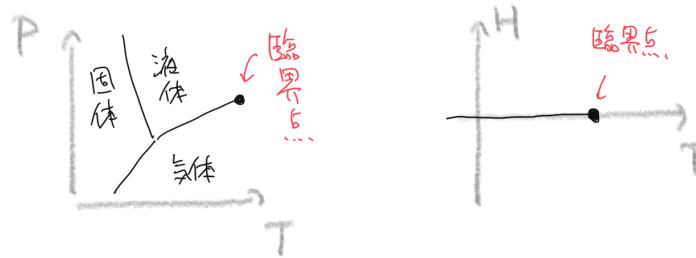


駒場現代物理学(2020)第9回講義ノート

今回は突然毛色のか変わった話をします。これまでの話との関係は次回以降明らかになるはず。

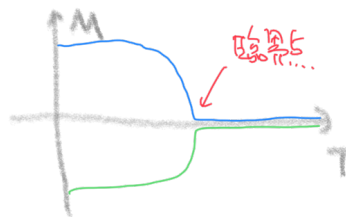
1 臨界現象とユニバーサリティ

まず水の相図を思い出す。すごいいいかげんには



(1.1)

の左図のようにになっている。気体と液体の境界線はある所で消失することが知られている。ここを臨界点 (critical point) という。(374°C, 22MPa ~ 217atm だそうである。) 上の右図は磁石の相図を示す。 H は外部磁場で、 $T < T_c$ だと外から磁場をかけなくても磁化をもっているが、 $T > T_c$ だと磁荷を失って磁石でなくなってしまう。 $H = \pm 0$ のときの磁化のグラフをそれぞれ青と緑で書くといいかげんには



(1.2)

という感じになる。

両者とも臨界点近傍では相図はおおよそ同じ形をしている。それだけではない。臨界点よりすこし低い温度を考え、 $t := |T - T_c|$ とすると、 $t \rightarrow 0$ で比熱 C は発散するが、それは冪にしたがう:

$$C \sim |t|^{-\alpha}. \quad (1.3)$$

また、磁石の場合は磁化 M 、水の場合は密度 ρ を考えると、 $T < T_c$ だと相転移線上で M および ρ がジャンプする。その差を Δ と書くとこれは今度は $t \rightarrow 0$ で冪でゼロにむかう:

$$\Delta \sim |t|^\beta \quad (1.4)$$

これらを臨界指数 (critical exponents) というが、これは水の場合も磁石の場合も

$$\alpha \sim 0.11, \quad \beta \sim 0.32 \quad (1.5)$$

とほぼ同じ値を示す。

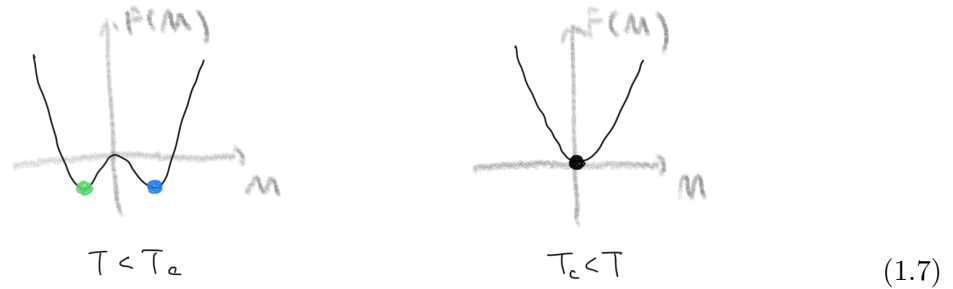
その他にも、相図上で同じ形状の臨界点をもって、同じ臨界指数をもつ全く異なった物理系が沢山ある。これをユニバーサリティという。勿論全ての臨界点と同じ臨界指数を持つわけではないが、ある特定の臨界指数のセットをもつ系がそれぞれ沢山あり、それら

をユニバーサリティクラスという。上記の臨界指数を持つ系は 3 次元のイジングユニバーサリティクラス (Ising universality class) と呼ばれる。¹

非常にいいかげんには、臨界点近くの相図の構造はつぎのように考えられる。磁化 M の値は (以下、水の場合は M は密度 ρ とよみかえ、 H は P と読み替えること。) 自由エネルギー $F(M)$ を最小化することによってもとまる。 $F(M)$ は T と H に依存する。これがおおよそ

$$F(M) = aM^4 + (T - T_c)M^2 - HM \quad (1.6)$$

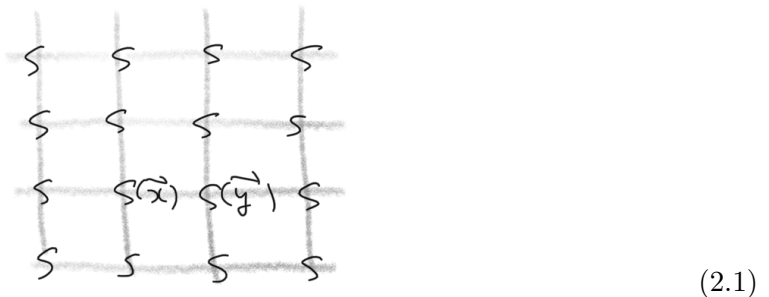
で与えられるとする。関数形は $T - T_c$ の正負で大きく変わる:



そうすると $T < T_c$ では H が $+0$ か -0 によってふたつのうちのどちらかの極小値が選ばれるので相転移線になるが、 $T > T_c$ ではそれは消失する。しかしこれでは $|M| \sim \sqrt{T_c - T}$ となり、 $\beta = 1/2$ になってしまう。この雑な解析を平均場近似 (mean field approximation) という。もっと詳細な理論が必要である。

2 イジング模型とそのシミュレーション

そこで登場するのがイジング模型 (Ising model) である。 d 次元の正方格子を考える。その各点 \vec{x} に $s(\vec{x}) = \pm 1$ を取る古典的自由度があるものとする。二次元の場合の絵は



というかんじ。

ある配位 $\{s(\vec{x})\}$ が得られる確率は

$$\propto \prod_{\vec{x}, \vec{y} \text{ は隣り合う}} e^{Js(\vec{x})s(\vec{y})} \prod_{\vec{x}} e^{hs(\vec{x})} \Gamma =: e^{-S_{J,h}[\{s(\vec{x})\}]} \quad (2.2)$$

であたえられるものとする。正のパラメタ J は逆温度とよばれ $J = 1/T$ と思うのが良い。 (逆温度は β と書くこともよくある。臨界指数と混乱しますが。) J が大きい、すな

¹レビューは例えば Pelissetto-Vicari, "Critical Phenomena and Renormalization-Group Theory", *Phys. Rept.* 368 (2002) 549-727 [arXiv:cond-mat/0012164 [cond-mat.stat-mech]] を見よ。 3次元イジングユニバーサリティクラスの実験データはその Sec. 3.2.2 にまとまっている。

わち T が小さいと、 $s(\vec{x})s(\vec{y})$ が $+1$ 、すなわち s の向きがそろっているほうが起こりやすい。一方で J がゼロに近い、すなわち T がとても大きいと、隣り合う s の間をそろえようという気がなくなる。 h は外部磁場。そうすると $h > 0$ だと $s = +1$ のほうが $s = -1$ より起こりやすく、 $h < 0$ だと $s = -1$ のほうが $s = +1$ より起こりやすくなる。

すると、 T が小さく J が十分おおきければ、 $h = \pm 0$ で s は ± 1 に揃ってしまう。しかし T が大きく J を十分ゼロに近くすると、どこかで s が揃わなくなる。これよりおおよそ相図の構造がわかった。

臨界指数はどうなるか。 $d = 1$ では後でやるようにそもそも臨界にならない。 $d > 1$ では次のようになることが知られている：

$$\begin{array}{c|c|c|c} & d = 2 & d = 3 & d \geq 4 \\ \hline \alpha & 0 & 0.110 \cdots & 0 \\ \beta & 1/8 & 0.326 \cdots & 1/2 \end{array} \quad (2.3)$$

$d \geq 4$ ではイジングモデルの結果は平均場近似と一致することが知られている。 $d = 2$ ではイジングモデルは Onsager により 1944 に厳密に解かれた。² 臨界指数はその厳密解からでも、その後発展した二次元の共形場理論の一般論をつかってももとまり、有理数になる。 $d = 3$ は長らくシミュレーション結果や近似計算しかなかったが、ここ十年ほど conformal bootstrap という理論手法が非常に発展して精密な数値がもとまるようになった。³ しかし臨界指数が有理数か代数的数かなどはまったくわかっていない。

厳密に解こうなどというたいそれた野望を抱く前に、シミュレーションをしてみよう。問題は配位 $\{s(\vec{x})\}$ を確率 (2.2) に従ってどう生成するかということである。一番安直な方法は Markov-chain Monte Carlo (MCMC) 法、Metropolis 法と呼ばれる。

まずは配位 $\{s_0(\vec{x})\}$ をひとつランダムにつくる。さて、 $\{s_i(\vec{x})\}$ が与えられたときに $\{s_{i+1}(\vec{x})\}$ をつぎのように作る。

- まず、ランダムに格子点 \vec{x}_0 を選ぶ。
- いま $s_i(\vec{x}_0)$ のみをフリップした配位を s'_i と書く。すなわち

$$s_i(\vec{x}) = \begin{cases} -s_i(\vec{x}) & \vec{x} = \vec{x}_0, \\ +s_i(\vec{x}) & \vec{x} \neq \vec{x}_0. \end{cases} \quad (2.4)$$

- すると確率比は

$$R := \frac{e^{-S[\{s'_i\}]} }{e^{-S[\{s_i\}]} } = e^{hs'_i(\vec{x}_0)/s_i(\vec{x}_0)} \prod_{\vec{y} \text{ は } \vec{x}_0 \text{ に隣接}} e^{Js_i(\vec{y})s'_i(\vec{x}_0)/s_i(\vec{x}_0)} \quad (2.5)$$

となる。 R は局所的に計算できるので計算コストが低い。

- 乱数 $x \in [0, 1]$ を生成し、
 - ここで $x < R$ ならば、 s'_i を採用して $s_{i+1} = s'_i$ とする。

²Onsager, “Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition” *Phys. Rev.* **65**(1944)117.

³原論文は El-Showk, Paulos, Poland, Rychkov, Simmons-Duffin, Vichi, “Solving the 3D Ising Model with the Conformal Bootstrap,” *Phys. Rev. D* **86** (2012) 025022 [arXiv:1203.6064 [hep-th]] . 日本語の教科書がありとても勉強になる: 中山優「高次元共形場理論への招待 – 3次元臨界 Ising 模型を解く–」(SGC ライブラリ153) サイエンス社。挑戦してみたいかがでしょう。

- ここで $x > R$ ならば、 s'_i を採用せず $s_{i+1} = s_i$ のままとする。

こうすると、長期的に $\{s\}$ がでる確率 $P(\{s\})$ は欲しいものになる。というのは、一ヶ所のフリップでつながる配位 $\{s\}$ と $\{s'\}$ に対し、 $e^{-S[\{s'\}]} / e^{-S[\{s\}]} = R < 0$ とすると、 $\{s\}$ から $\{s'\}$ へは確率 R で移行し $\{s'\}$ から $\{s\}$ へは確率 1 でかならず移行する。よって

$$P(\{s'\}) = RP(\{s\}) \quad (2.6)$$

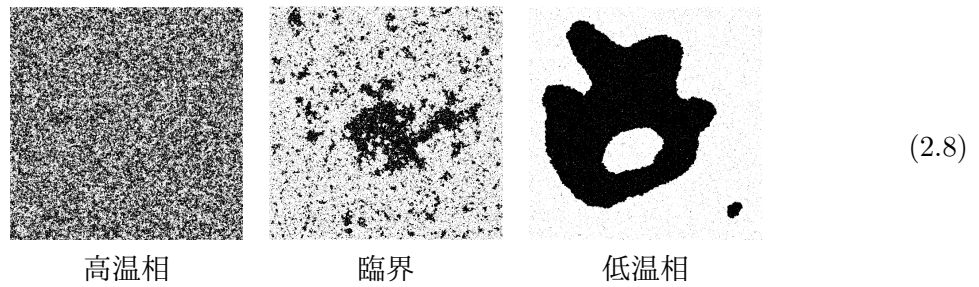
が出るので、これは (2.2) そのものである。

シミュレーションは自分で書いてみるのが勉強になる。二次元の場合、ブラウザ内で動くのは <https://mattbierbaum.github.io/ising.js/> というのがある、ソースコードは <https://github.com/mattbierbaum/ising.js/>。Mac 用のシミュレーションは以前僕が書いたのが AppStore にある。ソースコードは <https://github.org/yujitach/isingGLCL/>。何かの方法で遊んでみると良い。

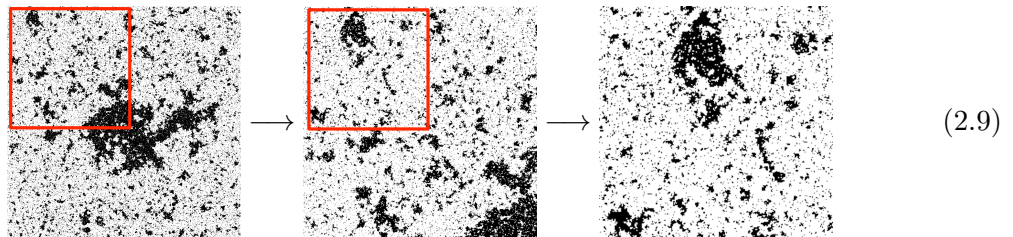
臨界点は厳密解より

$$J_c = \frac{1}{2} \log(1 + \sqrt{2}) = 0.4407 \dots \quad (2.7)$$

これより高温で $J < J_c$ だと図はすっかりぐちゃぐちゃ、 $J > J_c$ だとスピンはそろって塊ができる:



ちょうど臨界のときはもやもやであって、拡大してみると



いろいろなサイズの塊が混在している。スケールの変換に対して不変な理論になっている、臨界点直上では共形場理論になっている。このため

$$\langle s(\vec{x})s(\vec{y}) \rangle \sim |\vec{x} - \vec{y}|^{-\eta} \quad (2.10)$$

となるはず、ただし $\langle A \rangle$ は A の期待値。理論的に $\eta = 1/4$ だと知られている。

3 二次元イジング模型の双対性

さて、二次元イジング模型を解くのは難しいが、Kramers と Wannier による臨界点が (2.7) で与えられる気がとてもしてくる議論をみてみよう。⁴ イジングモデルでは配位 $\{s\}$

⁴H. A. Kramers and G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **60** (1941) 252.

の起こる確率は (2.2) で与えられたが、比例定数 Z^{-1} が決まっていない。どれかはかならず確率 1 で起こるので、

$$1 = Z(J, h)^{-1} \sum_{\{s\}} \prod_{\text{隣接する } s \text{ と } s'} e^{Jss'} \prod_s e^{-hs} \quad (3.1)$$

よって

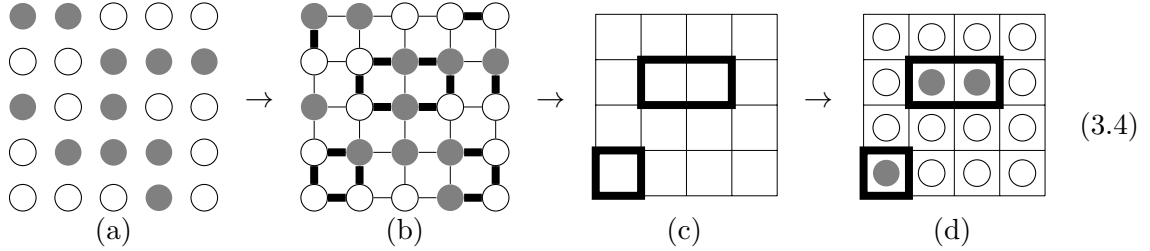
$$Z(J, h) = \sum_{\{s\}} \prod_{\text{隣接する } s \text{ と } s'} e^{Jss'} \prod_s e^{-hs} \quad (3.2)$$

を決めるのが大切である。これを分配関数という。以下簡単のため $h = 0$ とおいて

$$Z(J) = \sum_{\{s\}} \prod_{\text{隣接する } s \text{ と } s'} e^{Jss'} \quad (3.3)$$

を考える。

これからする操作を絵にまとめておく：



(a)から(b): さて、 $ss' = \pm 1$ だから、

$$e^{Jss'} = \cosh J \sum_{t=0,1} (ss' \tanh J)^t \quad (3.5)$$

である⁵。よって、

$$Z(J) = (\cosh J)^{2N} \sum_{\{s\}} \sum_{\{t\}} \prod_{\text{辺}} (ss' \tanh J)^t \quad (3.6)$$

である、ここで $\{t\}$ は各辺に 0, 1 が割り振られたもので、 N は格子点の数。図1(b) には $t = 1$ であるところを太線で示した。

(b)から(c): さて

$$\sum_{s=\pm 1} s^{1,3,5,\dots} = 0, \quad \sum_{s=\pm 1} s^{2,4,6,\dots} = 2 \quad (3.7)$$

をつかうと、先にスピン変数 s について和が取れ、

$$Z(J) = (2 \cosh J)^{2N} \sum_{\text{閉曲線をなす } \{t\}} (\tanh J)^L \quad (3.8)$$

となる、但し和は太線のなす閉曲線について取り、 L は閉曲線の長さ (図1(c))。

⁵ $\cosh t = (e^t + e^{-t})/2$, $\sinh t = (e^t - e^{-t})/2$, $\tanh t = \cosh t / \sinh t$.

(c)から(d): 閉曲線なので、その中は -1 、外は $+1$ という規則でスピン変数 μ を割り振ることが出来る (図1(d))。 μ は、もとのスピン変数 s 四つのなす正方形の中に書かれていることに注意しよう。各太線は隣り合う μ, μ' で $\mu\mu' = -1$ となるものに対応することを使うと、

$$Z(J) = (2 \cosh J)^{2N} \sum_{\{\mu\}} \prod_{\text{辺}'} (\tanh J)^{\frac{1}{2}(1-\mu\mu')} \quad (3.9)$$

$$= (2 \cosh J \sinh J)^N \sum_{\{\mu\}} \prod_{\text{辺}'} (\tanh J)^{-\frac{1}{2}\mu\mu'} \quad (3.10)$$

となる。ここで積は μ 同士をつなぐ全ての辺について取る。

結論: さて、(3.3) と比較すると、 $e^{-2J'} = \tanh J$ で J' を導入すれば

$$Z(J) = (\sinh 2J)^N Z(J') \quad (3.11)$$

がわかった。 J と J' の関係は、もっと対称的に

$$\sinh 2J \sinh 2J' = 1 \quad (3.12)$$

とも書ける。これより、 $\sinh 2J_c = 1$ は特殊な点であろうと予想がつく。これは $e^{2J_c} - e^{-2J_c} = 2$ ということなので、

$$J_c = \frac{1}{2} \log(1 + \sqrt{2}) \quad (3.13)$$

が特別な点であることがわかる。

\sinh は単調増加関数だから、関係 (3.12) は $J > J_c$ を $J < J_c$ にうつす。すなわち、高温領域を低温領域に、低温領域を高温領域にうつす。これを Kramers-Wannier 双対性⁶という。

次回使うので、縦方向と横方向の結合が異なる場合も考えておく。分配関数は

$$Z(J_{\text{横}}, J_{\text{縦}}) = \sum_{\{s\}} \prod_{\text{横隣}} e^{J_{\text{横}} s s'} \prod_{\text{縦隣}} e^{J_{\text{縦}} s s'} \quad (3.14)$$

とする。上の双対性変換をやりなおすと、

$$Z(J_{\text{横}}, J_{\text{縦}}) = (\sinh 2J_{\text{横}})^{\frac{N}{2}} (\sinh 2J_{\text{縦}})^{\frac{N}{2}} Z(J'_{\text{横}}, J'_{\text{縦}}) \quad (3.15)$$

ただし

$$\sinh 2J_{\text{横}} \sinh 2J'_{\text{縦}} = 1 \quad \sinh 2J_{\text{縦}} \sinh 2J'_{\text{横}} = 1 \quad (3.16)$$

となる。

⁶相対性(そうたいせい)と音で区別する為に双対性(そうついせい)と呼ぶ。