

研究会報告

$$d^2 x_{ij}^S(\omega)/d\omega|_{\omega=0} \geq 0$$

が成立することに注意すれば充分である。ここで添字 S は対称部分を意味する。エントロピーの増加分も

$$\exp S(t') = \text{Tr} \delta(H^I(t') - E(t'))$$

としてエントロピーを定義すれば

$$\Delta S = S(t') - S(-\infty) = \Delta \mathcal{E}(t')_{n.a.}/T(t')_{ad.} \geq 0$$

と求まる。ここで $\Delta \mathcal{E}(t')_{n.a.}$ は $\Delta \mathcal{E}(t')$ の non-adiabatic な部分, $T(t')_{ad}$ は分布 $\delta(H^I(t') - E(t'))$ に対応する温度であって, δ -関数をパラメーター表示したときのパラメーターの停留点で求まる。エネルギー以外の operator X_n についても

$$\begin{aligned} \langle X_n(t) \rangle_t &= \text{Tr} \rho^I(-\infty) U^\dagger(t) X_n(t) U(t) \\ &= X_n(t) + \sum_{n,m} Y_{mn}(t) \dot{\alpha}_m(t) + \dots \end{aligned}$$

となり $\langle X_n(t) \rangle_t \equiv \varphi_n(t)$ においてこの式を α について解けば Ginzburg-Landau の Exact な公式を得る;

$$\begin{aligned} \sum_m D_{n,m}(\varphi(t)) \dot{\varphi}_m(t) + \frac{\partial F(\varphi(t))}{\partial \varphi_m(t)} + \alpha_n(t) &= 0 \\ D_{n,m}(\varphi(t)) &\equiv \sum_{m',n'} F_{nn'} Y_{m'n'} F_{m'm} \\ F_{nn'} &\equiv \partial^2 F(\varphi)/\partial \varphi_n \partial \varphi_{n'} \end{aligned}$$

ここで $F(\varphi)$ は平衡系での Free energy で $F_{n,m}$ が正定値ゆえ D_{nm} も正定値である。

その他保存則のある時等いろいろな応用ができるが紙面の関係で割愛させて頂く。

詳しくは “Non-Equilibrium Thermodynamics and Its Corrections to Thermal Equilibrium”

R. Fukuda (Keio University preprint) をご参照下さい。

協力現象の統計力学的理論

— コヒーレント異常法とその応用 —

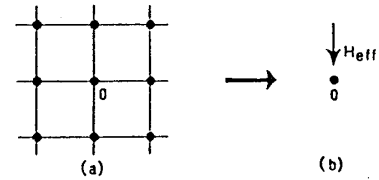
東大・理 鈴木 増 雄

§1. はじめに

自然現象は、多かれ少なかれ互に相互作用をしている多体系の協力現象である。それを一般的に扱う方法が存在するだろうか。もっとも簡単でよく用いられる方法は、平均場近似である。しかし、臨界視

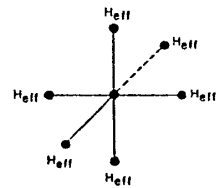
象のように際立った異常性を示す現象では、平均場近似は良くないことが知られている。それに代る強力な方法として、くり込み群の理論がしばしば用いられる。果して、平均場近似では、本当の臨界現象は捉えられないのだろうか。この報告の目的は、これに肯定的に答えることである。

平均場近似とは、よく知られているように、ある粒子またはスピンに着目し、それ以外の粒子等の影響を、第1図のように着目している粒子またはスピンに働く有効的な力によって近似的に表わす方法である。



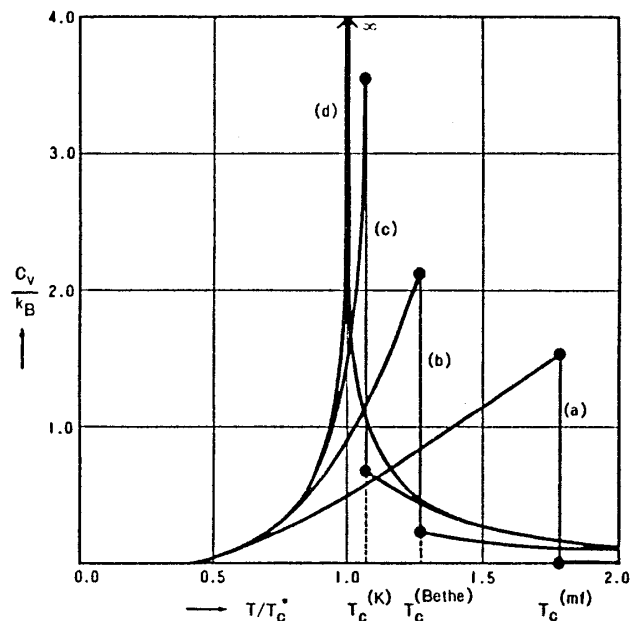
第1図. 平均場近似.

第1図のように、無限大の系を1個の系で近似的に置きかえる方法をワイスの平均場近似という。この近似では、ゆらぎの効果は全く考慮されていない。したがって、この近似で求めた物理量は、定性的にも必ずしも正しいものとは限らない。ゆらぎを取り入れるためには、平均からのずれを考慮できるような近似法を工夫しなければならない。ベータは第2図のように、クラスターを考え、クラスターの内側は統計力学的に正しく扱い、その外側の効果は、平均場 H_{eff} で置きかえた。こうすることによって、小さなクラスターのゆらぎはとり入れられる。この様子を比熱について図示すると第3図ようになる。



第2図. ベータ近似.

第3図からわかるように、ワイスの平均場近似に比べて、ベータのクラスター近似では、 T_C より上でもゆらぎが少しとり入れられて有限の比熱が現れ、少し改善されている。しかし、依然として比熱そのものは、 T_C でも有限であり、ラングウの理論と同じく、比熱のとびも有限である。菊地近似にすると、 T_C の値がオンサーガーの厳密解にもっと近くなり、それと同時に比熱の温度変化もオンサーガーの厳密解に見かけは近くなる。しかしやはり、 T_C 近傍の様子は、ベータ近似の結果と数学的には本質的に同じである。そのため、1935年のベータ近似以来、数多くのクラスター近似が工夫されているにもかかわらず、それらは T_C の変化の議論には利用されたが、臨界指数の研究には使われていなかった。



第3図. ワイス近似(a), ベータ近似(b), 菊地近似(c)及びオンサーガーの厳密解に基づいて求めた2次元イジング模型の比熱の温度変化。¹⁾

研究会報告

§2. クラスタ平均場近似とコヒーレント異常 — 温故知新 —

前節では、協力現象、特に相転移・臨界現象を扱うもっとも古い典型的な方法として平均場近似の特徴を議論した。第3図を見ていると、クラスタのサイズを大きくして、逐次、近似をあげていくにつれて、近似的に得られた相転移点 T_C のごく近傍を除けば、その外側の温度変化は、少しずつ定性的には真の臨界的振舞いに近づくのではないかと想像する人も多いでしょう。筆者自身も20年も前から、同じような見方をしていた。しかし、実際には、 T_C からもっと離れたところは、ワイスの平均場近似で良く記述され、ごく近傍も明らかに平均場近似の振舞いをするので、その中間領域で、非古典的な真の臨界的な振舞いが数値的に推測されるためには、クラスタのサイズを非常に大きくしなければならないことに気づいて、昨年までまともにこの問題を追究しなかった。

最近発見した筆者のコヒーレント異常法^{1)~7)} (Coherent-Anomaly-Method, 略してCAM) は、今までの盲点について、誰もが意味のないものとして無視してきた クラスタ平均場近似で得られる T_C のごく近傍の振舞いから真の臨界的振舞いを推定する 新しい方法である。平均場近似を拡張して、それに新しい見方を導入し、非古典的(すなわち、平均場近似の示す臨界的振舞いとは異なる)臨界指数を求めるという点で、これは、温故知新である。

それでは、どうしてそんなうまいことが可能なのであろうか。一般論^{1)~3), 5)}を説明する前に、わかり易くするために、磁性体の例で、特にその磁化率 $\chi_0(T) \equiv M/H$ に関して議論する。強磁性体の平均場近似は、1907年P. Weissによって提唱された。それによると、磁化率は T_C^* (真の相転移点) の近傍では

$$\chi_0(T) \sim \frac{1}{T - T_C^*} \quad (2.1)$$

のような異常性を示す。これは最初、キュリーによって実験的に発見されたもので、キュリー・ワイスの法則と呼ばれる。しかし、よく知られているように、最近の実験結果によると、

$$\chi_0(T) \sim \frac{1}{(T - T_C^*)^r} \quad (2.2)$$

のように、もっと一般のフラクタルな指標で特徴づけられるような異常性を示す。すなわち、一般には、 $r > 1$ である。このフラクタルな臨界指数を求めることが長い間の大問題であった。これに一つの解答を与えたのがウィルソンのくり込み群の理論である。それは、多くの問題に応用されているが、その基礎には、未解決の問題がいくつか残されている。特に、その理論の収束性は証明不可能と思われる。例えば ϵ -展開は、収束半径零の漸近展開である。

ここでは、新しい方法・物の見方を紹介したい。まず、強調したいことは、今までのように、ワイス近似、ベータ近似、菊地近似、小口近似…と個々別々に扱うのではなく、我々の新しい方法では、近似を全体として促え、そこから、共通の特徴を引き出すという発想が基本になっていることである。いわば、近似の度合に関する解析接続という概念を導入したことになる。

第4図のように、一般のクラスタを考え、その境界のスピンは平均場 $\{H_j\}$ が働くとして、クラスタ外のスピンの影響を有効的にとり入れる。平均場 H_j は、境界に隣接する z_j 個のスピンの期待値 $m =$

$\langle S_j \rangle$ の z_j 倍に比例すると仮定する。すなわち、 $H_j = z_j J m$ 。但し、 J は、相互作用の強さを表わす。クラスターの中心のスピンの期待値 $m_0 = \langle S_0 \rangle$ が m に等しいという条件によって、 m と H_j を決める。簡単のために、 $z_j = z$ 、 $H_j = H$ とすると、一般に、

$$m_0 = \mathcal{F}_L(T) m + \chi_L^{(cl)}(T) H \quad (2.3)$$

のように書ける。但し、 $\mathcal{F}_L(T)$ は、平均場によるフィード

・バックの非線型効果を表わす項で、久保の線型応答理論⁸⁾を用いて、量子系も含めて、クラスターの中心のスピン（または粒子）と境界のスピン（または粒子）との（カノニカル）相関関数で表現される量である。また、 $\chi_L^{(cl)}(T)$ は、サイズ L のクラスターの磁化率を表わす。これは、どんなに L が大きくても、有限系の磁化率であるから、 T に関して解析的であり、何ら発散は示さない。しかし、 $m_0 = m$ の条件より、磁化 m は、

$$m = \frac{\chi_L^{(cl)}(T)}{1 - \mathcal{F}_L(T)} H \equiv \chi_0(T) H \quad (2.4)$$

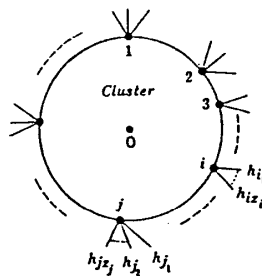
となり、クラスター平均場近似による磁化率 $\chi_0(T)$ は、

$$\chi_0 = \frac{\chi_L^{(cl)}(T)}{1 - \mathcal{F}_L(T)} \simeq \frac{\bar{\chi}(T_C)}{\varepsilon} ; \varepsilon = \frac{T - T_C}{T_C} \quad (2.5)$$

というキュリー・ワイスの法則に従う。ここで、「平均場臨界係数」 $\bar{\chi}(T_C)$ は、近似の度合が良くなると、相転移 T_C が真の相転移点 T_C^* に近づくにつれて、異常に大きくなる。これを「コヒーレント異常」と呼ぶことにする。近似の度合と共にコヒーレント異常になり、どの物理量 Q に対しても、 T_C^* で非古典的に発散する場合には、その平均場臨界係数 $\bar{\chi}$ は、系統的に（coherently）異常に大きくなる。この「コヒーレント異常性（Coherent Anomaly）」の発見が、新しい方法のキーポイントである。^{1)~3)} そこで、この方法を「コヒーレント異常法（Coherent Anomaly Method, 略して CAM）」という。^{1)~3)} もっと具体的に、コヒーレント異常を調べるには、例えば、

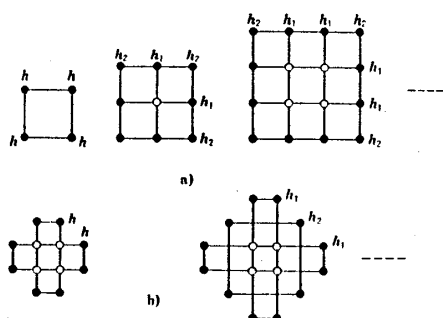
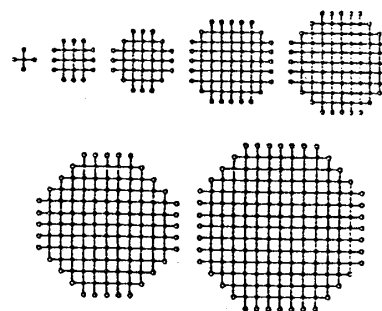
$$\bar{\chi}(T_C) \sim \frac{f_\chi}{(T_C - T_C^*)^\psi} \quad (2.6)$$

と仮定すると便利である。 ψ をコヒーレント異常指数と呼ぶ。明らかに、 $\psi > 0$ とすれば、 $T_C \rightarrow T_C^*$ の極限では、 $\bar{\chi}(T_C) \rightarrow \infty$ となる。現実的には、この極限をとることは不可能であるが、系統的に近似の度合をあげて、 $(T_C - T_C^*)/T_C^* \ll 1$ になれば、 ψ を近似的に評価することができる。もし、2次元イジング模型のように、 T_C^* がわかっていれば、2つの近似、例えば、ワイス近似とベータ近似の結果だけからでも、 ψ の値が推定できる。



第4図. 一般のクラスターとクラスター平均場^{1)~3)} $\{h_{jz_j}\}$.

研究会報告

第5図. 典型的なクラスターの列。^{1)~3)}第6図. 実際の計算に使われたクラスターの列。^{4)~6)}

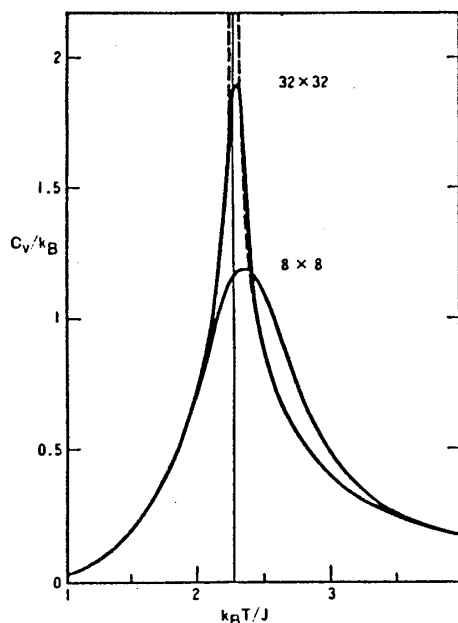
第5図及び第6図のようなクラスターの列をいくつか用いて、それぞれの $\bar{\chi}(T_C)$ を求め、それから、 ψ を精度よく決めることができる。^{4)~6)}

そこで、このコヒーレント異常指数 ψ から、磁化率 $\chi_0(T)$ の臨界指数 r が求められることを次節で示そう。

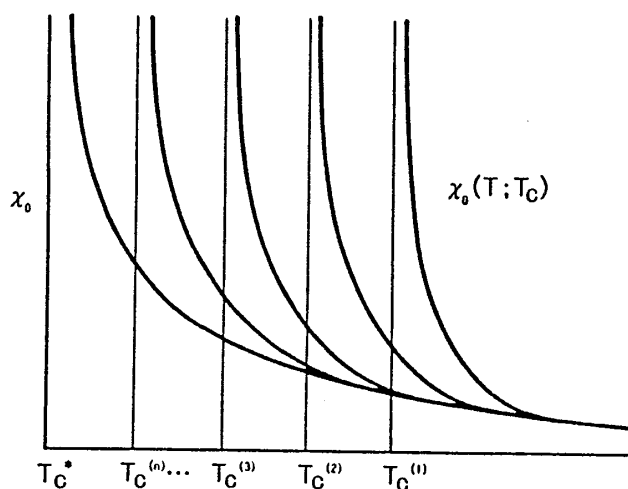
§3. コヒーレント異常と臨界指数

前節では、コヒーレント異常について説明したので、ここでは、さらに、このコヒーレント異常から、臨界指数を求める一般的な関係を議論する。これがCAM理論の中心となる部分である。

もし、第5図のクラスターを単に有限系として、周期的境界条件の下に解くと、その解、例えば、比熱は、第7図のように、すべての温度 T で解析的である。したがって、フィッシャーの有限サイズ・スケー

第7図.¹⁾ 有限系のイジング模型の比熱 (Ferdinand & Fisher⁹⁾ より採録)。

リング理論を用いて、臨界指数を評価するためには、クラスター・サイズ L を充分大きくして、中間温度領域での対数プロットが直線になるようにしなければならない。

第8図.¹⁾ クラスタ平均場近似による磁化率 χ_0 の温度変化。

第7図の 32×32 でも充分ではない。

コヒーレント異常法では、第8図に示されているように、それぞれの臨界点 $T_C^{(n)}$ で $\chi_0(T; T_C^{(n)})$ は発散する。したがって、あいまいさなしに $\bar{\chi}(T_C^{(n)})$ を求めることができる。 $\chi_0(T; T_C^{(n)})$ をそのまま温度の関数としてプロットすると、 $T_C^{(n)}$ を T_C^* に近づけるにつれて、 $\chi_0(T; T_C^{(n)})$ は、第8図に示した通り高温の領域から少しずつ、正しい磁化率に近づいて行く。次に、 $\chi_0(T; T_C^{(n)})$ の $T_C^{(n)}$ 近傍の異常性だけに着目し、それをスケルトン化して

$$\chi_0^{(\text{skel})}(T, T_C) = \frac{\chi_0(T_C)}{T - T_C} + \bar{\chi}(T_C) \quad (3.1)$$

のように表わすと、これは、 $T_C^{(n)}$ と共に、第9図のように変化する包絡線 $\chi_0^{(\text{enve})}(T)$ が存在する。非線型微分方程式（例えばクレローの方程式）の理論から、(3.1) を T_C で微分した式と、もとの (3.1) より、 T_C を消去すると、包絡線 $\chi_0^{(\text{enve})}(T)$ の式は、 T_C^* の近傍では、漸近的に、

$$\chi_0^{(\text{enve})}(T) \simeq \left\{ f_{\chi} \frac{(\psi+1)^{\psi+1}}{\psi^{\psi}} \right\} \times \frac{1}{(T - T_C^*)^{\psi+1}} \quad (3.2)$$

となる。但し、コヒーレント異常の表式

(2.6) を用いた。こうして、近似の列に共通した解、すなわち、包絡線がフラクショナルな臨界指数 r_e $\equiv \psi+1$ を持つことになる。直観的には、この r_e が、今我々が求めようとしている χ_0 の臨界指数 r に等しいものと期待される。

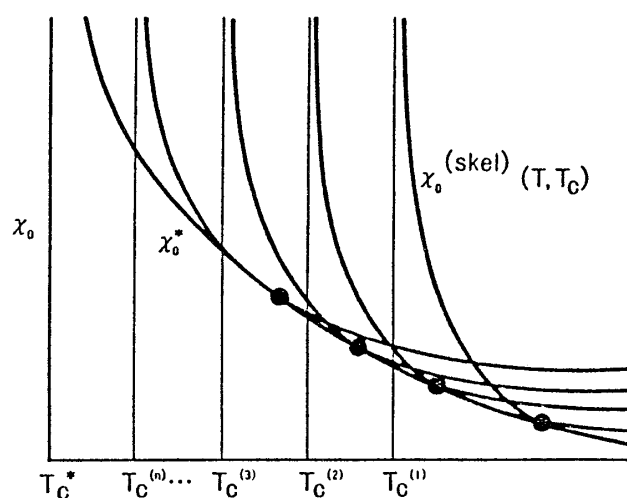
実際、詳しい議論、¹⁾ 特に、近似の度合に関するスケーリング理論を用いると、

$$\chi_0(T; T_C) \simeq \frac{1}{(T - T_C)(T_C - T_C^*)^{\psi}} f^{(\text{sc})} \left(\frac{T - T_C}{T_C - T_C^*} \right) \quad (3.3)$$

のような形になり、 $T_C \rightarrow T_C^*$ の極限での χ_0 は

$$\chi_0^*(T) = \lim_{T_C \rightarrow T_C^*} \chi_0(T; T_C) \simeq \frac{\hat{\chi}}{(T - T_C^*)^{\psi+1}} \quad (3.4)$$

となる。但し、



第9図.¹⁾ スケルトン化した磁化率とその包絡線 $\chi_0^*(T)$ の異常性。

研究会報告

$$\hat{\chi} = \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda \psi_f^{(sc)}(\lambda). \quad (3.5)$$

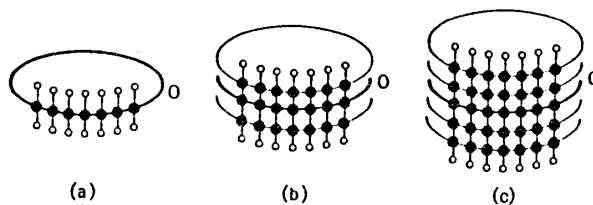
ここでは、(3.5)の存在を仮定した。しかし我々のクラスター平均場近似の理論では、イジング模型に対して

$$\lim_{L \rightarrow \infty} T_C(L) = T_C^* \quad (3.6)$$

が証明でき、⁵⁾ この意味で、理論の収束性が示せる。この点が、ウィルソンのくり込み群の理論とは大きく異なる。

§4. 転送行列とCAM理論

収束性をさらに良くするためには、半無限の系に平均場を与え、転送行列を用いて、 T_C や $\bar{\chi}(T_C)$ を求めると収束の仕方が極めて良くなる。第10図のように2次元イジング模型を転送行列を用いて、クラスター平均場近似を行うと、(a)図の場合には、磁化 $m \equiv \langle S_j \rangle$ に対する状態方程式が



第10図. 半無限の系の端に平均場を加える方法とその具体的な例.^{1), 5), 7)}

$$m = e^{2K} \sinh(2Km + h) \{1 + e^{4K} \sinh^2(2Km + h)\}^{-1/2} \quad (4.1)$$

のようになる。但し、 $K = J/k_B T$ 、及び $h = \mu_B H/k_B T$ 。これより、 $K_C = J/k_B T_C$ は

$$2K_C e^{2K_C} = 1 \quad \therefore K_C = 0.283572 \quad \dots\dots (4.2)$$

となる。また、 $\bar{\chi}^{(tm)} = 0.31905 (\mu_B^2/J)$ となる。一方、平均場近似の $K_C^{(mf)} = 0.25$ 、 $\bar{\chi}^{(mf)} = 0.25 (\mu_B^2/J)$ 、及び厳密な値 $K_C^* = 0.44069$ を用いると、 $\delta T_C^{(mf)} = T_C^{(mf)} - T_C^*$ と $\delta T_C^{(tm)} = T_C^{(tm)} - T_C^*$ が求められ、(2.6)のコヒーレント異常の関係式より、

$$\psi = \log(\bar{\chi}^{(mf)}/\bar{\chi}^{(tm)})/\log(\delta T_C^{(tm)}/\delta T_C^{(mf)}) = 0.763, \quad (4.3)$$

となり、 $r = 1 + \psi = 1.763$ のように非古典的な臨界指数が求められる。これは、厳密な値 $r = 7/4 = 1.75$ に極めて近い値であり、コヒーレント異常法がいかに有効かを示している。しかも、転送行列で半無限のゆらぎをとり入れると収束が速くなる。

さらに、第10図の(b), (c)のように逐次、幅 L を $L=7$ まで計算し、CAM理論を適用すると、 $r=1.751$ となり、⁷⁾非常に良い結果が得られる。

§5. 動的臨界現象

第4図に示したような一般のクラスターで境界に時間に依存した平均場 $H_{\text{eff}}(t) = zJm(t)/\mu_B$ を与

えて、磁化 $m(t)$ をセルフコンシステントに求めると動的 CAM 理論が作れる。平均場の入ったクラスタのハミルトニアン $\mathcal{H}(t)$ は

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_{cl} - M_{\partial Q} \cdot H_{eff}(t) - M_Q \cdot H_{ext} \quad (5.1)$$

となる。但し、 \mathcal{H}_{cl} は、平均場のないときのクラスタの相互作用ハミルトニアン、 M_Q は、クラスタ内の全磁化（すなわち秩序パラメータ）、 $M_{\partial Q}$ は境界の磁化の総和を表わす。磁化 $m(t)$ は

$$m(t) = \langle S_0 \rangle_t = \text{Tr} \rho(t) S_0 \quad (5.2)$$

によって決定される。但し、 S_0 は、クラスタの中心のスピン演算子である。系の密度行列 $\rho(t)$ は、次のフォン・ノイマンの方程式に従う：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = [\tilde{\mathcal{H}}(t), \rho(t)]. \quad (5.3)$$

これを久保⁹⁾に従って、平衡状態の近傍で

$$\rho(t) = \rho_{eq} + \Delta \rho(t) \quad (5.4)$$

と展開して $\Delta \rho(t)$ を H と $H_{eff}(t)$ の一次まで求めると、動的な応答関数 $\chi(\omega)$ が、我々のクラスタ平均場近似で

$$\chi(\omega) = \frac{\chi_Q(\omega)}{1 - \hat{J} \chi_{\partial Q}(\omega)} \quad (5.5)$$

の形に求められる。 $\chi_Q(\omega)$ は、クラスタ内の久保の線型応答を表わし、 $\chi_{\partial Q}(\omega)$ は、境界のスピンとクラスタの中心のスピンとの動的相関関数である。^{1)~3)} (5.5) 式で、 $\omega = 0$ とおき、分母のポールの位置を求めると、相転移点 T_C が求められる。さらに、(5.5) 式を ω の一次まで展開すると、

$$\chi(\omega) = \frac{\bar{\chi}}{\varepsilon + i\omega\bar{\tau}}; \quad \varepsilon = \frac{T - T_C}{T_C} \quad (5.6)$$

の形になる。そこで、この系の緩和時間 τ は、この動的クラスタ平均場近似では、

$$\tau = \frac{\bar{\tau}}{\varepsilon} \quad (5.7)$$

となり、動的平均場臨界係数 $\bar{\tau}$ が、近似の度合をあげるに従って、コヒーレントに異常性を示することになる。今、真の臨界緩和の指数を d 、すなわち、

$$\tau \sim (T - T_C^*)^{-d} \quad (5.8)$$

とすると、

$$\bar{\tau} \sim (T_C - T_C^*)^{-(d-1)} \quad (5.9)$$

研究会報告

となることが示せる。^{1)~5)}したがって、 $\overline{\tau}$ を調べることによって、 λ の値を評価することができる。実際、鈴木一久保¹⁰⁾の動的ワイス平均場近似と間々田一高野¹¹⁾の動的ベータ近似を組み合わせただけでも、3次元キネティックイジング模型の λ が

$$\lambda \simeq 1.35 \quad (5.10)$$

と求まる。¹⁾これは、期待される値に極めて近い。

もっと系統的な応用は、目下進行中である。

§6. その他、一般の協力現象への応用

以上の方法は、上の説明からわかる通り、臨界現象に限らず、他の一般の協力現象にも広く適用可能な方法である。例えば、self-avoiding walk (SAW)、トポロジカルな条件付きの拡散、量子拡散、スピングラス、乱流等への応用が期待される。^{1), 2)}もっと詳しくは、オリジナルの論文^{1)~7)}を参照して頂きたい。宇宙や生命の進化の問題にも将来応用してみたい。

§7. 結 び

ここで説明した方法は、平均場近似という多体問題におけるもっとも単純で物理的な方法を拡張し、それに「コヒーレント異常」という新しい概念を導入することによって、非古典的な漸近的挙動を調べる新しい強力な方法である。この方法は、さらに、漸近形ばかりでなく、クロスオーバー、または、全域的な振舞いを議論するのにも使える。

最後に、この研究の発展に協力し大いに活躍している研究室の香取真理、胡曉両君に感謝致します。

参考文献

- 1) M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn **55** (1986) 4205.
- 2) M. Suzuki, Phys. Lett. **116A** (1986) 375.
- 3) M. Suzuki: in *Quantum Field Theory* ed. F. Mancini (North-Holland, Amsterdam, 1986).
- 4) M. Suzuki and M. Katori, J. Phys. Soc. Jpn. **55** (1986) 1.
- 5) M. Suzuki, M. Katori and X. Hu, J. Phys. Soc. Jpn (準備中)
- 6) M. Katori and M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn (準備中)
- 7) X. Hu, M. Katori and M. Suzuki, J. Phys. Soc. Jpn (準備中)
- 8) R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **12** (1957) 570.
- 9) A. E. Ferdinand and M. E. Fisher, Phys. Rev. **185** (1969) 832.
- 10) M. Suzuki and R. Kubo, J. Phys. Soc. Jpn. **24** (1968) 51.
- 11) H. Mamada and F. Takano, J. Phys. Soc. Jpn. **25** (1968) 675.