

スピングラス球'模型'についての再考

北大理 物理 根本幸児

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

SK模型のハミルトニアンは次の形をしている。

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

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

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

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

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

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

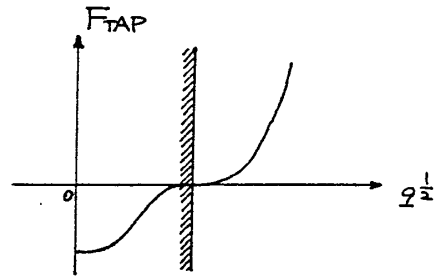


図 1

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

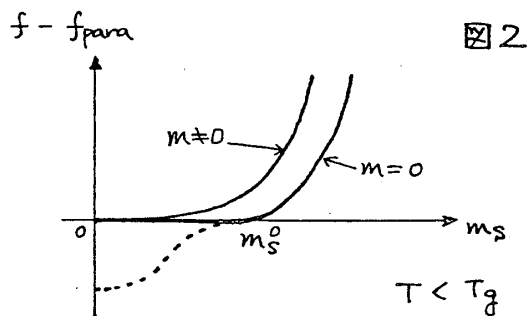
$$= \beta f_{para} + \frac{\beta \tilde{J}}{2} m^2 + \frac{\beta^2 \tilde{J}^2}{8(\beta \tilde{J} - 1)} m^4 + \frac{\beta^3 \tilde{J}^3 (3\beta \tilde{J} - 5)}{48(\beta \tilde{J} - 1)^3} m^6 + \frac{\beta^2 \tilde{J}^3}{8(\beta \tilde{J} - 1)} m^4 m_s^2 + \dots$$

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

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

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

まで一定となっている。(11)が成り立つ時の表式をそのままつけたのが図2の破線である(12.a)。この様子が図1と酷似していることに注意したい。ところでこの一定領域の $m=0$ が直の熱平衡値を与えるのだろうか。



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

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

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

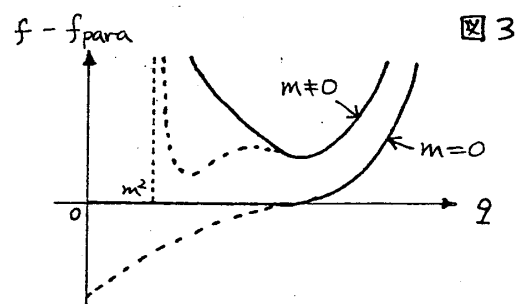
$$- \beta J(1-g) + \frac{1}{2\beta} \left[\frac{1}{2} - \ln 2\pi \beta J \right] \quad (1 < \beta J(1-g)) \quad (14.b)$$

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

2つの領域で表式が異なるのは、前に述べた鞍点の sticking による。 熱平衡状態は、 $\partial f / \partial m = h, \partial f / \partial g = 0$ ((15) の微分も含まれる) から決定され、その状態方程式はレゾリカ法によるものと一致する。 $f(m, g)$ を $T < T_g$ で調べると図3のようになる。 前と同じように

$$g_0 = 1 - T/T_g \quad (16)$$

を境に、(14.a), (14.b) が実線で示されている。 $m \neq 0$ の形からも明らかのように、 $h \rightarrow 0$ ($m \rightarrow 0$) の極限で $g = g_0$ となり、確かに凝縮が起っている。 (しかしながら $f(m=0, m_s)$ と同じように、 $f(0, g)$ は熱力学的極限で、 $0 < g < g_0$ に一定領域をもっていることがわかる。



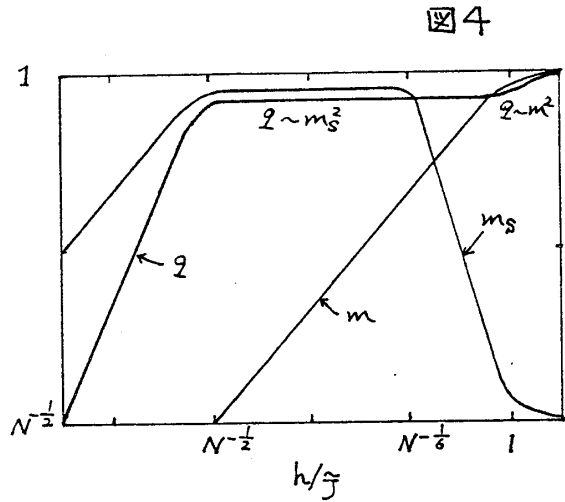
そのでは、 $h \rightarrow 0$ における $f(m, m_s)$ と $f(m, g)$ から得られる結果はどう説明されるか。 厳密な取り扱いではないが、大きな有限の N について考えた場合も、状態は鞍点方程式 (10) で与えられるとしてみる。 $h \sim O(N^{-\alpha})$ ($\alpha > 0$) の微小磁場を $T_g > T$ でかけた時、鞍点は $z = 1 + \delta$ ($\delta \ll 1$) とかくことができる。 その時 (10) を各項の最大オーダーのみで表わすと

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

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

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

その様子を両対数で表しているのが図4である。h ~ O(1)では、ほとんど、mがqに寄与し、msはO(N^{1/2})に留まっているが、磁場を弱めると、m ~ hで線型におちるのに対し、逆にms ~ h³で大きくはじめる。h ~ O(N^{-1/2})でms ~ O(1)になりほぼqの全てを担っている。さらに磁場を弱めてh ~ O(N^{-1/2})になると、ms ~ h, q ~ h²でおちっていく。=は有限のNである為であり、



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

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

- 1) f(m, ms), f(m, q)はそれぞれ l = βJ(1 - ms²), l = βJ(1 - q)を境に関数型を異にする。
- 2) h = 0, h_s = 0, T < T_gでの熱平衡値は、その境界上で与えられる。
- 3) その時平衡点では ∂²f/∂m² = 0, ∂²f/∂q² = 0 となっている。
- 4) 有限磁場では転移は起らず、"AT線"は h = 0, T < T_gで与えられる。
- 5) 熱力学的極限で f_{sq} - f_{para} = 0 である。従って自由エネルギー最小条件だけからは平衡値は決まらない。

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

- 6) l = βJ(1 - N^{-1/2}m²) のとき X_{ij}⁻¹ = ∂²f/∂m_i∂m_j はゼロ固有値をもつ。}
- SK模型のTAPの自由エネルギーの収束条件(3)に対応しているのが(1)である。(3)はAT

線¹⁰⁾と同じ"なの2", 2)~4)から, "球模型ではPaT仮説"¹¹⁾は正しい"といえる(S_G 領域は線に縮退しているわけだが)。3), 6)から, S_G 相は"marginally stable"状態であることが再確認される。もし(本当に)SK模型との対応があるのなら, 5)の結果は何か意味があるだろうか。SK模型の T_g 以下での f_{para} は知られていないが, f_{sq} との差が $O(N^{-r})$ ($r > 0$)である可能性もあり, blocking効果の"微妙さ"が現れているかも知れない。そうならば, S_G 転移の構造の本質は $O(N^{-r})$ に隠されているといえはしまいか。

References

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