秩序変数が必要となる。そこで、Edwards と Anderson は次式で定義されるスピングラス秩序変数を考えた。

$$q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \sigma_i \rangle^2 \quad (7)$$

強磁性相ではほとんどのスピンが同じ方向を向く。その向きを正とすれば、 $\langle \sigma_i \rangle > 0$ となる。よって、強磁性相は $m > 0, q > 0$ で特徴付けられる。また、常磁性相では各サイトにおいて $\langle \sigma_i \rangle = 0$ となることから $m = q = 0$ となる。一方、スピングラス相では各スピンは特定の向きに凍結しているため、 $\langle \sigma_i \rangle \neq 0$ となる。それらの値はサイト i 毎に正負ばらばらな値となるため、一次の平均である磁化 m は 0 となる。一方で、 $\langle \sigma_i \rangle^2$ は常に正となるため $q > 0$ となる。よって、スピングラス相は $m = 0, q > 0$ なる状態で表現することが可能となる。

EA 模型は相互作用が最近接スピンのみに働くために、有限次元系に対応する模型とすることが出来る。一方で、このような模型に対しては、まず平均場近似を用いてその性質を理解することが重要である。Sherrington と Kirkpatrick は平均場近似が厳密となる平均場模型、Sherrington-Kirkpatrick 模型 (以下 SK 模型) を考案した [12]。SK 模型のハミルトニアンは次の式で与えられる。

$$H = - \sum_{i>j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (8)$$

ここで、(8) 式における和は全てのスピン対について取る。また、 J_{ij} の分布は平均が J_0 、分散 J^2 の Gauss 分布で与えられる。 N を系の全スピン数とすると、平均場模型はあるスピンが他の $(N-1)$ 個のスピン全てと相関している模型である。すなわち、熱力学極限 $N \rightarrow \infty$ では無限個のスピンと相関することになり、この事実から平均場模型は無限次元の系を考えているとすることが出来る。EA, SK 模型に代表される、典型的な Ising スピングラス模型の相図を図 6 に示す。SK 模型では各相境界において、二次転移が起きることが知られている。

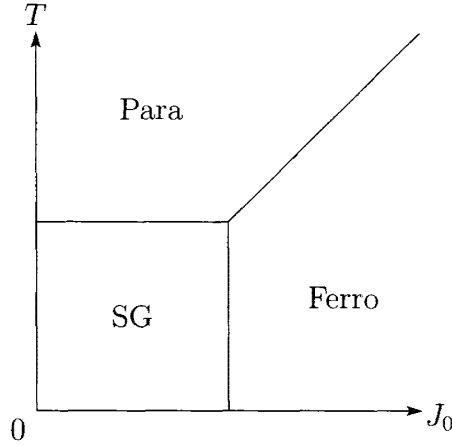


図 6: Ising スピングラス模型の典型的な相図。横軸を相互作用の平均値、縦軸を温度とした。実線は相境界を表す。Ferro, Para, SG はそれぞれ強磁性相, 常磁性相, スピングラス相を表す。

一方で、二次転移に加えて一次転移も存在する模型がある。それはスピンの大きさ S が 1 の模型であり、Blume-Emery-Griffiths 模型 (以下 BEG 模型) と呼ばれる [13]。EA 模型に対応する $S = 1$ の模型は次のハミルトニアンで表される。

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j - K \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 + D \sum_i S_i^2 \quad (9)$$

ここで、 J_{ij} は交換相互作用、 K は四重極子相互作用、 D は結晶場を表す。また、 S_i はサイト i におけるスピンであり、 $0, \pm 1$ の 3 値を取る。BEG 模型において、 $K = 0$ のときは Blume-Capel 模型と呼ばれる [14][15]。また、SK 模型に対応する $S = 1$ の平均場スピングラス模型は Ghatak-Sherrington 模型 (以下 GS 模型) と呼ばれる [16]。

これら $S = 1$ の系は、EA 模型や SK 模型を含んだ模型である。それは結晶場 $D \rightarrow -\infty$ とすると、(2) 式から分かるように、 $S = \pm 1$ のみが分配関数に寄与するためである。そこから結晶場 D を大きくすることで、 $S = 0$ の状態を取り込むことが出来る。これより、BEG スピン

グラス模型やGS模型は、EA模型やSK模型を一般化したものと言うことが出来る。よって、 $S=1$ の系の解析から、スピングラス模型に関するより多くの情報をわれわれは得ることが出来るのである。

1.4 一次転移と量子揺らぎ

通常の相転移および臨界現象は、マクロなスケールにおける相互作用と熱揺らぎとの競合によって起きるため、ミクロな量子揺らぎの効果は無視することが出来た。しかし、低温では熱揺らぎの効果が小さくなる。つまり、自由エネルギー曲面の谷に状態が位置すると、熱揺らぎでは他の状態に遷移するのは困難となる(図7(a))。

一方で、低温では量子効果(トンネル効果)の寄与が大きくなる。そのため、トンネル効果によって低温でも状態間の遷移が起きるのである(図7(b))。このように、低温では従来の熱揺らぎによる相転移とは異なった、量子系特有の量子相転移が起こることが期待される。

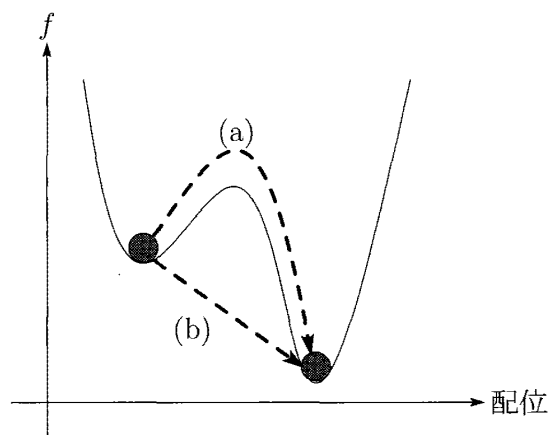


図 7: 熱揺らぎと量子揺らぎ。縦軸は自由エネルギー、横軸は配位を表す。また、(a) は熱揺らぎによる状態遷移、(b) は量子揺らぎ(トンネル効果)による状態遷移を表す。

スピングラス理論の分野では、量子スピングラスの研究も古典系の研究と同時期から行われていた。量子スピングラス模型としては、次の二つの模型が代表的である。一つ目は Bray と Moore によって導入された、ベクトルスピン型のスピングラス模型である [17]。しかし、この模型は解析が困難な上に、実験的に量子効果を制御することが出来ないことから、あまり精力的には研究されていないというのが現状である。もう一つの量子スピングラス模型は、古典スピングラス模型に横磁場のような制御可能な外場を印加したものである [18]。特に、横磁場 Ising スピングラスのモデル物質である $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ の実験 [19] を説明することが、量子スピングラス模型を解析する大きな動機の一つとなっている。また、今日では情報科学における最適化問題にも応用されており [20]、その適用範囲は物理の枠を超えて広がっている。

古典系と同様に、量子スピングラス模型においても最も盛んに研究されているのは、平均場模型に対応する横磁場 SK 模型である [21]。古典 SK 模型は二次転移を起こす模型であるため、横磁場 SK 模型の解析から量子揺らぎと二次転移の関係性が明らかになると言うことが出来る。

このような量子スピングラス模型の研究が盛んな一方で、一次転移を示す系の解析はあまり行われていない。しかし、以下に見るように一次転移と量子揺らぎの関係を理解することは、

物理的にも非自明かつ興味深い問題である。また、先述の最適化問題においても、一次相転移が最適化効率と密接に関わることが知られており、物理のみならず情報科学の面でも重要な課題となっている [22]。

具体的に、なぜ一次転移と量子揺らぎが興味深いのかを説明する。まず、一次の転移点直上では、自由エネルギーは秩序変数に対し図 8 のような形状を持つ。この自由エネルギー構造は、転移点において黒丸で表された二つの状態が共存していることを表している。また、それらの状態間にポテンシャル障壁が存在することが一次転移の特徴と言える。

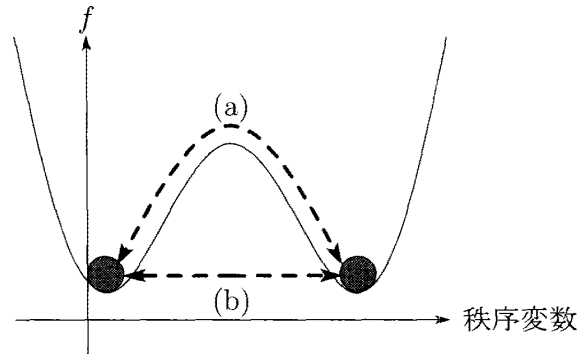


図 8: 一次転移と熱・量子揺らぎ。縦軸は自由エネルギー、横軸は秩序変数を表す。また、(a) は熱揺らぎ、(b) は量子揺らぎを表す。

系が有限温度にあるときは、熱揺らぎ (図 8(a)) によって二つの状態間の遷移が起きる。また、低温では熱揺らぎは弱くなるために、図 8(a) のような状態遷移が起きる可能性は低くなる。一方で、低温では量子揺らぎの効果が顕著になる。そのため、図 8(b) で表したように、状態間のポテンシャル障壁をトンネル効果で遷移することが可能となる。

これより、一次転移に対する量子揺らぎの効果として、二つの可能性が考えられる。一つ目の可能性はトンネル効果によって状態間の遷移が可能となるため、状態間のポテンシャル障壁は実効的に意味を持たないというものである。つまり、このときは一次転移からポテンシャル障壁がない状況である二次転移へと変化するものと考えられる。二つ目の可能性は、量子揺らぎが加わった場合でもポテンシャル障壁が依然として残るというものである。この場合は強い量子揺らぎの下でも一次転移が存在することになる。

本論文ではこれらの課題に答えるべく、一次転移のある系に対する量子効果について議論していく。一次転移を示す系には様々なものがあるが [23][24]、二次転移および一次転移に対する量子効果の解析という観点から、両者の相転移を含む模型があれば有用である。よって、本論文では BEG 模型や GS 模型といった $S = 1$ の系を用いて、量子揺らぎの効果を議論していく。

1.5 有限次元におけるスピングラス

相転移の描像を理解する手段として、平均場模型を用いた解析は非常に有効である。しかし、1.3 節でも述べたように平均場模型は無限次元の系を考えているため、その性質が実験に対応する有限次元系と一致するかは自明ではない。そこで、有限次元におけるスピングラス模型の解析が大きな課題となる。

相図の解明に対し、最も信頼性があるのは厳密解である。古典スピングラス模型に対する厳密解として、相図上の特定の領域における内部エネルギーや比熱の上限、相関不等式などを求めたものがある [4]。また 2 次元の場合は、相境界を解析的に高い精度で求めた先行研究もある [25][26]。しかし、スピングラス模型の相図全体を明らかにする厳密解、解析解は現在のところ得られていない。また、有限次元の量子スピングラス模型に対する厳密解は、現在のところ 1 次元に対するもののみである [27]。

このような背景から、有限次元の古典・量子スピングラス模型の解析では、数値シミュレーションが主要な手法として発展してきた。それらの中でも代表的な手法は、実空間繰り込み群の方法とモンテカルロ法である [28]。本論文では、有限次元系の量子スピングラス模型を解析するにあたり、実空間繰り込み群の方法を応用した解析を行う。そこで、本節では繰り込み群の基本的な考え方に触れておく。

繰り込み群は系のミクロな情報を落とす(粗視化する)ことで、マクロなスケールで起きる現象に注目するという考えに基づいている。ここでは二次元強磁性 Ising 模型を例として、最も直感的な繰り込み変換であるブロック・スピン変換を用いて、その考えを見ていく。

まず、図 9(a) のようなスピン配位があるとする。ブロック・スピン変換の例として、スピンを 3×3 個ずつのブロックに分解する。そしてブロック内のスピンの多数決によって、各ブロックの代表となるスピンを決定する(図 9(b))。

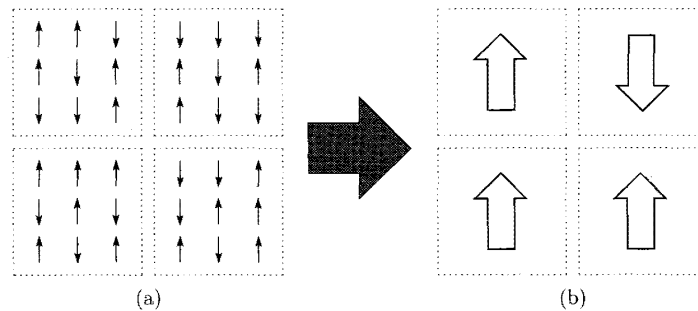


図 9: Ising スピンのブロックスピン変換。(a) は繰り込まれる前、(b) は繰り込まれた後のスピン配位を表す。

これら一連の変換を繰り込み変換という。図 9 の場合、(a) ではスピンの向きのバラバラさが見えるが、粗視化した後の (b) ではスピンの揃った状態に見える。つまり、繰り込み変換によって、系の有効温度が下がったことを表している。これは短いスケールで起きている系の挙動を繰り込むことで、より長いスケールで起きる現象を浮き彫りにしたとも言える。よって、無限回の繰り込み変換を行うことで、マクロな系で起きている現象を引き出すことが出来るのである。これより、元の系が強磁性相にある場合は、無限回の繰り込み変換を行うことで有効温度が 0 へと変化する(図 10(a))。一方で、系が常磁性相にある場合は、無限回の繰り込みによって有効温度は無限大となる(図 10(b))。

このように繰り込み群の方法を用いることで、有限次元の性質を調べることが出来る。ブロック・スピン変換は多数決という非解析的な繰り込み群の方法であるが、有効温度の変化を解析的に求められる Migdal-Kadanoff の繰り込み群(以下 MKRG)という方法もある [29][30]。MKRG による解析はスピングラスにも応用されており、定性的な性質を反映した結果が得られている [31][32]。そこで、本論文では有限次元系の解析手法として MKRG を用いる。

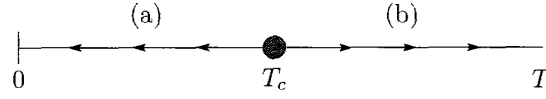


図 10: 繰り込み変換による有効温度の変化。 T_c は臨界点を表す。(a) は強磁性相, (b) は常磁性相における有効温度の変化を表す。

1.6 本論文の構成

本論文は次の 6 つの章からなる。

まず、第 2 章では量子系へ拡張する前の準備として、レプリカ法を用いた古典 SK 模型および GS 模型の解析を行う。また、その解析を通し、各模型における相転移の性質を見ていく。

第 3 章では横磁場に代表される量子揺らぎを導入した SK 模型, GS 模型の解析を行う。解析にあたり、経路積分の方法を用いた。経路積分を用いると、秩序変数が虚時間に依存するという古典系では見られない性質が現れる。そこで、秩序変数の虚時間依存性を無視する静的近似を用いた解析を行い、相図を描く。また、秩序変数の虚時間依存性を取り込んだ高橋による解析を解説し [33], その手法を $S = 1$ の系へと拡張した解析を行う。

本論文では有限次元へ接近する手法として、実空間繰り込み群の手法を用いる。中でもランダム系へと容易に拡張できる MKRG を用いて解析を行う。そこで、技術的な手法を説明する前の準備として、4.1 節では繰り込み群の一般論を解説する。また、4.2 節以降では MKRG の手法を古典 Ising 模型の解析を説明する。

5.1 節では MKRG を量子スピン系へ応用する方法を横磁場 Ising 模型を用いて解説する。その手法を用いた純粋系およびランダム系に対する結果を 5.2 節以降で示す。また、得られた結果から Ising 模型に対する量子揺らぎの影響を議論する。

第 6 章では同様の手法を用いた、横磁場 BEG 模型の解析について述べる。BEG 模型は一次転移が起きる模型であるため、繰り込み群の方法で一次転移を判定する方法が必要となる。6.2 節ではその判定法について説明する。純粋系およびランダム系に対する結果は 6.3 節以降で示し、 $S = 1$ の系に対する量子効果の影響を見ていく。

最後の章は以上の結果の総括に充てる。

2 平均場古典スピングラス模型の相転移

本章では、量子効果を導入した系の解析を行うための準備として、レプリカ法を用いた古典 SK, GS 模型の解説を行う。これらの模型は $S = 1/2$ と $S = 1$ の平均場スピングラス模型である。

ランダム系では、熱平均に加えてランダムネスに対する平均が必要となる。2.1 節では、スピングラスがどのような物理系に対応しているかを説明した上で、どのようなランダム平均を考えるべきかを議論する。また、そのランダム平均を数学的恒等式を用いて実行する手法である、レプリカ法について解説する。次に、次章の準備として、古典 SK 模型および GS 模型の相転移をレプリカ法を用いて議論する。本論文ではレプリカ対称性の仮定の下で解析を行い、相図を示す。なお本章の内容は文献 [12], [16] および [34] のレビューである。

2.1 自己平均性とランダム平均

相互作用がランダムな分布を持つ系には、大きく二つの系がある。一つ目はスピンの反転と相互作用の変化が、同じ時間スケールで起こる場合である。このような系をアニール系 (徐冷系) という。例として、高温状態にある希薄合金を考える。ここから温度を徐々に下げていくと、磁性および非磁性原子の位置は最も安定な配置を目指して変化していく。これはスピン系の描像では、スピンと相互作用が互いに安定な状態を目指して、同じ時間スケールで変化することを表すのである。

一方で、スピングラスでは、スピン間の相互作用がサンプル毎に固定されている。言い換えると、各磁性原子の配置が固定された状態にある。このような系では、アニール系のように相互作用が変化することはない。このような系はクエンチ系 (急冷系) と呼ばれる。

相互作用の確率分布を $P(J_{ij})$ とする。系のランダムネスはこの確率分布に従って与えられる。一般的な統計力学の考え方に従うと、自由エネルギーを J_{ij} の関数として書き下すことが目標となるが、このような計算は非常に困難である。しかし、次に説明するように、自由エネルギーなどの物理量は個々の J_{ij} の与え方には依存せず、その分布によって決定されることが分かる。これを自己平均性という。

自己平均性は次のような議論から理解することが出来る。まず、一辺の長さが l_0 の d 次元系を考える。この系を系 0 と呼び、その自由エネルギーを F_0 と表す。次に、系 0 を図 11 のように、一辺 l_1 の部分系に分割することを考える。その部分系の数を M とすれば、 $M = (l_0/l_1)^d$ なる関係が成り立つ。また、 $l_0 \gg l_1 \gg 1$ とそれぞれの系が十分に大きいと仮定する。各部分系の自由エネルギーを F_i と表す。ただし、 $i = 1, \dots, M$ である。すると、系 0 の自由エネルギー F_0 は、部分系の自由エネルギー F_i を用いて次のように表される。

$$F_0 = \sum_{i=1}^M \left(F_i + O(l_1^{d-1}) \right) = \sum_{i=1}^M F_i + O(l_0^d l_1^{-1}) \quad (10)$$

ここで、 $O(\cdot)$ は自由エネルギーに対する部分系表面からの寄与を表す。

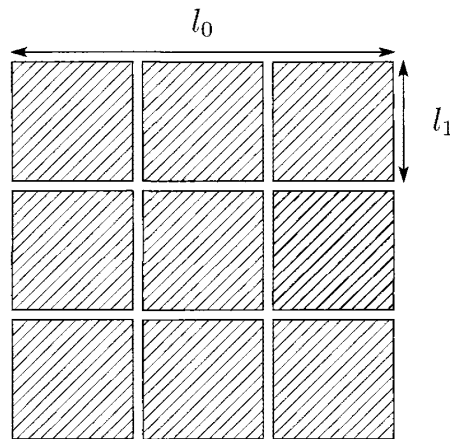


図 11: 全体系から部分系への分割。

1 スピンあたりの自由エネルギーを求めるために、(10) 式の両辺を l_0^d で割る。1 スピンあた

りの自由エネルギーを f で表すと, (10) 式から次の式を得る。

$$f_0 = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f_i + O(l_1^{-1}) \sim \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f_i \quad (11)$$

ここで (11) 式の最右辺を得るにあたり, $l_1 \rightarrow \infty$ の極限を考えた。

(11) 式は, 物理的には次のことを意味している。まず, 左辺はある相互作用の分布 $\{J_{ij}\}$ が与えられたサンプルにおける自由エネルギーである。このとき, 自由エネルギーは $\{J_{ij}\}$ の関数となる。一方で, 各部分系が異なる配位の相互作用を持つことを考えると, 最右辺は自由エネルギーを確率分布 $P(J_{ij})$ で平均した量を表す。このことから, 一般的な $\{J_{ij}\}$ に関する自由エネルギーを求める代わりに, 確率分布 $P(J_{ij})$ に関する平均量を計算しても等価であることが示された。実際に計算を行う上では後者の方が扱い易いため, 物理量を求める際は確率分布 $P(J_{ij})$ に関する平均を考慮する。このランダムネスに対する平均操作は, 熱平均と区別して配位平均と呼ばれる。

クエンチ系において, 配位平均は固定された配位に対する熱平均を取った後に行われる。(11) 式を用いれば, 固定された配位に対する自由エネルギーが f_i であり, 部分系についての和が配位平均に相当する。このことから, 系の自由エネルギー F は次のように書かれる。

$$F = -\frac{1}{\beta} [\log Z] = -\frac{1}{\beta} \int \prod_{\langle i,j \rangle} dJ_{ij} P(J_{ij}) \log Z(\{J_{ij}\}) \quad (12)$$

ここで, $[\dots]$ は配位平均, Z は分配関数を表す。

上記のように配位平均を考えることで, 理論的見通しは良くなる。しかし, (12) 式にあるような $\log Z$ の平均を取るという操作は, それでもなお困難な計算である。この困難性を回避する方法としてレプリカ法がある。レプリカ法は, $\log Z$ の平均を Z のべき乗の平均へと数学的恒等式を用いて変換する手法である。

$$[\log Z] = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{[Z^n] - 1}{n} \quad (13)$$

Z^n の配位平均は次節以降で見ると, n が自然数であれば容易に実行することが出来る。しかし, $n \rightarrow 0$ の極限を取るため, n を自然数から実数へと解析接続する必要がある。この操作は数学的厳密性に欠けている部分であるが, ある模型ではレプリカ法を用いた解と用いていない解が一致することが知られている [5]。よって, 相転移の描像を知る上ではレプリカ法には問題がないものと考えて, 本論文では議論を進めていく。

次節以降ではこのレプリカ法を SK 模型および GS 模型に適用して, 相図や相転移の描像を議論する。

2.2 SK 模型のレプリカ対称解

本節ではレプリカ法を用いて, 最も基本的なスピングラス模型である SK 模型の解析を行う。SK 模型の解析を通し, スピングラス秩序変数が自然と導入され, スピングラス相が持つ性質を知ることが出来る。

SK 模型のハミルトニアンは (8) 式で与えられていた。ここでは確認のため再び記す。

$$H = - \sum_{i>j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (14)$$

ここで、 i はスピンの位置するサイトの添え字であり、 i, j は全てのスピン対について取る。また、全スピン数を N とする。 σ は ± 1 を取る Ising 変数である。 J_{ij} はクエンチされた相互作用であり、SK 模型では J_{ij} の分布関数が以下のように与えられる。

$$P(J_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{2\pi J^2}} \exp\left(-\frac{N}{2J^2} J_{ij}^2\right) \quad (15)$$

レプリカ法に従って配位平均 $[Z^n]$ の計算を行う。

$$[Z^n] = \text{Tr}_{\{\sigma\}} \exp\left(\frac{\beta^2 J^2}{2N} \sum_{i>j} \sum_{a,b} \sigma_i^a \sigma_j^a \sigma_i^b \sigma_j^b\right) \quad (16)$$

ここで次の恒等式を用いる。

$$\sum_{i>j} \sum_{a,b=1}^n \sigma_i^a \sigma_j^a \sigma_i^b \sigma_j^b = \frac{nN(N-1)}{2} + \frac{1}{2} \sum_{a \neq b} \left\{ \left(\sum_i \sigma_i^a \sigma_i^b \right)^2 - N \right\} \quad (17)$$

熱力学極限 $N \rightarrow \infty$ で自由エネルギーに寄与する項のみを取り出せば、(16) 式は次のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} [Z^n] &= \text{Tr}_{\{\sigma\}} \exp \left\{ \frac{nN}{4} \beta^2 J^2 + \frac{\beta^2 J^2}{4N} \sum_{a \neq b} \left(\sum_i \sigma_i^a \sigma_i^b \right)^2 \right\} \\ &= \text{Tr}_{\{\sigma\}} \int_{-\infty}^{\infty} dq_{ab} \exp \left\{ -\frac{N\beta^2 J^2}{2} \sum_{a>b} q_{ab}^2 + \beta^2 J^2 \sum_{a>b} q_{ab} \left(\sum_i \sigma_i^a \sigma_i^a \right) + \frac{nN}{4} \beta^2 J^2 \right\} \end{aligned} \quad (18)$$

ここで、1 行目から 2 行目への変形では Hubbard-Stratonovitch 変換

$$\exp\left(\frac{a}{2}x^2\right) = \sqrt{\frac{aN}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left(-\frac{Na}{2}y^2 + \sqrt{N}axy\right) \quad (19)$$

を用いた。(18) 式におけるトレースは、サイト毎に独立に計算することが出来る。よって (18) 式は、

$$[Z^n] = \int_{-\infty}^{\infty} dq_{ab} \exp\left(-\frac{N\beta^2 J^2}{2} \sum_{a>b} q_{ab}^2 + N \log \text{Tr} e^L + \frac{nN}{4} \beta^2 J^2\right) \quad (20)$$

$$L = \beta^2 J^2 \sum_{a>b} q_{ab} \sigma^a \sigma^b \quad (21)$$

となる。ここで現れた補助変数 q_{ab} は、後に見るようにスピングラス秩序変数となる。(20) 式において、指数関数の肩にある各項は全てサイト数 N に比例しているため、熱力学極限 $N \rightarrow \infty$ では鞍点法を用いることで、この積分を評価することが出来る。自由エネルギーの極値を与える q_{ab} を用いれば、 $[Z^n]$ は次のようになる。

$$\begin{aligned} [Z^n] &= \exp \left\{ Nn \left(-\frac{\beta^2 J^2}{2n} \sum_{a>b} q_{ab}^2 + \frac{1}{n} \log \text{Tr} e^L + \frac{1}{4} \beta^2 J^2 \right) \right\} \\ &\sim 1 + nN \left(-\frac{\beta^2 J^2}{2n} \sum_{a>b} q_{ab}^2 + \frac{1}{n} \log \text{Tr} e^L + \frac{1}{4} \beta^2 J^2 \right) \end{aligned} \quad (22)$$

レプリカ数 n は最終的に 0 へと極限を取るため、上式第 1 行から第 2 行への変形では、 n が十分小さいとして n の一次まで展開した。これより、1 スピンあたりの自由エネルギーは次のように評価される。

$$\begin{aligned} [f] &= -\frac{1}{\beta N} \lim_{n \rightarrow 0} \frac{[Z^n] - 1}{n} \\ &= \lim_{n \rightarrow 0} \left(\frac{\beta J^2}{2n} \sum_{a>b} q_{ab}^2 - \frac{1}{\beta n} \log \text{Tre}^L - \frac{\beta J^2}{4} \right) \end{aligned} \quad (23)$$

鞍点法を用いた際の q_{ab} に関する極値の条件は、(23) 式の自由エネルギーに対する極値条件となっており、実際に q_{ab} に関して微分することで鞍点方程式、

$$q_{ab} = \frac{\text{Tr} \sigma^a \sigma^b e^L}{\text{Tre}^L} \quad (a \neq b) \quad (24)$$

を得る。すなわち、スピングラス秩序変数が異なるレプリカ間の相関によって表されることが上式より分かる。上式をさらに詳しく見ることで、スピングラス相の性質を知ることが出来る。上式は次のように書き換えることが出来る。

$$q_{ab} = \left[\frac{\text{Tr} \sigma_i^a \sigma_i^b e^{-\beta \sum_c H_c}}{\text{Tre}^{-\beta \sum_c H_c}} \right] \quad (25)$$

ここで、 H_c は c 番目のレプリカに対応するハミルトニアンである。

$$H_c = - \sum_{i>j} J_{ij} \sigma_i^c \sigma_j^c \quad (26)$$

(25) 式の分母は Z^n であり、 $n \rightarrow 0$ で $Z^n \rightarrow 1$ となる。また、分子は (16) 式から (20) 式を得るに至る過程と同様の計算をすることで、 $(\text{Tre}^L)^{N-1} \text{Tr}(\sigma^a \sigma^b e^L)$ となる。(23) 式から $n \rightarrow 0$ の極限で、 $\log \text{Tre}^L$ は n に比例することが分かるため、 $n \rightarrow 0$ で $\text{Tre}^L \rightarrow 1$ となる。これを用いれば、分子は $\text{Tr}(\sigma^a \sigma^b e^L)$ となり、(24) 式と同値であることが分かる。(25) 式においてレプリカ数が a, b 以外のものは分母と分子で打ち消し合う。よって、 q_{ab} が次のように書き換えられる。

$$q_{ab} = \left[\frac{\text{Tr} \sigma_i^a e^{-\beta H_a}}{\text{Tre}^{-\beta H_a}} \frac{\text{Tr} \sigma_i^b e^{-\beta H_b}}{\text{Tre}^{-\beta H_b}} \right] = [\langle \sigma_i^a \rangle \langle \sigma_i^b \rangle] = [\langle \sigma_i \rangle^2] \quad (27)$$

常磁性相では $\langle \sigma_i \rangle = 0$ であるから、 $\langle \sigma_i \rangle$ の平均である磁化 m およびスピングラス秩序変数 q は 0 となる。一方で、スピンの向きに凍結している場合は、各サイト i において $\langle \sigma_i \rangle$ が正負様々な値を持つ。このとき磁化 m は 0 となるが、(27) 式からスピングラス秩序変数 q は 0 ではない正の値を持つことが分かる。よって、 $m = 0, q > 0$ なる状態を用いて、スピンが無秩序に凍結するというスピングラスの性質を表現出来ることが分かる。

自由エネルギー (23) 式の評価を進める。(23) 式から解析を進めるためには、秩序変数 q_{ab} のレプリカ添え字 a, b 依存性を明らかにする必要がある。最も素朴なものは、レプリカはわれわれが人為的に導入したものであるから、秩序変数はレプリカの添え字に依存しないであろうという仮定である。この仮定による解をレプリカ対称解 (以下 RS 解) と呼ぶ。すなわち $q_{ab} = q$ と置き換える。後に見るように、この仮定に沿った解析は低温において破綻する。低温での正しい解を得るためには、レプリカ対称性の破れを考慮しなければならない [35][36]。しかし、温

度が転移点以上のときは RS 解は正しい解となる。よって、相境界を求める上では RS 解のみの解析でよいので、本論文では RS 解のみを考える。

RS 解 $q_{ab} = q$ を仮定すると、(23) 式の第 1 項は容易に評価することが出来て、

$$\sum_{a>b} q_{ab}^2 = \frac{n(n-1)}{2} q^2 \quad (28)$$

となる。次に (23) 式の第 2 項を評価する。

$$\begin{aligned} \log \text{Tre}^L &= \log \text{Tr} \exp \left(\beta^2 J^2 q \sum_{a>b} \sigma^a \sigma^b \right) \\ &= \log \int Dz \text{Tr} \exp \left(\beta J \sqrt{q} z \sum_a \sigma^a - \frac{n \beta^2 J^2 q}{2} \right) \\ &\sim n \left\{ \int Dz \log 2 \cosh(\beta J \sqrt{q} z) - \frac{\beta^2 J^2 q}{2} \right\} \end{aligned} \quad (29)$$

ここで、

$$\int Dz \dots = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} \dots \quad (30)$$

とした。これより、RS 解に対する自由エネルギーが以下のように得られる。

$$f_{\text{RS}} = -\frac{\beta J^2}{4} (1-q)^2 - \frac{1}{\beta} \int Dz \log 2 \cosh(\beta J \sqrt{q} z) \quad (31)$$

秩序変数 q に関する極値条件から、次の鞍点方程式が導かれる。

$$q = \int Dz \tanh^2(\beta J \sqrt{q} z) \quad (32)$$

スピングラス相が現れる転移点では、秩序変数 q が十分小さいと考えられる。そこで、(32) 式の右辺を q について 1 次まで展開する。これより次の式を得る。

$$q = \beta^2 J^2 q \quad (33)$$

(33) 式は転移点において成り立つ式であるから、温度について解くことで転移点 $T_c = J$ が得られる。同様に (31) 式を Landau 展開することで、同じ解を得ることが出来る。 q の 2 次まで展開することにより、自由エネルギーは次のようになる。

$$f_{\text{RS}} \sim -\frac{1}{\beta} \log 2 - \frac{1}{4} \beta J^2 (1 - \beta^2 J^2) q^2 \quad (34)$$

Landau 理論より q^2 の係数が 0 となる温度が転移点であり、 $T_c = J$ が再び導かれる。同時に SK 模型のスピングラス転移は二次転移であることが分かる。しかし、ここで一つ注意しなければならないことがある。それは (34) 式からも分かるように、自由エネルギーの鞍点は q に対して極大となるということである。これは強磁性体の Landau 理論とは異なる描像であり、レプリカ法を用いたために生じた問題である。具体的には (28) 式の評価によって、 n が 1 より小さい場合は q^2 の係数が負であることに由来する。

2.3 GS 模型のレプリカ対称解

本節では $S = 1$ の平均場スピングラス模型である，GS 模型の解析を行い相図を描く。SK 模型と同様に，GS 模型に対してもレプリカ対称性の破れを考慮した解が求められているが，相境界を描く上では両者に大きな違いはない [37]。よって，本節でも RS 解のみを扱う。GS 模型のハミルトニアンは次式で与えられる。

$$H = - \sum_{i>j} J_{ij} S_i S_j + D \sum_{i=1}^n (S_i)^2 \quad (35)$$

SK 模型と同様に，交換相互作用 J_{ij} は分布関数 (15) 式で与えられている。(35) 式の第一項において， i, j は全てのスピン対について取る。また，全スピン数を N とする。 D は結晶場と呼ばれ，スピンの異方性を表す項である。なぜなら，結晶場は $S = \pm 1$ の Ising 的なスピンに対してはエネルギーを D だけ上昇させ， $S = 0$ の状態に対してはエネルギー 0 を与える。つまり，結晶場の強さは $S = \pm 1$ と $S = 0$ の状態の割合を決定する。このことから， D は化学ポテンシャルの役割を持つことが分かる。GS 模型は $D \rightarrow -\infty$ の極限では $S = \pm 1$ の状態しか分配関数に寄与しないため，この極限において SK 模型と等価になる。また， $D \rightarrow \infty$ の極限では $S = 0$ の状態のみが寄与するため，磁気的な性質は持たないことが直感的に理解出来る。以上の議論から GS 模型は一般化された SK 模型と言うことも出来る。

レプリカ法に従って，分配関数の n 乗に対して配位平均を取ると次の式を得る。

$$[Z^n] = \text{Tr}_{\{S\}} \exp \left\{ \frac{\beta^2 J^2}{2N} \sum_{i>j} \sum_{a,b=1}^n S_i^a S_j^a S_i^b S_j^b - \beta D \sum_i \sum_{a=1}^n (S_i^a)^2 \right\} \quad (36)$$

計算を進めるにあたり，次の恒等式が有用である

$$\begin{aligned} & \sum_{i>j} \sum_{a,b=1}^n S_i^a S_j^a S_i^b S_j^b \\ &= \sum_{i>j} \sum_{a=1}^n (S_i^a S_j^a)^2 + \sum_{i>j} \sum_{a \neq b} S_i^a S_j^a S_i^b S_j^b \\ &= \frac{1}{2} \sum_{a=1}^n \left\{ \left(\sum_i S_i^{a^2} \right)^2 - \sum_i S_i^{a^2} \right\} + \frac{1}{2} \sum_{a \neq b} \left\{ \left(\sum_i S_i^a S_i^b \right)^2 - \sum_i S_i^{a^2} S_i^{b^2} \right\} \\ &\sim \frac{1}{2} \sum_{a=1}^n \left\{ \sum_i (S_i^a)^2 \right\}^2 + \frac{1}{2} \sum_{a \neq b} \left(\sum_i S_i^a S_i^b \right)^2 \end{aligned} \quad (37)$$

ここで，熱力学極限およびクエンチ系への極限 $n \rightarrow 0$ において寄与しない項は落とした。スピン 1 の場合は $(S_i^a)^2 = 1$ が成り立たないことに注意する。(37) 式を (36) 式に代入し，Hubbard-Stratonovitch 変換を用いれば，

$$[Z^n] = \int \prod_{a \neq b} dq_{ab} \int \prod_a dp_a \exp \left\{ -\frac{N\beta^2 J^2}{4} \left(\sum_{a \neq b} q_{ab}^2 + \sum_a \chi_a^2 \right) + N \log \text{Tr}_{\{S^a\}} e^L \right\} \quad (38)$$

$$L = \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{a \neq b} q_{ab} S^a S^b + \beta \sum_a \left(\frac{\beta J^2}{2} \chi_a + D \right) (S^a)^2 \quad (39)$$

を得る。これより、自由エネルギーも SK 模型と同様に得ることが出来る。

$$[f] = \lim_{n \rightarrow 0} \left\{ \frac{\beta J^2}{4n} \left(\sum_{a \neq b} q_{ab}^2 + \sum_a \chi_a^2 \right) - \frac{1}{\beta n} \log \text{Tre}^L \right\} \quad (40)$$

q_{ab} および χ_a に関して、自由エネルギーが極値を取るという条件が鞍点方程式を与える。よって、2つの鞍点方程式が次のように得られる。

$$q_{ab} = \frac{\text{Tr} S^a S^b e^L}{\text{Tre}^L} \quad (a \neq b), \quad (41)$$

$$\chi_a = \frac{\text{Tr} S^a S^a e^L}{\text{Tre}^L} \quad (42)$$

具体的に相境界を得るために、RS 解 $q_{ab} = q, \chi_a = \chi$ を仮定して計算を進める。(40) 式の第 1 項は次のように評価される。

$$\sum_{a \neq b} q_{ab}^2 + \sum_a \chi_a^2 = \sum_{a \neq b} q^2 + \sum_a \chi^2 = n(n-1)q^2 + n\chi^2 \quad (43)$$

第 2 項は RS 解の下で具体的に計算することが出来て、次のようになる。

$$\begin{aligned} \log \text{Tre}^L &= \log \int Dz \left[\text{Tr} \exp \left(\beta J \sqrt{q} z S^a + \left\{ \frac{\beta^2 J^2}{2} (\chi - q) + \beta D \right\} (S^a)^2 \right) \right]^n \\ &= n \int Dz \log \left\{ 1 + 2 \exp \left(\frac{\beta^2 J^2}{2} (\chi - q) + \beta D \right) \cosh(\beta J \sqrt{q} z) \right\} \end{aligned} \quad (44)$$

これより、(43),(44) 式を (40) 式に代入することで、RS 解に対する自由エネルギーを得る。

$$f_{\text{RS}} = \frac{\beta J^2}{4} (\chi^2 - q^2) - \frac{1}{\beta} \int Dz \log \left[1 + 2 \exp \left(\frac{\beta^2 J^2 (\chi - q)}{2} + \beta D \right) \cosh(\beta J \sqrt{q} z) \right] \quad (45)$$

χ と q に関する鞍点方程式はそれぞれ、

$$\chi = \int Dz \frac{2 \exp \left(\frac{\beta^2 J^2 (\chi - q)}{2} + \beta D \right) \cosh(\beta J \sqrt{q} z)}{1 + 2 \exp \left(\frac{\beta^2 J^2 (\chi - q)}{2} + \beta D \right) \cosh(\beta J \sqrt{q} z)}, \quad (46)$$

$$q = \int Dz \left[\frac{2 \exp \left(\frac{\beta^2 J^2 (\chi - q)}{2} + \beta D \right) \sinh(\beta J \sqrt{q} z)}{1 + 2 \exp \left(\frac{\beta^2 J^2 (\chi - q)}{2} + \beta D \right) \cosh(\beta J \sqrt{q} z)} \right]^2 \quad (47)$$

となる。以上の解析から、図 12 の相図を得る。図 12 の二次転移が起きる相境界では、 q が 0 から有限の値へと連続的に変化する。この相境界において、 χ は連続的に変化する。一方で、一次転移の相境界では q および χ が不連続に変化する。

図 12 より、GS 模型では一次、二次転移の両者が存在することが分かる。特に一次転移が起きる相境界は、常磁性相がスピングラス相よりも低温に入り込むような形状をしている。このように不安定な相が安定な相よりも低温側に存在するような転移をリエントラント転移という。また、GS 模型は $D \rightarrow -\infty$ で SK 模型と等価であった。よって、 $D \rightarrow -\infty$ とすることで転移点は $T/J = 1$ に漸近する。

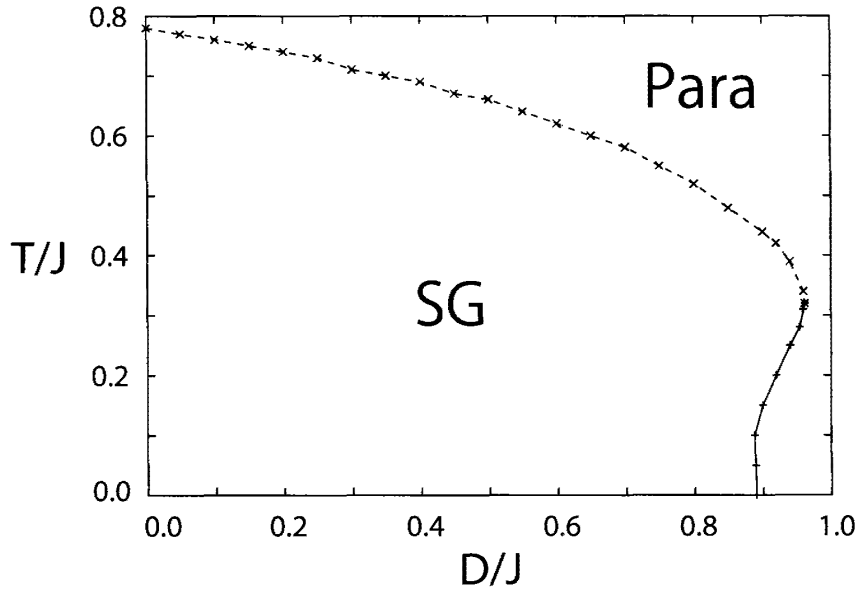


図 12: 古典 GS 模型の相図。縦軸は温度 T ，横軸は結晶場 D を表す。実線は一次転移，破線は二次転移を表す。相境界内部はスピングラス相 (SG)，外部は常磁性相 (Para) を表す。

図 12 は鞍点方程式 (46), (47) 式を解くことによって得ることが出来る。Ghatak と Sherrington はこれらの式を評価することで相図を描いたが，求められた秩序変数は自由エネルギーの連続条件に反しており，誤った結果であることが F. A. da Costa らによって指摘されている [34]。彼らは自由エネルギーの連続条件を考慮することで，正しい RS 解に対する相図を描いた。鞍点方程式の解は q については極大， χ については極小となる。 q について極大を取るのは，前節で述べた通りレプリカ法を用いたことに由来する性質である。

以上の結果は先行研究 [34] と同様のものである。次章では量子効果を導入することで，この相図がどのように変化していくのかを見る。

3 横磁場 SK 模型と横磁場・横結晶場 GS 模型の相転移

本章では量子スピングラス模型として，横磁場 SK 模型と横磁場・横結晶場 GS 模型の解析を行い，相図を示す。また，相図から各模型が量子揺らぎの影響をどのように受けるかを見ていく。

量子系の解析の難しさとして，スピン演算子の非可換性がある。そのため，量子スピンの記述されている系を何らかの方法で古典スピン系に書き直すことが出来れば非常に有用である。その手法の 1 つとして，経路積分を用いる方法がある [38][39]。そこで 3.1 節ではスピン系における経路積分表示について解説する。経路積分表示を行った結果として，量子スピン系では秩序変数が虚時間に依存することになる。多くの場合は静的近似 (static approximation) という，秩序変数の虚時間依存性を無視した解析を行うが，本論文ではその虚時間依存性を部分的に取り込んだ解析を行った。虚時間依存性の取り込みについては $S = 1$ の系についても，横磁場 SK 模型の計算と同様の定式化によって行うことが出来る。そのため，まずは最も基本的な量子スピングラス模型である横磁場 SK 模型の場合を 3.2 節で解説し [33]，その後 3.3 節で $S = 1$ の

系へと拡張する。

3.1 スピン系の経路積分表示

本節では分配関数の経路積分表示について解説する [38][39]。経路積分を用いることの長所は、非可換な演算子から構成されるハミルトニアンを可換な古典量を用いて書き換えられる点である。

経路積分表示をするためには、完全系をなす状態が必要である。ここではそのような状態として、スピンの大きさが S のコヒーレント状態を次のように導入する。

$$|S\rangle = e^{-i\phi\hat{S}_z} e^{-i\theta\hat{S}_y} |S\rangle \quad (48)$$

ここで、 $\hat{S}_z|S\rangle = S|S\rangle$ とした。また、 $\exp(-i\theta\hat{S}_y)$ は $\hat{S}_y$ 軸回りに θ だけ回転する演算子であることに注意する。スピン演算子のコヒーレント状態による期待値は、

$$\langle S|\hat{S}|S\rangle = \langle S|(\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)|S\rangle = S(\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta) \quad (49)$$

となる。つまり、コヒーレント状態に対する各スピン演算子の期待値は、3次元の極座標表示に対応する。また、コヒーレント状態は完全系をなす。つまり、

$$\int dS |S\rangle \langle S| = 1, \quad (50)$$

$$\int dS \dots = \frac{2S+1}{4\pi} \int_{-1}^1 d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\phi \dots \quad (51)$$

となる。ここで、コヒーレント状態は完全系をなす一方で、異なる (θ, ϕ) で与えられたコヒーレント状態は直交しないことに注意する。コヒーレント状態の導入や性質に関する詳細な解説は付録 A に記した。

系の分配関数はコヒーレント状態を用いた積分表示では次のように表される。

$$Z = \text{Tr}_{\{\hat{S}_0\}} \exp(-\beta H(\hat{S}_0)) = \int dS_0 \langle S_0 | \exp(-\beta H(\hat{S}_0)) | S_0 \rangle \quad (52)$$

(52) 式は、指数の肩を $\Delta\tau = \beta/M$ を用いて分解し、完全系の条件 (50) 式を用いることで次のように書き換えられる。

$$Z = \int dS_0 \langle S_0 | \left(e^{-\Delta\tau H(\hat{S}_0)} \right)^M | S_0 \rangle \quad (53)$$

$$= \int \prod_{i=0}^{M-1} dS_i \langle S_0 | e^{-\Delta\tau H(\hat{S}_0)} | S_1 \rangle \langle S_1 | \dots | S_{M-1} \rangle \langle S_{M-1} | e^{-\Delta\tau H(\hat{S}_{M-1})} | S_M \rangle \quad (54)$$

ここで $|S_k\rangle$ は $|S((M-k)\Delta\tau)\rangle$ を表す。また、周期境界条件 $|S_0\rangle = |S_M\rangle$ を課している。 τ が虚数だと考えれば、(54) 式はシュレディンガー方程式における時間発展演算子を作用させていることに対応する。そのため時間 τ は虚時間と呼ばれる。 $M \rightarrow \infty$ として $\langle S_k | e^{-\Delta\tau \hat{H}(\hat{S}_k)} | S_{k+1} \rangle$ を具体的に評価する。簡単のため、状態ベクトル $|S((M-k)\Delta\tau)\rangle$ を時間をあらわにした形、

$|\mathbf{S}_k\rangle = |\tau + \Delta\tau\rangle$, $|\mathbf{S}_{k+1}\rangle = |\tau\rangle$ とする。

$$\begin{aligned} \langle \tau + \Delta\tau | e^{-\Delta\tau \hat{H}} | \tau \rangle &\sim \langle \tau + \Delta\tau | 1 - \Delta\tau \hat{H} | \tau \rangle \\ &\sim 1 - \Delta\tau \left(\langle \tau | \hat{H} | \tau \rangle - \langle \dot{\tau} | \tau \rangle \right) \\ &\sim \exp \left[\Delta\tau (\langle \dot{\tau} | \tau \rangle - \langle \tau | \hat{H} | \tau \rangle) \right] \end{aligned} \quad (55)$$

上式の変形において、 $\Delta\tau$ の 2 次以上の項は落とした。

(55) 式の指数の肩にある $\langle \tau | \hat{H} | \tau \rangle$ は、コヒーレント状態に対するハミルトニアン $\hat{H}$ の期待値であり、(49) 式からも明らかなように $(\theta(\tau), \phi(\tau))$ で表現される古典量となる。よって、古典量であることを明示するために、 $\langle \tau | H(\hat{\mathbf{S}}) | \tau \rangle = H(\mathbf{S}(\tau))$ とする。

指数の肩の第 1 項は、次の議論から純虚数になることが分かる。

$$0 = \frac{d}{d\tau} \langle \tau | \tau \rangle = \langle \dot{\tau} | \tau \rangle + \langle \tau | \dot{\tau} \rangle = 2\text{Re}(\langle \dot{\tau} | \tau \rangle) \quad (56)$$

そこでこの項を虚数をあらわにした形で $\langle \dot{\tau} | \tau \rangle \equiv i\Phi(\tau)$ とする。この項は、Berry 位相と呼ばれる幾何学的な因子が現れる項である。

これより $\Delta\tau \rightarrow 0$ の極限を取ることで、積を積分の形で書き換えると、(54) 式は次のようになる。

$$Z = \int d\mathbf{S}(\tau) \exp \left[i \int_0^\beta d\tau \Phi(\tau) - \int_0^\beta d\tau H(\mathbf{S}(\tau)) \right] \quad (57)$$

上式がスピン系における分配関数の経路積分表示である。(57) 式から、 d 次元の量子系が、虚時間方向を加えた $(d+1)$ 次元の古典系に対応していることが分かる。虚時間方向の 1 次元が量子揺らぎの影響を反映している。

3.2 横磁場 SK 模型の相転移

本節では、3.1 節で導入した経路積分表示を用いて横磁場 SK 模型の解析を行う。横磁場 SK 模型のハミルトニアンは次式で与えられる。

$$H = - \sum_{i>j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \Gamma \sum_i \sigma_i^x \quad (58)$$

ここで $i > j$ は全てのスピン対について取り、全スピン数を N とする。また、 σ^z, σ^x はサイト i におけるスピン演算子を表し、次の Pauli 行列で表される。

$$\sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (59)$$

交換相互作用 J_{ij} の分布は (15) 式と同様に Gauss 分布で与える。

まず、分配関数を経路積分表示することで、古典変数に書き換える。

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr}_{\{\sigma\}} e^{-\beta \hat{H}} \\ &= \int d\mathbf{S} \exp \left[\int_\tau \left\{ i \sum_{i=1}^N \Phi_i(\tau) + \Gamma \sum_{i=1}^N n_i^x(\tau) + \sum_{i>j} J_{ij} n_i^z(\tau) n_j^z(\tau) \right\} \right] \end{aligned} \quad (60)$$

ここで, $n_i^x(\tau), n_i^z(\tau)$ は (49) 式より $n_i^x(\tau) = \sin \theta_i(\tau) \cos \phi_i(\tau), n_i^z(\tau) = \cos \theta_i(\tau)$ である。また, $\int_\tau \dots = \int_0^\beta d\tau \dots$ とした。

上式に対して古典 SK 模型と同様にレプリカを導入して, n 乗された分配関数に対して配位平均を取る。

$$\begin{aligned}
 [Z^n] &= \left[\int \prod_{a=1}^n d\mathbf{S}_a \exp \left(\int_\tau \sum_{a=1}^n \left\{ i \sum_{i=1}^N \Phi_{i,a}(\tau) + \Gamma \sum_{i=1}^N n_{i,a}^x(\tau) + \sum_{i>j} J_{ij} n_{i,a}^z(\tau) n_{j,a}^z(\tau) \right\} \right) \right] \\
 &= \int \prod_a d\mathbf{S}_a \exp \left[\int_\tau \sum_a \sum_i \{ i \Phi_{i,a}(\tau) + \Gamma n_{i,a}^x(\tau) \} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{J^2}{2N} \int_{\tau, \tau'} \sum_{a,b} \sum_{i>j} n_{i,a}^z(\tau) n_{j,a}^z(\tau) n_{i,b}^z(\tau') n_{j,b}^z(\tau') \right] \quad (61)
 \end{aligned}$$

(61) 式の第 3 項目は次のように書き換えられる。

$$\begin{aligned}
 &\int_{\tau, \tau'} \sum_{a,b} \sum_{i>j} n_{i,a}^z(\tau) n_{j,a}^z(\tau) n_{i,b}^z(\tau') n_{j,b}^z(\tau') \\
 &= \frac{1}{2} \int_{\tau, \tau'} \sum_{a,b} \left\{ \left(\sum_i n_{i,a}^z(\tau) n_{i,b}^z(\tau') \right)^2 - \sum_i (n_{i,a}^z(\tau))^2 (n_{i,b}^z(\tau'))^2 \right\} \\
 &\sim \frac{1}{2} \int_{\tau, \tau'} \sum_{a,b} \left(\sum_i n_{i,a}^z(\tau) n_{i,b}^z(\tau') \right)^2 \quad (62)
 \end{aligned}$$

ここで, (62) 式の評価において, $N \rightarrow \infty$ で寄与しない項は無視した。これより, (61) 式は次のように書き換えられる。

$$\begin{aligned}
 [Z^n] &= \int \prod_a d\mathbf{S}_a \exp \left[\int_\tau \sum_a \sum_i \{ i \Phi_{i,a}(\tau) + \Gamma n_{i,a}^x(\tau) \} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{J^2}{4N} \int_{\tau, \tau'} \left\{ \sum_a \left(\sum_i n_{i,a}^z(\tau) n_{i,a}^z(\tau') \right)^2 + 2 \sum_{a>b} \left(\sum_i n_{i,a}^z(\tau) n_{i,b}^z(\tau') \right)^2 \right\} \right] \quad (63)
 \end{aligned}$$

さらに (63) 式の指数の肩に現れる 2 次の項を, Hubbard-Stratonovitch 変換 (19) 式を用いて 1 次の項に変換する。 $n_{i,a}^z(\tau) n_{i,a}^z(\tau')$ の項に対する補助変数として $\chi_a(\tau, \tau')$ を, $n_{i,a}^z(\tau) n_{i,b}^z(\tau')$ の項に対する補助変数として $q_{ab}(\tau, \tau')$ を用いると, (63) 式は

$$\begin{aligned}
[Z^n] &= \int \prod_a d\chi_a(\tau, \tau') \prod_{a \neq b} dq_{ab}(\tau, \tau') \exp \left[-\frac{NJ^2}{4} \int_{\tau, \tau'} \left\{ \sum_a \chi_a^2(\tau, \tau') + 2 \sum_{a>b} q_{ab}^2(\tau, \tau') \right\} \right] \\
&\times \prod_i \int \prod_a dS_a \exp \left[\int_{\tau} \sum_a \{ i\Phi_i^a(\tau) + \Gamma n_{i,a}^x(\tau) \} \right. \\
&\quad \left. + \frac{J^2}{2} \int_{\tau, \tau'} \left\{ \sum_a \chi_a(\tau, \tau') n_{i,a}^z(\tau) n_{i,a}^z(\tau') + 2 \sum_{a>b} q_{ab}(\tau, \tau') n_{i,a}^z(\tau) n_{i,b}^z(\tau') \right\} \right] \\
&= \int \prod_a d\chi_a(\tau, \tau') \prod_{a \neq b} dq_{ab}(\tau, \tau') \\
&\exp \left[-\frac{NJ^2}{4} \int_{\tau, \tau'} \left\{ \sum_a \chi_a^2(\tau, \tau') + 2 \sum_{a>b} q_{ab}^2(\tau, \tau') \right\} + N \log \text{Tre}^L \right] \quad (64)
\end{aligned}$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned}
\text{Tre}^L &= \int \prod_a dS_a \exp \left[\int_{\tau} \sum_a \{ i\Phi_a(\tau) + \Gamma n_a^x(\tau) \} \right. \\
&\quad \left. + \frac{J^2}{2} \int_{\tau, \tau'} \left\{ \sum_a n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') \chi_a(\tau, \tau') + 2 \sum_{a>b} n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') q_{ab}(\tau, \tau') \right\} \right] \quad (65)
\end{aligned}$$

とした。また (64) 式において、

$$d\chi_a(\tau, \tau') = \prod_{0 \leq \tau, \tau' \leq \beta} d\chi_a(\tau, \tau'), \quad dq_{ab}(\tau, \tau') = \prod_{0 \leq \tau, \tau' \leq \beta} dq_{ab} \quad (66)$$

と省略した形で記している。ただし τ, τ' は連続変数であることに注意する。(64) 式において、指数の肩は全てスピン数 N に比例している。よって、(64) 式の積分は鞍点法を用いて評価することが出来る。鞍点は次の状態方程式を解くことで得ることが出来る。

$$\chi_a(\tau, \tau') = \frac{\text{Tr} n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') e^L}{\text{Tre}^L}, \quad (67)$$

$$q_{ab}(\tau, \tau') = \frac{\text{Tr} n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') e^L}{\text{Tre}^L} \quad (68)$$

古典系と同様に、これらは秩序変数となる。

各秩序変数の物理的な意味について考える。まず、異なるレプリカ間の相関を表す $q_{ab}(\tau, \tau')$ は、古典系と同様にスピングラス秩序変数である。ただし、量子揺らぎの影響により秩序変数が虚時間 τ, τ' に依存している。次に $\chi_a(\tau, \tau')$ は、同じレプリカにおける虚時間方向の相関を表す。 $\chi_a(\tau, \tau')$ は古典系 ($\Gamma = 0$) であれば 1 となり、一般の Γ に対しては $\chi_a(\tau, \tau') \leq 1$ となる。これは量子効果によってスピンが揺らいでいることを反映している。このことから、 $\chi_a(\tau, \tau')$ は量子性を表す秩序変数である。

鞍点方程式の解 $\chi_a(\tau, \tau')$ と $q_a(\tau, \tau')$ を用いて、自由エネルギーを評価する。 $n \rightarrow 0$ の極限を考えると、(65) 式は次のようになる。

$$[Z^n] \sim \exp \left[-Nn \frac{J^2}{4n} \int_{\tau, \tau'} \left\{ \sum_a \chi_a^2(\tau, \tau') + 2 \sum_{a>b} q_{ab}^2(\tau, \tau') \right\} + Nn \frac{1}{n} \log \text{Tre}^L \right]$$

これより自由エネルギーは,

$$-\beta f = \lim_{n \rightarrow 0} \left[-\frac{J^2}{4n} \int_{\tau, \tau'} \left\{ \sum_a \chi_a^2(\tau, \tau') + 2 \sum_{a>b} q_{ab}^2(\tau, \tau') \right\} + \frac{1}{n} \log \text{Tre}^L \right]$$

となる。ここから自由エネルギーを求めるために、古典系と同様に RS 解を仮定して解析を行う。さらに量子系では秩序変数が虚時間 τ に依存しているため、解析が困難となっている。そこで、次節ではレプリカ対称性の仮定に加え、静的近似を導入することで議論を進める。

3.2.1 静的近似における RS 解

ここでは RS 解の仮定に加え、Bray と Moore によって導入された静的近似を導入し解析を進める [17]。なお本節で得られる結果は、文献 [40] と同様のものである。

RS 解および静的近似の下では、秩序変数を次のように仮定する。

$$\chi_a(\tau, \tau') = \chi, \quad q_{ab}(\tau, \tau') = q \quad (69)$$

3.1, 3.2 節でも見たように、秩序変数の虚時間依存性は量子性に由来したものであった。静的近似はその依存性を落とすという近似であるから、古典近似をしていることになる。しかし、以下に見るように部分的には量子効果を取り入れているため、古典系と完全に一致する訳ではない。もし逆温度が $\beta = 0$ であれば、虚時間依存性も $\tau = \tau' = 0$ のみになる。よって、静的近似は高温では正しい描像を与えているものと期待される。

具体的に自由エネルギー (69) 式の評価を進める。まず、この仮定の下で $\log \text{Tre}^L$ の項を評価する。

$$\begin{aligned} \text{Tre}^L &= \int \prod_a d\mathbf{S}_a \exp \left[\int_{\tau} \{ i\Phi_a(\tau) + \Gamma n_a^x(\tau) \} \right. \\ &\quad \left. + \frac{J^2 \chi}{2} \int_{\tau, \tau'} \sum_a n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') + \frac{J^2 q}{2} \int_{\tau, \tau'} \sum_{a \neq b} n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') \right] \quad (70) \end{aligned}$$

$$= \int Dz \left(\int Dz_a \int d\mathbf{S}_a \exp \left[\int_{\tau} \{ i\Phi_a(\tau) + \Gamma n_a^x(\tau) + h_a n_a^z(\tau) \} \right] \right)^n \quad (71)$$

$$= \int Dz \left(\int Dz_a \text{Tr}_{\sigma_a} \exp [\beta \Gamma \sigma_a^x + h_a \sigma_a^z] \right)^n \quad (72)$$

ここで、 $\int Dz \dots$ は (30) 式と同様の定義である。また、 h_a は以下のように定義した。

$$h_a = Jz_a \sqrt{\chi - q} + Jz \sqrt{q} \quad (73)$$

(71) 式から (72) 式の変形においては、経路積分表示の逆過程を用いて古典変数から演算子へと変換した。この変形は、静的近似を用いたことで虚時間積分の被積分関数から秩序変数を分離したために可能となったものである。

(71) 式を n の 1 次まで展開して $\log \text{Tre}^L$ を評価すると、

$$\log \text{Tre}^L \sim n \int Dz \log \left(\int Dz_a \text{Tr}_{\sigma_a} \exp [\beta \Gamma \sigma_a^x + \beta h_a \sigma_a^z] \right) \quad (74)$$

$$= n \int Dz \log \left(\int Dz_a 2 \cosh \left(\beta \sqrt{h_a^2 + \Gamma^2} \right) \right) \quad (75)$$

となる。これより、静的近似および RS 解の下での自由エネルギーが以下のように得られる。

$$f = \frac{\beta J^2}{4}(\chi^2 - q^2) - T \int Dz \log \left(2 \int Dz_a \cosh \left(\beta \sqrt{h_a^2 + \Gamma^2} \right) \right) \quad (76)$$

自由エネルギーを秩序変数 χ, q で微分することで、次の鞍点方程式を得る。

$$\chi = \int Dz \frac{\int Dz_a \left(\frac{\Gamma}{h_a^2} + \frac{h_a}{h_a^2} \frac{\tanh \beta h'_a}{\beta h'_a} \right) \cosh \beta h'_a}{\int Dz_a \cosh \beta h'_a}, \quad (77)$$

$$q = \int Dz \left(\frac{\int Dz_a \frac{\sinh \beta h'_a}{\beta h'_a}}{\int Dz_a \cosh \beta h'_a} \right)^2 \quad (78)$$

ここで $h'_a = \sqrt{h_a^2 + \Gamma^2}$ とした。以上の解析から、静的近似と RS 解の仮定の下で、図 13 の相図が得られる。

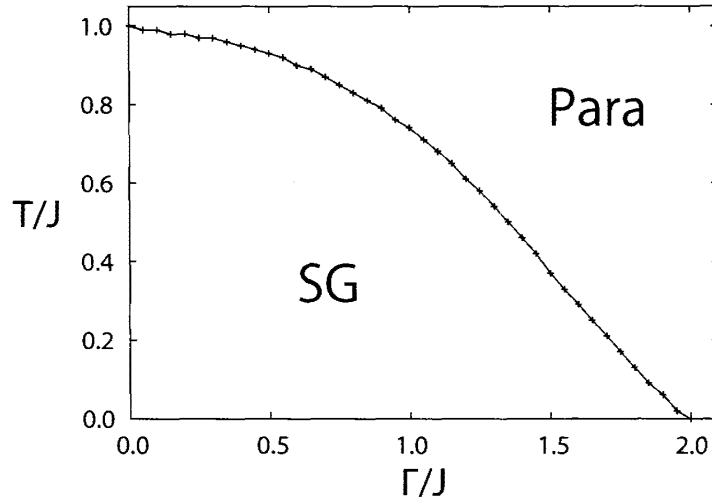


図 13: 横磁場 SK 模型の相図。(RS 解+静的近似) 横軸は横磁場の強さ Γ , 縦軸は温度 T を表す。相境界内部はスピングラス相 (SG), 外部は常磁性相 (Para) である。

図 13 は, q について極大, χ について極小となる自由エネルギーを数値的に評価することで描いた。古典極限 $\Gamma \rightarrow 0$ では転移点が $T/J = 1$ となり, 2.2 節の結果と整合している。また, $T = 0$ の転移点は $\Gamma/J = 2$ となる。

3.2.2 横磁場 SK 模型における静的近似の改良

前節では, 秩序変数の虚時間依存性を無視するという静的近似を用いて横磁場 SK 模型の相図を描いた。しかし, 秩序変数の虚時間依存性は量子性の現れであるため, この近似は低温で誤った描像を与えるものと考えられる。よって, 秩序変数の動的な効果を考慮した解析が様々な手法で行われている [41][42][43][44][45]。本節ではその中でも, $S = 1$ の系にも拡張が容易である高橋の方法について解説する [33]。

静的近似が正しい描像を与えるかどうかを調べるためには、次式のように秩序変数の虚時間依存性を摂動として取り込み、その影響を調べればよい。

$$\chi_a(\tau, \tau') = \chi + \tilde{\chi}_a(\tau, \tau'), \quad q_{ab}(\tau, \tau') = q + \tilde{q}_{ab}(\tau, \tau') \quad (79)$$

ここで、各秩序変数の第1項は秩序変数の静的解 (69) 式を表す。第2項は秩序変数の虚時間に依存する項であり、静的近似解と比較して十分に小さいものとする。

このように秩序変数を静的解と動的な部分とに分離し、 $[Z^n]$ を次のように評価する。

$$[Z^n] = \int D\chi Dq D\tilde{\chi} D\tilde{q} \exp[-Nn\beta f(\chi, q, \tilde{\chi}, \tilde{q})] \quad (80)$$

$$= \int D\chi Dq \exp[-Nn\beta f_{\text{eff}}(\chi, q)] \quad (81)$$

(80) 式では自由エネルギー f が $(\chi, q, \tilde{\chi}, \tilde{q})$ の関数で与えられる。一方で (80) 式から (81) 式では、秩序変数の動的な部分に関する積分を実行することで、その動的な影響を静的解に繰り込むという操作が行われている。これは静的解に対しては解析の見通しが非常によいことを利用した手法である。(80) 式から (81) 式への変形は形式的には厳密であるが、実際に $\tilde{\chi}, \tilde{q}$ の積分を厳密に実行するのは困難である。よって $\tilde{\chi}, \tilde{q}$ を二次まで展開し、Gauss 積分を実行するという摂動計算を行うことになる。

上記の方針に従って自由エネルギーの評価を進める。(79) 式を用いると、(64) 式は次のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} [Z^n] &= \int d\chi \prod_a d\chi_a(\tau, \tau') dq \prod_{a \neq b} dq_{ab}(\tau, \tau') \\ &\quad \exp \left[-\frac{NJ^2}{4} \int_{\tau, \tau'} \left\{ \sum_a (\chi + \tilde{\chi}_a(\tau, \tau'))^2 + \sum_{a \neq b} (q + \tilde{q}_{ab}(\tau, \tau'))^2 \right\} + N \log \text{Tre}^L \right] \\ &= \int d\chi \prod_a d\tilde{\chi}_a(\tau, \tau') dq \prod_{a \neq b} d\tilde{q}_{ab}(\tau, \tau') \exp \left[-\frac{nN\beta^2 J^2}{4} \chi^2 - \frac{(n^2 - n)N\beta^2 J^2}{4} q^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{NJ^2}{4} \int_{\tau, \tau'} \left(\sum_a \tilde{\chi}_a^2(\tau, \tau') + \sum_{a \neq b} \tilde{q}_{ab}^2(\tau, \tau') \right) + N \log \text{Tre}^L \right] \quad (82) \end{aligned}$$

$\tilde{\chi}_a(\tau, \tau'), \tilde{q}_{ab}(\tau, \tau')$ の Fourier 変換は次式で定義される。

$$\tilde{\chi}_a(\tau, \tau') = \sum_{n \neq 0} \tilde{\chi}_a(n) e^{-i \frac{2\pi n}{\beta} (\tau - \tau')} \quad (83)$$

$$\tilde{q}_{ab}(\tau, \tau') = \sum_{n, m \neq 0} \tilde{q}_{ab}(n, m) e^{-i \frac{2\pi}{\beta} (n\tau - m\tau')} \quad (84)$$

$n = m = 0$ のモードは、時間依存性がない項を表すため、静的近似の解となる。そのため定義域から除いてある。 n および m についての和は正負の整数について取る。また、 $\tilde{\chi}$ については同じレプリカ間の相関であるため、虚時間方向への並進対称性を課した。一方、 $\tilde{q}$ は異なるレプリカ間の相関であるため、虚時間依存性は一般的なものとした。また、(82) 式への変形では、

(83) および (84) 式を用いて得られる次の等式を用いた。

$$\int_{\tau, \tau'} \tilde{\chi}(\tau, \tau') = 0, \quad (85)$$

$$\int_{\tau, \tau'} \tilde{q}(\tau, \tau') = 0 \quad (86)$$

(82) 式の解析をさらに進める。(70)～(73) 式と同様の計算をすることで、 Tre^L は以下のようになる。

$$\begin{aligned} \text{Tre}^L = & \int Dz \int \prod_a Dz_a d\mathbf{S}_a \exp \left[\sum_a \int_{\tau} \{i\Phi_a(\tau) + \Gamma n_a^x(\tau) + h_a n_a^z(\tau)\} \right. \\ & \left. + \frac{J^2}{2} \sum_a \int_{\tau, \tau'} n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') \tilde{\chi}_a(\tau, \tau') + \frac{J^2}{2} \sum_{a \neq b} \int_{\tau, \tau'} n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') \tilde{q}_{ab}(\tau, \tau') \right] \end{aligned} \quad (87)$$

ここで、見通しを良くするために以下の表式を定義する。

$$Z_a = \exp \left[\int_{\tau} \{i\Phi_a(\tau) + \Gamma n_a^x(\tau) + h_a n_a^z(\tau)\} \right], \quad (88)$$

$$\langle (\cdots) \rangle = \int Dz \int \prod_a Dz_a d\mathbf{S}_a (\cdots) \quad (89)$$

(87) 式を Z_a を用いて表した後に、 $\tilde{\chi}$ と $\tilde{q}$ の 1 次まで展開すると次の式を得る。

$$\begin{aligned} \text{Tre}^L = & \left\langle \left(\prod_a Z_a \right) \exp \left[\frac{J^2}{2} \int_{\tau, \tau'} \left\{ \sum_a n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') \tilde{\chi}_a(\tau, \tau') \sum_{a \neq b} n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') \tilde{q}_{ab}(\tau, \tau') \right\} \right] \right\rangle \\ \sim & \left\langle \left(\prod_a Z_a \right) \right\rangle \left(1 + \frac{J^2}{2} I_1 \right) \end{aligned} \quad (90)$$

ここで、

$$\begin{aligned} I_1 = & \frac{\int_{\tau, \tau'} \sum_a \langle (\prod_{a'} Z_{a'}) n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') \rangle \tilde{\chi}_a(\tau, \tau')}{\langle \prod_{a'} Z_{a'} \rangle} \\ & + \frac{\int_{\tau, \tau'} \sum_{a \neq b} \langle (\prod_{a'} Z_{a'}) n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') \rangle \tilde{q}_{ab}(\tau, \tau')}{\langle \prod_{a'} Z_{a'} \rangle} \end{aligned} \quad (91)$$

とした。 I_1 は異なる虚時間の間の z 方向の相関関数を含んでいる。相関関数の詳細な計算方法は付録 C.1 に示した。付録 C.1 の結果を用いると、 I_1 に含まれる各積分は、レプリカの添え字によって以下ようになる。

$$\begin{aligned} & \int \prod_{a'} d\mathbf{S}_{a'} \left\{ \left(\prod_{a'} Z_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') \right\} \tilde{\chi}_a(\tau, \tau') \\ = & \prod_{a'} (2 \cosh \beta h'_{a'}) [\cos^2 \phi_a + \sin^2 \phi_a D_a(\tau - \tau')] \tilde{\chi}_a(\tau, \tau'), \end{aligned} \quad (92)$$

$$\begin{aligned} & \int \prod_{a'} d\mathbf{S}_{a'} \left\{ \left(\prod_{a'} Z_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') \right\} \tilde{q}_{ab}(\tau, \tau') \\ = & \prod_{a' \neq a \neq b} (2 \cosh \beta h'_{a'}) (2 \cos \phi_a \sinh \beta h'_a) (2 \cos \phi_b \sinh \beta h'_b) \tilde{q}_{ab}(\tau, \tau') \end{aligned} \quad (93)$$

ここで,

$$D_a(\tau - \tau') = \frac{\cosh\{(\beta - 2\tau + 2\tau')h'_a\}}{\cosh \beta h'_a}, \quad (94)$$

$$h'_a = \sqrt{\Gamma^2 + h_a^2}, \quad (95)$$

$$\cos \phi_a = \frac{h_a}{h'_a}, \quad \sin \phi_a = \frac{\Gamma}{h'_a} \quad (96)$$

とした。

相関関数の中で虚時間依存性がない項は, (85),(86) 式より 0 になることが分かる。よって, I_1 に寄与する項は $\tilde{\chi}_a$ に比例する部分のみである。以上をまとめると,

$$I_1 = \frac{\int_{\tau, \tau'} \sum_a \int Dz \left(\int Dz_a 2 \cosh \beta h'_a \right)^{n-1} \left[\int Dz_a 2 \cosh \beta h'_a \sin^2 \phi_a D_a(\tau - \tau') \right] \tilde{\chi}_a(\tau, \tau')}{\int Dz \left(\int Dz_a 2 \cosh \beta h'_a \right)^n}$$

となる。ここで, レプリカ数 n を十分小さいと見なし $c^n \sim 1 + n \log c$ と展開する。特に $n \rightarrow 0$ の極限で自由エネルギーに寄与する項のみを取り出すと, I_1 は次のように求まる。

$$I_1 = \sum_a \int_{\tau, \tau'} \tilde{\chi}_a(\tau, \tau') \int Dz \frac{\int Dz_a \cosh \beta h'_a \sin^2 \phi_a D_a(\tau - \tau')}{\int Dz_a \cosh \beta h'_a} \quad (97)$$

一次の摂動の項が計算出来たので, 具体的に自由エネルギーの計算を行う。まず, $\log \text{Tre}^L/n$ は次のように評価される。

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \log \text{Tre}^L &= \frac{1}{n} \left\{ \log \left\langle \left(\prod_a Z_a \right) \right\rangle + \log \left(1 + \frac{J^2}{2} I_1 \right) \right\} \\ &\sim \int Dz \log \left(\int Dz_a 2 \cosh \beta h'_a \right) + \frac{J^2}{2n} I_1 \end{aligned} \quad (98)$$

上式の第 1 項目は静的近似解に相当しており, 第 2 項が虚時間依存性を摂動として取り込んだ効果である。これより, (82) 式から $[Z^n]$ が次のように求まる。

$$\begin{aligned} [Z^n] &= \int d\chi \prod_a d\tilde{\chi}_a dq \prod_{a \neq b} dq_{ab} \exp \left[-\frac{nN\beta^2 J^2}{4} \chi^2 - \frac{(n^2 - n)N\beta^2 J^2}{4} q^2 + \frac{J^2}{2n} I_1 \right. \\ &\quad \left. - \frac{NJ^2}{4} \int_{\tau, \tau'} \left(\sum_a \tilde{\chi}_a^2(\tau, \tau') + \sum_{a \neq b} q_{ab}^2(\tau, \tau') \right) + nN \left(\int Dz \log \left(\int Dz_a 2 \cosh \beta h'_a \right) \right) \right] \\ &= \int d\chi \prod_a d\tilde{\chi}_a(\tau, \tau') dq \exp \left[-\frac{nN\beta^2 J^2}{4} \chi^2 - \frac{(n^2 - n)N\beta^2 J^2}{4} q^2 \right. \\ &\quad \left. + nN \int Dz \log \left(\int Dz_a 2 \cosh \beta h'_a \right) - \frac{NJ^2}{4} \sum_a \int_{\tau, \tau'} \tilde{\chi}_a^2(\tau, \tau') + \frac{NJ^2}{2} I_1 \right] \end{aligned} \quad (99)$$

ここで q_{ab} に関する積分は定数を与え, さらに熱力学極限 $N \rightarrow \infty$ 及び $n \rightarrow 0$ で寄与しないため省略した。 $\tilde{\chi}(\tau, \tau')$ に関しては虚時間方向の並進対称性を利用して, Fourier 変換を行い, 虚

時間に関する積分を実行する。(83) 式を用いると,

$$\begin{aligned}
\int_{\tau, \tau'} \tilde{\chi}_a^2(\tau, \tau') &= \sum_{m_1, m_2 \neq 0} \int_{\tau, \tau'} \tilde{\chi}_a(m_1) \tilde{\chi}_a(m_2) e^{-i \frac{2\pi(m_1+m_2)}{\beta}(\tau-\tau')} \\
&= \beta^2 \sum_{m \neq 0} \tilde{\chi}_a(m) \tilde{\chi}_a(-m) \\
&= \beta^2 \sum_{m \neq 0} \tilde{\chi}_a(m) \tilde{\chi}_a^*(m)
\end{aligned} \tag{100}$$

を得る。また、相関関数 $D_a(\tau - \tau')$ の Fourier 変換を考える。

$$D_a(\tau - \tau') = \sum_{m \neq 0} D_m^a e^{-i \frac{2\pi m}{\beta}(\tau - \tau')}, \tag{101}$$

$$\begin{aligned}
D_m^a &= \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau D_a(\tau) e^{i \frac{2\pi m}{\beta} \tau} \\
&= \frac{\beta h'_a}{(\beta h'_a)^2 + (\pi m)^2} \tanh \beta h'_a
\end{aligned} \tag{102}$$

ここで m は正負の整数に対して取る。以上の計算より,

$$\int_{\tau, \tau'} \tilde{\chi}_a(\tau, \tau') D_a(\tau - \tau') = \beta^2 \sum_{m \neq 0} \tilde{\chi}_a(m) D_m^a \tag{103}$$

を得る。

これより、 $\tilde{\chi}$ に関する積分は、レプリカ数 a および周波数を指定する m 毎に独立に Gauss 積分することが出来る。Gauss 積分を実行した後に、 $[Z^n]$ が以下のように得られる。

$$\begin{aligned}
[Z^n] &= \int d\chi dq \exp \left[-nN f_0 + \frac{nN\beta^2 J^2}{2} \sum_{m>0} \left(\int Dz \frac{\int Dz_a \cosh \beta h'_a \sin^2 \phi_a D_m^a}{\int Dz_a \cosh \beta h'_a} \right)^2 \right] \\
&\sim \exp \left[-nN f_0 + \frac{nN\beta^2 J^2}{2} \sum_{m>0} \left(\int Dz \frac{\int Dz_a \cosh \beta h'_a \sin^2 \phi_a D_m^a}{\int Dz_a \cosh \beta h'_a} \right)^2 \right]
\end{aligned} \tag{104}$$

ここで、 f_0 は (76) 式で与えられる静的近似の下での自由エネルギーである。また指数の肩が N に比例しているため鞍点法を用いた。これより、静的近似を改良した自由エネルギーが以下のように得られる。

$$\begin{aligned}
f &= \frac{\beta J^2}{4} (\chi^2 - q^2) - \frac{1}{\beta} \int Dz \log \left(2 \int Dz_a \cosh \beta h'_a \right) \\
&\quad - \frac{\beta^2 J^2}{2} \sum_{m>0} \left(\int Dz \frac{\int Dz_a \cosh \beta h'_a \sin^2 \phi_a D_m^a}{\int Dz_a \cosh \beta h'_a} \right)^2
\end{aligned} \tag{105}$$

静的近似の際と同様に、自由エネルギーを直接評価することで相図を描く。上式の自由エネルギーに対しては、改良による補正項の和の上限を定めて評価を行う。今回は $m = 1, 4, 10$ の3通りに対して解析を行う。補正項は本来 $m = \infty$ までの和を取るべきであるが、 $m = 10$ 程度までの評価で得られる結果は十分に収束する。よって、本論文では m の最大値を 10 とした解析を行った。

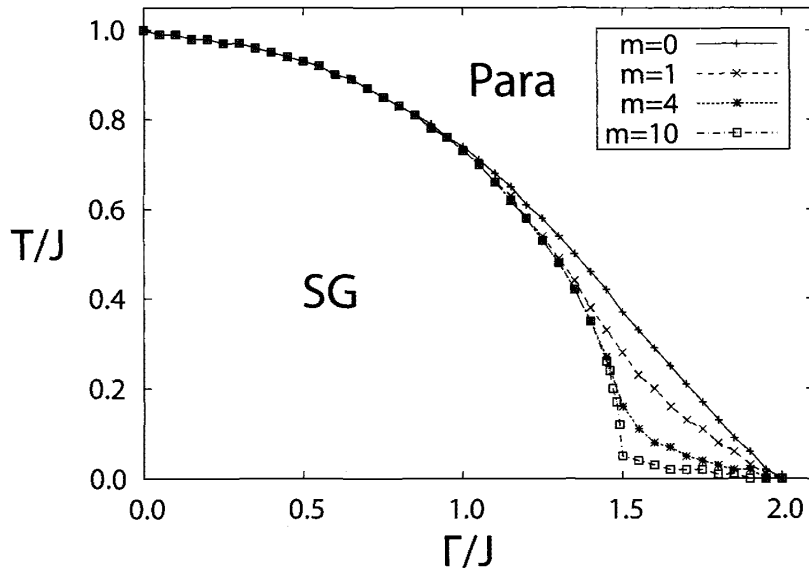


図 14: 横磁場 SK 模型の相図。(RS 解+静的近似の改良) 横軸は横磁場の強さ Γ , 縦軸は温度 T を表す。実線は静的近似解 ($m = 0$) を表し, 破線, 点線, 一点鎖線はそれぞれ和の上限が $m = 1, 4, 10$ のときの相境界を表す。

以上の解析から図 14 の相図が得られた。図 14 では比較のために $m = 0$ (静的近似) の結果も載せている。

図 14 より, 静的近似は転移点が高温にある場合は ($\Gamma \leq 1$), 正しい解を与えていると考えられる。しかし, 量子揺らぎが顕著となる低温では, 秩序変数の動的な効果によって秩序が破壊されていることが分かる。また, m を増やすに従って, $T = 0$ における転移点が $\Gamma_c \sim 1.5$ に漸近していく様子が分かる。これは先行研究 [41][45] の結果と非常に近い値である。ただし, 上記の解析は極低温では破綻することが指摘されている [33]。(87) 式において, $\text{Tr} e^L$ を $\tilde{\chi}$ および $\tilde{q}$ で展開すると, その係数には必ず $(\beta J)^2$ が現れる。つまり, $(\beta J)^2 \tilde{\chi}$ および $(\beta J)^2 \tilde{q}$ の展開となるのである。このような展開が正当化されるのは βJ が十分に小さい場合であるから, 上記の解析はある種の高温展開と言うことが出来る。よって, 極低温では破綻してしまうのである。よって, 図 14 の相境界でも, 極低温のものについては信頼性が低い。特に, $m = 10$ における $\Gamma > 1.5$ の不自然な相境界はその最たる例である。温度で表すと, $T > 0.1$ の範囲では上記の解析が有効であると言える。

本節で解説した内容は, 秩序変数の動的効果に対する一次の摂動までを扱ったものである。よって, 転移点の値をより詳細に調べるためには, さらに高次の摂動を考慮すればよい。ただし, 上述のように, その展開係数には十分注意を払う必要がある。この解析法の下では, 一次摂動の範囲でも先行研究と十分に整合する結果が得られる。よって, 次節以降で扱う $S = 1$ の系に対しても, 同様に一次摂動の範囲で解析を行っていく。

3.3 横磁場・横結晶場 GS 模型の解析

本節では量子 GS 模型の解析を行う。2.2 節でも見たように, 古典 GS 模型は低温領域で一次転移が起き, その転移点直上では二つの安定解がポテンシャル障壁を介して存在する。一方, 低温では量子揺らぎの効果が大きくなる。そこで本節では 3.2 節で解説した手法を用いて, 量子

GS 模型の相転移を調べていく。本節では GS 模型に対する量子効果として、2 種類の量子揺らぎを考える。一つ目は横磁場であり、3.3.1, 3.3.2 節で議論する。二つ目は 3.3.3 節以降で議論する横結晶場である。量子 GS 模型に関する先行研究は、現在のところ二つ程度である [46][47]。さらに、秩序変数の動的効果を考慮した研究は行われていない。よって、ポテンシャル障壁で遮られた二つの状態に、量子性由来の動的な揺らぎがどのような影響を及ぼすかに注目して議論を進める。

3.3.1 横磁場 GS 模型の静的近似・RS 解

横磁場 GS 模型のハミルトニアンは以下のように与えられる。

$$\hat{H} = - \sum_{i>j} J_{ij} S_i^z S_j^z + D \sum_i (S_i^z)^2 - \Gamma \sum_i S_i^x \quad (106)$$

ここで $i > j$ は全てのスピン対について取り、 J_{ij} は (15) 式で与えられる Gauss 分布で与える。 $S = 1$ のスピン演算子 S^z, S^x は次の行列で表される。

$$S^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad S^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (107)$$

$S = 1$ の系における横磁場の効果を見る。そのために $S^z|S\rangle = S|S\rangle$ とする。 $S = 0, \pm 1$ である。このとき、各状態は S^x を作用させることで以下ようになる。

$$S^x|\pm 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle, \quad S^x|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |-1\rangle) \quad (108)$$

これより、横磁場は Ising スピン $S = \pm 1$ とスピン 0 の状態 $S = 0$ の間の遷移を表すことが分かる。横磁場を強くすると、両者の遷移が高い確率で発生する。よって、横磁場を強くすることで一次転移が破壊されるものと予想される。

具体的に解析を進める。まず、RS 解および静的近似を仮定して解析を行う。 $S = 1$ の場合も横磁場 SK 模型と全く同様に解析することが出来る。違いは (72) 式におけるトレースの計算のみである。横磁場 GS 模型の場合は、 Tre^L が次のようになる。

$$\text{Tre}^L = \int Dz \left(\int Dz_a \text{Tr}_{S_a} \exp \left[\beta \Gamma \hat{S}_a^x - \beta D (\hat{S}_a^z)^2 + \beta h_a \hat{S}_a^z \right] \right)^n \quad (109)$$

これより静的近似の下での自由エネルギーの RS 解が次のように求まる。

$$f = \frac{\beta J^2}{4} (\chi^2 - q^2) - \frac{1}{\beta} \int Dz \log \left(\int Dz_a \text{Tr}_{S_a} \exp \left[\beta \Gamma \hat{S}_a^x - \beta D (\hat{S}_a^z)^2 + \beta h_a \hat{S}_a^z \right] \right) \quad (110)$$

トレースの計算は次の行列の固有値を求めることで計算出来る。

$$\begin{pmatrix} \beta h_a - \beta D & \frac{\beta \Gamma}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{\beta \Gamma}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{\beta \Gamma}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\beta \Gamma}{\sqrt{2}} & -\beta h_a - \beta D \end{pmatrix} \quad (111)$$

上記の行列式を解くには、3 次方程式 $\lambda^3 + a_2\lambda^2 + a_1\lambda + a_0 = 0$ の解 $\lambda_n (n = 0, 1, 2)$ が次のように与えられることを用いる。

$$\lambda_n = 2y \cos \left[\frac{1}{3} \left\{ \cos^{-1} \left(\frac{-G}{2y^3} \right) + 2n\pi \right\} \right] - \frac{1}{3}a_2 \quad (112)$$

$$y = W_0^{\frac{1}{2}}, \quad W_0 = \frac{a_2^2 - 3a_1}{9}, \quad G = \frac{2a_2^3 - 9a_1a_2 + 27a_0}{27} \quad (113)$$

自由エネルギー (110) 式の評価から、図 15,16 の相図を得る。

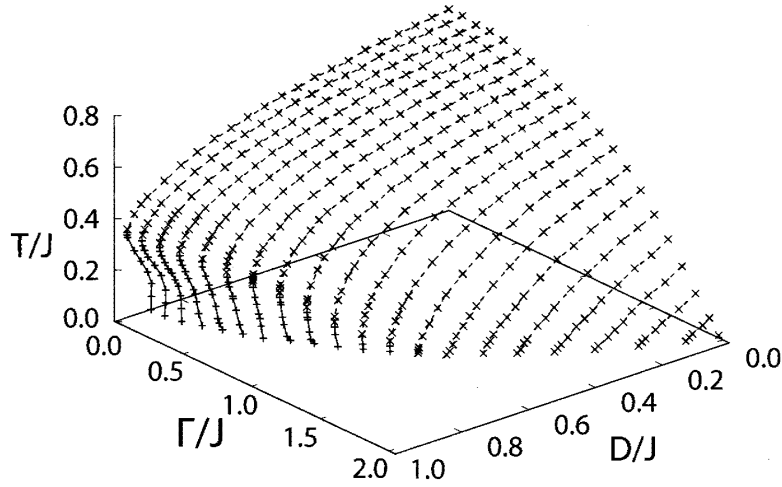


図 15: 横磁場 GS 模型の相図。(RS 解+静的近似) 実線は一次転移, 破線は二次転移を表す。実線および破線で囲まれた領域はスピングラス相, それ以外の領域は常磁性相である。

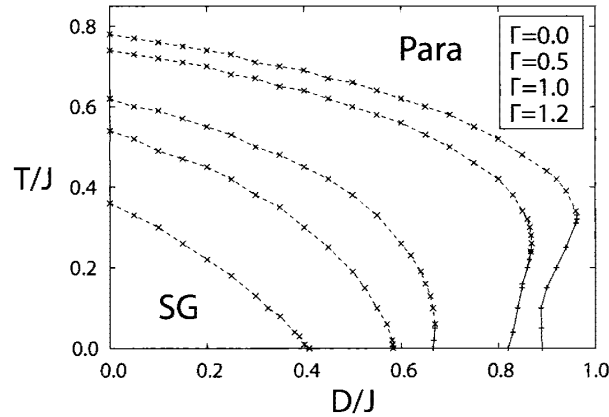


図 16: $T-D$ 平面における横磁場 GS 模型の相図。(RS 解+静的近似) 実線は一次転移, 破線は二次転移を表す。相境界内部はスピングラス相 (SG), 外部は常磁性相 (Para) である。各相境界は, 上から順に $\Gamma = 0, 0.5, 1.0, 1.2$ のものを表す。

図 15,16 から分かるように, 横磁場を加えた場合でも一次転移は残ることが分かる。これは横磁場の強さがそれ程強くない領域では, 依然としてポテンシャル障壁が残ることを表している。しかし, 横磁場を強くしていくことで一次転移は消失する。それは図 16 から分かるように, リエントラント転移の消失と同時に起きる。

横磁場が強い領域において一次転移が消失するという結果は、次のように解釈することが出来る。GS 模型における一次転移は、 $|\pm 1\rangle$ が優勢なスピングラス相と $|0\rangle$ が優勢な常磁性相の共存状態に支配されている。今、考えている $S = 1$ の横磁場は、 $|\pm 1\rangle$ と $|0\rangle$ との間の遷移を引き起こす。よって、横磁場が十分強くなると、上記の共存状態は破壊され一次転移から二次転移へと移行するのである。

これらの結果は、RS 解および静的近似の範囲のものである。しかし、横磁場 SK 模型の解析から分かるように、静的近似は低温で正確性に欠ける近似である。そこで、次節では秩序変数の虚時間依存性を考慮した解析を行う。

3.3.2 横磁場 GS 模型における静的近似の改良

本節では低温での相転移の描像を正しく得るために、3.2.2 節で解説した方法を横磁場 GS 模型に適用して静的近似の改良を行う。

横磁場 GS 模型は横磁場 SK 模型と比較して固有値の形が複雑であるために、図 15 に示した相図の全領域において静的近似の改良を行うのは困難である。そこで、相図上の $D = 0$ の領域に限定して静的近似の改良を行う。

秩序変数の虚時間依存性を導入したことによる補正項は、横磁場 SK 模型のときと同様に (91) 式を $S = 1$ に対して評価することで得られる。付録 C.2 の結果より、 I_1 に現れる各積分の結果は以下のように求まる。

$$\begin{aligned} & \int \prod_{a'} d\mathbf{S}_{a'} \left\{ \left(\prod_{a'} Z_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') \right\} \tilde{\chi}_a(\tau, \tau') \\ &= \prod_{a'} (1 + 2 \cosh \beta h'_{a'}) \left[\cos^2 \phi_a \frac{2 \cosh \beta h'_a}{1 + 2 \cosh \beta h'_a} + \sin^2 \phi_a D_a(\tau - \tau') \right] \tilde{\chi}_a(\tau, \tau'), \quad (114) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \int \prod_{a'} d\mathbf{S}_{a'} \left\{ \left(\prod_{a'} Z_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') \right\} \tilde{q}_{ab}(\tau, \tau') \\ &= \prod_{a' \neq a \neq b} (1 + 2 \cosh \beta h'_{a'}) (2 \cos \phi_a \sinh \beta h'_a) (2 \cos \phi_b \sinh \beta h'_b) \tilde{q}_{ab}(\tau, \tau') \quad (115) \end{aligned}$$

ここで ϕ_a および h'_a は、(95),(96) 式と同様の定義である。また、 $D_a(\tau - \tau')$ は以下のように定義したものである。

$$D_a(\tau - \tau') = \frac{\cosh\{(\beta - \tau + \tau')h'_a\} + \cosh\{(\tau - \tau')h'_a\}}{1 + 2 \cosh \beta h'_a} \quad (116)$$

$\tilde{\chi}(\tau, \tau')$, $\tilde{q}(\tau, \tau')$ の係数に虚時間の依存性を持たない項は (85),(86) 式を考慮することで、補正項への寄与が 0 となることが分かる。よって、(97) 式と同様の計算から I_1 が以下のように求まる。

$$I_1 = \sum_a \int_{\tau, \tau'} \tilde{\chi}_a(\tau, \tau') \int Dz \frac{Dz_{a'} (1 + 2 \cosh \beta h'_{a'} \sin^2 \phi_a D_a(\tau - \tau'))}{\int Dz_{a'} (1 + 2 \cosh \beta h'_{a'})} \quad (117)$$

I_1 に含まれる虚時間積分を実行するために、 $D_a(\tau)$ の Fourier 変換を考える。

$$D_m^a = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau D_a(\tau) e^{i \frac{2\pi m}{\beta} \tau} = \frac{\beta h'_a}{(\beta h'_a)^2 + (2\pi m)^2} \frac{2 \sinh \beta h'_a}{1 + 2 \cosh \beta h'_a} \quad (118)$$

$\tilde{\chi}$ に関する Gauss 積分を実行することで、次の改良された自由エネルギーを得る。

$$f = \frac{\beta J^2}{4}(\chi^2 - q^2) - \frac{1}{\beta} \int Dz_1 \log \left(1 + 2 \int Dz_a \cosh \beta h'_a \right) - \frac{\beta J^2}{2} \sum_{m>0} \left(\int Dz \frac{\int Dz_a (1 + 2 \cosh \beta h'_a) \sin^2 \phi_a D_m^a}{\int Dz_a (1 + 2 \cosh \beta h'_a)} \right) \quad (119)$$

上記の改良された自由エネルギーを評価することで、図 17 の相図が得られる。このとき、図 17 中の相境界は全て二次転移である。図 17 から、横磁場 GS 模型の場合も秩序変数の動的効果が低温領域の相境界を修正することが分かる。ただし、図 17 と図 14 を比較すると分かるように、横磁場 GS 模型の方が静的近似による相図と改良したものとの差が小さくなっている。

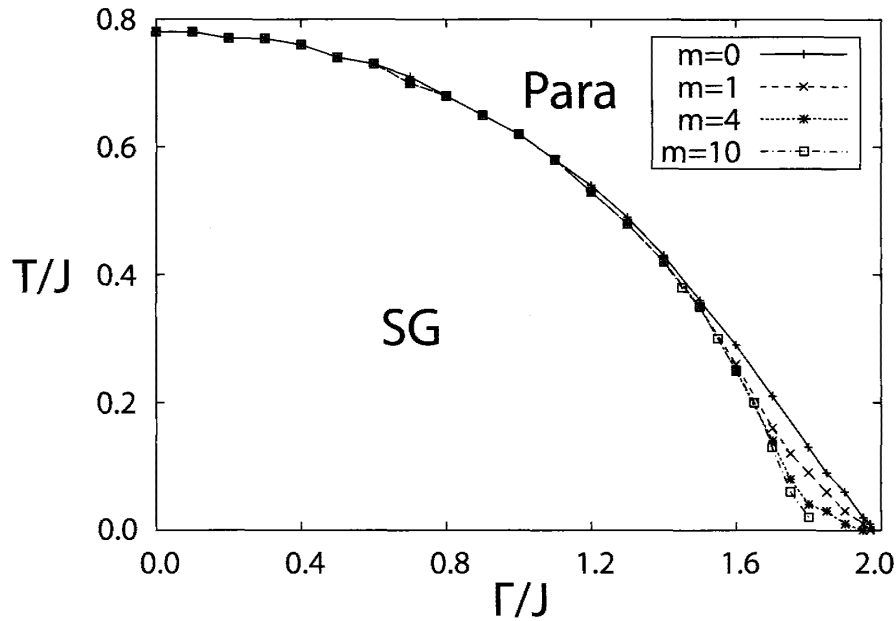


図 17: $T-\Gamma$ 平面における横磁場 GS 模型 ($D = 0.0$) の相図。(RS 解+静的近似の改良) 横軸は横磁場 Γ 、縦軸は温度 T を表す。実線は静的近似解 ($m = 0$) を表し、破線、点線、一点鎖線はそれぞれ和の上限が $m = 1, 4, 10$ のときの相境界を表す。相境界内部はスピングラス相 (SG)、外部は常磁性相 (Para) である。

3.3.3 横結晶場 GS 模型の静的近似・RS 解

$S = 1$ の場合は、演算子 S^x を用いることで、横磁場ではない量子揺らぎを導入することが出来る。それが横結晶場 Ω であり、 $(S^x)^2$ に比例する形を持つ。横結晶場 GS 模型は後に見るように、横磁場 SK 模型とある極限において一致する。よって、横結晶場 GS 模型の解析を通して、 $S = 1/2$ および $S = 1$ における量子揺らぎの影響を比較することが可能となる。そのため、本節以降ではスピンの大きさと量子揺らぎの影響という点に注目して議論を進めていく。

まず、横結晶場 GS 模型のハミルトニアンは以下のように与えられる。

$$\hat{H} = - \sum_{i>j} J_{ij} S_i^z S_j^z + D \sum_i (S_i^z)^2 - \Omega \sum_i (S_i^x)^2 \quad (120)$$

ここで $i > j$ は全てのスピン対について取り、 J_{ij} は (15) 式で与えられる。

$S = 1$ の系における横結晶場が、どのような性質を持つかを確認しておく。まず、 $(S^x)^2$ は次の行列で表される。

$$(S^x)^2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} D_I \quad (121)$$

ここで、行列 D_I は次のように定義した。

$$D_I = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (122)$$

(121) 式最右辺における第一項は、系のエネルギーを一様に変化させる。よって、量子揺らぎは D_I により実現される。3.3.1 節と同様に $S^z|S\rangle = S|S\rangle$ とすると、それぞれの状態に D_I を作用することによって次式が得られる。

$$D_I|\pm 1\rangle = |\mp 1\rangle \quad (123)$$

$$D_I|0\rangle = |0\rangle \quad (124)$$

これより、横結晶場は Ising スピン間の遷移を引き起こすことが分かる。これは $S = 1/2$ のときの横磁場と同様の効果である。さらに、 $D \rightarrow -\infty$ とすると $|0\rangle$ なる状態は分配関数に寄与しない。よって、横結晶場 GS 模型は $D \rightarrow -\infty$ の極限で横磁場 SK 模型と等価となるのである。このとき $\Gamma = 2\Omega$ なる関係がある。

具体的な解析を RS 解および静的近似を仮定して進めていく。横結晶場 GS 模型のハミルトニアンに対して、 $\text{Tr} e^L$ は次のようになる。

$$\text{Tr} e^L = \int Dz \left(\int Dz_a \text{Tr}_{S_a} \exp [\beta\Omega(S_a^x)^2 - \beta D(S_a^z)^2 + \beta h_a S_a^z] \right)^n \quad (125)$$

上式におけるトレースは、次の行列の固有値を求めることで得られる。

$$\begin{pmatrix} \beta h_a - \beta D + \frac{\beta\Omega}{2} & 0 & \frac{\beta\Omega}{2} \\ 0 & \beta\Omega & 0 \\ \frac{\beta\Omega}{2} & 0 & -\beta h_a - \beta D + \frac{\beta\Omega}{2} \end{pmatrix} \quad (126)$$

これより、静的近似の下での自由エネルギーの RS 解が次のように求まる。

$$f = \frac{\beta J^2}{4} (\chi^2 - q^2) - \Omega - \frac{1}{\beta} \int Dz_1 \log \left\{ 1 + 2e^{-\beta D - \frac{\beta\Omega}{2}} \int Dz_a \cosh \beta h'_a \right\} \quad (127)$$

ただし、 $h'_a = \sqrt{h_a^2 + \Omega^2/4}$ とした。(127) 式において $D \rightarrow -\infty$ とすると、 $\log$ の中では第 2 項目が有意となる。(127) 式と (76) 式を比較することで、確かに上記の極限では横結晶場 GS 模型が横磁場 SK 模型と等価となることが分かる。自由エネルギー (127) 式を評価することで図 18, 19 の相図を得る。

図 18 より、横結晶場を加えた場合は広い領域で一次転移が起きることが分かる。特に $D = 0$ においても横結晶場が強い領域では、一次転移が起きる。また、三重臨界点の温度も横結晶場

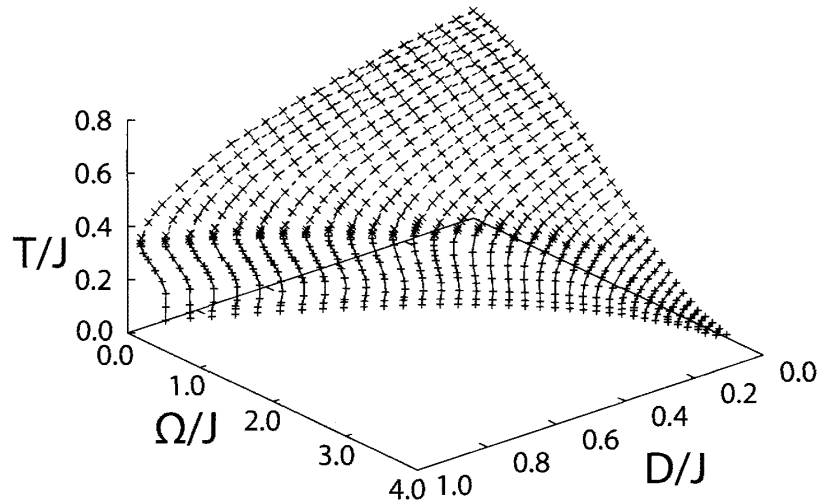


図 18: 横結晶場 GS 模型の相図。(RS 解+静的近似) 実線および破線はそれぞれ一次転移, 二次転移が起きる転移点である。また, 実線と破線で囲まれた領域はスピングラス相, それ以外の領域は常磁性相である。

によってそれ程大きく変化しないことが分かる。以上のように, 横結晶場が強い領域で一次転移が起きるという結果は, 以下のように解釈することが出来る。まず, GS 模型の一次転移点における共存状態は, $|\pm 1\rangle$ が有意なスピングラス相と $|0\rangle$ による常磁性相によるものであった。また, 本節の冒頭で見たように, 横結晶場は Ising スピン $|\pm 1\rangle$ の間の遷移を引き起こす量子揺らぎである。そのため, 横磁場とは異なり, 横結晶場は共存状態間のトンネリングを引き起こさないのである。よって, 共存状態間のポテンシャル障壁は横結晶場では破壊されず, 一次転移が残るのである。

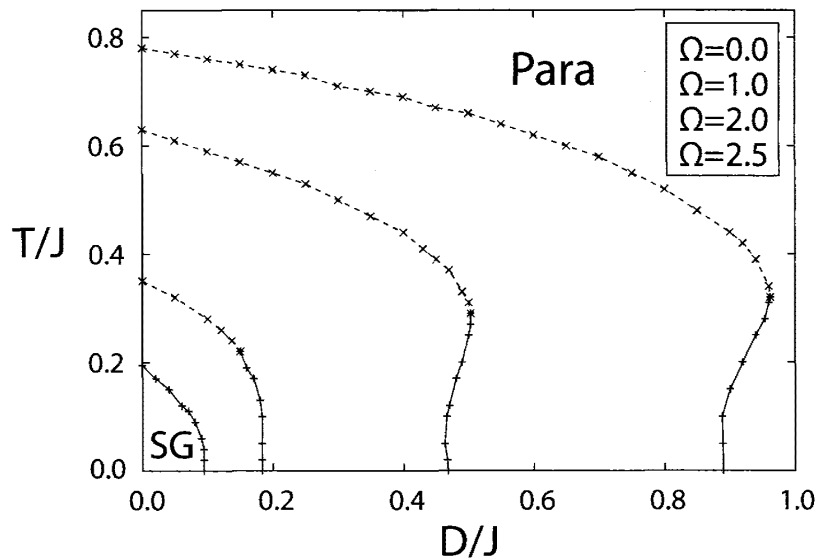


図 19: $T-D$ 平面における横結晶場 GS 模型の相図。(RS 解+静的近似) 実線および破線はそれぞれ一次転移, 二次転移が起きる転移点である。相境界内部はスピングラス相 (SG), 外部は常磁性相 (Para) である。各相境界は上から順に $\Omega = 0.0, 1.0, 2.0, 2.5$ のものである。

また、図 19 は $\Gamma = 0.0, 1.0, 2.0, 2.5$ に対して、図 18 の相図を $T - D$ 平面に射影したものである。この相図から分かるように、横結晶場の場合はリエントラント転移が消失しても一次転移は残る。これはリエントラント転移が消失すると同時に一次転移が消失した、横磁場 GS 模型とは異なる描像である。

以上の結果を考慮して、次節では静的近似の改良を行うことで相図がどのように変化するかを見ていく。

3.3.4 横結晶場 GS 模型における静的近似の改良

本節では、横結晶場 GS 模型に対して静的近似の改良を行う。前節で見たように、横結晶場 GS 模型は $D \rightarrow -\infty$ の極限で横磁場 SK 模型と等価となる。そのため、 $S^z = 0$ なる状態が加わることで、量子揺らぎの影響がどのように変化するかに注目して議論する。

横結晶場 GS 模型において、(91) 式に現れる各積分は、付録 C.3 より以下のように求まる。

$$\begin{aligned} & \int \prod_{a'} dS_{a'} \left\{ \left(\prod_{a'} Z_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') \right\} \tilde{\chi}_a(\tau, \tau') \\ &= \prod_{a'} \left(e^{\beta\Omega} + 2e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \cosh \beta h'_{a'} \right) \\ & \times \left[\left(\frac{h_a}{h'_a} \right)^2 \frac{2e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \cosh \beta h'_a}{e^{\beta\Omega} + 2e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \cosh \beta h'_a} + \left(\frac{\Omega}{2h'_a} \right)^2 D_a(\tau - \tau') \right] \tilde{\chi}_a(\tau, \tau'), \end{aligned} \quad (128)$$

$$\begin{aligned} & \int \prod_{a'} dS_{a'} \left\{ \left(\prod_{a'} Z_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') \right\} \tilde{q}_{ab}(\tau, \tau') \\ &= \prod_{a' \neq a \neq b} \left(e^{\beta\Omega} + 2e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \cosh \beta h'_{a'} \right) \\ & \times \left(\frac{2h_a}{h'_a} e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \sinh \beta h'_a \right) \left(\frac{2h_b}{h'_b} e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \sinh \beta h'_b \right) \tilde{q}_{ab}(\tau, \tau') \end{aligned} \quad (129)$$

ここで、 $D_a(\tau - \tau')$ は次式で定義される。

$$D_a(\tau - \tau') = \frac{2e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \cosh\{(\beta - 2\tau + 2\tau')h'_a\}}{e^{\beta\Omega} + 2e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \cosh \beta h'_a} \quad (130)$$

$\tilde{\chi}(\tau, \tau')$, $\tilde{q}(\tau, \tau')$ の係数に虚時間の依存性を持たない項は、(85), (86) 式から補正項への寄与は 0 となる。

よって、(97) 式と同様の計算から I_1 が以下のように求まる。

$$I_1 = \sum_a \int_{\tau, \tau'} \tilde{\chi}_a(\tau, \tau') \int Dz \frac{\int Dz_a \left(e^{\beta\Omega} + 2e^{\frac{\beta\Omega}{2} \cosh \beta h'_a} \right) \sin^2 \phi_a D_a(\tau - \tau')}{\int Dz_{a'} \left(e^{\beta\Omega} + 2e^{\frac{\beta\Omega}{2} \cosh \beta h'_{a'}} \right)} \quad (131)$$

I_1 に含まれる虚時間に関する積分を実行するために、 $D_a(\tau)$ の Fourier 変換を考える。

$$\begin{aligned} D_m^a &= \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau D_a(\tau) e^{i\frac{2\pi m}{\beta}\tau} \\ &= \frac{2\beta h'_a e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D}}{e^{\beta\Omega} + 2e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \cosh \beta h'_a} \frac{\sinh \beta h'_a}{(\beta h'_a)^2 + (\pi m)^2} \end{aligned} \quad (132)$$

この D_m^a を用いると, I_1 が次のように求まる。

$$I_1 = \beta^2 \sum_a \int Dz \frac{\sum_{m \neq 0} \tilde{\chi}_a(m) \int Dz_a \left(e^{\beta\Omega} + 2e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \cosh \beta h'_a \right) \left(\frac{\Omega}{2h'_a} \right)^2 D_m^a}{\int Dz_{a'} \left(e^{\beta\Omega} + 2e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \cosh \beta h'_{a'} \right)} \quad (133)$$

$\tilde{\chi}$ に関する Gauss 積分を実行すると, 改良された次の自由エネルギーを得る。

$$f = \frac{\beta J^2}{4} (\chi^2 - q^2) - \Omega - \frac{1}{\beta} \int Dz_1 \log \left\{ 1 + 2e^{-\beta D - \frac{\beta\Omega}{2}} \int Dz_a \cosh \beta h'_a \right\} - \frac{\beta J^2}{2} \sum_{m>0} \left(\int Dz \frac{\int Dz_a \left(e^{\beta\Omega} + 2e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \cosh \beta h'_a \right) \left(\frac{\Omega}{2h'_a} \right)^2 D_m^a}{\int Dz_a \left(e^{\beta\Omega} + 2e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \cosh \beta h'_a \right)} \right)^2 \quad (134)$$

上記の改良された自由エネルギーを評価することで相図を描く。

図 20 および図 21 は, それぞれ $D = -5.0, -1.0$ における横結晶場 GS 模型の相図を $T - \Omega$ 平面で描いたものである。ここでは横磁場 SK 模型の場合と同様に, 補正項の和の上限を $m = 1, 4, 10$ とした結果を示した。また, 比較のために静的近似 ($m = 0$) の結果も載せている。それぞれの結果から, 結晶場 D が小さい領域では横磁場 SK 模型の相図 (図 14) と類似の相図が得られた。これは $S^z = \pm 1$ なる状態が有意な系では, 低温において秩序変数の虚時間依存性が重要であることを表している。また, 横磁場 SK 模型と同様に, 各結晶場 D における転移は全て二次転移である。

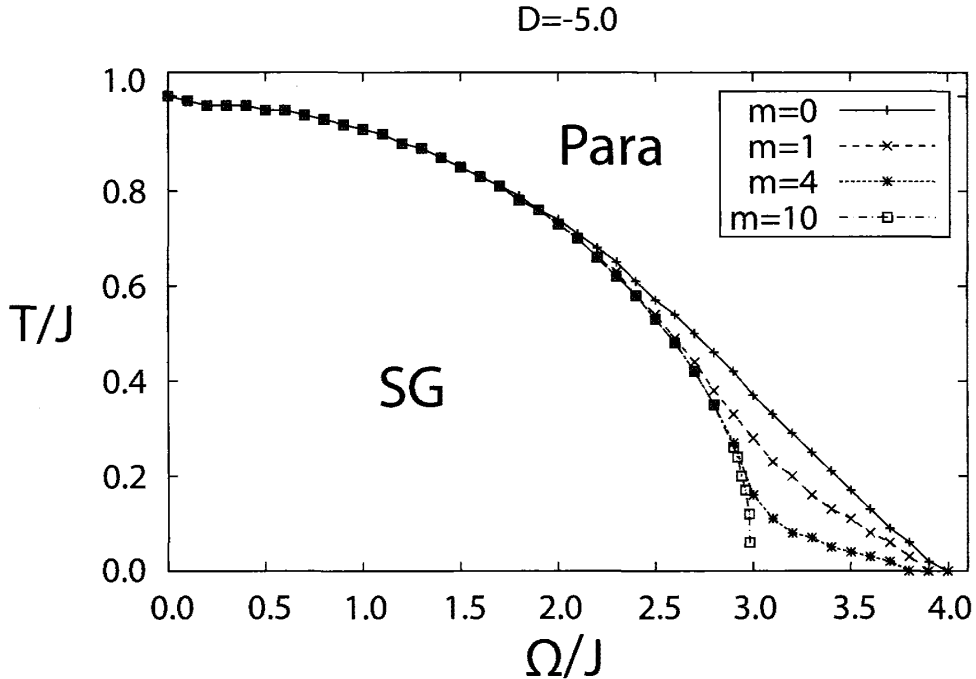


図 20: $T - \Omega$ 平面における横結晶場 GS 模型 ($D = -5.0$) の相図。(RS 解+静的近似の改良) 横軸は横結晶場 Ω , 縦軸は温度 T を表す。実線は静的近似解 ($m = 0$) を表し, 破線, 点線, 一点鎖線はそれぞれ和の上限が $m = 1, 4, 10$ のときの相境界を表す。相境界内部はスピングラス相 (SG), 外部は常磁性相 (Para) である。

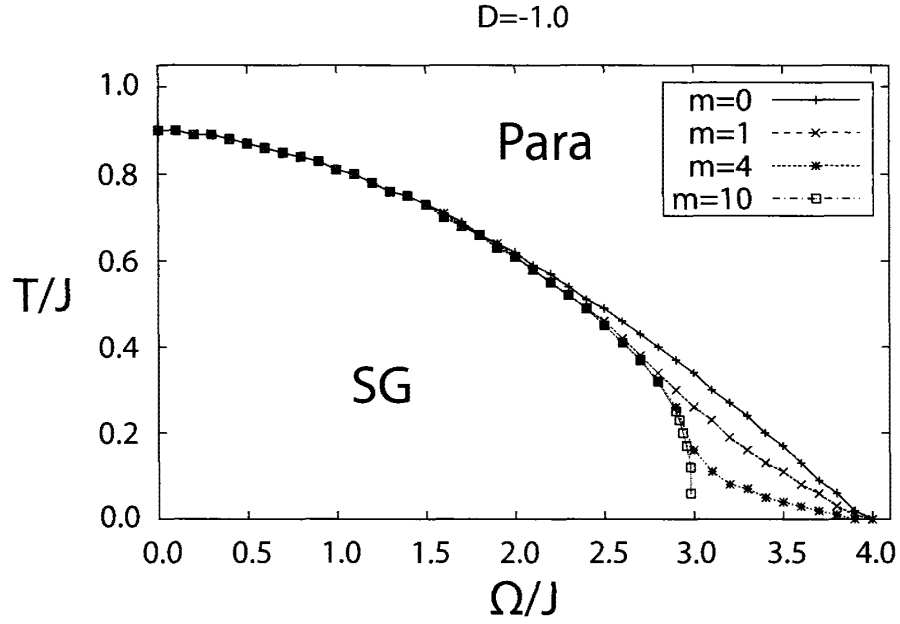


図 21: $T - \Omega$ 平面における横結晶場 GS 模型 ($D = -1.0$) の相図。(RS 解+静的近似の改良) 実線, 破線, 点線, 一点鎖線はそれぞれ和の上限が $m = 0, 1, 4, 10$ のときの相境界を表す。

また, 図 22 および図 23 は, 結晶場の強さが $D = -0.4, -0.1$ の場合の相図である。これらの相図から, 結晶場の値が大きくなるにつれて, 静的近似解と改良された解に対する相境界の差が小さくなることが分かる。これは $S^z = 0$ なる状態が増えるにつれて, 量子揺らぎの効果が小さくなっていることを表している。

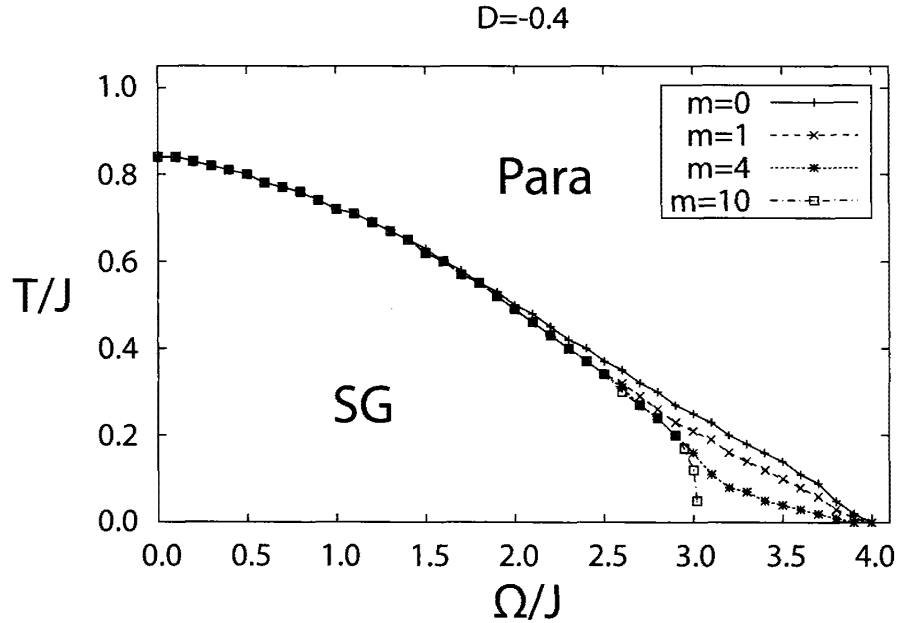


図 22: $T - \Omega$ 平面における横結晶場 GS 模型 ($D = -0.4$) の相図。(RS 解+静的近似の改良) 実線, 破線, 点線, 一点鎖線はそれぞれ和の上限が $m = 0, 1, 4, 10$ のときの相境界を表す。

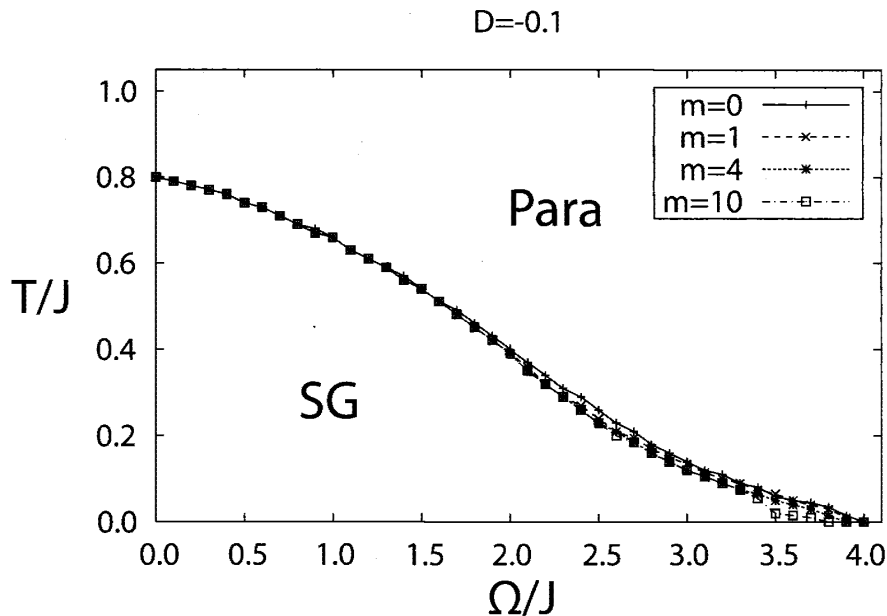


図 23: $T - \Omega$ 平面における横結晶場 GS 模型 ($D = -0.1$) の相図。(RS 解+静的近似の改良) 実線, 破線, 点線はそれぞれ和の上限が $m = 0, 4, 10$ のときの相境界を表す。

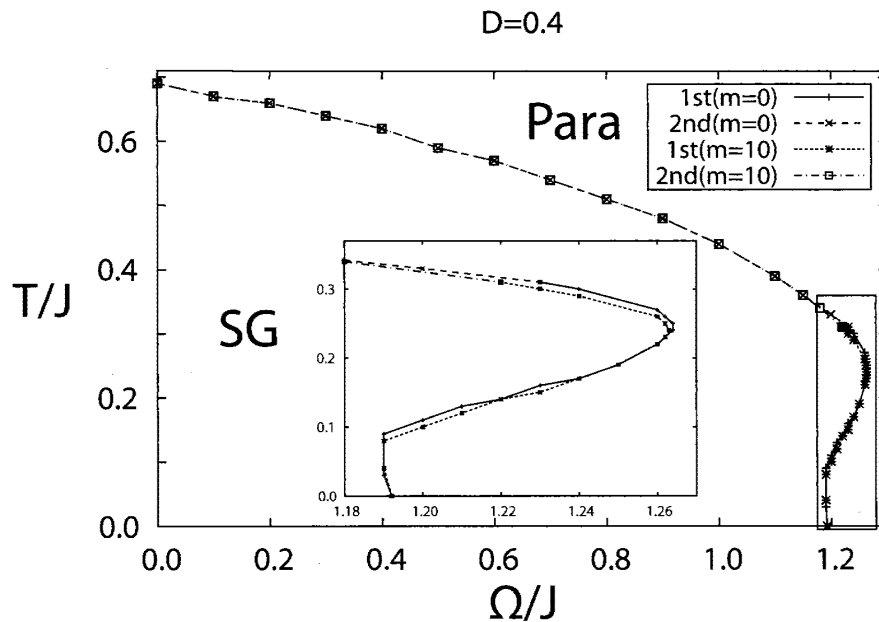


図 24: $T - \Omega$ 平面における横結晶場 GS 模型 ($D = 0.4$) の相図。(RS 解+静的近似の改良) 実線と破線は, 静的近似解 ($m = 0$) による一次転移と二次転移を表す。点線および一点鎖線は和の上限を $m = 10$ としたときの相境界を表し, それぞれ一次転移と二次転移を表す。相境界内部はスピングラス相 (SG), 外部は常磁性相 (Para) である。

図 24 は $D = 0.4$ における相図である。ここでは静的近似 ($m = 0$) による結果と, 補正項の和の上限を $m = 10$ とした結果を示した。図 24 から, $S^z = 0$ なる状態が有意な場合は, 静的近似解と改良された結果の差がほとんど見られないことが分かる。この結果から, D が大きな

場合は低温においても静的近似がよい近似となっていることが分かる。よって、図 18,19 で示した横結晶場 GS 模型の相図は、全領域において信頼性のあるものと言うことが出来る。

以上の結果から、 $S^z = 0$ の割合が増えると、静的近似がよい近似となることが確かめられた。これは量子揺らぎの影響が、スピンの大きさを大きくすると弱まるということを表している。この事実は、秩序変数の動的効果から現れる相関関数 (132) 式に着目することで理解することが出来る。(132) 式において、 D が非常に小さい場合は分母の第一項目は実質的に寄与しない。すると、横磁場 SK 模型の解析で現れた相関関数 (102) 式と等価になる。一方で、 D が大きい場合は、(132) 式の分母第一項目が有意となる。よって、 D_m の値は非常に小さくなり、補正項が寄与しなくなるのである。これより、 D が大きい領域では、静的近似が正しい描像を与えていることが理解出来る。

また、低温領域で一次転移が発生する場合は静的近似が良い近似となり、低温領域で二次転移が起きる場合は静的近似が妥当な近似とはならないという傾向が伺える。この傾向は横磁場・結晶場 GS 模型の相図から推測されるものであり、どの程度一般的なものは定かではない。一次転移と静的近似の関係性を明確にするためには、横磁場 p 体 SK 模型のような他の一次転移が発生する模型の解析が有用であると考えられる。

4 実空間繰り込み群とランダムスピン系への応用

前章までは、平均場模型を例として古典・量子スピングラス模型の解析を行ってきた。平均場模型はあるスピンが、他のスピン全てと相互作用している模型である。これは無限次元の系を考えていることに相当しているため、得られた結果は有限次元の性質とは一般に異なる。そのため、現実の物質を表す、有限次元でのスピングラス模型の性質を理解することが重要となる。

有限次元の解析方法はいくつかあるが、その中でも繰り込み群の手法は無限に大きな系を考えることが出来るため、非常に有用である。4.1 節では、その繰り込み群の一般論について解説する。また、4.2 節以降では本論文で用いた Migdal-Kadanoff の繰り込み群 (以下 MKRG) を Ising 模型を例として解説する。

4.1 繰り込み群の一般論とスケーリング則

ここでは繰り込み群の基本的な考え方を説明する。また、自由エネルギーのスケーリング則から、各種物理量の特異性を特徴付ける臨界指数とスケーリング指数を結びつける関係式を導く [1]。

繰り込み群は系を粗視化することによって、系のマクロな振る舞いを引き出すことを目的として考えられた。実空間繰り込み群の最も基本的な考え方は、Kadanoff によるブロック・スピン変換によるものである [29](図 25)。

1.5 節でも触れた通り、ブロック・スピン変換は与えられたスピン配位に対して、ブロック毎の代表となるスピンを多数決で決定する繰り込みの方法であった。もし系が強磁性相にあれば、この変換を繰り返すことで系の有効温度は 0 へと向かう。一方で、系が常磁性相にあれば、有効温度は無限大へと向かう。具体的にこのような繰り込み変換を行う際は、粗視化の程度を表すスケール b が必要となる。これをスケール因子という。図 25 の場合は $b = 3$ である。

このような繰り込み変換と臨界現象がどのように結びつけられるかを見ていく。まず、系を特徴付ける物理量は自由エネルギーから導かれる。そのため、系の性質を適切に表現するには、

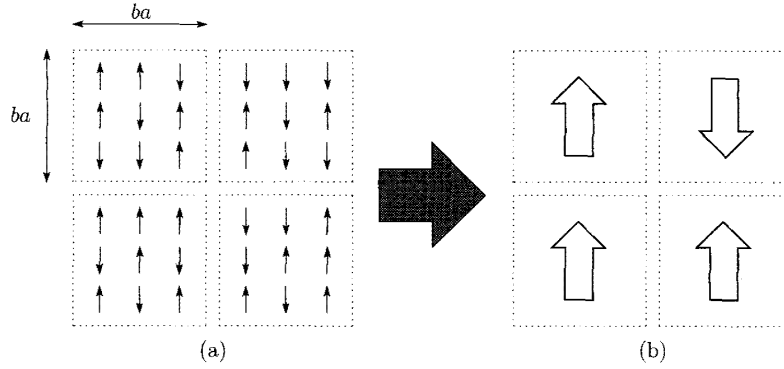


図 25: Ising スピンのブロック・スピン変換。(a) から (b) へとスケール因子 $b=3$ のブロック・スピン変換が行われている。 a は格子定数である。(a) の点線で囲んだブロックの内部にあるスピンの対し、代表となるスピンを多数決で決める。

自由エネルギーが繰り込み変換に対して不変とならなければならない。言い換えれば、自由エネルギーが不変となるように、系の有効温度が変化するのである。これより、繰り込み群を構成する際に、次の式で表される分配関数の不変性が要求される。

$$Z(H) = Z'(H') \quad (135)$$

ここで、左辺と右辺はそれぞれ粗視化する前後のハミルトニアンに対する分配関数である。

次元を d とすると、粗視化後の系におけるスピン数 N' と長さ r' は、元の系における N, r を用いて次のように結びつけられる。

$$N' = b^{-d} N, \quad r' = b^{-1} r \quad (136)$$

これより 1 スピンあたりの自由エネルギーは次のように変換される。

$$f(H) = \frac{1}{N} \log Z(H) = \frac{1}{N' b^d} \log Z'(H') = b^{-d} f(H') \quad (137)$$

(137) 式はスケーリング則を導く上で基本となる式である。

次に、この繰り込み変換によって、ハミルトニアンそのものがどのように変化していくかを見る。以下の議論では温度はハミルトニアンに含まれているものとする。つまり、 βH を改めて H と書く。

まず、系が図 26(a) のように最近接相互作用のみを持っているとする。この系に対して、 $\times$ 印のスピンの和を取るという繰り込み変換を施す。このような操作を部分和を取るという。部分和を計算するという繰り込み変換は、ブロック・スピン変換とは異なる繰り込み変換である。しかし、どちらも系の粗視化を行っているという点では同様の操作である。部分和の計算を行うと、系には図 26(b) のように次近接、4 体相互作用が生成される。一般に、同様の操作を繰り返すことによって、多くの多体相互作用が現れる。

これより、ハミルトニアンを一般的に次のような形で表現する。

$$H = \sum_n u_n O_n = \mathbf{u} \cdot \mathbf{O} \quad (138)$$

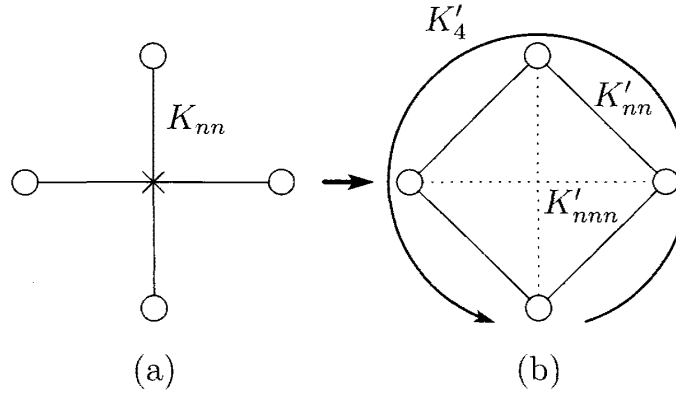


図 26: 正方格子における部分和。実線は最近接相互作用 K_{nn} , 点線は次近接相互作用 K_{nnn} を表す。また, 4 体相互作用 K_4 を半円で表現した。(a) では最近接相互作用のみでも, $\times$ 印で表されたスピンの和を取る (繰り込む) ことで, (b) では次近接, 4 体相互作用が現れる。

ここで, $\mathbf{u}$ は最近接, 次近接, 4 体相互作用などからなるパラメータの組を表す。 O_n は u_n に共役なスピン変数である。Ising 模型を例にすると, 最近接相互作用 u_1 に共役なスピン変数 O_1 は $\sigma_i \sigma_j$ となり, 4 体相互作用 u_4 に共役なスピン変数 O_4 は $\sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l$ といった具合である。ここで, 相互作用は逆温度 β をあらかじめ含んでいることに注意する。

ある繰り込み変換 R を行くと, 分配関数が不変となるように相互作用の強さが変化する。これより, 繰り込まれた相互作用 $\mathbf{u}'$ は次のように表現される。

$$\mathbf{u}' = R(\mathbf{u}) \quad (139)$$

上式は相互作用の変化を表し, 繰り込み群方程式と呼ばれる。繰り込まれた相互作用 $\mathbf{u}'$ は相互作用 $\mathbf{u}$, スケール因子 b および次元 d の関数である。

繰り込み群方程式に従った相互作用の変化の軌跡は, 繰り込みの流れと呼ばれる。無限回の繰り込み変換を行うことで, 強磁性相であれば流れは $T = 0$ へ向かい, 常磁性相であれば $T \rightarrow \infty$ へ向かう。一方, 転移点直上では繰り込み変換を施しても系の有効温度は変化しない。よって, 繰り込み変換を繰り返すことで, 相互作用が変化しない固定点 $\mathbf{u}^*$ に流れる。固定点 $\mathbf{u}^*$ は次の方程式を満たす。

$$\mathbf{u}^* = R(\mathbf{u}^*) \quad (140)$$

一般に転移点と固定点は異なる。例として, 2 次元 Ising 模型の繰り込みの流れを, 最近接相互作用-次近接相互作用平面に射影し図 27 に示す。図 27 において, $K_{nn}^{(c)}$, $K_{nnn}^{(c)}$ はそれぞれ最近接, 次近接相互作用のみが存在する Ising 模型の転移点を表す。系が $K_{nn}^{(c)}$ または $K_{nnn}^{(c)}$ にあるとき, 繰り込み変換を繰り返すことで, $\mathbf{u}$ は黒丸で表された固定点 $\mathbf{u}^*$ に流れる。

臨界現象を調べるためには, 固定点近傍での自由エネルギーの振る舞いに注目すればよい。そこで, 相互作用を固定点 $\mathbf{u}^*$ から微小に変位させたときの振る舞いを調べる。(139) 式において, $\mathbf{u} = \mathbf{u}^* + \delta\mathbf{u}$ として $\delta\mathbf{u}$ の一次まで展開する。

$$\delta\mathbf{u}' = \left. \frac{\partial R}{\partial \mathbf{u}} \right|_{\mathbf{u}=\mathbf{u}^*} \delta\mathbf{u} \quad (141)$$

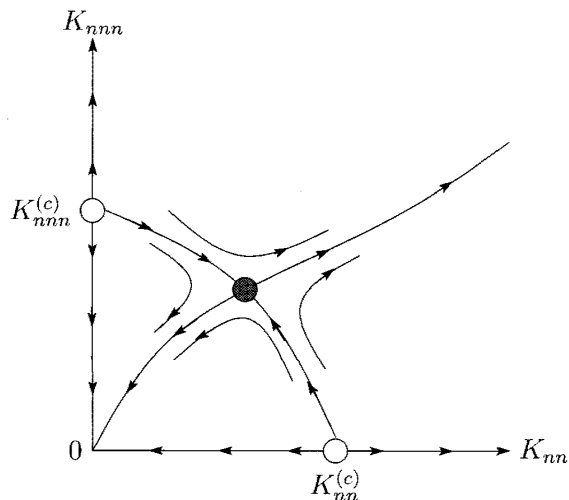


図 27: 最近接, 次近接相互作用空間における Ising 模型の繰り込みの流れ。 $K_{nn}^{(c)}$, $K_{nnn}^{(c)}$ はそれぞれ最近接, 次近接相互作用のみが存在する Ising 模型の転移点を表す。また黒丸は固定点を表す。

これは (138) 式の表式で書くと,

$$\delta u'_n = \sum_m T_{nm} \delta u_m \quad (142)$$

となる。ここで,

$$T_{nm} \equiv \frac{\partial R_n(\mathbf{u})}{\partial u_m} \quad (143)$$

である。 T を対角化する行列を P とすれば, スケーリング場 $\mathbf{g}$ は次のように定義される。

$$g_i \equiv \sum_j P_{ij}^{-1} \delta u_j \quad (144)$$

また, g_i に対する固有値 λ_i は, スケール因子 b のべき乗で書くことが出来る。

$$(P^{-1}TP)_{ii}g_i = \lambda_i(b)g_i \equiv b^{y_i}g_i \quad (145)$$

ここで, $P^{-1}TP$ は対角行列であることを用いた。固有値がスケール因子のべきとなることは, 次の議論から分かる。スケール因子 b の繰り込みの後に, スケール因子 b' の繰り込みを行うことを考える。これは最初からスケール因子 bb' の繰り込みを行うことと同じである。よって, 固有値 λ_i の間に次の関係式が成り立つ。

$$\lambda_i(b)\lambda_i(b') = \lambda_i(bb') \quad (146)$$

このような方程式は, 固有値 λ_i がスケール因子 b のべきで表されなければ成り立たない。

以上の考察から, 固定点近傍ではスケーリング場 g_i に対する繰り込み群方程式が次のように得られる。

$$g'_i = b^{y_i}g_i \quad (147)$$

ここで、右辺に現れる y_i を、スケーリング場 g_i に対するスケーリング指数と呼ぶ。

$y_i < 0$ のときは繰り込み変換を繰り返すことで、固定点からの変位 g_i が 0 となる。これは g_i がどのような値であっても、固定点に吸い込まれることを表すため、系の性質には決定的な影響を及ぼさない。よって、このようなスケーリング指数、スケーリング場を有意でないという。図 28 の g_2 は $y_2 < 0$ の状況を表している。

一方で、 $y_i > 0$ のときは固定点からの変位 g_i が大きくなり、固定点から離れる流れを表す (図 28 の g_1)。このような流れは以下で議論する通り、物理量の特異性と密接に関わるため、 $y_i > 0$ に対応するスケーリング場、スケーリング指数を有意であるという。

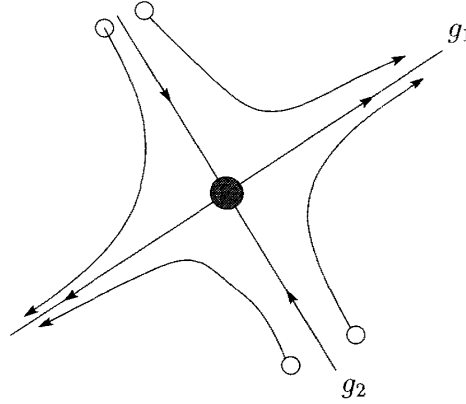


図 28: スケーリング場空間における繰り込みの流れ。 g_1 は有意なスケーリング場、 g_2 は有意でないスケーリング場を表す。黒丸は固定点を表す。白丸で表された初期条件から繰り込むと、繰り込みの流れは図中の軌跡を辿る。

上で求めたスケーリング場を用いてスケーリング則を導出する。今、固定点からの変位は非常に小さいとしているため、以下の議論は固定点の近傍のみで有効である。

(137) 式はスケーリング場を用いて次のように表現される。

$$f(\{u_i\}) = f(\{g_i\}) = b^{-d} f(\{g'_i\}) \quad (148)$$

ここで、(148) 式は自由エネルギーの特異性を持つ項のみを表している。全体の自由エネルギーは特異性を持たない項 $w(g)$ も含むが、今は臨界現象のみに注目しているため、特異性のない項は無視している。

スケーリング場 g の中でも、臨界現象に寄与するのは有意な変数のみである。Ising 模型を考え、温度に対する有意な変数を g_1 、磁場に対する有意な変数を g_2 とする。 g_1 は図 27 より、固定点から離れる方向への変位に対応することが分かる。図 27 から明らかなように、 g_1 は最近接相互作用のみでなく次近接相互作用の影響も受ける。一般にはより多くの多体相互作用が g_1 に寄与することになる。しかし、われわれは温度を図 27 中の $K_{nn}^{(c)}$ に十分近付けることで、繰り込みの流れを固定点に十分近付けることが出来る。これは、スケーリング場 g_1 を最近接 Ising 模型の転移点からの変位 $t = (T - T_c)/T_c$ に比例するように取ることが出来ることを表す。同様の議論から、 g_2 も磁場 h に比例するように取ることが出来る。よって、ここでは有意な変数を $g_1 = t, g_2 = h$ とする。

繰り込み変換を n 回施すと、(148) 式は、

$$f(t, h) = b^{-nd} f(b^{ny_t} t, b^{ny_h} h) \quad (149)$$

となる。 $b^{ny_t}t = 1$ とすれば (149) 式は,

$$f(t, h, \dots) = t^{d/y_t} f(1, ht^{-y_h/y_t}) \equiv t^{d/y_t} f(ht^{-y_h/y_t}) \quad (150)$$

となる。上式が自由エネルギーのスケーリング則である。ここで, (150) 式における最後の等式では, 1 を特異性を生み出さない項として省略した。ここで, 置き換え $b^{ny_t}t = 1$ の意味について確認しておく。この置き換えは $t = b^{-ny_t}$ と書き換えられ, $y_t > 0$ に注意すると $n \rightarrow \infty$ で $t \rightarrow 0$ となる。よって, この置き換えは温度を転移点に近付けることを意味している。

(150) 式を各パラメータで微分することで, スケーリング則が導かれる。比熱は $h = 0$ と置き温度で 2 回微分すると得られる。比熱の特異性が $C \sim t^{-\alpha}$ で特徴付けられることを用いれば,

$$C \sim t^{-\alpha} \sim \frac{\partial^2 f(t, 0)}{\partial t^2} \sim t^{d/y_t-2} \quad (151)$$

これより $\alpha = 2 - d/y_t$ を得る。磁化の特異性は $m \sim t^\beta$ で表されることから,

$$m \sim t^\beta \sim \left. \frac{\partial f(t, h)}{\partial h} \right|_{h=0} \sim t^{(d-y_h)/y_t} \quad (152)$$

より $\beta = (d - y_h)/y_t$ となる。同様に磁化率は,

$$\chi \sim t^{-\gamma} \sim \left. \frac{\partial^2 f(t, h)}{\partial h^2} \right|_{h=0} \sim t^{(d-2y_h)/y_t} \quad (153)$$

となることから $\gamma = (d - 2y_h)/y_t$ を得る。以上の議論からスケーリング則が得られた。重要なことは次元 d と各スケーリング場のスケーリング指数が分かれば, スケーリング則より物理量の特異性が分かるということである。よって, 固定点周りでのスケーリング指数が分かれば, 臨界現象が明らかとなるのである。次節以降ではこれらを調べるのが課題となる。

4.2 Migdal-Kadanoff の繰り込み群

本節では, 本論文で用いる繰り込み群の手法である, MKRG について説明する [30]。MKRG は純粋系だけでなく, ランダム系の解析にも容易に拡張が可能である。よって, 有限次元系のスピングラス模型を解析する強力な手法となる。

MKRG の構成において基本となるのは, 1 次元の状態和の計算である。そのため, まず 1 次元 Ising 模型を繰り込み群の観点から見ることにする。その後一般の次元 d へと拡張する。以下の議論ではランダム系の解析を考慮し, ボンド毎に相互作用が異なる一般的な形式の下で MKRG の解説を行う。

4.2.1 1 次元 Ising 模型

1 次元 Ising 模型の実空間繰り込みは, 近似を用いることなく実行することが出来る。磁場を含んだ Ising 模型を例にしてこのことを見る。

図 29 は 1 次元の問題に対して, 中間スピン σ_2 の和を取るという部分和の操作を表している。図 29 では, スケール因子を $b = 2$ としている。図 29 の (a) におけるハミルトニアンは次式で与えられる。

$$-H_0 = J_{12}\sigma_1\sigma_2 + J_{23}\sigma_2\sigma_3 + h_{12}(\sigma_1 + \sigma_2) + h_{23}(\sigma_2 + \sigma_3) + h_{12}^\dagger(\sigma_1 - \sigma_2) + h_{23}^\dagger(\sigma_2 - \sigma_3) \quad (154)$$

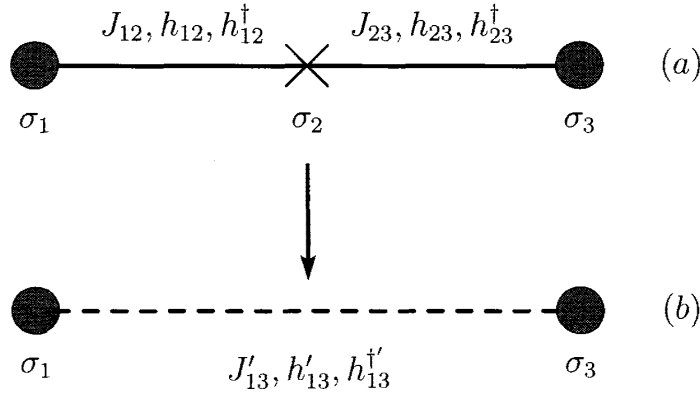


図 29: 1次元の部分和。 σ_1 と σ_2 間の相互作用を J_{12} , σ_2 と σ_3 間の相互作用を J_{23} とした。

ここでも相互作用 J_{12} や磁場 h_{12} と逆温度 $\beta = 1/T$ の積を、改めて J_{12} , h_{12} と書いていることに注意する。(154) 式における各項について説明する。 J_{12} は σ_1 と σ_2 の間に働く相互作用である。 $h_{12}, h_{12}^\dagger$ は σ_1 と σ_2 に作用する磁場である。通常、外場はサイト毎に作用するため、このような書き方はしない。しかし、今はボンドを一つの単位とした議論を行っているために、外場もボンド毎に働いているものと見なして書き直している。 $h_{12}^\dagger$ は共役な外場と言われ、そのスピンの依存性が $(\sigma_1 - \sigma_2)$ のように差で定義される。ランダムネスのない系を考えた場合は $h^\dagger = 0$ となる。しかし、ランダムネスのある場合は、系を正しく記述するために $h^\dagger$ のように異方的に作用する場が必要となる。

指数の肩に $-H_0$ を乗せ、 σ_2 について和を取ることによって、繰り込まれたハミルトニアン $-H'$ が得られる (図 29(b))。繰り込まれたハミルトニアンは、(154) 式と同様に次のように定義される。

$$-H' = J'_{13}\sigma_1\sigma_3 + h'_{12}(\sigma_1 + \sigma_3) + h_{12}^{\dagger'}(\sigma_1 - \sigma_3) \quad (155)$$

このように定義した $-H_0$ と $-H'$ は、次の関係式で結ばれている。

$$\sum_{\sigma_2=\pm 1} \exp \{-H_0(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)\} = A \exp \{-H'(\sigma_1, \sigma_3)\} \quad (156)$$

ここで、右辺の A はスピン変数を含まない定数である。(156) 式の左辺は具体的に計算することが出来て、

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma_2=\pm 1} \exp \{-H_0(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)\} \\ &= 2e^{(h_{12}+h_{12}^\dagger)\sigma_1+(h_{23}-h_{23}^\dagger)\sigma_3} \cosh \left\{ (J_{12}\sigma_1 + J_{23}\sigma_3) + (h_{12} + h_{23} - h_{12}^\dagger + h_{23}^\dagger) \right\} \end{aligned} \quad (157)$$

$$\equiv R(\sigma_1, \sigma_3) \quad (158)$$

となる。(158) 式を (156) 式に代入し、 $\sigma_1, \sigma_3 = \pm 1$ を具体的に与えて評価することで、繰り込まれた相互作用が次のように得られる。

$$J'_{13} = \frac{1}{4} \log \left\{ \frac{R(1,1)R(-1,-1)}{R(1,-1)R(-1,1)} \right\}, \quad (159)$$

$$h'_{13} = \frac{1}{4} \log \left\{ \frac{R(1,1)}{R(-1,-1)} \right\}, \quad (160)$$

$$h'^{\dagger}_{13} = \frac{1}{4} \log \left\{ \frac{R(1,-1)}{R(-1,1)} \right\} \quad (161)$$

これが各相互作用に対する繰り込み群方程式である。

次に基底状態 $T = 0$ における繰り込み群方程式を構成する。Ising 模型において、 $R(\sigma_1, \sigma_3)$ はより一般的に次のように書くことが出来る。

$$R(\sigma_1, \sigma_3) = e^{\lambda_1} + e^{\lambda_2} \quad (162)$$

これは σ_2 に関するトレースが、 2×2 の行列式を解くことに相当しているためである。ここでは、その固有値を $\lambda_1(\sigma_1, \sigma_3), \lambda_2(\sigma_1, \sigma_3)$ とした。固有値 λ は逆温度 β を含んでいることを考慮すれば、 $T \rightarrow 0$ の極限で寄与するのは最大固有値のみである。よって、基底状態に対する繰り込み群方程式は、次の式を解くことで得ることが出来る。

$$A \exp \{ -H'(\sigma_1, \sigma_3) \} = \exp \left[\max_i \lambda_i(\sigma_1, \sigma_3) \right] \quad (163)$$

基底状態における繰り込み群方程式が、最大固有値のみで記述出来るという議論は、 $S = 1/2$ に限らず一般のスピンの大きさに対しても成り立つものである。

一度繰り込み群方程式を立てれば、その変換を何度も施すことによって系の粗視化を進めることが出来る。ここで、一様な磁場 $h_{ij} = h$ が加わっている強磁性体 ($J_{ij} = J$) を考える。このとき (161) 式より $h'^{\dagger}_{13} = 0$ となることが分かる。つまり、ランダムネスのない純粋系では $h^{\dagger}$ は常に 0 である。さらに、外部磁場 h も 0 とする。すると、繰り込み群方程式は相互作用 J に関するものだけとなり、(156) 式より次の繰り込み群方程式を得る。

$$J' = \frac{1}{2} \log \{ \cosh(2J) \} \quad (T \neq 0), \quad (164)$$

$$J' = J \quad (T = 0) \quad (165)$$

$T \neq 0$ のときは $J = 0$ で (164) 式の等号が成り立つ。また、 $J \neq 0$ のとき、(160) 式の繰り込み群方程式は、 J に対して常に減少関数となる。つまり、有限温度から繰り込み変換を繰り返すと、最終的に $J = 0$ の固定点に流れる。 $J = 0$ はスピン間の相関がないことを表すため、常磁性相を特徴付ける固定点である。よって、(164) 式から有限温度では強磁性秩序が存在しないことが分かる。また、 $T = 0$ のときは任意の J に対して等号が成立する。これは温度 0 に強磁性相があることを表している。

これらの結果は有限温度で相転移が起きない、1 次元 Ising 模型の厳密解と矛盾のない結果である。このように、1 次元 Ising 模型に関しては、近似を用いることなく繰り込み変換を行うことが出来る。1 次元 Ising 模型に対する以上の結果は、繰り込みの流れを用いて表すと図 30 のようになる。

無限回の繰り込み変換を施した後に辿り着く固定点は、安定固定点と呼ばれる。安定固定点は相を特徴付ける固定点であり、1 次元 Ising 模型の場合は $T = \infty$ が常磁性相を表す安定固定

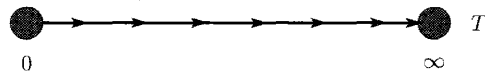


図 30: 1 次元 Ising 模型の繰り込みの流れ。温度 ∞ は安定固定点である。また、有限温度の初期条件から繰り込み変換を繰り返すと、最終的に $T \rightarrow \infty$ となる。

点である。一方で、固定点から少しパラメータをずらしたとき、繰り込み変換によってその変位が大きくなるような場合がある。このような固定点を不安定固定点と呼ぶ。1 次元 Ising 模型の場合は、 $T = 0$ が不安定固定点である。

4.2.2 Migdal-Kadanoff RG ($d \geq 2$)

4.2.1 節で見たように、1 次元の問題に対しては、実空間繰り込みを近似なしに実行することが出来る。しかし、2, 3 次元といったより高い次元を扱うときは、1 次元のときのように厳密には解析を行うことは非常に困難である。それは正方格子などに対して愚直に部分和を取ると、図 26 のように次々と多体相互作用が現れるためである。多体相互作用を取り込むことで転移点や臨界指数を正確に見積もる研究もあるが [48][49]、ランダム系へ拡張しようとするときと複雑であり見通しが良くない。

MKRG は粗視化の過程において近似を導入することで、全ての相互作用を 2 体のみとする実空間繰り込み群の方法である。その臨界指数の精度などは、前述の文献 [48][49] による繰り込み群よりもよくないが、後に見る Ising 模型の連続転移など定性的な性質は十分に再現することが出来ている。また、ランダム系でも成功を収めている数少ない実空間繰り込み群の方法である [31][32]。

有限次元の MKRG を説明するために、2 次元の正方格子を考える。図 31(a) では、各スピンの相互作用が最近接のみに存在するものとする。また、各スピンに磁場が印加されている状況を考える。MKRG の目標はそのような系に繰り込み変換を施すことで、粗視化された系、図 31(c) を得ることである。また、それに伴う相互作用の変化を解析的に得ることである。ここでは、図 31(c) においても相互作用は最近接のみであるとする。

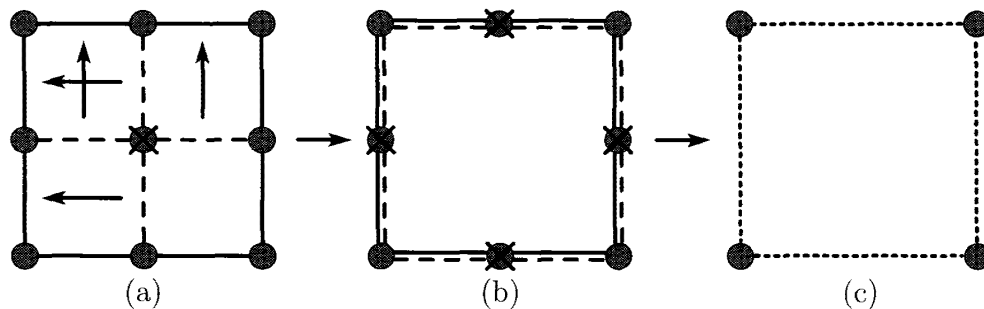


図 31: 2 次元正方格子におけるスケール因子 $b = 2$ の MKRG。丸印はサイトを表す。

MKRG では、まず図 31(a) の×印で表されたスピンを無視する。そして、破線で表されたボンドの相互作用を矢印の先のボンドの相互作用と足し合わせる。この操作をボンド置換と言う。図 31(b) はボンド置換した後の状態を表している。ボンド置換された相互作用は二つの相互作用の和である。次に、図 31(b) の×印で表されたスピンについて部分和を取る。これは前節で扱った一次元の部分和の計算に他ならない。よって、1 次元 Ising 模型の場合と同様に×印で表されたスピンに関する和を計算することが出来る。

ここで、上記の操作を数式で表現する。図 31(b) の 1 次元の部分系に着目すれば、部分系のハミルトニアンは (154) 式と同様に次のように書くことが出来る。

$$-H_0 = \tilde{J}_{12}\sigma_1\sigma_2 + \tilde{J}_{23}\sigma_2\sigma_3 + \tilde{h}_{12}(\sigma_1 + \sigma_2) + \tilde{h}_{23}(\sigma_2 + \sigma_3) + \tilde{h}_{12}^\dagger(\sigma_1 - \sigma_2) + \tilde{h}_{23}^\dagger(\sigma_2 - \sigma_3) \quad (166)$$

ただし、チルダで表された相互作用はボンド置換した後での相互作用である。 $d = 2, b = 2$ の場合、それらは次のようになる。

$$\tilde{J}_{ij} = \sum_{n=1}^2 J_{in,jn}, \quad \tilde{h}_{ij} = \sum_{n=1}^2 h_{in,jn}, \quad \tilde{h}_{ij}^\dagger = \sum_{n=1}^2 h_{in,jn}^\dagger \quad (167)$$

繰り込まれた相互作用 $J'_{13}, h'_{13}, h_{13}^\dagger$ を得るためには、(157) 式において $J_{ij} \rightarrow \tilde{J}_{ij}$, $h_{ij} \rightarrow \tilde{h}_{ij}$, $J_{ij}^\dagger \rightarrow \tilde{h}_{ij}^\dagger$ と置き換えたものを、 $R(\sigma_1, \sigma_3)$ として定義すれば良い。これで 2 次元における繰り込み群方程式が、相互作用や磁場がランダムな場合も含む一般的な形で導かれた。

1 次元のときと同様に、全ての相互作用 J_{ij} を J 、磁場 h を 0 としたときの繰り込みの流れを見る。 $\tilde{J}_{ij} = 2J$ に注意すれば、次の繰り込み群方程式を得る。

$$J' = \frac{1}{2} \log \{ \cosh(4J) \} \quad (168)$$

(168) 式では自明な固定点 $J = 0, \infty$ に加えて、不安定な固定点 $J_c = 0.3047 (T_c = 3.282)$ が存在する。これは、2 次元 Ising 模型が有限温度で相転移を起こすことと矛盾のない結果である。繰り込みの流れは図 32 のようになる。

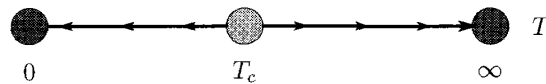


図 32: MKRG による 2 次元 Ising 模型の繰り込みの流れ。臨界点 T_c より低温のときは $T = 0$ へ、高温のときは $T \rightarrow \infty$ に向かって流れる。

さらに、不安定固定点近傍でのスケーリング指数を求め、比熱の特異性を表す指数 α を求める。今、考えている相互作用は交換相互作用のみであるから、(143) 式より J' を J で微分すればよい。

$$\left. \frac{\partial J'}{\partial J} \right|_{J=J_c} = 2 \tanh(4J_c) = b^{y_t} \quad (b = 2) \quad (169)$$

これより、スケーリング指数が $y_t = 0.747$ と求まる。さらに $\alpha = 2 - d/y_t$ を用いれば、比熱の特異性を表す臨界指数 $\alpha = -0.677$ と求まる。このことから、厳密解が示唆するような比熱の

発散は、MKRG では確認出来ない。しかし、スピンの揺らぎが大きくなる連続転移の描像は見る事が出来ている。

一般の次元 d 、スケール因子 b における MKRG は、(167) 式を次のように書き換えることで実行することが出来る。

$$\tilde{J}_{ij} = \sum_{n=1}^{b^{d-1}} J_{i_n, j_n}, \quad \tilde{h}_{ij} = \sum_{n=1}^{b^{d-1}} h_{i_n, j_n}, \quad \tilde{h}_{ij}^\dagger = \sum_{n=1}^{b^{d-1}} h_{i_n, j_n}^\dagger \quad (170)$$

次元やスケール因子が変わっても、固定点を見つけ、その周りでのスケーリング指数を評価して臨界指数を調べるという手法は変わらない。しかし、われわれが解析的に繰り込み群方程式を解けるのは、相互作用や磁場が一様な純粋系に限られる。そこで、次節ではランダムボンダ Ising 模型を考え、MKRG のランダム系への応用法について解説する。

4.2.3 MKRG のランダム系への応用

ここでは $\pm J$ Ising 模型を例として、ランダム系に対する MKRG の応用法を Nobre の方法に従って解説する [32]。

$\pm J$ Ising 模型とは、Ising スピン間の相互作用が確率 p で強磁性、確率 $(1-p)$ で反強磁性相互作用となる模型である。 J_{ij} を交換相互作用として、この確率分布を数式で表すと次の通りである。

$$P(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J) + (1-p)\delta(J_{ij} + J) \quad (J > 0) \quad (171)$$

この模型は既に実空間繰り込み群やモンテカルロ法で調べられており、3次元以上ではスピングラス相が存在することが知られている [31][50]。

具体的に3次元におけるスケール因子 $b=2$ の MKRG を用いて、MKRG のランダム系への応用を解説する。(159),(170) 式から、このときの繰り込み群方程式は、ボンダ置換された相互作用

$$\tilde{J}_{12} = \sum_{n=1}^4 J_{1_n, 2_n}, \quad \tilde{J}_{23} = \sum_{n=1}^4 J_{2_n, 3_n} \quad (172)$$

を用いて次のように表される。

$$J'_{13} = \frac{1}{2} \log \frac{R(1, 1)}{R(1, -1)}, \quad (173)$$

$$R(\sigma_1, \sigma_3) = 2 \cosh(\tilde{J}_{12}\sigma_1 + \tilde{J}_{23}\sigma_3) \quad (174)$$

純粋系のときは、全てのボンダ対 $\langle i, j \rangle$ に対して交換相互作用は一様であった。そのため、繰り込まれた相互作用もまた、ボンダに依存せず一様となる。しかし、ランダム系の場合は相互作用が確率分布によって与えられる。そのため、繰り込まれた相互作用もボンダによって異なる。

このことから、ランダム系の実空間繰り込み群を行うにあたり、重要な注意点が二つある。一つ目はランダムネスの確率分布を、適切に再現出来るだけのボンダ数を用意することである。この多くのボンダの集合をプールと呼び、その要素数を N とする。まず、われわれはランダムネスの確率分布に従い、 N 本のボンダに相互作用を与える。 $\pm J$ ボンダランダムネスの場合

は、 pN 本に強磁性相互作用、 $(1-p)N$ 本に反強磁性相互作用を与えることになる。この確率分布は、 N が大きいほど忠実に再現することが出来る。プール数 N が小さい領域では転移点が N に依存してしまう。そこで、転移点が N に依存しない程度まで N を大きくする必要がある。そのような条件を満たすプール数として、本論文では $N = 400000$ とする。

相互作用の確率分布は、繰り込み変換を行うにつれて、その形を徐々に変えていく。つまり、純粋系とは異なり、われわれは相互作用の強さだけでなく、その確率分布にも注目する必要がある。その両者を同時に扱うためには、相互作用の強さを確率分布で平均した量に注目すればよい。特に、Ising 模型の場合は相互作用の平均と分散を繰り込み変換を行う度に見る。

$$\langle J \rangle_n = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N J_{i,n}, \quad (175)$$

$$\langle J^2 \rangle_n = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N J_{i,n}^2 \quad (176)$$

ここで i はプールの要素を、 n は繰り込み変換のステップ数を表す。

前節でも見たように、 $n \rightarrow \infty$ としたときに行き着く安定固定点が相を特徴付ける。すなわち、 $\langle J \rangle_\infty, \langle J^2 \rangle_\infty$ を見ることで相を決定出来るのである。強磁性相であれば、スピンは同じ方向を向くのであるから、各 J_i は正かつ十分大きな値を持つ。よって、強磁性相は $\langle J \rangle, \langle J^2 \rangle \rightarrow \infty$ と表現することが出来る。一方、常磁性相ではスピン間の相関が弱いいため、各 J_i が 0 であると考えられる。よって、 $\langle J \rangle, \langle J^2 \rangle \rightarrow 0$ で常磁性相は特徴付けられる。スピングラス相はスピンがランダムな向きに凍結した相であるから、あるボンドは強磁性的 ($J_i > 0$) であり、あるボンドは反強磁性的 ($J_i < 0$) であると考えられる。よって、スピングラス相は平均 $\langle J \rangle$ が 0、分散 $\langle J^2 \rangle$ が ∞ となる相として特徴付けることが出来る。以下に上記の関係をまとめる。

- 強磁性相： $\langle J \rangle, \langle J^2 \rangle \rightarrow \infty$
- 常磁性相： $\langle J \rangle, \langle J^2 \rangle \rightarrow 0$
- スピングラス相： $\langle J \rangle \rightarrow 0, \quad \langle J^2 \rangle \rightarrow \infty$

2つ目に重要なことは、結果がサンプルに依存するということである。無限系であれば確率分布 (171) 式を誤差なく再現出来るため、得られた結果がサンプルに依存するということはない。しかし、我々が扱うプールの数は大きな数ではあっても有限である。そのためランダムネスを与える際に有限サイズ効果が生まれてしまう。そこで、サンプルに関しても平均を取る操作が必要となる。さらに、そのサンプル数が多いほど、無限系で期待される結果をわれわれは得ることが出来る。本論文では 100 個のサンプルを取り相図を描く。サンプル平均の取り扱いについては、次節で具体例を用いて詳細に説明する。

最後に具体的な数値計算の方法について説明する。まず、初期条件として、考える温度 T とランダムネスの確率 p を設定する。そして、 N 本のボンドに確率分布 (171) 式に従って相互作用を与える。次に、 N 本のボンドの中から無造作に 8 本のボンドを選び、繰り込み群方程式 (173) 式に従って繰り込まれた相互作用を求める。ここで”8本のボンド”は $d=3, b=2$ のとき、繰り込み群方程式を立てる際に 8 本のボンドを要するためである。上記の操作を繰り込まれた相互作用が N 個出来るまで繰り返す。これで 1 ステップの繰り込み変換となる。この繰り込まれたボンドから、さらに N 本の繰り込まれたボンドを生成するという操作を繰り返す。こ

の過程が粗視化を進めていることに対応する。十分繰り込んだ後に、(175),(176) 式の量を評価し、初期条件 T, p はいずれの相であったかを決定する。この解析を多数のサンプルに対して同様に行う。

次章では上記の手法を用いて、 $\pm J$ Ising 模型の相図を描いていく。

5 $\pm J$ 横磁場 Ising 模型の実空間繰り込み群による解析

本章では横磁場 Ising 模型に対して、MKRG を応用した解析を行う。横磁場 Ising 模型の実空間繰り込み群による解析には、いくつかの先行研究がある [51][52]。しかし、その方法は $S = 1$ などの系には容易に拡張することが出来ない。そこで、われわれは切断近似を用いて、量子系の実空間繰り込み群を構成した。5.1 節では一次元横磁場 Ising 模型を用いて、その方法を解説する。また、5.2 節では任意の次元への拡張を考える。われわれの方法は MKRG を下に構成するために、ランダム系への拡張も容易に行うことが出来る。5.3 節では古典および量子系におけるスピングラス模型の解析から得られた相図を比較することによって、量子揺らぎがどのような役割を果たすかを見ていく。

5.1 1次元横磁場 Ising 模型の繰り込み

まず、1次元横磁場 Ising 模型の繰り込み群方程式を求める。横磁場 Ising 模型のハミルトニアンは次式で与えられる。

$$-H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z + \Gamma \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i^x + \sigma_j^x) \quad (177)$$

$\langle i,j \rangle$ は最近接のボンドについて取る。 σ_i^z, σ_i^x はサイト i における Pauli 行列である。前節と同様に、相互作用には温度が含まれているものとする。また、横磁場の項は本来サイト上にあるが、実空間繰り込み群を行うことを考慮してボンド単位で表示した。系の分配関数は、

$$Z = \text{Tre}^{-H} \quad (178)$$

である。分配関数の計算において、次の部分系を抜き出す。

$$Z_{\text{part}} = \text{Tr}_{\sigma_2} \exp [(J_{12}\sigma_1^z + J_{23}\sigma_3^z)\sigma_2^z + \Gamma(\sigma_1^x + 2\sigma_2^x + \sigma_3^x)] \quad (179)$$

量子系において、このように部分系を取り出す操作は厳密に行うことは出来ない。それは σ_1, σ_3 に対し、Pauli 行列の x 成分と z 成分が非可換であるためである。そのため、この操作は第1の近似となる。次に、2つ目の近似として切断近似 (decoupling 近似) を導入する。すなわち、 σ_1, σ_3 の非可換性を再び無視して、部分系の分配関数を次のように書き換え、それを σ_1, σ_3 で構成される繰り込まれたハミルトニアンと対応させる。

$$Z_{\text{part}} \sim \exp [\Gamma(\sigma_1^x + \sigma_3^x)] \text{Tr}_{\sigma_2} \exp [(J_{12}\sigma_1^z + J_{23}\sigma_3^z)\hat{\sigma}_2^z + 2\Gamma\sigma_2^x] \quad (180)$$

$$= 2 \exp [\Gamma(\sigma_1^x + \sigma_3^x)] \cosh \left(\sqrt{(J_{12}\sigma_1^z + J_{23}\sigma_3^z)^2 + 4\Gamma^2} \right) \quad (181)$$

$$\equiv A \exp [J'_{13}\sigma_1^z\sigma_3^z + \Gamma'(\sigma_1^x + \sigma_3^x)] \quad (182)$$

$$\sim A \exp [\Gamma'(\sigma_1^x + \sigma_3^x)] \exp (J'_{13}\sigma_1^z\sigma_3^z) \quad (183)$$

ここで、 $R(\sigma_1^z, \sigma_3^z)$ を次のように定義する。

$$R(\sigma_1^z, \sigma_3^z) \equiv 2 \cosh \left(\sqrt{(J_{12}\sigma_1^z + J_{23}\sigma_3^z)^2 + 4\Gamma^2} \right) \quad (184)$$

上式と (75) 式を比較すると、切断近似は平均場理論における静的近似と類似したものであることが予想される。よって、量子スピン系を解析する上での最も初等的な近似とすることが出来る。

(184) 式を用いることで、切断近似の下での繰り込み群方程式が以下のように得られる。

$$J'_{13} = \frac{1}{2} \log \left[\frac{R(1, 1)}{R(1, -1)} \right], \quad (185)$$

$$\Gamma' = \Gamma \quad (186)$$

すなわち、横磁場 Γ は切断近似の下では不変となる。

ここで、切断近似は横磁場 Γ について展開した結果の 1 次までを採用した近似とも捉えることが出来る。そのため、 Γ にあらかじめ逆温度 β を含ませていることを考慮すると、

$$\beta\Gamma < 1 \rightarrow \Gamma < T \quad (187)$$

の領域では近似の信頼性が高いと考えられる。また、 σ_2 に関しては近似を行っていない点にも注意する。そのため、この繰り込み群は量子効果を部分的に取り込んだものと考えることが出来る。

具体的に強磁性体 ($J_{ij} = J(>0)$) に対して、(185),(186) 式から得られる繰り込み群の流れを見る。このとき、繰り込み群方程式は、

$$J' = \frac{1}{2} \log \left(\frac{\cosh(2\sqrt{J^2 + \Gamma^2})}{\cosh(2\Gamma)} \right), \quad (188)$$

$$\Gamma' = \Gamma \quad (189)$$

となる。繰り込み群方程式 (188) 式では、 $\Gamma \neq 0$ としたとき常に $J' < J$ が成り立つ。そのため、繰り込み変換を施す度に J は 0 に近づく。よって、 $T = 0$ を含めた全ての温度領域に対して、強磁性相は存在しないことになる。1 次元の強磁性横磁場 Ising 模型は厳密解がある。その結果によると、 $T = 0$ かつ $0 \leq \Gamma \leq J$ の領域で強磁性相がある。(188) 式の繰り込み群方程式は、厳密解の結果とは矛盾したものとなっている。近似が低温で破綻している証拠の一つである。しかし、次に述べるように、2 次元以上では切断近似の下でも定性的な性質は保たれている。

5.2 $d \geq 2$ 次元における横磁場 Ising 模型の繰り込み

横磁場 Ising 模型の繰り込みを一般の次元へと拡張する。古典系と同様にボンド置換を行い、実効的に 1 次元の問題に落とすことで拡張が可能である。その際に、横磁場の取り扱いが複雑なのでここで説明する。

例として、2 次元正方格子を考える。古典系のボンド置換と同様に考えると、相互作用と横磁場をボンド 2 本分足し合わせるという操作がボンド置換に対応する。特に強磁性体を見ると、(188) 式において $J \rightarrow 2J, \Gamma \rightarrow 2\Gamma$ としたものが繰り込み群方程式になる。切断近似の下では、 $\Gamma' = 2\Gamma$ となり横磁場は常に増加する流れが生まれる。しかし、これは物理的ではない。

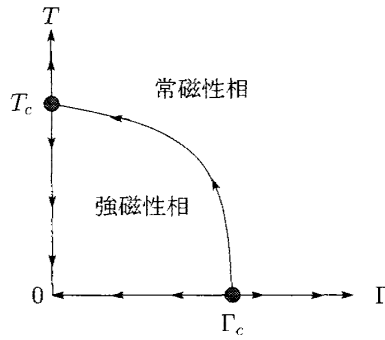


図 33: 横磁場 Ising 模型の相図。横軸は横磁場 Γ ，縦軸は温度 T を表す。 T_c および Γ_c はそれぞれ $\Gamma = 0, T = 0$ における転移点である。

なぜなら図 33 に示したように、強磁性相では横磁場 Γ が 0 に向かうと考えられるためである [53]。実際に、1 次元横磁場 Ising 模型では、強磁性相でそのような流れが確認されている [54]。

よって、切断近似を用いて MKRG を行うためには、任意の領域で横磁場が単調に増加するという非物理的な描像を回避する必要がある。その方法として、ボンド置換を行う際に、正方格子の中央にあるスピンに対する横磁場を無視する方法を考える。その近似の下では、相互作用のみがボンド置換される。よって、(184) 式の $R(\sigma_1^z, \sigma_3^z)$ は 2 次元の系では以下ようになる。

$$R(\sigma_1^z, \sigma_3^z) = 2 \cosh \left[\sqrt{(\tilde{J}_{12}\sigma_1^z + \tilde{J}_{23}\sigma_3^z)^2 + 4\Gamma^2} \right], \quad (190)$$

$$\tilde{J}_{12} = \sum_{n=1}^2 J_{1n,2n}, \quad \tilde{J}_{23} = \sum_{n=1}^2 J_{2n,3n} \quad (191)$$

この $R(\sigma_1^z, \sigma_3^z)$ を用いれば、繰り込み群方程式は (185), (186) 式と同様になる。つまり、一般の次元に対しても横磁場は繰り込まれないものとする。横磁場が不変であるということは、横磁場が 0 に向かうような秩序相内では横磁場を過大に評価し、横磁場が ∞ に向かうような無秩序相では過小に評価していることになる。一般の次元、スケール因子への拡張は、(170) 式と同様に、(191) 式における和の上限を b^{d-1} で置き換えればよい。

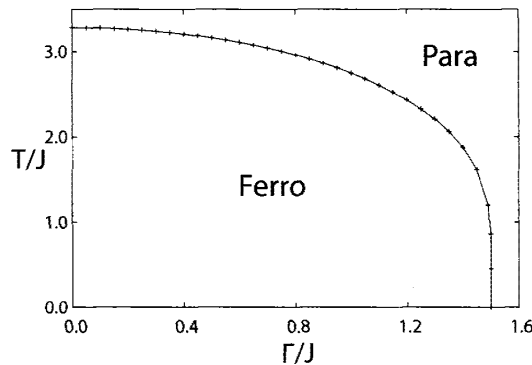


図 34: MKRG を用いた 2 次元横磁場 Ising 模型の相図。縦軸は温度 T ，横軸は横磁場 Γ を表す。実線では連続転移が起きる。相境界内部は強磁性相 (Ferro)，外部は常磁性相 (Para) である。

上記の方法を利用して2次元の横磁場 Ising 模型に対する解析を行った結果、図 34 のような相図が得られる。相図から、 Γ が大きくなるにつれて転移点は低くなり、 $\Gamma_c = 1.5$ で $T = 0$ に存在していた強磁性相が消えることが分かる。

5.3 3次元 $\pm J$ Ising 模型の相転移

前節では、純粋系に対する結果を述べた。本節では、量子系に対する結果を述べる準備として、古典 $\pm J$ Ising 模型の相転移について見ていく。本節で行う解析は、スピングラス相が存在する3次元の系に対して行う [31]。

前章でも述べたように、本論文におけるランダム系の解析では、プール数を $N = 400000$ 、サンプル数を $S = 100$ とした。4.2.3 節で解説した方法を用いた結果、古典の3次元 $\pm J$ Ising 模型に対する相図が図 35 のように得られる。図 35 から、3次元 $\pm J$ Ising 模型では低温かつランダムネスが強い領域でスピングラス相が存在することが分かる。また、強磁性相とスピングラス相の間の相転移はリエントラント転移であることが見て取れる。

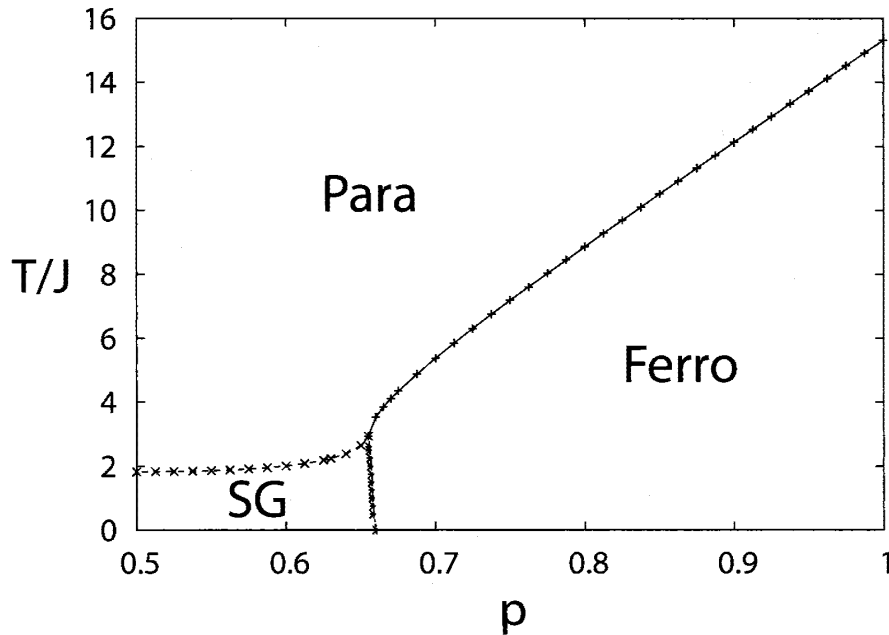


図 35: 3次元 $\pm J$ Ising 模型の相図。縦軸は温度 T ，横軸は強磁性相互作用の占有確率 p を表す。実線と点線で囲まれた領域は強磁性相 (Ferro)，破線と点線で囲まれた領域はスピングラス相 (SG) を表す。それ以外の領域は常磁性相 (Para) である。

ここで、サンプル平均の取り方について述べる。4.2.3 節で触れたように、ランダム系では相境界付近で、サンプルによって異なる安定固定点へ流れるという性質が見られる。そこで、サンプルに関する平均操作が必要であった。前章でも述べた通り、本論文では文献 [32] の方法を用いて、サンプル依存性を考慮する。その手法では、全サンプル数 S に対して、どれだけのサンプル数が強磁性、常磁性、スピングラスの安定固定点へ流れたのか、という比を考える。強磁性、常磁性、スピングラス安定固定点へ流れたサンプル数を、それぞれ S_F, S_P, S_{SG} とする

と、それらの比 η は次のように定義される。

$$\eta_i = \frac{S_i}{S} \quad (i = F, P, SG) \quad (192)$$

具体的に、図 35 中のいくつかの相境界付近に対して、比 η と温度 T または強磁性占有確率 p の依存性を見ていく。

図 36 は、図 35 中の $p = 0.9875$ における相境界付近での η を温度の関数として描いたものである。図 36 において、強磁性の割合が多い場合は強磁性相、常磁性の割合が多い場合は常磁性相と考える。また、転移点は両者の割合が等しい点、つまり図 36 の実線と破線の交点で決めるものとする。

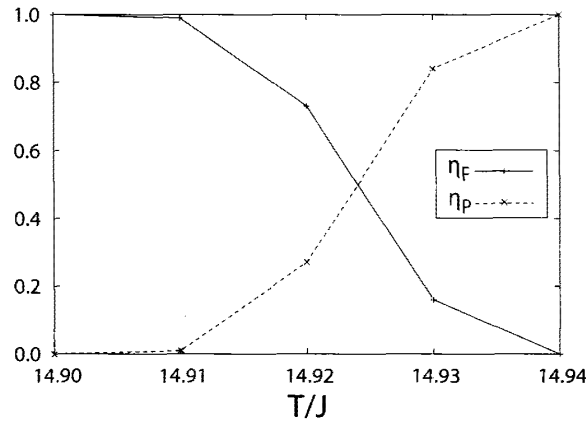


図 36: $p = 0.9875$ における相境界付近のサンプル依存性。縦軸は比 η ，横軸は温度 T を表す。実線は強磁性の割合 η_F ，破線は常磁性の割合 η_P を表す。

また、上記とは異なり 3 相が混在する場合もある。図 37 は $p = 0.655$ の多重臨界点付近におけるサンプル依存性である。この場合も最も割合の多い相が、その温度における相であると考えられる。図 37 のような場合は、実線と破線の交点で転移点を決定する。

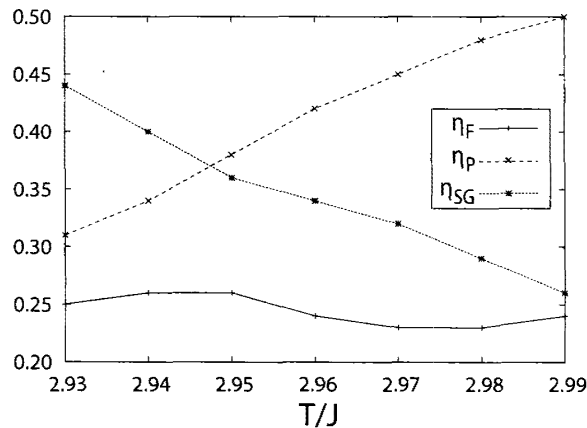


図 37: $p = 0.655$ における相境界付近のサンプル依存性。縦軸は比 η ，横軸は温度 T を表す。実線は強磁性の割合 η_F ，破線は常磁性の割合 η_P ，点線はスピングラスの割合 η_{SG} を表す。

以上の例に加え、代表的な転移として対称分布 $p = 0.5$ における常磁性–スピングラス相境界と、 $T = 0$ におけるスピングラス–強磁性相境界におけるサンプル依存性を、それぞれ図 38, 39 に示す。転移点の決定法は上述の方法と同様である。

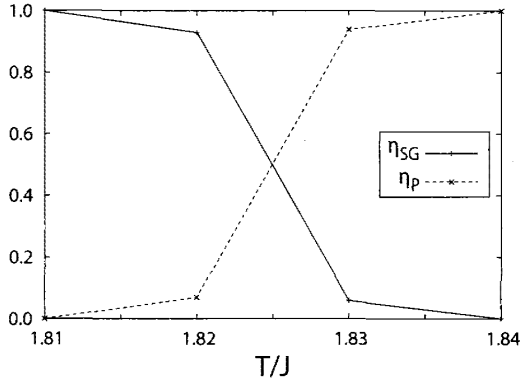


図 38: $p = 0.5$ における相境界付近のサンプル依存性。横軸は温度 T を表す。

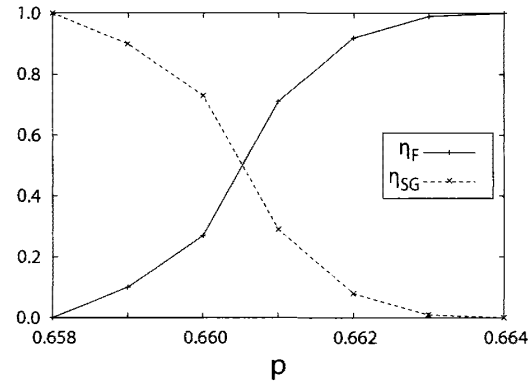


図 39: $T = 0.0$ における相境界付近のサンプル依存性。横軸は強磁性相互作用の占有確率 p を表す。

さらに、スピングラス転移における臨界現象も調べる。ここでは、スピングラス転移を特徴付ける不安定固定点 $p = 0.5, T_c = 1.825$ における臨界指数を求める。ランダム系における臨界指数は、相互作用の分布関数に対する平均と分散を用いて調べることが出来る (詳細は付録 D)。付録 D における繰り込み変換 R は、(173) 式と対応する。(172) 式の表記を用いると、(318) 式の行列の各成分は次のように求まる。

$$\langle \partial_1 R \rangle = 4 \tanh(\tilde{J}_{12} + \tilde{J}_{23}), \quad (193)$$

$$\langle \partial_2 R \rangle = \frac{2}{\cosh^2(\tilde{J}_{12} + \tilde{J}_{23})} \quad (194)$$

残りの成分は、 $\langle J \rangle$ と上式を組み合わせることによって得ることが出来る。これより、数値的に $y_t \sim 0.858$ を得て、スケーリング則から比熱の特異性が $\alpha \sim -1.5$ となることが分かった。 α が負であることは、スピングラス転移点において比熱が発散しない描像と定性的に一致している。

5.4 3次元横磁場 $\pm J$ Ising 模型の相転移

古典系の解析ではランダムネスが十分大きく、低温の領域でスピングラス相が観測される。一方で低温は量子揺らぎが有意となる領域でもあるため、スピングラス相が量子揺らぎの影響をどのように受けるかを知ることは重要である。ここでは、5.2 節で説明した横磁場 Ising 模型の繰り込み群方程式を用いて、 $\pm J$ 横磁場 Ising 模型の相図を描く。転移点の決定法や解析の手法は古典系と同様である。

図 40 は横磁場の強さを $\Gamma = 0.5$ としたときの相図である。この相図から、量子揺らぎを加えた場合も、スピングラス相は存在していることが分かる。よって、量子揺らぎが古典系における相転移描像を急激に変化させるようなことはないと言える。

また、図 41 は横磁場の強さを $\Gamma = 1.0$ としたときの相図である。このときは、有限温度におけるスピングラス転移が $p = 0.5$ までは伸びないが、有限の領域で存在するという古典系では見られない描像が得られる。

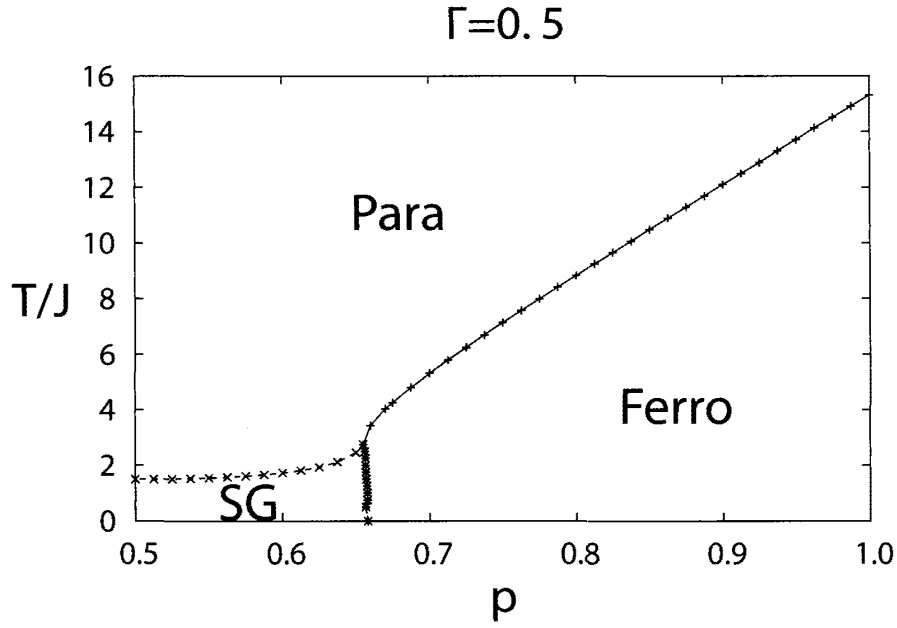


図 40: 3 次元 $\pm J$ 横磁場 Ising 模型 ($\Gamma = 0.5$) の相図。縦軸は温度 T ，横軸は強磁性相互作用の占有確率 p を表す。実線と点線で囲まれた領域は強磁性相 (Ferro)，破線と点線で囲まれた領域はスピングラス相 (SG) を表す。それ以外の領域は常磁性相 (Para) である。

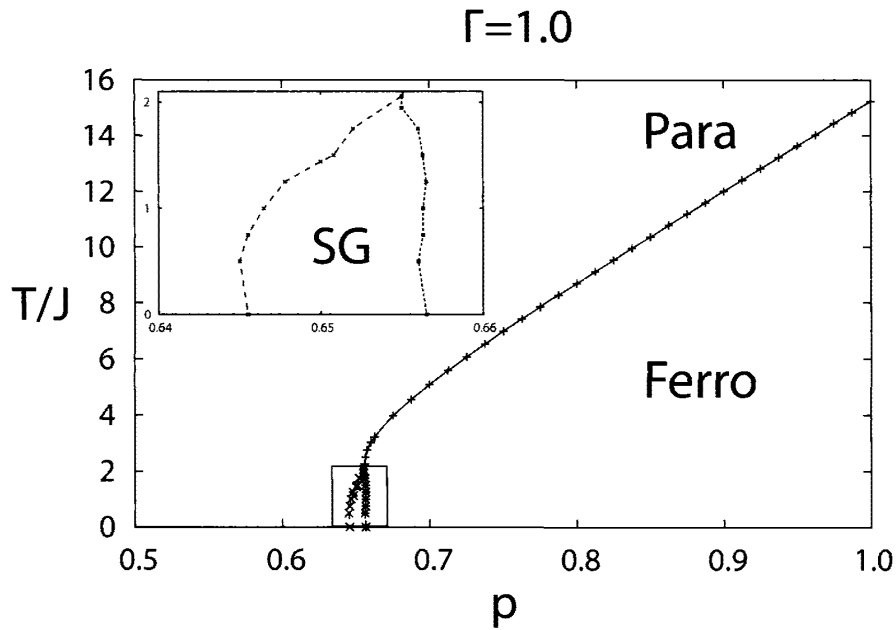


図 41: 3 次元 $\pm J$ 横磁場 Ising 模型 ($\Gamma = 1.0$) の相図。縦軸は温度 T ，横軸は強磁性相互作用の占有確率 p を表す。実線と点線で囲まれた領域は強磁性相 (Ferro)，破線と点線で囲まれた領域はスピングラス相 (SG) を表す。それ以外の領域は常磁性相 (Para) である。

最後に対称分布 $p = 0.5$ における， $T - \Gamma$ 平面の相図を図 42 に示す。このとき $T = 0$ におけるスピングラス相は $\Gamma_c = 0.706$ で消失する。

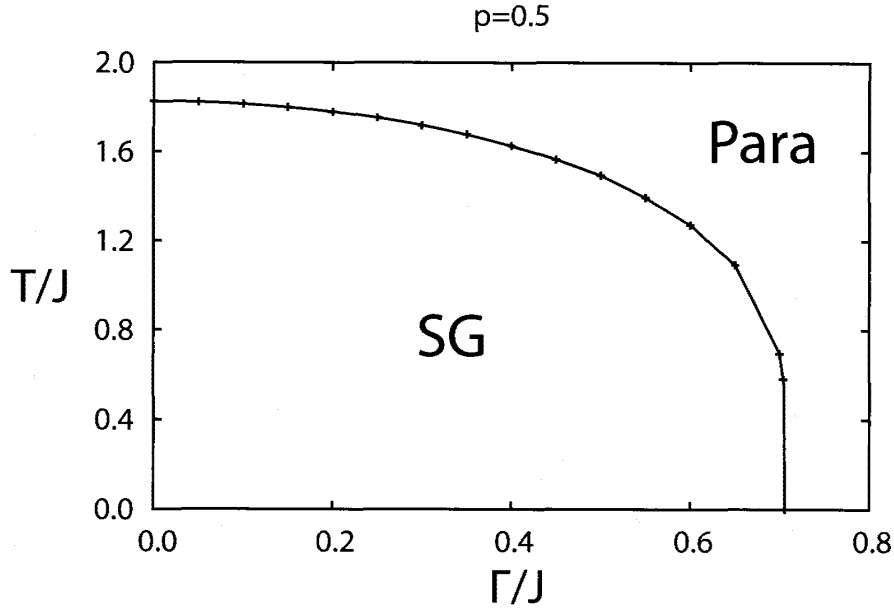


図 42: 3 次元 $\pm J$ 横磁場 Ising 模型 ($p = 0.5$) の相図。縦軸は温度 T ，横軸は横磁場 Γ を表す。

以上の解析から、3 次元横磁場 Ising スピングラス模型の相転移に対して、以下の結果を得た。まず、スピングラス相は横磁場を加えた場合も存在することが、図 40 より分かる。本論文で用いた切断近似は、秩序相内では横磁場を過大評価することに対応している。よって、本論文の解析は、量子系においてもスピングラス相が存在するという事実の強い証拠となる。また、図 41 から有限温度のスピングラス転移はあるものの、それが $p = 0.5$ まで到達しないという古典系では見られない相図が得られた。これは強い横磁場の下では、スピングラス相がランダムネスに対し脆弱になるものと解釈することが出来る。

6 $\pm J$ 横磁場 Blume-Emery-Griffiths 模型の実空間繰り込み群による解析

本章では、横磁場 BEG スピングラス模型の解析を実空間繰り込み群の方法を用いて行う。まず、6.1 節では一般的な相互作用を持つ横磁場 BEG 模型について、繰り込み群方程式を立てる。BEG 模型は平均場理論や実空間繰り込み群による解析から、一次転移を起こすことが知られている。一次転移は、スピンの揺らぎが大きくなる連続転移とは異なる相転移である。このことから、繰り込み群の理論の下で一次転移を判別する基準が新たに必要となる。そのため、6.2 節では一次転移に対するスケーリング則について解説する。6.3 節では、上記のスケーリング則を用いて、純粋系の横磁場 BEG 模型を解析した結果を述べる。6.4 節では、 $\pm J$ 横磁場 BEG 模型に対しての解析結果を述べる。スケーリング則の評価によって、ランダム系においても転移の次数を特定した相図を描くことが出来たので、その結果を報告する。

6.1 横磁場 BEG 模型の繰り込み群方程式

本節では、横磁場 BEG 模型の繰り込み群方程式を導出する。基本的な考え方は横磁場 Ising 模型の場合と同様である。まず、一般の相互作用に対して、横磁場 BEG 模型のハミルトニアンは以下になる。

$$-H = \sum_{\langle i,j \rangle} [J_{ij} S_i^z S_j^z + K_{ij} (S_i^z S_j^z)^2 - D_{ij} \{ (S_i^z)^2 + (S_j^z)^2 \} - D_{ij}^\dagger \{ (S_i^z)^2 - (S_j^z)^2 \} + \Gamma (S_i^x + S_j^x)] \quad (195)$$

ここで $\langle i, j \rangle$ は最近接のサイトを表す。また、 S_i^z, S_i^x はそれぞれサイト i における $S = 1$ のスピン演算子である。3.3 節で見たように J, D, Γ で表される項はそれぞれ交換相互作用、結晶場、横磁場である。また、BEG 模型ではスピンの 4 乗に比例するような相互作用 K が存在する。これは四重極相互作用と呼ばれる。平均場理論の下では、四重極相互作用をハミルトニアンに入れなくても正しく解析を行うことが出来る。しかし、MKRG を行うに当たっては、この相互作用を入れなければ相互作用の変数空間が閉じない。よって、四重極相互作用も考慮して、繰り込み群方程式を立てる。Blume-Capel 模型のように四重極相互作用を含まない模型の解析は、初期条件として $K = 0$ を代入することで実行可能である。

d 次元の超立方格子を考えると、スケール因子 b の下でボンド置換された相互作用は次のようになる。

$$\tilde{J}_{ij} = \sum_{n=1}^{b^d-1} J_{ijn}, \quad \tilde{K}_{ij} = \sum_{n=1}^{b^d-1} K_{ijn}, \quad \tilde{D}_{ij} = \sum_{n=1}^{b^d-1} D_{ijn}, \quad \tilde{D}_{ij}^\dagger = \sum_{n=1}^{b^d-1} D_{ijn}^\dagger \quad (196)$$

ここでも横磁場は繰り込まれないものと仮定した。5.2 節でも説明したように、ボンド置換を行った後では 1 次元の状態和の計算に帰着する。よって、横磁場 Ising 模型の場合と同様に、切断近似を用いて状態和の計算をすればよい。切断近似と静的近似の類似性を考慮すると、切断近似も結晶場 D が正の領域ではある程度妥当な近似であることが予想される。

ここからはスケール因子を $b = 2$ として解析を進める。繰り込み群方程式を簡潔に表すために、(185) 式に対応する $R(S_1^z, S_3^z)$ を次のように定義する。

$$R(S_1^z, S_3^z) = \sum_{i=0}^2 \exp(\lambda_i(S_1^z, S_3^z)) \quad (197)$$

ここで $\lambda_i(S_1^z, S_3^z)$ は行列の固有値である。

$$\begin{pmatrix} a+b+c & \frac{\Gamma}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{\Gamma}{\sqrt{2}} & c & \frac{\Gamma}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\Gamma}{\sqrt{2}} & -a+b+c \end{pmatrix} \quad (198)$$

ここで、 $a \equiv \tilde{J}_{12} S_1^z + \tilde{J}_{23} S_3^z$, $b \equiv \tilde{K}_{12} (S_1^z)^2 + \tilde{K}_{23} (S_3^z)^2$, $c \equiv -(\tilde{D}_{12} + \tilde{D}_{12}^\dagger) (S_1^z)^2 - (\tilde{D}_{23} - \tilde{D}_{23}^\dagger) (S_3^z)^2$ とした。上記の行列に対する固有方程式は、(113) 式を用いて解くことが出来る。

(197) 式を用いることで、各相互作用の繰り込み群方程式が以下のように得られる。

$$J' = \frac{1}{2} \log \left[\frac{R(1,1)}{R(1,-1)} \right], \quad (199)$$

$$K' = \frac{1}{2} \log [R(1,1)R(1,-1)] + \log \left[\frac{R(0,0)}{R(1,0)R(0,1)} \right], \quad (200)$$

$$D' = -\frac{1}{2} \log \left[\frac{R(1,0)R(0,1)}{(R(0,0))^2} \right], \quad (201)$$

$$D^{\dagger'} = \frac{1}{2} \log \left[\frac{R(0,1)}{R(1,0)} \right], \quad (202)$$

$$\Gamma' = \Gamma \quad (203)$$

温度 T ，四重極相互作用 K ，結晶場 D ，横磁場 Γ を決め，上記の繰り込み群方程式に従って繰り込み変換を施す。ここで注意することは，共役な結晶場 $D^{\dagger}$ はランダムネスによって発生するものであるから，初期条件としては 0 と取ることである。

Ising 模型の場合と同様に，十分繰り込んだ後の交換相互作用 J が 0 に近づくか ∞ に発散するかを調べることで，相境界を描くことが出来る。しかし，相転移の次数はこの時点で確定することは出来ない。そこで，次節では一次転移を繰り込み群を用いて決定する方法について説明する。

6.2 不連続固定点におけるスケーリング場

本節では，BEG 模型の一次転移を繰り込み群により決定する手法について説明する。この議論は Neienhuis と Nauenberg による，Ising 模型を例とした議論に基づいている [55]。より一般的な模型に対する議論は，Fisher と Berker によって行われている [56]。これらの詳細な解説は付録 E に載せる。ここでは，具体的に古典 BEG 模型における一次転移のスケーリング場を求める。

様々な模型の一次転移を特徴付ける固定点は，不連続固定点と呼ばれる。例として Ising 模型を考える。温度を $T < T_c$ に固定し，図 43(a) 中の (1) の経路に沿って磁場 h 変化させると， $h = 0$ において磁化が不連続に変化する。図 43(b) は経路 (1) 上における磁化を磁場の関数として描いたものである。

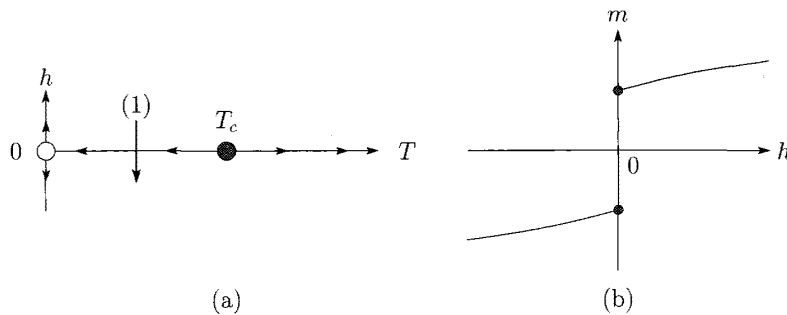


図 43: Ising 模型の不連続固定点。図 (a) において縦軸は磁場 h ，横軸は温度 T を表す。また各軸に沿った矢印は繰り込みの流れを表す。図 (b) は $T < T_c$ における磁化 m を磁場 h の関数として描いたものである。

初期条件を $T < T_c, h = 0$ とすると、繰り込み変換により繰り込みの流れは $T = 0, h = 0$ へと向かう。また、初期条件を $T < T_c, h = \epsilon > 0$ とすれば、繰り込み変換を繰り返すことで $T = 0, h = \epsilon' > 0$ へと流れる。この点で、系は正の磁化を持つ。一方で、初期条件を $T < T_c, h = -\epsilon$ とすれば、流れは $T = 0, h = -\epsilon' < 0$ へと向かい、負の磁化を持つことになる。 $T = 0$ において $\epsilon' \rightarrow 0$ の極限を取ると、 $T = h = 0$ で正負の磁化を持った状態が共存することが分かる。よって、 $T = 0, h = 0$ が一次転移を特徴付ける不連続固定点となる。

古典 BEG 模型の不連続固定点は、基底状態 $T = 0$ におけるエネルギーを評価することで知ることが出来る。ここでは純粋系を考えるため、(195) 式の $D^\dagger$ は 0 とする。強磁性相では基底状態において、全てのスピンの $S^z = 1$ (または $S^z = -1$) であるため、1 ボンドあたりのエネルギーは $E_F = J + K - 2D$ となる。一方で、 $T = 0$ において全てのスピンの $S^z = 0$ なる状態を取るとすると、1 ボンドあたりのエネルギーは $E_P = 0$ となる。

これより、 E_F と E_P の大小関係によって、系の状態が急激に変化することが分かる。つまり、図 44 の領域 1 では $D < (J + K)/2$ となるため、 $E_F < E_P$ から強磁性相となる。一方で、図 44 の領域 2 では $(J + K)/2 < D$ であるから、 $E_F > E_P$ より全てのスピンの $S_i^z = 0$ と常磁性相となることが分かる。これより、 $D = (J + K)/2$ なる点で強磁性相および常磁性相の共存状態が実現する。以上の議論から、古典 BEG 模型の不連続固定点が $T = 0, D = (J + K)/2$ となることが分かった。この固定点では磁化 $\langle S_i \rangle$ およびスピンの 2 乗の平均値 $\langle (S_i^z)^2 \rangle$ が不連続に変化する。

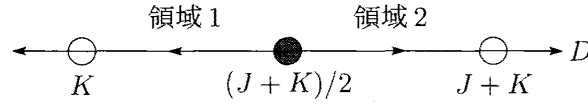


図 44: BEG 模型の不連続固定点。横軸は結晶場 D を表す。黒点是不連続固定点である。白点は繰り込み群方程式を立てる際に、最大となる固有値の値が変わる点であり固定点ではない。 $K \leq D \leq (J + K)/2$ を満たす領域を領域 1、 $(J + K)/2 \leq D \leq J + K$ を満たす領域を領域 2 とする。

次に、不連続固定点の周りでの繰り込み群方程式およびスケーリング場を導出する。基底状態における繰り込み群方程式は、(163) 式で表したように最大固有値を用いて構成される。ここでは $D \geq 0, J \geq K$ を仮定して繰り込み群方程式を示す。スケール因子は $b = 2$ 、次元は $d = 3$ とする。以降の議論は、一般のスケール因子および次元に対しても同様に行うことが出来る。また、ここでは純粋系を考えているので、 $D^\dagger$ は 0 であることに注意する。

すると、古典系では (198) 式の解が次のように得られる。

$$\lambda_0(S_1^z, S_3^z) = -4D\{(S_1^z)^2 + (S_3^z)^2\}, \quad (204)$$

$$\lambda_1(S_1^z, S_3^z) = 4J(S_1^z + S_3^z) + 4(K - D)\{(S_1^z)^2 + (S_3^z)^2\}, \quad (205)$$

$$\lambda_2(S_1^z, S_3^z) = -4J(S_1^z + S_3^z) + 4(K - D)\{(S_1^z)^2 + (S_3^z)^2\} \quad (206)$$

各領域において、これらの値の中で最大となるものを $R(S_1^z, S_3^z)$ とすればよい。

具体的に、図 44 の領域 1 における繰り込み群方程式を、 $R(S_1^z, S_3^z)$ を評価することで求める。

領域 1 では各 $R(S_1^z, S_3^z)$ が次のように得られる。

$$R(1, 1) = 8J + 8K - 16D, \quad (207)$$

$$R(1, -1) = -8D, \quad (208)$$

$$R(1, 0) = 4J + 4K - 12D \quad (209)$$

これより (199)～(201) 式を用いることで、次の繰り込み群方程式を得る。

$$J' = 4(J + K - D), \quad (210)$$

$$K' = D' = 4(-J - K + 3D) \quad (211)$$

これより、線形化された繰り込み変換行列 T は次のようになる。

$$T = \begin{pmatrix} 4 & 4 & -4 \\ -4 & -4 & 12 \\ -4 & -4 & 12 \end{pmatrix} \quad (212)$$

$b = 2$ に注意すると、この行列の固有値は $\Lambda = b^d, b^{d-1}, 0$ となる。 T を対角化する行列 P およびその逆行列 P^{-1} は以下のようになる。

$$P = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad P^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad (213)$$

最も有意なスケーリング指数は、変換行列の最大固有値から得られる。最大固有値 $\Lambda = b^d$ は P^{-1} の第 3 行で特徴付けられることから、最も有意なスケーリング場 g_1 が次のように求められる。

$$g_1 = -(J + K) + 2D \quad (214)$$

これより、スケーリング場 g_1 の繰り込み群方程式は $g_1' = b^d g_1$ となる。スケーリング指数が次元と一致するときは、付録 E の議論より一次転移が起こる。よって、確かに $D = (J + K)/2$ において一次転移が起こることが確かめられた。これより、相図を描く際は不連続固定点に十分近付いた後にスケーリング場 g_1 および g_1' を評価すればよい。つまり、 g_1 のスケーリング指数を y_1 としたときに、 $y_1 = d$ ならば一次転移、 $y_1 < d$ ならば二次転移と判定するのである。

同様の議論を領域 2 に適用する。この領域における、各 $R(S_1^z, S_3^z)$ が次のようになる。

$$R(1, 1) = 8J + 8K - 16D, \quad (215)$$

$$R(1, -1) = -8D, \quad (216)$$

$$R(1, 0) = -4D \quad (217)$$

これより、次の繰り込み群方程式が得られる。

$$J' = K' = 4(J + K - D), \quad (218)$$

$$D' = 4D \quad (219)$$

よって繰り込み変換行列 T は,

$$T = \begin{pmatrix} 4 & 4 & -4 \\ 4 & 4 & -4 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \quad (220)$$

となる。固有値は先程と同様に $\Lambda = b^d, b^{d-1}, 0$ となる。 T を対角化する行列 P およびその逆行列 P^{-1} は,

$$P = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad P^{-1} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -1 \end{pmatrix} \quad (221)$$

となるため、最大固有値に対応するスケーリング場 g_1 が以下のように得られる。

$$g_1 = \frac{J+K}{2} - D \quad (222)$$

領域 1 と 1/2 倍の違いがあるが、実際は g_1 の発展を評価するため、領域 1, 2 両者で $g_1 = (J+K) - 2D$ を評価すればよい。

6.3 純粋系における横磁場 BEG 模型の相転移

本節では、純粋系に対する横磁場 BEG 模型の解析を行う。純粋系に対する先行研究として、古典 BEG 模型を平均場近似の下で解析したものや、2 次元の MKRG を用いて解析したものがある [57][58]。これらの研究によると、相図中に一次転移と二次転移の両者が見られることが知られている。

また、横磁場を加えた系については、平均場近似を用いた解析のみが行われている [59]。平均場近似によると、横磁場を加えた場合も一次転移が存在することが明らかとなっている。しかし、有限次元の横磁場 BEG 模型で同様の性質が得られるかは非自明である。よって、5.1, 5.2 節で説明した手法を用いて、3 次元系の解析を行う。

以下の相図では、四重極相互作用の初期条件は $K = 0$ とした。これは Blume-Capel 模型を解析したことに相当しているが、臨界現象は Blume-Capel 模型でも変わらない。

まず、 $d = 3$ の古典系に対して図 45 の相図が得られる。図 45 より結晶場 D が小さい領域では二次転移が起こることが確認された。このとき繰り込み変換を繰り返すと、やがて $D \rightarrow -\infty$ となる。これは BEG 模型の二次転移が、 $S = 1/2$ の Ising 模型の臨界現象と同様であることを意味する。また、 D が大きい領域では一次転移を起こすことが分かった。一次転移の転移点直上における繰り込みの流れは不連続固定点へと向かい、前節の g_1 に対応するスケーリング指数が次元 $d = 3$ と一致する。転移が二次転移から一次転移へと変化する点は三重臨界点である。

次に、横磁場 BEG 模型について得られた結果を見る。図 46, 47 は、それぞれ $\Gamma = 2.0, 4.0$ に対する相図である。これらの相図から、横磁場 BEG 模型においても古典系と同様に、一次、二次転移の両者が存在することが分かる。図 46, 47 を描く際は、量子系に対しても古典系のスケーリング場 g_1 を用いることで一次転移の判別を行った。量子系においても古典系のスケーリング場で評価出来る理由は、以下のように理解することが出来る。不連続固定点では、スケーリング場 g_1 が繰り込む度に b^d 倍され非常に大きな値となる。一方で、横磁場 Γ は切断近似の下

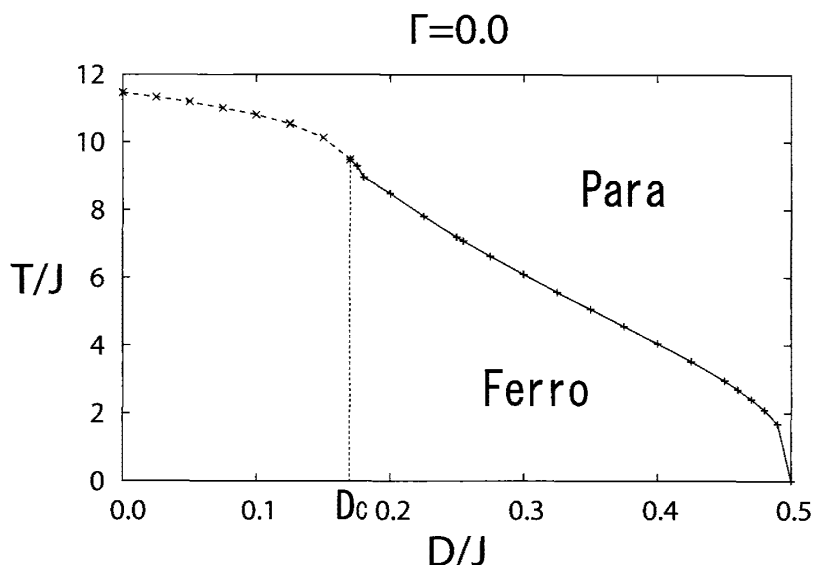


図 45: 3 次元古典 BEG 模型の相図。縦軸は温度 T ，横軸は結晶場 D を表す。実線は一次転移，破線は二次転移の相境界を表す。実線と破線の分岐が起きる点は三重臨界点となる。

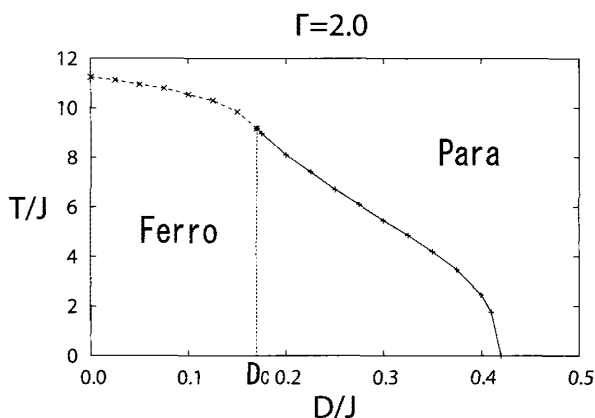


図 46: $\Gamma = 2.0$ における横磁場 BEG 模型の相図。

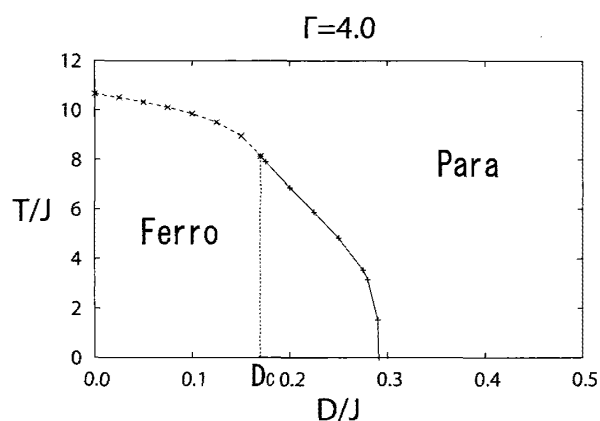


図 47: $\Gamma = 4.0$ における横磁場 BEG 模型の相図。

では不変であるから， g_1 と比べて無視しても差し支えない程度の大きさとなる。よって，古典 BEG 模型のスケーリング場が量子系でも有効となるのである。

また，これらの相図から切断近似を用いた MKRG の下では，三重臨界点における結晶場の強さ D_c/J が，横磁場に依存せずに $D_c/J \sim 0.17$ と一定となることが確認された。このことから， $T = 0$ において一次転移が消失する臨界横磁場の強さもまた， $D_c/J \sim 0.17$ で与えられると予想出来る。それを確かめるために $T = 0$ での相図を描くと，図 48 のようになる。

図 48 から，確かに基底状態においても $D_c/J \sim 0.17$ を境界として一次転移と二次転移が分岐することが分かる。また，相図の形状は異なるが，図 45 と図 48 を比較することで，量子揺らぎが温度揺らぎと類似した性質を持っていることがこれらの相図から推測出来る。

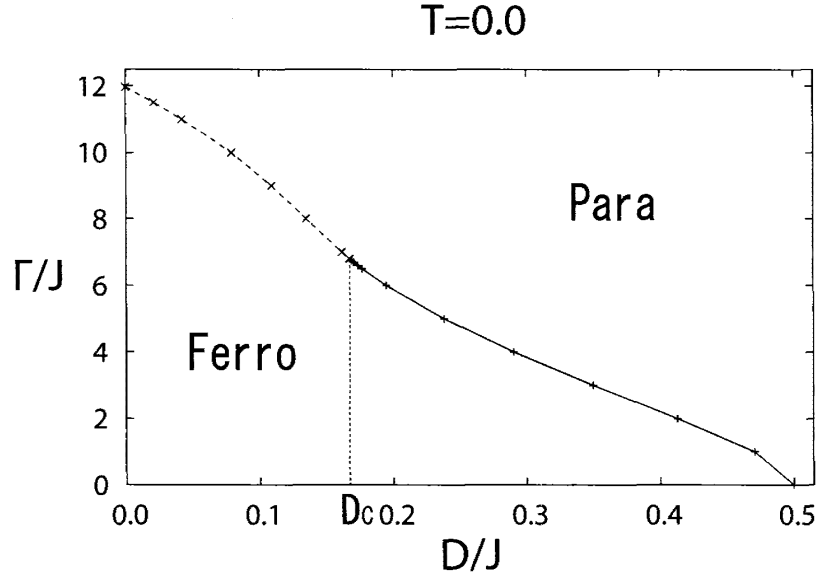


図 48: 3 次元横磁場 BEG 模型の基底状態 $T = 0$ における相図。縦軸は横磁場の強さ Γ/J ，横軸は結晶場 D/J を表す。実線は一次転移，破線は二次転移の境界を表す。実線と破線の分岐が起きる点は三重臨界点となる。

6.4 $\pm J$ 横磁場 BEG 模型の相図

本節では、交換相互作用に $\pm J$ ボンドランダムネスを加え、横磁場 BEG 模型を解析する。5.3 節で説明したように、BEG スピングラス模型に対しても相を判定するには、十分繰り込んだ後の相互作用の平均 $\langle J \rangle$ と分散 $\langle J^2 \rangle$ の振る舞いを見ればよい。また、一次転移を判定するためには、前節で説明したスケーリング場を評価すればよい。ただし、ここではランダム系を扱うために、 $g_1 = J + K - 2D$ の表式をランダム系のものへと拡張する必要がある。

ランダム系では、系の代表的な交換相互作用，四重極相互作用，結晶場は、それぞれ分布関数に対する平均を取ることで得ることが出来る。すなわち、交換相互作用の平均に加えて、四重極相互作用と結晶場の平均も次のように導入する。

$$\langle K \rangle_n = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N K_{i,n}, \quad \langle D \rangle_n = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N D_{i,n}, \quad \langle D^\dagger \rangle_n = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N D_{i,n}^\dagger \quad (223)$$

ランダム系においては共役な場 $D^\dagger$ が現れるが、 $D^\dagger$ を含んだハミルトニアンを用いて基底状態の繰り込み群方程式を立てると、各スケーリング場に $D^\dagger$ は現れないことが分かる。以上の考察から、ランダム系における一次転移を判別するスケーリング場 g_1 を次のように取ることが出来る。

$$g_1 = \langle J \rangle + \langle K \rangle - 2\langle D \rangle \quad (224)$$

このスケーリング場は純粋系と同様の理由から、横磁場を加えたときも不変であると考えられる。

上記の方法に従い、固定点およびスケーリング場を評価すると、古典 BEG スピングラス模型の相図が図 49 のように得られる。

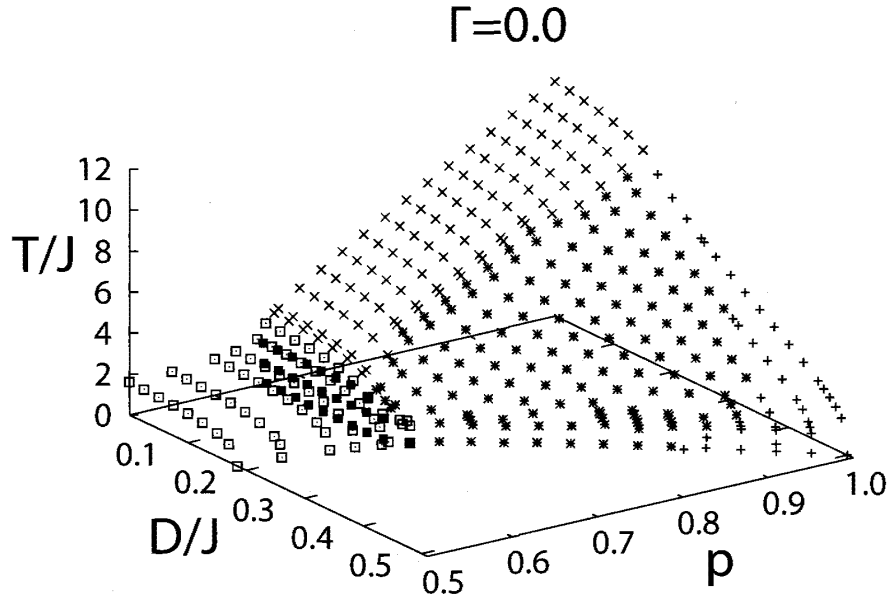


図 49: 3次元古典 BEG スピングラス模型の相図。× 点, + 点, * 点, ■ 点で囲まれた領域は強磁性相, ■ 点および □ 点で囲まれた領域はスピングラス相である。それ以外の領域は常磁性相である。

図 49 における各相転移について説明する。まず, + 点で表したのは常磁性相から強磁性相への一次相転移である。図 49 から, 古典 BEG スピングラス模型において一次転移が起きる領域は, ランダムネスが強くなるにつれて急激に狭まることが図 49 から分かる。 $T = 0$ において一次転移が存在する限界確率は, $p \sim 0.88$ であった。

次に, × 点および * 点で起きる相転移について述べる。図 49 の緑点では, 常磁性相から強磁性相への二次転移が起きる。その臨界現象は Ising 模型の二次転移と同様である。その理由は繰り込み変換によって, $D \rightarrow -\infty$ となるためである。図 49 の青点も緑点と同様に二次転移であるが, その臨界現象は Ising 模型のものとは異なる。* 点の場合は, 繰り込みの流れが不連続固定点の近傍まで近づく。しかし, スケーリング場 g_1 の臨界指数 y_1 が, $y_1 < d$ となる。よって, * 点の二次転移は, 一次転移がランダムネスの影響で二次転移に移行したものと考えることが出来る [60]。以降ではこれをランダムネスによる二次転移と呼ぶ。

□ 点および ■ 点は, それぞれ常磁性-スピングラス転移, 強磁性-スピングラス転移の相境界である。スピングラス相では, 繰り込み変換によって $D \rightarrow -\infty$ となる。これはスピングラス相においては $S^z = \pm 1$ なる状態が主要な役割を果たしていることを意味する。また, これは BEG 模型のスピングラス転移と Ising 模型のスピングラス転移が, 同様の臨界現象で記述されることを意味している。

図 50 はいくつかの占有確率 p に対して, 図 49 の相図を $T-D$ 平面で描いたものである。これより結晶場 D を強くすると, 純粋系 $p = 1.0$ では二次転移 (破線) から一次転移 (実線) へと転移が移り変わるのに対し, ランダムネスが加わることによって ($p = 0.95, 0.9$), 二次転移-ランダムネスによる二次転移 (点線) -一次転移のように転移が変化することが分かる。また, ランダムネスをより強くすることで一次転移は消失し ($p = 0.75$), やがてスピングラス転移 (一点鎖線) のみが観測される ($p = 0.6$)。また, D が大きい領域では, ランダムネスが加わるとリエントラント転移が起きる振る舞いが見られる。これは純粋系では見られない, ランダム系特有の性質である。以上の結果は, 先行研究による解析と同様のものである [61]。

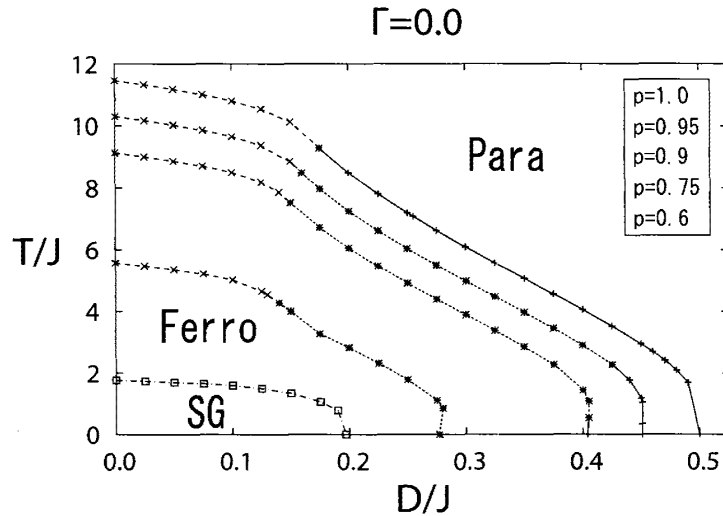


図 50: $T-D$ 平面における 3 次元古典 BEG スピングラス模型の相図。実線、破線、点線で囲まれた領域は強磁性相 (Ferro)、一点鎖線で囲まれた領域はスピングラス相 (SG) である。それ以外の領域は常磁性相 (Para) である。相境界は高温側から順に $p = 1.0, 0.95, 0.9, 0.75, 0.6$ のものである。

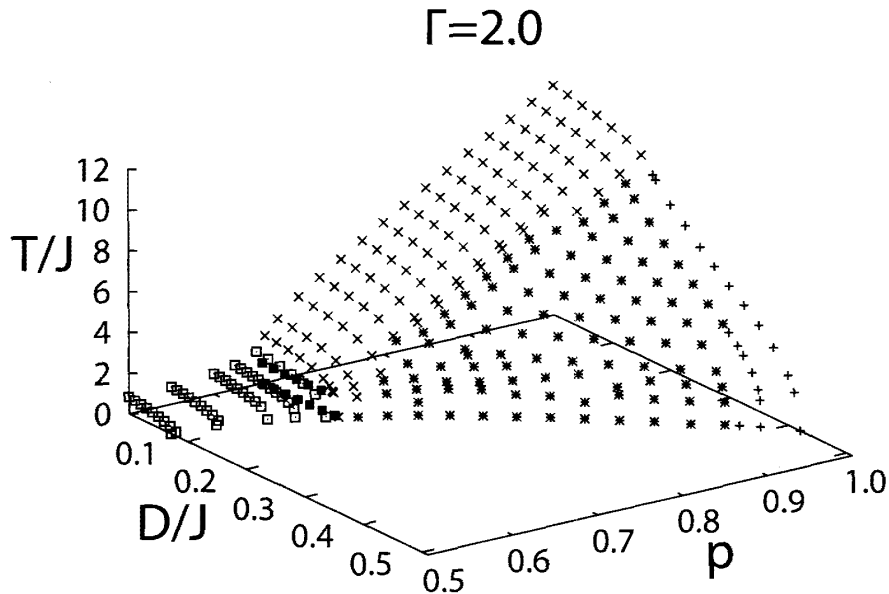


図 51: 3 次元横磁場 BEG スピングラス模型 ($\Gamma = 2$) の相図。 $\times$ 点, $+$ 点, $*$ 点, $\blacksquare$ 点で囲まれた領域は強磁性相, $\blacksquare$ 点および $\square$ 点で囲まれた領域はスピングラス相である。それ以外の領域は常磁性相である。

次に、横磁場 $\Gamma = 2.0$ を印加したときの相図を図 51 に示す。図 49 と図 51 を比較すると、量子揺らぎの影響で各秩序相の領域が狭まっているのが分かる。また、量子系では一次転移が、古典系以上にランダムネスの影響を強く受けることが図 51 から分かる。特に、 $T = 0$ においては $p \sim 0.96$ が一次転移の存在限界となり、古典系の存在限界 $p \sim 0.88$ よりも非常に小さなランダムネスで一次転移は消失する。また、二次転移およびスピングラス転移の性質は古典系と同様であった。

古典系と同様に、図 51 の相図を $T-D$ 平面で描いたものを図 52 に示す。

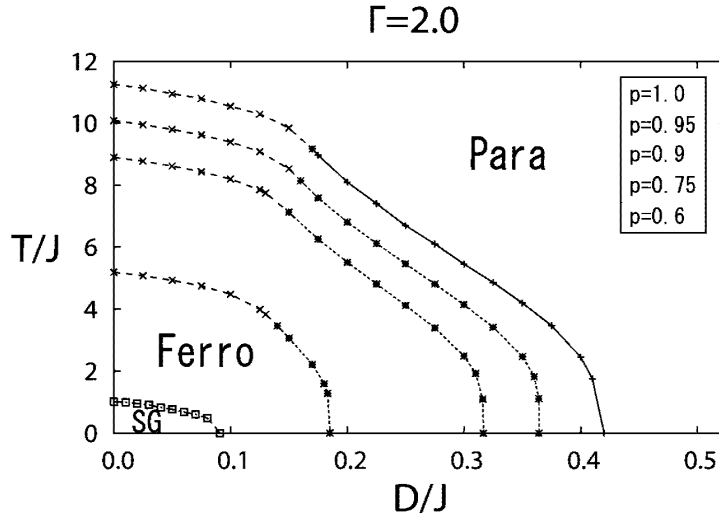


図 52: $T-D$ 平面における 3 次元横磁場 BEG スピングラス模型 ($\Gamma = 2$) の相図。実線、破線、点線で囲まれた領域は強磁性相 (Ferro)、一点鎖線で囲まれた領域はスピングラス相 (SG) である。それ以外の領域は常磁性相 (Para) である。相境界は高温側から順に $p = 1.0, 0.95, 0.9, 0.75, 0.6$ のものである。

以上の結果から、横磁場 BEG 模型の相転移に対して次の結論を得た。まず、本研究では純粋系における横磁場 BEG 模型の相図を描いた。相図から、横磁場を加えた場合でも古典系と同様に、一次転移と二次転移の両者が現れることが明らかとなった。また、三重臨界点における結晶場の強さ D_c は、横磁場の強さに依存せず一定であることが分かった。これは MKRG を用いたために生じたものと思われるが、他の解析法でもこのような普遍性があるかは興味深い点である。

また、 $\pm J$ ボンドランダムネスを加えた系に対して、全域的な相図を描くことに成功した。相図から、横磁場 Ising 模型の場合と同様に、横磁場 BEG 模型に対しても量子揺らぎは秩序破壊をもたらすことが分かった。また、相図全体の定性的な性質は、古典系のものと同様のものが得られた。横磁場 BEG 模型においても横磁場 Ising 模型の場合と同様に、スピングラス相が存在することが明らかとなった。従って、量子揺らぎが BEG 模型の臨界現象を急激に変えることはない結論付けられる。古典系と量子系の間での最も大きな違いは、一次転移に対するランダムネスの影響とすることが出来る。つまり、横磁場が印加された系では、一次転移がランダムネスに対して非常に不安定となることが、本研究から明らかとなった。

7 結論と今後の課題

本論文では量子 BEG スピングラス模型を、平均場理論および実空間繰り込み群の方法を用いて解析した。本章では、それらの解析から得られた結果をまとめ、今後の課題を述べる。

平均場理論による解析

本論文では $S = 1$ の平均場スピングラス模型である GS 模型に対して、二種類の量子揺らぎを導入した模型を考えた。一つ目は横磁場 Γ であり、 $S^z = \pm 1$ と $S^z = 0$ の間の遷移を引き起

こす量子揺らぎである。二つ目は横結晶場 Ω であり、このときは $S^z = 1$ と $S^z = -1$ の間の遷移が起きる。

上記の量子スピン系の解析を行う際には、分配関数の経路積分表示を用いた。 d 次元量子系は経路積分表示によって、 $(d+1)$ 次元古典系へと書き換えられる。この加えられた 1 次元は量子揺らぎに由来するものであり、秩序変数の虚時間依存性という形で現れる。その上で、まず静的近似を用いた解析を行った。静的近似は秩序変数の虚時間依存性を無視するという近似である。また、秩序変数の動的効果を部分的に取り込んだ解析を各模型に対して行った。

静的近似を用いた解析から、横磁場 GS 模型に対しては、横磁場 Γ が強くなると一次転移が消失するという結果が得られた。横磁場は二つの共存状態の間のトンネリングを引き起こす。よって、横磁場が強い場合は共存状態間に存在するポテンシャル障壁が、実効的に消失するものと考えることが出来る。一方で、横結晶場 Ω を強くした場合は、一次転移の消失は見られなかった。これは横結晶場の遷移は $S^z = 1$ と $S^z = -1$ の間で起こるため、共存状態の破壊にはつながらなかったものと理解出来る。

横磁場 SK 模型の場合は、静的近似は低温において正しい相転移の描像を与えない。つまり、低温では秩序変数の虚時間依存性が重要な意味を持つことになる。このような性質は量子 GS 模型でも同様に考えられるため、秩序変数の虚時間依存性を取り込んだ解析を行った。

横磁場 GS 模型に対しては、結晶場 D が 0 の領域のみで静的近似の改良を行った。その結果、横磁場 SK 模型の場合と同様に、低温における相境界が修正されることが明らかとなった。特に $D = 0$ の領域においては二次の相転移が発生し、このとき秩序変数の動的効果が重要な意味を持つことになる。ただし、横磁場 GS 模型 ($D = 0$) の場合は横磁場 SK 模型ほど大きく相境界が変化しないことが本論文の解析から明らかとなった。

また、横結晶場 GS 模型においては、任意の結晶場 D に対して静的近似の改良を行った。横結晶場 GS 模型は、 $D \rightarrow -\infty$ の極限で横磁場 SK 模型と等価になる。そこで、様々な結晶場の強さに対して、静的近似と改良されたものとの比較を行った。その結果、 $S^z = \pm 1$ が強く寄与する D が小さな領域では、秩序変数の虚時間依存性が重要であることが分かった。一方で、 $S^z = 0$ が強く寄与する D が正の領域では、静的近似と改良されたものとの間に大きな差はなかった。これは、 $S^z = 0$ なる状態が量子揺らぎの効果を弱めていると考えることが出来る。言い換えれば、 $S = 1/2$ の系は量子揺らぎが非常に大きな系だということも出来る。ここでの解析結果は、スピンの大きさが大きくなると、量子揺らぎの影響が弱くなるという考え方の一つの例となっている。

このように、横磁場による量子揺らぎの場合は静的近似が妥当でなく、横結晶場による量子揺らぎの場合は結晶場 D が大きい領域で静的近似が良い近似となっていることが確かめられた。

一般に、低温では秩序変数の動的効果が重要な役割を果たす。しかし、量子 GS 模型の場合はその範疇ではない場合もあり、非常に珍しい例だと言うことが出来るだろう。動的効果が重要であった SK 模型とそうではない GS 模型の違いを挙げるとすれば、最も顕著なものは一次転移の存在である。よって、一次転移と静的近似の妥当性の間には何かしらの関係があるものと予想される。

それらを解決するための課題として、次の二つのものが挙げられる。まず、一つ目は横磁場 GS 模型に対する静的近似の改良を、一般の結晶場 D について行うことである。本論文で調べた $D = 0$ の領域では二次の相転移のみが発生した。静的近似を用いた相図によると、横磁場 GS 模型の場合も結晶場 D が大きい領域で一次転移が発生することが分かっている。よって、任意の結晶場 D における静的近似の改良から、横磁場 GS 模型における静的近似と一次転移の

関係性が明らかになるだろう。特に横磁場は共存状態間の遷移を引き起こすため、そのような量子揺らぎと秩序変数の虚時間依存性がどのような関係にあるかは興味深い課題と言える。

二つ目の課題は、他の模型に対して一次転移と量子揺らぎの関係を調べることである。例として p 体 SK 模型がある。この模型は $p > 2$ の場合に一次転移が起きる模型である。また、 $S^z = \pm 1$ のみで一次転移が起きるという点でも、GS 模型とは異なる模型である。よって、横磁場 p 体 SK 模型における静的近似とその改良を議論することは重要な研究課題となる。特に、横磁場 p 体 SK 模型は $p \rightarrow \infty$ の極限で静的近似が厳密となることが知られているため [62][63]、任意の p に対してどのような振る舞いを見せるかは興味深い。

実空間繰り込み群による解析

本論文では、 $\pm J$ 横磁場 BEG 模型の相転移を、実空間繰り込み群の方法を用いて解析を行った。解析に当たっては、古典系でスピングラス相が存在する 3 次元の系を考えた。

量子スピングラス模型に対する実空間繰り込み群の方法として、本論文では MKRG を応用した手法を考えた。そこでは次に述べる二つの近似を導入することで、繰り込み群方程式を導いた。一つ目の近似は、横磁場をボンド置換しないというものである。二つ目はスピン演算子の非可換性を部分的に無視する切断近似である。上記の近似の下では、繰り込み群方程式を容易に得ることが出来る。よって、 $S = 1/2$ の系のみならず、 $S = 1$ の系への拡張も容易に行うことが出来る。これらの近似を用いて得られた繰り込み群方程式は、横磁場が繰り込まれないというものとなった。厳密な繰り込み群方程式の下では、秩序相にある系に対して繰り込み変換を繰り返すと、横磁場 Γ は 0 へ流れるものと考えられる。よって、横磁場が不変となる本論文の繰り込み群方程式は、秩序相内では横磁場を過大評価していると解釈出来る。

以上の繰り込み群方程式をランダム系に適用し、様々な横磁場の強さに対する相図を描いた。その解析から $\pm J$ 横磁場 Ising 模型の場合は、横磁場を加えた場合でもスピングラス相が存在することが分かった。本論文で用いた繰り込み群方程式は秩序相内で横磁場を過大評価しているため、上記の結果は 3 次元横磁場 Ising 模型においてスピングラス相が存在することの強い証拠である。

また、同様の解析を横磁場 BEG 模型に対しても行った。得られた相図から、横磁場 BEG 模型においてもスピングラス相が存在することが明らかとなった。さらにスケーリング指数を評価することで、一次転移が横磁場およびランダムネスに対してどのような影響を受けるかを数値的に調べた。その結果、純粋系の場合は、横磁場をある程度強くしても一次転移が残ることが分かった。一方で、そのような系に対しランダムネスを加えると、一次転移は急激に消失することが明らかとなった。よって、横磁場が加わった系では、一次転移がランダムネスに対して非常に不安定であると言えることが出来る。

ここで議論した横磁場 BEG 模型の解析は、有限次元における量子 BEG 模型の研究として初めてのものである。また、本研究は任意のランダムネスに対して相図を描いたという点で、今後の量子 BEG スピングラス模型の研究に対する一つの基準を与えることが期待される。

今後の課題として、繰り込み群方程式を立てる際に用いた二つの近似の改良が挙げられる。一般に、量子系に対してボンド置換のような操作は行うことが出来ない。本論文ではそのために一部の横磁場を無視するという近似を導入した。しかし、これも厳密な取り扱いではない。そのため、まずボンド置換に対応する適切な繰り込みの方法を考案する必要がある。次に、切断近似を改良する必要がある。切断近似を用いると、横磁場が繰り込まれないという繰り込み群方程式を得る。しかし、これは一般に正しい描像と言うことは出来ない。特に、MKRG を

用いる場合は 1 次元の状態和の計算が基本となるため、1 次元横磁場 Ising 模型を厳密に解析出来るような繰り込み群が必要となるだろう。

以上のように、本論文では一次転移に対する量子揺らぎとランダムネスの影響について議論を行ってきた。このような一次転移と量子揺らぎに関する研究は、連続転移に対するものと比較するとあまり積極的に議論されているとは言えない。しかし、一次転移のある系は量子揺らぎによるトンネル効果を最も直接的に見ることが出来る非常に興味深い系である。よって、このような系の研究を通して、量子相転移に対する明確な理解がさらに進むものと期待される。

A スピンコヒーレント状態

ここではスピンのコヒーレント状態について説明する [64]。コヒーレント状態とは、量子状態の中でも最も古典的な状態と表される。つまり、不確定性が最小になる状態ということである。また、各スピン演算子の期待値がブロッホ球面上の極座標で表されることから、古典的な状態を想像することが出来る。

具体的にコヒーレント状態に対する、各スピン演算子の期待値、不確定性関係、および完全性について議論していく。一般的に大きさ S のスピンを考える。付録 A ではスピンの成分を表す添え字を下付きで表示する。

各スピン演算子の間には、次の交換関係が成り立つ。

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk}S_k \quad (225)$$

ここで、スピンの添え字 i, j, k は x, y, z のいずれかを取る。また ϵ_{ijk} は完全反対称テンソルである。

昇降演算子を次のように定義する。

$$S_+ = S_x + iS_y, \quad S_- = S_x - iS_y \quad (226)$$

スピンの状態を $S_z|M\rangle = M|M\rangle$ なる状態 $|M\rangle$ で指定する。状態 $|-S\rangle$ は次の固有方程式を満たす。

$$S_-|-S\rangle = 0 \quad (227)$$

また、状態 $|M\rangle$ は S_+ を状態 $|-S\rangle$ に $(S+M)$ 回作用させることで得られるため、次の式が得られる。

$$|M\rangle = \frac{1}{(M+S)!} \left(\frac{2S}{M+S} \right)^{-\frac{1}{2}} S_+^{M+S} |-S\rangle \quad (228)$$

この状態を Dicke 状態と呼ぶ。次に、ベクトル $\mathbf{n} = (\sin \phi, -\cos \phi, 0)$ 回りに θ だけスピンを回転させる演算子を次のように導入する。

$$R_{\theta, \phi} = e^{-i\theta S_n} = e^{-i\theta(S_x \sin \phi - S_y \cos \phi)} = e^{\zeta S_+ - \zeta^* S_-}, \quad (229)$$

$$S_n = S_x \sin \phi - S_y \cos \phi, \quad (230)$$

$$\zeta = \frac{1}{2}\theta e^{-i\phi} \quad (231)$$

また、スピン演算子 S_n に直交する演算子 S_k を次のように定義しておくとも便利である。

$$S_k = S_x \cos \phi + S_y \sin \phi \quad (232)$$

これらの関係は図 53 により説明される。つまり、 S_n は S_x を z 軸回りに $-(\pi/2 - \phi)$, S_n は S_x を z 軸回りに ϕ だけ回転させたものである。

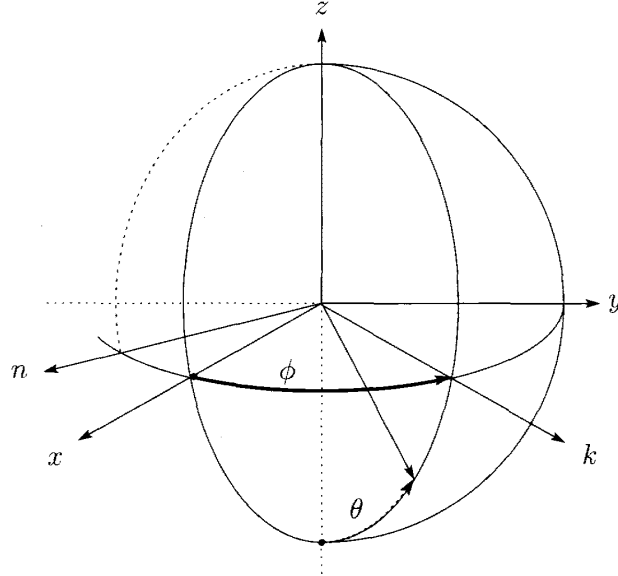


図 53: スピン空間における回転演算子 $R_{\theta,\phi}$ の定義。 ϕ は z 軸回りの回転, θ は n 軸回りの回転を表す。

上記の演算子を用いて、コヒーレント状態を詳しく見ていく。まず、コヒーレント状態は基底状態に回転演算子 (229) 式を作用させることで得ることが出来る。

$$|\theta, \phi\rangle = R_{\theta,\phi} | -S \rangle \quad (233)$$

この表現は (48) 式と等価である。具体的には (229) 式における θ を $\pi - \theta$ で置き換えることで、位相因子を除いて (48) 式と同様の表式を得る。ここで、あるコヒーレント状態 $|\theta, \phi\rangle$ に対する各スピン演算子の期待値 $\langle \theta, \phi | S_i | \theta, \phi \rangle$ を考える。

$$\langle \theta, \phi | S_i | \theta, \phi \rangle = \langle -S | R_{\theta,\phi}^{-1} S_i R_{\theta,\phi} | -S \rangle \quad (234)$$

図 53 を参照すると、 S_i は回転演算子 $R_{\theta,\phi}$ により次のように変換されることが分かる。

$$R_{\theta,\phi}^{-1} S_x R_{\theta,\phi} = S_n \sin \phi + S_k \cos \phi \cos \theta + S_z \cos \phi \sin \theta \quad (235)$$

$$R_{\theta,\phi}^{-1} S_y R_{\theta,\phi} = -S_n \cos \phi + S_k \sin \phi \cos \theta + S_z \sin \phi \sin \theta \quad (236)$$

$$R_{\theta,\phi}^{-1} S_z R_{\theta,\phi} = -S_k \sin \theta + S_z \cos \theta \quad (237)$$

状態 $| -S \rangle$ に対する期待値が残るのは、 S_z に比例する項のみである。よって (234) 式は、

$$\begin{aligned} \langle \theta, \phi | S | \theta, \phi \rangle &= \langle \theta, \phi | (S_x, S_y, S_z) | \theta, \phi \rangle \\ &= S(\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) \end{aligned} \quad (238)$$

となる。このことから、コヒーレント状態に対する各スピン演算子の期待値は、3次元の極座標表示に対応することが分かる。これはコヒーレント状態が最も古典的なスピン状態であると言われる理由の一つである。

さらに、コヒーレント状態は不確定性が最小であることを示す。一般に $[S_x, S_y] = iS_z$ なる交換関係があるとき、次の不確定性原理が成り立つ。

$$\langle S_x^2 \rangle \langle S_y^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle S_z \rangle^2 \quad (239)$$

ここで $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$ を用いた。また、回転演算子 $R_{\theta, \phi}$ で変換したスピン演算子 $(S_\xi, S_\eta, S_\zeta) = R_{\theta, \phi}(S_x, S_y, S_z)R_{\theta, \phi}^{-1}$ に対しても同様の関係が成り立つ。

$$\langle S_\xi^2 \rangle \langle S_\eta^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \langle S_\zeta \rangle^2 \quad (240)$$

このとき等号はコヒーレント状態に対して成り立つことを示す。

$$\langle \theta, \phi | S_\xi^2 | \theta, \phi \rangle = \langle -S | S_x^2 | -S \rangle = \frac{1}{4} \langle -S | S_- S_+ | -S \rangle = \frac{S}{2} \quad (241)$$

$$\langle \theta, \phi | S_\eta^2 | \theta, \phi \rangle = \langle -S | S_y^2 | -S \rangle = \frac{1}{4} \langle -S | S_- S_+ | -S \rangle = \frac{S}{2} \quad (242)$$

$$\langle \theta, \phi | S_\zeta^2 | \theta, \phi \rangle = \langle -S | S_z^2 | -S \rangle = S^2 \quad (243)$$

以上の計算から、(240) 式の等号が成り立っていることが分かる。

最後にコヒーレント状態の完全性を示す。そのために、指数の分解公式を用いる (付録 B)。

$$e^{w_+ S_+ + w_- S_- + w_z S_z} = e^{x_+ S_+} e^{(\ln(x_z)) S_z} e^{x_- S_-} \quad (244)$$

$$= e^{y_- S_-} e^{(\ln(y_z)) S_z} e^{y_+ S_+} \quad (245)$$

(229) 式の最右辺をこの公式を用いて分解すると、次のようになる。

$$R_{\theta, \phi} = e^{\zeta S_+ - \zeta^* S_-} = e^{\tau S_+} e^{\ln(1+|\tau|^2) S_z} e^{-\tau^* S_-} \quad (246)$$

$$= e^{-\tau^* S_-} e^{-\ln(1+|\tau|^2) S_z} e^{\tau S_+} \quad (247)$$

ここで、

$$\tau = e^{-i\phi} \tan\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (248)$$

である。(246) 式を用いてコヒーレント状態 (233) 式を書き換える。

$$\begin{aligned} |\theta, \phi\rangle &= R_{\theta, \phi} | -S \rangle = e^{\tau S_+} e^{\ln(1+|\tau|^2) S_z} e^{-\tau^* S_-} | -S \rangle \\ &= e^{\tau S_+} e^{\ln(1+|\tau|^2) S_z} | -S \rangle = e^{\tau S_+} e^{-\ln(1+|\tau|^2) S} | -S \rangle \\ &= \left(\frac{1}{1+|\tau|^2} \right)^S e^{\tau S_+} | -S \rangle \end{aligned} \quad (249)$$

任意の状態は Dicke 状態で展開することが出来る。ここではコヒーレント状態を Dicke 状態で

展開することを考える。その展開係数は行列要素 $\langle M|\theta, \phi \rangle$ を計算することで得られる。

$$\langle M|\theta, \phi \rangle = \frac{1}{(1+|\tau|^2)^S} \langle M| \sum_{m=0}^{2S} \frac{\tau^m}{m!} S_+^{m'} | -S \rangle \quad (250)$$

$$= \frac{1}{(1+|\tau|^2)^S} \frac{\tau^{M+S}}{(M+S)!} \langle M| S_+^{M+S} | -S \rangle \quad (251)$$

$$= \frac{\tau^{M+S}}{(1+|\tau|^2)^S} \binom{2S}{M+S}^{\frac{1}{2}} \quad (252)$$

$$= \binom{2S}{M+S}^{\frac{1}{2}} \sin^{S+M} \left(\frac{\theta}{2} \right) \cos^{S-M} \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{-i(S+M)\phi} \quad (253)$$

よって,

$$|\theta, \phi \rangle = \sum_{M=-S}^S \binom{2S}{M+S}^{\frac{1}{2}} \sin^{S+M} \left(\frac{\theta}{2} \right) \cos^{S-M} \left(\frac{\theta}{2} \right) e^{-i(S+M)\phi} |M\rangle \quad (254)$$

となる。(254) 式を用いて完全性を示す。

$$\begin{aligned} & \int dS |\theta, \phi \rangle \langle \theta, \phi| \\ &= \frac{2S+1}{4\pi} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \sum_{m, m'} \binom{2S}{m+S}^{\frac{1}{2}} \binom{2S}{m'+S}^{\frac{1}{2}} e^{i(m'-m)\phi} \\ & \quad \times \left(\cos \frac{\theta}{2} \right)^{2J-m-m'} \left(\sin \frac{\theta}{2} \right)^{2J+m+m'} |m\rangle \langle m'| \\ &= \frac{2S+1}{2} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \sum_m \binom{2S}{m+S} \left(\cos \frac{\theta}{2} \right)^{2J-2m} \left(\sin \frac{\theta}{2} \right)^{2J+2m} |m\rangle \langle m| \end{aligned} \quad (255)$$

この積分は $\sin^2(\theta/2) = t$ と置き換えることで、ベータ関数へと帰着する。その値はちょうど定数部分を打ち消すため、(255) 式は

$$\int dS |\theta, \phi \rangle \langle \theta, \phi| = \sum_m |m\rangle \langle m| = \mathbf{1} \quad (256)$$

となり、コヒーレント状態の完全性が証明される。

B 指数分解公式

ここでは、(245) 式で用いた指数の分解公式 (disentangling formula) を説明する。(245) の分解公式は一般のスピン大きさに対して成り立つ。しかし、 $S > 1/2$ のスピンは $S = 1/2$ のスピンの合成で得られることを考えれば、証明は $S = 1/2$ の場合で十分である。

$S = 1/2$ のスピン演算子は 2×2 行列で表され、以下のようになる。

$$S_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (257)$$

これらを用いて $\exp(w_+S_+ + w_-S_- + w_zS_z)$ を展開すると、次の表現を得る。

$$e^{w_+S_+ + w_-S_- + w_zS_z} = \begin{pmatrix} \cosh K + \frac{w_z}{2K} \sinh K & \frac{w_+}{K} \sinh K \\ \frac{w_-}{K} \sinh K & \cosh K - \frac{w_z}{2K} \sinh K \end{pmatrix}, \quad (259)$$

$$K \equiv \sqrt{w_+w_- + \frac{w_z^2}{4}} \quad (260)$$

同様に、 $\exp(x_+S_+) \exp((\ln x_z)S_z) \exp(x_-S_-)$, $\exp(y_-S_-) \exp((\ln y_z)S_z) \exp(y_+S_+)$ も展開すると次の行列表現を得る。

$$e^{x_+S_+} e^{(\ln x_z)S_z} e^{x_-S_-} = \begin{pmatrix} \sqrt{x_z} + \frac{x_+x_-}{\sqrt{x_z}} & \frac{x_+}{\sqrt{x_z}} \\ \frac{x_-}{\sqrt{x_z}} & \frac{1}{\sqrt{x_z}} \end{pmatrix}, \quad (261)$$

$$e^{y_-S_-} e^{(\ln y_z)S_z} e^{y_+S_+} = \begin{pmatrix} \sqrt{y_z} & y_+ \sqrt{y_z} \\ y_- \sqrt{y_z} & \frac{1}{\sqrt{y_z}} + y_+ y_- \sqrt{y_z} \end{pmatrix} \quad (262)$$

行列の各成分を比較することで、分解公式 (245) 式を得る。

C 虚時間方向の相関関数

ここでは3章で用いた相関関数の計算を示す。

C.1 横磁場 SK 模型

横磁場 SK 模型に対する相関関数を計算する。具体的には次の積分を実行する。

$$\int \left(\prod_{a'} dS_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') \exp \left[\int_{\tau} \sum_{a'} \{ i\Phi_{a'}(\tau) + \Gamma n_{a'}^x(\tau) + h_{a'} n_{a'}^z(\tau) \} \right] (a \neq b), \quad (263)$$

$$\int \left(\prod_{a'} dS_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') \exp \left[\int_{\tau} \sum_{a'} \{ i\Phi_{a'}(\tau) + \Gamma n_{a'}^x(\tau) + h_{a'} n_{a'}^z(\tau) \} \right] \quad (264)$$

まず (263) 式から計算する。(263) 式は異なるレプリカ間 ($a \neq b$) の相関関数と見なせる。この場合は平均を独立に取ることが出来るため、積分はレプリカ毎に分離することが出来る。

$$\begin{aligned} & \int \left(\prod_{a'} dS_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') \exp \left[\int_{\tau} \sum_{a'} \{ i\Phi_{a'}(\tau) + \Gamma n_{a'}^x(\tau) + h_{a'} n_{a'}^z(\tau) \} \right] \\ &= \prod_{a' \neq a \neq b} \left(\int dS_{a'} Z_{a'} \right) \left(\int dS_a n_a^z(\tau) Z_a \right) \left(\int dS_b n_b^z(\tau') Z_b \right) \end{aligned} \quad (265)$$

ここで、 Z_a は (88) 式で定義したものを再び用いた。(265) の1つ目の項は、経路積分表示を行列表示に書き換えることで容易に計算出来る。

$$\begin{aligned} \int dS_{a'} Z_{a'} &= \text{Tr}_{\sigma_{a'}} \exp [\beta(\Gamma \sigma_{a'}^x + h_{a'} \sigma_{a'}^z)] \\ &= \text{Tr}_{\sigma_{a'}} \exp [\beta h_{a'}' (\sin \phi_{a'} \sigma_{a'}^x + \cos \phi_{a'} \sigma_{a'}^z)] \\ &\equiv \text{Tr}_{\sigma_{a'}} \exp (\beta h_{a'}' \sigma_{a'}^{z'}) \end{aligned} \quad (266)$$

ここで h'_a, ϕ_a は以下のように定義した。

$$h'_a = \sqrt{\Gamma^2 + h_a^2}, \quad (267)$$

$$\cos \phi_a = \frac{h_a}{h'_a} \quad \sin \phi_a = \frac{\Gamma}{h'_a} \quad (268)$$

$(\sigma_a^{z'})^2 = \mathbf{1}$ より, (266) 式は次のように計算出来る。

$$\begin{aligned} & \text{Tr}_{\sigma_{a'}} \exp \left(\beta h'_a \sigma_{a'}^{z'} \right) \\ &= \text{Tr}_{\sigma_{a'}} \left(\cosh \beta h'_a + \sigma_{a'}^{z'} \sinh \beta h'_a \right) \\ &= 2 \cosh \beta h'_a \end{aligned} \quad (269)$$

次に (265) 式の 2 つ目の項を計算する。先程と同様に経路積分表示から演算子形式に書き換えるが, このときは時刻 τ において演算子が作用する。よって時間順序に注意すると次の演算子表示を得る。

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{S}_a n_a^z(\tau) Z_a &= \text{Tr}_{\sigma_a} \exp \left[(\beta - \tau) h'_a \sigma_a^{z'} \right] \sigma_a^z \exp \left(\tau h'_a \sigma_a^{z'} \right) \\ &= \text{Tr}_{\sigma_a} \exp \left(\beta h'_a \sigma_a^{z'} \right) \sigma_a^z \\ &= \text{Tr}_{\sigma_a} \left\{ \sigma_a^z \cosh \beta h'_a + (\cos \phi_a + \sigma_a^x \sigma_a^z \sin \phi_a) \sinh \beta h'_a \right\} \\ &= 2 \cos \phi_a \sinh \beta h'_a \end{aligned} \quad (270)$$

これより,

$$\begin{aligned} & \int \left(\prod_{a'} d\mathbf{S}_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') \exp \left[\int_{\tau} \sum_{a'} \{ i\Phi_{a'}(\tau) + \Gamma n_{a'}^x(\tau) + h_{a'} n_{a'}^z(\tau) \} \right] \\ &= \prod_{a' \neq a \neq b} (2 \cosh \beta h'_{a'}) (2 \cos \phi_a \sinh \beta h'_a) (2 \cos \phi_b \sinh \beta h'_b) \end{aligned} \quad (271)$$

となる。以上の計算から, 異なるレプリカ間の相関関数は虚時間 τ に依存しないことが分かる。次に, (264) 式を計算する。先程と同様にレプリカ毎の積分に分離する。

$$\begin{aligned} & \int \left(\prod_{a'} d\mathbf{S}_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') \exp \left[\int_{\tau} \sum_{a'} \{ i\Phi_{a'}(\tau) + \Gamma n_{a'}^x(\tau) + h_{a'} n_{a'}^z(\tau) \} \right] \\ &= \prod_{a' \neq a} \left(\int d\mathbf{S}_{a'} Z_{a'} \right) \left(\int d\mathbf{S}_a n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') Z_a \right) \\ &= \prod_{a' \neq a} (2 \cosh \beta h'_{a'}) \left(\int d\mathbf{S}_a n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') Z_a \right) \end{aligned} \quad (272)$$

後半の積分は、時間順序を考慮すると次のように演算子形式で書くことが出来、展開することでトレースの計算を行うことが出来る。

$$\begin{aligned}
& \int d\mathbf{S}_a n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') Z_a \\
&= \text{Tr}_{\sigma_a} \exp \left[(\beta - \tau) \sigma_a^{z'} \right] \sigma_a^z \exp \left[(\tau - \tau') \sigma_a^{z'} \right] \sigma_a^z \exp \left(\tau' \sigma_a^{z'} \right) \\
&= \text{Tr}_{\sigma_a} \exp \left[(\beta - \tau + \tau') h'_a \sigma_a^{z'} \right] \sigma_a^z \exp \left[(\tau - \tau') h'_a \sigma_a^{z'} \right] \sigma_a^z \\
&= \text{Tr}_{\sigma_a} \left[\sigma_a^z \cosh \{ (\beta - \tau + \tau') h'_a \} + (\cos \phi_a - i \sigma_a^y \sin \phi_a) \sinh \{ (\beta - \tau + \tau') h'_a \} \right] \\
&\quad \left[\sigma_a^z \cosh \{ (\tau - \tau') h'_a \} + (\cos \phi_a - i \sigma_a^y \sin \phi_a) \sinh \{ (\tau - \tau') h'_a \} \right] \\
&= \text{Tr}_{\sigma_a} \left[\cosh \{ (\beta - \tau + \tau') h'_a \} \cosh \{ (\tau - \tau') h'_a \} + \sigma_a^z \cos \phi_a \sinh \beta h'_a \right. \\
&\quad \left. + \sigma_a^x \sin \phi_a \sinh \{ (\beta - 2\tau + 2\tau') h'_a \} + \cos 2\phi_a \sinh \{ (\beta - \tau + \tau') h'_a \} \sinh \{ (\tau - \tau') h'_a \} \right] \\
&= 2 \cos^2 \phi_a \cosh \beta h'_a + 2 \sin^2 \phi_a \cosh \{ (\beta - 2\tau + 2\tau') \} \quad (273)
\end{aligned}$$

これより、

$$\begin{aligned}
& \int \left(\prod_{a'} d\mathbf{S}_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') \exp \left[\int_{\tau} \sum_{a'} \{ i\Phi_{a'}(\tau) + \Gamma n_{a'}^x(\tau) + h_{a'} n_{a'}^z(\tau) \} \right] \\
&= \prod_{a' \neq a} (2 \cosh \beta h'_{a'}) [2 \cos^2 \phi_a \cosh \beta h'_a + 2 \sin^2 \phi_a \cosh \{ (\beta - 2\tau + 2\tau') \}] \quad (274)
\end{aligned}$$

となる。これより、同じレプリカ間の虚時間相関関数は、その差 $(\tau - \tau')$ の関数となることが分かる。以上の議論から、横磁場 SK 模型の虚時間方向に対する相関関数が求まる。

C.2 横磁場 GS 模型

横磁場 GS 模型の $D = 0$ の領域に限って相関関数を計算する。具体的に次の量を計算する。

$$\int \left(\prod_{a'} d\mathbf{S}_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') \exp \left[\int_{\tau} \sum_{a'} \{ i\Phi_{a'}(\tau) + \Gamma n_{a'}^x(\tau) + h_{a'} n_{a'}^z(\tau) \} \right] \quad (a \neq b), \quad (275)$$

$$\int \left(\prod_{a'} d\mathbf{S}_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') \exp \left[\int_{\tau} \sum_{a'} \{ i\Phi_{a'}(\tau) + \Gamma n_{a'}^x(\tau) + h_{a'} n_{a'}^z(\tau) \} \right] \quad (276)$$

SK 模型と同様に、(275) 式は次のように書き換えることが出来る。

$$\begin{aligned}
& \int \left(\prod_{a'} d\mathbf{S}_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') \exp \left[\int_{\tau} \sum_{a'} \{ i\Phi_{a'}(\tau) + \Gamma n_{a'}^x(\tau) + h_{a'} n_{a'}^z(\tau) \} \right] \\
&= \prod_{a' \neq a \neq b} \left(\int d\mathbf{S}_{a'} Z_{a'} \right) \left(\int d\mathbf{S}_a n_a^z(\tau) Z_a \right) \left(\int d\mathbf{S}_b n_b^z(\tau') Z_b \right) \quad (277)
\end{aligned}$$

上式の第 1 項目を演算子表示にする。

$$\begin{aligned}
\int d\mathbf{S}_{a'} Z_{a'} &= \text{Tr}_{S_{a'}} \exp [\beta (\Gamma S_{a'}^x + h_{a'} S_{a'}^z)] \\
&= \text{Tr}_{S_{a'}} \exp [\beta h'_{a'} (\sin \phi_{a'} S_{a'}^x + \cos \phi_{a'} S_{a'}^z)] \\
&\equiv \text{Tr}_{S_{a'}} \exp (\beta h'_{a'} \hat{S}_{a'}) \quad (278)
\end{aligned}$$

h'_a, ϕ_a は横磁場 SK 模型の際と同様に定義した。 $S = 1$ のとき, (278) 式の指数は次のように展開することが出来る。

$$\exp(\beta h'_a \hat{S}_a) = 1 + \sinh(\beta h'_a) \hat{S}_a + \{\cosh(\beta h'_a) - 1\} \hat{S}_a^2 \quad (279)$$

これより,

$$\text{Tr}_{S_a} \exp(\beta h'_a \hat{S}_a) = 1 + 2 \cosh \beta h'_a \quad (280)$$

となる。(277) 式の第 2 項目は, 次のように計算することが出来る。

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{S}_a n_a^z(\tau) Z_a &= \text{Tr}_{S_a} \exp[(\beta - \tau) h'_a \hat{S}_a] S_a^z \exp(\tau h'_a \hat{S}_a) \\ &= \text{Tr}_{S_a} \exp(\beta h'_a \hat{S}_a) S_a^z \\ &= 2 \cos \phi_a \sinh \beta h'_a \end{aligned} \quad (281)$$

よって, (280), (281) 式から (277) 式が次のように求まる。

$$\begin{aligned} &\int \left(\prod_{a'} d\mathbf{S}_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') \exp \left[\int_{\tau} \sum_{a'} \{i\Phi_{a'}(\tau) + \Gamma n_{a'}^x(\tau) + h_{a'} n_{a'}^z(\tau)\} \right] \\ &= \prod_{a' \neq a \neq b} (1 + 2 \cosh \beta h'_{a'}) (2 \cos \phi_a \sinh \beta h'_a) (2 \cos \phi_b \sinh \beta h'_b) \end{aligned} \quad (282)$$

次に (278) 式を計算する。まず, レプリカ数毎に積分を分離する。

$$\begin{aligned} &\int \left(\prod_{a'} d\mathbf{S}_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') \exp \left[\int_{\tau} \sum_{a'} \{i\Phi_{a'}(\tau) + \Gamma n_{a'}^x(\tau) + h_{a'} n_{a'}^z(\tau)\} \right] \\ &= \prod_{a' \neq a} \left(\int d\mathbf{S}_{a'} Z_{a'} \right) \left(\int d\mathbf{S}_a n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') Z_a \right) \\ &= \prod_{a' \neq a} (1 + 2 \cosh \beta h'_{a'}) \left(\int d\mathbf{S}_a n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') Z_a \right) \end{aligned} \quad (283)$$

上式第 2 項目は, 時間順序に注意して演算子表示に書き換えることで計算出来る。

$$\begin{aligned} &\int d\mathbf{S}_a n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') Z_a \\ &= \text{Tr}_{S_a} \exp[(\beta - \tau) \hat{S}_a] S_a^z \exp[(\tau - \tau') \hat{S}_a] S_a^z \exp(\tau' \hat{S}_a) \\ &= \text{Tr}_{S_a} \exp[(\beta - \tau + \tau') h'_a \hat{S}_a] S_a^z \exp[(\tau - \tau') h'_a \hat{S}_a] S_a^z \\ &= 2 \cos^2 \phi_a \cosh \beta h'_a + \sin^2 \phi_a [\cosh\{(\beta - \tau + \tau') h'_a\} + \cosh\{(\tau - \tau') h'_a\}] \end{aligned} \quad (284)$$

よって, 横磁場 GS 模型 ($D = 0$) の場合も相関関数は虚時間の差 $(\tau - \tau')$ に依存することが分かる。

C.3 横結晶場 GS 模型

横結晶場 GS 模型の相関関数を計算する。そのため次の積分を考える。

$$\int \left(\prod_{a'} d\mathbf{S}_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') \exp \left[\int_{\tau} \sum_{a'} \{ i\Phi_{a'}(\tau) - D(n_{a'}^z(\tau))^2 + \Omega (n_{a'}^x(\tau))^2 + h_{a'} n_{a'}^z(\tau) \} \right] \quad (285)$$

$$\int \left(\prod_{a'} d\mathbf{S}_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') \exp \left[\int_{\tau} \sum_{a'} \{ i\Phi_{a'}(\tau) - D(n_{a'}^z(\tau))^2 + \Omega (n_{a'}^x(\tau))^2 + h_{a'} n_{a'}^z(\tau) \} \right] \quad (286)$$

なお、(285) 式では $a \neq b$ とする。(285) 式は次のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} & \int \left(\prod_{a'} d\mathbf{S}_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') \exp \left[\int_{\tau} \sum_{a'} \{ i\Phi_{a'}(\tau) - D(n_{a'}^z(\tau))^2 + \Omega (n_{a'}^x(\tau))^2 + h_{a'} n_{a'}^z(\tau) \} \right] \\ &= \prod_{a' \neq a \neq b} \left(\int d\mathbf{S}_{a'} Z_{a'} \right) \left(\int d\mathbf{S}_a n_a^z(\tau) Z_a \right) \left(\int d\mathbf{S}_b n_b^z(\tau') Z_b \right) \end{aligned} \quad (287)$$

ここで、

$$Z_a = \exp \left[\int_{\tau} \sum_{a'} \{ i\Phi_{a'}(\tau) - D(n_{a'}^z(\tau))^2 + \Omega (n_{a'}^x(\tau))^2 + h_{a'} n_{a'}^z(\tau) \} \right] \quad (288)$$

とした。(287) 式、第 1 項を演算子表示すると、

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{S}_{a'} Z_{a'} &= \text{Tr}_{S_{a'}} \exp \left[\beta \{ -D(S_{a'}^z)^2 + \Omega (S_{a'}^x)^2 + h_{a'} S_{a'}^z \} \right] \\ &= e^{-\beta D + \frac{\beta \Omega}{2}} \text{Tr}_{S_{a'}} \exp \left[\beta h S_{a'}^z + \beta \left(D + \frac{\Omega}{2} \right) C + \frac{\beta \Omega}{2} C^x \right] \end{aligned} \quad (289)$$

となる。ここで、行列 C および C^x を次のように定義した。

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C^x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (290)$$

このトレースを計算するにあたり、次の展開公式が有用である。

$$\begin{aligned} \exp [a S^z + b (S^z)^2 + c (S^x)^2] &= \frac{a}{\sqrt{a^2 + c^2}} S^z \sinh(\sqrt{a^2 + c^2}) + (S^z)^2 \cosh(\sqrt{a^2 + c^2}) \\ &+ C \exp(b + c) + \frac{c}{\sqrt{a^2 + c^2}} C^x \sinh(\sqrt{a^2 + c^2}) \end{aligned} \quad (291)$$

これより、

$$\begin{aligned} & \int d\mathbf{S}_{a'} Z_{a'} \\ &= e^{-\beta D + \frac{\beta \Omega}{2}} \text{Tr}_{S_{a'}} \left\{ (S^z)^2 \cosh \beta h'_{a'} + C \exp \left[\beta \left(D + \frac{\Omega}{2} \right) \right] + \frac{\sinh \beta h'_{a'}}{h'_{a'}} \left(h S^z + \frac{\Omega}{2} C^x \right) \right\} \\ &= e^{\beta \Omega} + 2e^{\frac{\beta \Omega}{2} - \beta D} \cosh \beta h'_{a'} \end{aligned} \quad (292)$$

を得る。ここで、

$$h'_a = \sqrt{h_a^2 + \frac{\Omega^2}{4}} \quad (293)$$

とした。

(287) 式、第 2 項も展開公式 (291) 式を用いることで次のように求まる。

$$\begin{aligned} & \int dS_a n_a^z(\tau) Z_a \\ &= \text{Tr}_{S_a} \exp [(\beta - \tau) \{h_a S^z - D(S^z)^2 + \Omega (S^x)^2\}] S^z \exp [\tau \{h_a S^z - D(S^z)^2 + \Omega (S^x)^2\}] \\ &= \frac{2h_a}{h'_a} e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \sinh \beta h'_a \end{aligned} \quad (294)$$

よって、

$$\begin{aligned} & \int \left(\prod_{a'} dS_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_b^z(\tau') \exp \left[\int_{\tau} \sum_{a'} \{i\Phi_{a'}(\tau) - D(n_{a'}^z(\tau))^2 + \Omega (n_{a'}^x(\tau))^2 + h_{a'} n_{a'}^z(\tau)\} \right] \\ &= \prod_{a' \neq a \neq b} \left(e^{\beta\Omega} + 2e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \cosh \beta h'_{a'} \right) \frac{2h_a}{h'_a} e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \sinh \beta h'_a \cdot \frac{2h_b}{h'_b} e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \sinh \beta h'_b \end{aligned} \quad (295)$$

となる。2 体の相関関数 (286) 式も展開公式から計算され、次のようになる。

$$\begin{aligned} & \int \left(\prod_{a'} dS_{a'} \right) n_a^z(\tau) n_a^z(\tau') \exp \left[\int_{\tau} \sum_{a'} \{i\Phi_{a'}(\tau) - D(n_{a'}^z(\tau))^2 + \Omega (n_{a'}^x(\tau))^2 + h_{a'} n_{a'}^z(\tau)\} \right] \\ &= \prod_{a' \neq a} \left(e^{\beta\Omega} + 2e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \cosh \beta h'_{a'} \right) \\ &\quad \times e^{\frac{\beta\Omega}{2} - \beta D} \left[\left(\frac{h_a}{h'_a} \right)^2 2 \cosh \beta h'_a + \left(\frac{\Omega}{2h'_a} \right)^2 2 \cosh \{(\beta - 2\tau + 2\tau') h'_a\} \right] \end{aligned} \quad (296)$$

D ランダム系における臨界指数

ここでは繰り込み群の考え方にに基づき、ランダム系における臨界指数の求め方を解説する [65]。ランダム系と純粋系の最大の違いは、相互作用がデルタ関数型の分布を持つのではなく、広がりを持った分布になる点である。その性質を考慮すると、系を特徴付けるのは平均のみではなく、分散も重要になるであろうと考えることが出来る。その具体的な定式化をここでは行う。特に、交換相互作用のみが繰り込み群方程式に現れる 2 体相互作用のみの Ising 模型を考え、MKRG を念頭に置いた定式化を行う。

まず系の繰り込まれた相互作用に関する分布関数を、繰り込む前の分布関数と繰り込み変換の畳み込みで定義する。

$$P'(\{K'\}) = \int \left(\prod_{r=1}^N dK_r \right) \left(\prod_{r'=1}^{N'} \delta(K'_{r'} - R_{r'}(\{K\})) \right) P(\{K\}) \quad (297)$$

ここで、 K, K' はそれぞれ繰り込む前の相互作用と繰り込まれた相互作用を表す。 P はそれぞれの分布関数である。また、 r はボンドを指定するインデックスであり、 N, N' は繰り込む前後の全ボンド数である。上で現れた分布関数は、ボンド毎に独立なものとする。すなわち、

$$P(\{K\}) = \prod_{r=1}^N P(K_r) \quad (298)$$

これを用いると、分布の繰り込み群方程式は以下のように書き換えられる。

$$P'(K'_{r'}) = \int \left(\prod_{r=1}^N dK_r P(K_r) \right) \delta(K'_{r'} - R_{r'}(\{K\}_m)) \quad (299)$$

ここで、 $m = b^d$ は相互作用を繰り込む際に必要となる元の系のボンドの本数を表す。臨界現象を特徴付ける固定点である固定点近傍では、分布関数もその形が不変となる。以降このような分布を固定分布と呼ぶことにする。固定分布では以下の等式が成り立つ。

$$P^*(\{K'\}) = \int \left(\prod_{r=1}^N dK_r P^*(K_r) \right) \delta(K'_{r'} - R_{r'}(\{K\})) \quad (300)$$

この固定分布に対する相互作用の平均 μ_1^* と分散 μ_2^* を次式で定義する。

$$\mu_1^* = \int dK P^*(K) K, \quad \mu_2^* = \int dK P^*(K) (K - \mu_1^*)^2 \quad (301)$$

臨界現象を見るためには、固定分布から微小にずれた分布を考えればよい。この分布は相互作用空間において、固定分布を微小に平行移動したものと考えることが出来る。具体的に固定分布 $P^*(K)$ から x だけずれた分布 $P^*(K - x)$ を考える。また、そのようなずれを引き起こす確率分布を $\delta p(x)$ とする。すると、固定分布から微小にずれた確率分布 $P(K)$ は、再び畳み込みで表現することが出来る。

$$P(K) = \int dx P^*(K - x) \delta p(x) \quad (302)$$

$P^*(K - x)$ を $x = 0$ の回りで展開すると次の式を得る。

$$P^*(K - x) \sim P^*(K) - \frac{dP^*(K)}{dK} x + \frac{1}{2} \frac{d^2 P^*(K)}{dK^2} x^2 \quad (303)$$

これより、(303) 式を (302) 式に代入することで次の式を得る。

$$\begin{aligned} P(K) &= \int dx P^*(K - x) \delta p(x) \\ &\sim P(K)^* - \frac{dP^*(K)}{dK} \int dx \delta p(x) x + \frac{1}{2} \frac{d^2 P^*(K)}{dK^2} \int dx \delta p(x) x^2 \\ &\equiv P(K)^* - \frac{dP^*(K)}{dK} \delta_1 + \frac{1}{2} \frac{d^2 P^*(K)}{dK^2} \delta_2 \end{aligned} \quad (304)$$

(304) 式を用いることで、相互作用の平均からのずれ $\delta\mu_1$ は次のように表すことが出来る。

$$\begin{aligned} \delta\mu_1 &= \mu_1 - \mu_1^* \\ &= \int dK (P(K) - P^*(K)) K \\ &= -\delta_1 \int dK \frac{dP^*(K)}{dK} K + \frac{1}{2} \delta_2 \int dK \frac{d^2 P^*(K)}{dK^2} K \\ &= \delta_1 \end{aligned} \quad (305)$$

上式の変形では、部分積分と確率分布 $P^*(K)$ に対する次の条件を用いた。

$$P^*(K)|_{K \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0 \quad (306)$$

$$\left. \frac{dP^*(K)}{dK} \right|_{K \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0 \quad (307)$$

また、分散のずれ $\delta\mu_2$ は次のように表すことが出来る。

$$\begin{aligned} \delta\mu_2 &= \mu_2 - \mu_2^* \\ &= \int dK P(K)(K - \mu_1)^2 - \int dK P(K)^*(K - \mu_1^*)^2 \\ &= \int dK P(K)(K - \mu_1)^2 - \int dK P^*(K)\{(K - \mu_1)^2 + 2\delta\mu_1(K - \mu_1)\} \\ &= \int dK (P(K) - P(K)^*)(K - \mu_1)^2 \\ &= -\delta_1 \int dK \frac{dP(K)^*}{dK} (K - \mu_1)^2 + \frac{1}{2}\delta_2 \int dK \frac{d^2 P(K)^*}{dK^2} (K - \mu_1) \\ &= \delta_2 \end{aligned} \quad (308)$$

ここでは条件 (306), (307) 式を用いた。また、ずれ $\delta\mu_1$ の一次まで残し、二次の項は落とした。

次に、繰り込まれた分布及び相互作用に対する平均と分散のずれ $\delta\mu'_1, \delta\mu'_2$ を計算する。ここでは繰り込まれたずれを繰り込む前のずれで表すことが目標となる。まず、 $\delta\mu'_1$ を計算する。

$$\delta\mu'_1 = \int dK' P(K')' K' - \int dK' P(K')^* K' \quad (309)$$

分布に関する繰り込み群方程式 (299) 式と固定分布に対する等式 (300) を用いると、

$$\begin{aligned} \delta\mu'_1 &= \int \left(\prod_{r'=1}^{N'} dK'_{r'} \right) \prod_{r=1}^{N'} \left\{ \int \left(\prod_{r=1}^m dK_r P(K_r) \right) \delta(K' - R_{r'}(\{K\}_m)) \right\} \prod_{r'=1}^{N'} K'_{r'} \\ &\quad - \int \left(\prod_{r'=1}^{N'} dK'_{r'} \right) \prod_{r=1}^{N'} \left\{ \int \left(\prod_{r=1}^m dK_r P^*(K_r) \right) \delta(K' - R_{r'}(\{K\}_m)) \right\} \prod_{r'=1}^{N'} K'_{r'} \\ &= \int \left(\prod_{r=1}^m dK_r P(k_r) \right) R(\{K\}_m) - \int \left(\prod_{r=1}^m dK_r P^*(k_r) \right) R(\{K\}_m) \end{aligned} \quad (310)$$

を得る。 $P(K_r)$ に対して展開 (304) 式を考え、 δ_1, δ_2 の一次まで取ると次の等式が成り立つ。

$$\begin{aligned} \prod_{r=1}^m dK_r P(K_r) &= \prod_{r=1}^m dK_r \left\{ \prod_{r=1}^m P^*(K_r) - \delta_1 \sum_{r=1}^m \left(\frac{\partial P^*(K_r)}{\partial K_r} \prod_{a \neq r} P^*(K_a) \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\delta_2}{2} \sum_{r=1}^m \left(\frac{\partial^2 P^*(K_r)}{\partial K_r^2} \prod_{a \neq r} P^*(K_a) \right) \right\} \end{aligned} \quad (311)$$

(311) 式を (310) 式に代入する。

$$\begin{aligned}
\delta\mu'_1 &= \int \prod_{r=1}^m dK_r \left[-\delta_1 \sum_{r=1}^m \left(\frac{\partial P^*(K_r)}{\partial K_r} \prod_{r' \neq r} P^*(K_{r'}) \right) R(\{K\}_m) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\delta_2}{2} \sum_{r=1}^m \left(\frac{\partial^2 P^*(K_r)}{\partial K_r^2} \prod_{r' \neq r} P^*(K_{r'}) \right) R(\{K\}_m) \right] \\
&= \int \left(\prod_{r=1}^m dK_r P^*(K_r) \right) \left[\delta_1 \sum_{r=1}^m \frac{\partial R(\{K\}_m)}{\partial K_r} + \frac{\delta_2}{2} \sum_{r=1}^m \frac{\partial^2 R(\{K\}_m)}{\partial K_r^2} \right] \quad (312)
\end{aligned}$$

ここで、表現を簡単化するために次の記号を導入する。

$$\langle \cdots \rangle = \int \left(\prod_{r=1}^m dK_r P^*(K_r) \right) \cdots \quad (313)$$

$$\partial_i f = \frac{1}{i} \sum_{r=1}^m \frac{\partial^i f}{\partial K_r^i} \quad (314)$$

(313),(314) 式を用いると、(312) 式は次のように書き換えられる。

$$\delta\mu'_1 = \langle \partial_1 R \rangle \delta_1 + \langle \partial_2 R \rangle \delta_2 \quad (315)$$

次に、繰り込まれた相互作用及び分布関数に対する分散のずれを δ_1, δ_2 を用いて表す。

$$\begin{aligned}
\delta\mu'_2 &= \int dK' P'(K') (K' - \mu'_1)^2 - \int dK' P^*(K') (K' - \mu_1^*)^2 \\
&= \int dK' P'(K') (K' - \mu_1^* - \delta'_1)^2 - \int dK' P^*(K') (K' - \mu_1^*)^2 \\
&\sim \int dK' (P'(K') - P^*(K')) (K' - \mu_1^*)^2 \\
&= \prod_{r'=1}^{N'} \left[\int dK_{r'} \left\{ \int \prod_{r=1}^m dK_r (P(K_r) - P^*(K_r)) \delta(K_{r'} - R_{r'}(\{K\}_m)) \right\} (K_{r'} - \mu_1^*)^2 \right] \\
&= \int \prod_{r=1}^m dK_r (P(K_r) - P^*(K_r)) (R(\{K\}_m) - \mu_1^*)^2 \\
&= \int \prod_{r=1}^m dK_r \left\{ -\delta_1 \sum_{r=1}^m \left(\frac{\partial P^*(K_r)}{\partial K_r} \prod_{r' \neq r} P^*(K_{r'}) \right) + \frac{\delta_2}{2} \sum_{r=1}^m \left(\frac{\partial^2 P^*(K_r)}{\partial K_r^2} \right) \right\} \\
&\quad \times (R(\{K\}_m) - \mu_1^*)^2 \\
&= \delta_1 \int \left(\prod_{r=1}^m dK_r \right) \sum_{r=1}^m \left(\frac{\partial R^2(\{K\}_m)}{\partial K_r} - 2\mu_1^* \frac{\partial (R(\{K\}_m))}{\partial K_r} \right) \\
&\quad + \frac{\delta_2}{2} \int \left(\prod_{r=1}^m dK_r \right) \sum_{r=1}^m \left(\frac{\partial^2 R^2(\{K\}_m)}{\partial K_r^2} - 2\mu_1^* \frac{\partial^2 R(\{K\}_m)}{\partial K_r^2} \right) \quad (316)
\end{aligned}$$

(313),(314) 式を用いて書き換えると、

$$\delta\mu'_2 = (\langle \partial_1 R \rangle - 2\langle R \rangle \langle \partial_2 R \rangle) \delta_1 + (\langle \partial_2 R^2 \rangle - 2\langle R \rangle \langle \partial_2 R \rangle) \delta_2 \quad (317)$$

を得る。 $\delta_1 = \delta\mu_1, \delta_2 = \delta\mu_2$ を用いて, (315) 式と (317) 式を行列の形に書き直すと次の式を得る。

$$\begin{pmatrix} \delta\mu'_1 \\ \delta\mu'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \partial_1 R \rangle & \langle \partial_2 R \rangle \\ (\langle \partial_1 R \rangle - 2\langle R \rangle \langle \partial_2 R \rangle) & (\langle \partial_2 R^2 \rangle - 2\langle R \rangle \langle \partial_2 R \rangle) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\mu_1 \\ \delta\mu_2 \end{pmatrix} \quad (318)$$

上式の繰り込み変換行列を対角化することにより, スケーリング指数を知ることが出来る。特に, ここでは温度 (交換相互作用) のみが有意な状況を考えているため, 得られるスケーリング指数は比熱の特異性 α と結びつく。

E 一次転移に対するスケーリング

ここでは繰り込み群の考え方で一次転移を判別する方法を解説する [55][56]。まず, 一次転移が起きる転移点直上では, 複数の相が共存しているという事実が重要である。例えば Ising 模型であれば, 温度を $T < T_c$ に固定して磁場を変化させると, $h = 0$ において磁化が不連続に飛ぶことが分かっている。これは $T < T_c$ かつ $h = 0$ では, 正の磁化を持つ相と負の磁化を持つ相が同じ確率で共存していることを表している。

相の性質は秩序変数やエネルギーなどの物理量で特徴付けられる。そこで, 次のような一般的な熱力学諸量を考える。

$$M_\alpha = \frac{1}{N} \frac{\partial \log Z_N}{\partial J_\alpha} \quad (319)$$

Ising 模型を例にすると, $J_\alpha = \beta J$ であれば右辺はエネルギー, $J_\alpha = \beta h$ であれば右辺は磁化となる。

繰り込まれたパラメータをプライムを用いて表す。すると, 上式は次のように書き換えることが出来る。

$$\begin{aligned} M_\alpha &= \frac{1}{b^d N'} \frac{\partial \log Z'_{N'}}{\partial J_\alpha} \\ &= \frac{1}{b^d N'} \frac{\partial \log Z'_{N'}}{\partial J'_\beta} \frac{\partial J_\alpha}{\partial J'_\beta} \\ &= b^{-d} M'_\beta T_{\beta\alpha} \end{aligned} \quad (320)$$

ここで, 繰り込み変換による分配関数の不変性を用いた。また, 和に関しては既約表現を用いている。ここで用いた繰り込み変換行列 $T_{\beta\alpha}$, は第4章で現れた繰り込み変換行列と同様の行列である。上式より熱力学密度 M_α は, 変換行列 $T_{\beta\alpha}$ の左固有ベクトルであることが分かる。第4章でも用いた $T_{\beta\alpha}$ を対角化する行列を P とする。 $O_\alpha \equiv M_\beta P_{\beta\alpha}$ とすると, (320) 式は次のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} O_\alpha &= b^{-d} O'_\beta P^{-1} T_{\beta\alpha} P \\ &= b^{-d} O'_\beta D_{\beta\alpha} \\ &= b^{-d+y_\alpha} O'_\alpha \end{aligned} \quad (321)$$

ここで D は対角行列であり固定点の回りでその成分が $D_{\alpha\alpha} = b^{y_\alpha}$ となることを用いた。ここで用いた O_α はスケーリング場 g_α に共役な物理量及び秩序変数であることが以下の議論から分

かる。まず一般的な相互作用の集合を第 4 章と同様に $\mathbf{u}$ とする。固定点 $\mathbf{u}^*$ からの微小変位を $\delta\mathbf{u}$ とする。この $\delta\mathbf{u}$ を (320) 式の右からかけると、

$$M_\alpha \delta u_\alpha = b^{-d} M'_\beta T_{\beta\alpha} \delta u_\alpha \quad (322)$$

となる。ここでも和の既約表現を用いた。スケーリング場 g_α は、前述の行列 P^{-1} を用いて次のように定義されていた。

$$g_\alpha = P_{\alpha\beta}^{-1} u_\beta \quad (323)$$

これより (322) 式は次のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} O_\alpha g_\alpha &= b^{-d} O'_\beta D_{\beta\alpha} g_\alpha \\ &= b^{-d} O'_\alpha g'_\alpha \end{aligned} \quad (324)$$

よって、 O_α がスケーリング場 g_α に共役な物理量及び秩序変数であることが分かる。

議論を一次転移のスケーリングへと戻す。先程述べたように、一次転移は複数の相の共存状態である。それ故に、固定点において (320) 式の左固有ベクトル M_α が少なくとも二つ独立に存在すればよい。対角化した表示では、独立な二つの O_α が存在すればよいことになる。それらを $O_{\alpha,1}, O_{\alpha,2}$ とする。これら二つの熱力学諸量は、 $g_\alpha \rightarrow 0$ に正負どちらの方向から極限を取ったかに依存する。この二つの熱力学諸量の差を ΔO_α とすると、次のように評価出来る。

$$\begin{aligned} \Delta O_\alpha &= O_{\alpha,1} - O_{\alpha,2} \\ &= b^{-d+y_\alpha} \left(O_{\alpha,1}^{(1)} - O_{\alpha,2}^{(1)} \right) \\ &= b^{n(-d+y_\alpha)} \left(O_{\alpha,1}^{(n)} - O_{\alpha,2}^{(n)} \right) \end{aligned} \quad (325)$$

ここで n は繰り込み変換の回数を表す。また、固定点 $g_\alpha = 0$ の正負両側で同様のスケーリング指数 y_α を持つことを仮定した。もし $y_\alpha < d$ であれば、 $n \rightarrow \infty$ で $\Delta O_\alpha \rightarrow 0$ となり、二つの独立した熱力学密度は存在しないことになる。これは連続転移を表すスケーリング則である。一方で、 $y_\alpha = d$ であれば $n \rightarrow \infty$ でも $\Delta O_\alpha \neq 0$ となり、二つの独立した熱力学密度が存在することになる。これより、一次転移に対するスケーリング則は繰り込み変換行列に対する最大のスケーリング指数 y_α と次元 d との一致で与えることが出来る。

謝辞

本論文を書き終えるにあたり、度重なる議論と励ましを与えて頂いた西森秀稔教授に心から感謝いたします。高橋和孝助教には研究に対するアドバイスに加え、本論文の推敲の際にも助力を頂きました。深く感謝いたします。京都大学の大関真之助教には、非常に有用な議論をして頂きました。また、松田佳希さんには数値計算の手法など、多数の助言を頂きました。この場を借りて、お礼を申し上げます。また、本研究を様々な形で支えてくださった西森秀稔研究室、および東京工業大学物性物理学専攻物性理論グループの皆様、そして物理を通じてお世話になった全ての方々に深く感謝いたします。

参考文献

- [1] H. Nishimori and G. Ortiz: *Elements of Phase transitions and Critical Phenomena*, Oxford University Press, Oxford (2011).
- [2] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 3 (1944) 4.
- [3] 高山 一: スピングラス 丸善株式会社 1991 年.
- [4] H. Nishimori: *Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing*, Oxford University Press, Oxford (2001).
- [5] K. H. Fisher and J. A. Hertz: *Spin Glasses*, Cambridge University Press, Cambridge (1991).
- [6] V. Cannella and J. A. Mydosh, Phys. Rev. B **6** (1972) 4220.
- [7] S. Nagata, P. H. Keesom and H. R. Harrison, Phys. Rev. B **19** (1979) 1633.
- [8] M. A. Ruderman and C. Kittel, Phys. Rev. **96** (1954) 99.
- [9] T. Kasuya, Progr. Theoret. Phys. **16** (1954) 45.
- [10] K. Yosida, Phys. Rev. **106** (1957) 893.
- [11] S. F. Edwards and P. W. Anderson, J. Phys, **F5** (1975) 965.
- [12] D. Sherrington and S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. **35** (1975) 1792.
- [13] M. Blume, V. J. Emery and R. B. Griffiths, Phys. Rev. A **4** (1971) 1071.
- [14] M. Blume, Phys. Rev. **141** (1966) 517.
- [15] H. W. Capel, Physica **32** (1966) 966.
- [16] S. K. Ghatak and D. Sherrington, J. Phys. C **10** (1977) 3149.
- [17] A. J. Bray and M. A. Moore, J. Phys. C **13** (1980) L655.
- [18] P. J. de Gennes, Solid State Commun. **1** (1963) 132.
- [19] W. Wu, D. Bitko, T. F. Rosenbaum and G. Aeppli, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 1919.
- [20] T. Kadowaki and H. Nishimori, Phys. Rev. E **58** (1998) 5355.
- [21] B. K. Chakrabarti, A. Dutta and P. Sen: *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models*, Springer-Verlag, Heidelberg (1996).
- [22] T. Jörg, F. Krzakala, J. Kurchan, A. C. Maggs and J. Pujos, Europhys. Lett. **89** (2010) 40004.
- [23] K. Binder and A. P. Young, Rev. Mod. Phys. **58** (1986) 801.

- [24] F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54** (1982) 235.
- [25] M. Ohzeki, H. Nishimori and A. N. Berker, Phys. Rev. E **77** (2008) 061116.
- [26] M. Ohzeki, Phys. Rev. E **79** (2009) 021129.
- [27] D. S. Fisher, Phys. Rev. Lett. **69** (1971) 534.
- [28] K. Binder and A. P. Young, Rev. Mod. Phys. **58** (1986) 801.
- [29] L. P. Kadanoff Physics 2 (1966) 263.
- [30] L. P. Kadanoff, Ann. of Phys, **100** (1976) 359.
- [31] G. Migliorini and A. N. Berker, Phys. Rev. B **57** (1998) 426.
- [32] F. D. Nobre, Phys. Rev. E **64** (2001) 046108.
- [33] K. Takahashi, Phys. Rev. B **76** (2007) 184422.
- [34] F. A. da Costa, C. S. O. Yokoi and S. R. A. Salinas, J. Phys. C **27** (1994) 3365.
- [35] G. Parisi, Phys. Lett, **73 A** (1979) 203.
- [36] G. Parisi, J. Phys. A, **13** (1980) 1887.
- [37] A. Crisanti and L. Leuzzi, Phys. Rev. Lett. **95** (2005) 087201.
- [38] J. R. Klauder, Phys. Rev. D **19** (1979) 2349.
- [39] 永長 直人: 物性論における場の量子論 岩波書店 1995 年.
- [40] K. D. Usadel, Solid State Commun. **58** (1986) 629.
- [41] T. Yamamoto and H. Ishii, J. Phys. C **20** (1987) 6053.
- [42] K. Walasek and K. Lukierska-Walasek, Phys. Rev. B **38** (1988) 725.
- [43] Y. Y. Goldschmidt and P-Y Lai, Phys. Rev. Lett. **64** (1990) 2467.
- [44] K. D. Usadel, G. Büttner and T. K. Kopeć, Phys. Rev. B **44** (1991) 12583.
- [45] J. Miller and D. A. Huse, Phys. Rev. Lett. **70** (1993) 3147.
- [46] Z. Domański and T. K. Kopeć, J. Phys.: Condens. Matter **12** (2000) 5727.
- [47] S. G. Magalhaes and C. V. Morais, Phys. Rev. B **77** (2008) 134422.
- [48] T. W. Burkhardt, Phys. Rev. B **20** (1979) 2905.
- [49] F. Lee, H. H. Chen and F. Y. Wu, Phys. Rev. B **40** (1989) 4871.
- [50] N. Kawashima and H. Rieger, Frustrated Spin Systems ed H. T. Diep (Singapore: World Scientific) section 9 (2004).

- [51] R. R. dos Santos, J. Phys. C. **15** (1982) 3141.
- [52] B. Boechat and R. R. dos Santos, Phys. Rev. B **49** (1994) 6404.
- [53] J. Cardy: *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (1996).
- [54] J. Sólyom and P. Pfeuty, Phys. Rev. B **24** (1981) 218.
- [55] B. Nienhuis and M. Nauenberg, Phys. Rev. Lett. **35** (1975) 477.
- [56] M. E. Fisher and A. N. Berker, Phys. Rev. B **26** (1982) 2507.
- [57] M. Blume, V. J. Emery and R. B. Griffiths, Phys. Rev. A **4** (1971) 1071.
- [58] M. Kaufman, R. B. Griffiths, J. M. Yeomans and M. E. Fisher, Phys. Rev. B **23** (1981) 3448.
- [59] E. Albayrak and M. Keskin J. Magn. Magn. Mater. **206**. (1999) 83.
- [60] A. Falicov and A. N. Berker, Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 4380.
- [61] V. O. Özçelik and A. N. Berker, Phys. Rev. E **78** (2008) 031104.
- [62] Y. Y. Goldshmidt, Phys. Rev. B **41** (1990) 4858.
- [63] T. Obuchi, H. Nishimori and D. Sherrington, J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 054002.
- [64] F. T. Arecchi, E. Courtens, R. Gilmore and H. Thomas, Phys. Rev. A **6** (1972) 2211.
- [65] D. Andelman and A. N. Berker, Phys. Rev. B **29** (1984) 2630.