

5. 臨界現象に於ける平均場転送行列CAM

東大 理 胡 暁、鈴木 増雄

§ 1 序

相転移、臨界現象に於ける一般的な手法として、繰り込み群や有限サイズスケーリング法とは異なる新しい方法——コヒーレント異常法が鈴木^{1, 2, 3)}によって提唱された。コヒーレント異常法は、よく知られている平均場近似に基づき、いままで捨てられていた情報をフルに利用することによって真の臨界現象を調べ得る強力な方法である。

平均場近似では、波数の小さいゆらぎの効果は平均場をもって表し、波数の大きいゆらぎは正確に扱うという点において、繰り込み群とは対照的である。一方、平均場近似ではセルフ・コンシステンシイ条件によって相転移、臨界現象に於ける非線型性をいち早く捉えることによって、有限系の状態和しかとっていないにも関わらず、その解が相転移を示すところにそれは有限サイズスケーリング法と著しく異なる。しかし、いくら大きい有限系での平均場近似を行っても、近似的臨界点こそ改善されるが、臨界指数は古典値のまま変わらない。それ故、平均場近似は古典近似と呼ばれ、真の臨界現象は得られないと思われていた。CAM理論のもっとも重要なポイントは、いままで別々に考えられていた平均場近似を系統的に捉え直し、近時臨界点が真の値に近づくにつれて、近似的臨界点での古典的発散の係数（平均場臨界係数）が異常を示すことを突き止め、その異常の度合から真の臨界指数の古典的指数からのずれが分かることを理論的に示したことである。実際の応用に於ては、CAMは古典的指数からのずれを調べることによって真の臨界指数を計算するので、有限サイズスケーリング法よりも、ある程度小さい有限系での平均場近似で精度の良い結果が得られることが予想される。

CAMを用いて、真の臨界指数及び臨界点を非常に高い精度で評価するには、次の二つのことが大事である。一つは、如何にして有限系内の自由度を効率よく扱うかであり、もう一つは、如何にセルフ・コンシステンシイ条件をはかすかである。なぜならば、正確に扱える自由度が多ければ多いほど、ゆらぎの効果が多くとりいれられて、平均場が系に直接的に与える影響が小さくなり、もとの系のバルクの性質が見えるし、良いセルフ・コンシステンシイ条件によっ

研究会報告

ては、同じ有限系を扱っても、より良い近似的臨界点を得られ、系の臨界領域に迫ることができるからである。

そこで、クラスターなどの有限系の拡張として、一方向に無限に長く、残りの方向は有限である、いわば準有限系をとる。このような準有限系内の自由度は転送行列法を用いて効率よく扱うことができるし、断面の境界に平均場をかけ、その断面を大きくしていくことによって平均場近似列が構成される。このような近似に基づくCAMを平均場転送行列CAMと呼ぶ。特に二次元では、準有限系は帯になり、平均場には並進対称性があるから、平均場を中心スピンの期待値に等しいように置く、いわゆるワイス型近似以外に、境界にあるスピンの期待値が中心スピンのそれに等しくなるように平均場を決める、いわゆるベーテ型近似も系統的に実行できる。

本報告では二次元正方格子上のイジング・スピン系での平均場転送行列CAMの応用を紹介し、色々な静的臨界指数が如何にして、CAMによって高い精度で計算されるかを示し、CAMの枠組み内で、それらの臨界指数の満たすべき関係を明かにする。^{4, 5)}

§ 2 平均場転送行列法及びベーテ型近似

二次元イジング・スピン系の有効ハミルトニアンは次のようになる

$$(1) \quad \mathcal{H}_{\text{eff}} = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H_m \sum_{i \in \partial \Omega} S_i - H \sum_{i \in \Omega} S_i$$

系の一例あたりの自由エネルギーは、転送行列の最大固有値 λ_{\max} によって与えられるので、

$$(2) \quad F = -k_B T \ln \lambda_{\max}(J, T, H_m, H)$$

中心スピン及び境界スピンの期待値は λ_{\max} の平均場及び外場に対する微係数 a 、 b 、 c 、 d 、 e 、 f を用いて表せる

$$(3) \quad \langle S_c \rangle = a H_m + b H_m^3 + c H$$

$$(4) \quad \langle S_b \rangle = d H_m + e H_m^3 + f H$$

ベーテ型近似においては、我々はセルフ・コンシステンシイ条件として

$$(5) \quad \langle S_c \rangle = \langle S_b \rangle$$

と置き、上の式が成り立つように平均場を決める。高温側では、平均場の高次を無視して、平均場が次のように外場と関係づけられる：

$$(6) \quad H_m = [(f - c)/(a - d)] H$$

それによってスピンの期待値が次のように与えられる：

$$(7) \quad \langle S \rangle \simeq [(af - cd)/(a - d)] H$$

この近似においては、近似臨界点が

$$(8) \quad a = d$$

によって決まり、高温側から臨界点に近づくとつれて、帯磁率が発散する：

$$(9) \quad \chi \simeq \bar{\chi}[N, K_c(N)]\epsilon^{-1}$$

臨界点直上では、平均場の3次の項を考慮すれば、臨界磁化が次のように与えられることが分かる：

$$(10) \quad \langle S \rangle = \bar{m}_c[N, K_c(N)]H^{1/3}$$

低温側では外場がなくても平均場が有限であり、対称性が自発的に破れている：

$$(11) \quad \langle S \rangle = \bar{m}_s[N, K_c(N)]|\epsilon|^{1/2}$$

比熱に関しては、高温側ではゆらぎからの寄与しかないので、(2)にある自由エネルギーを温度に関する微分から計算できる。一方、低温側では、自由エネルギーはゆらぎ以外に自発磁化からの寄与が加えられる。その増分は式(3)、(4)から導かれる状態方程式から

$$(12) \quad \Delta F = -[(a-d)/2a(f-c)]\langle S \rangle^2 - [(b-e)/4a^3(f-c)]\langle S \rangle^4$$

となることが判り、その温度に関する微分から比熱の増分 ΔC が得られる。

§ 3 非一様系でのベータ型近似

相関長に関する平均場近似を構成するため、半無限系を考え、その境界にかかる外場に誘導される磁化の境界からの距離の依存性を平均場近似を用いて調べる。境界から X 離れた境界に平行な線を中心線とする幅 N の帯をとる。一様系と同じように帯内の自由度は正確に扱うが、それ以外の部分の効果は平均場で表す。但し、今の場合、帯の両側にかかる平均場は等しくなく、それぞれの境界からの距離の関数としなければならない。

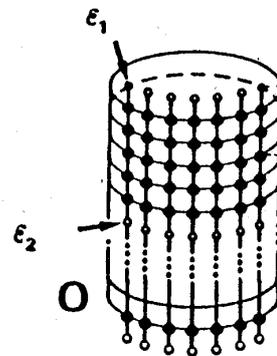


図1 半無限系でのベータ近似

(3)、(4)の代わりに我々は次の式を得る：

$$(13) \quad \langle S_c(X) \rangle = a[\epsilon_1(X) + \epsilon_2(X)] + b\epsilon_1(X)^3$$

$$(14) \quad \langle S_u(X) \rangle = d_1\epsilon_1(X) + d_2\epsilon_2(X) + e\epsilon_1(X)^3$$

$$(15) \quad \langle S_l(X) \rangle = d_2\epsilon_1(X) + d_1\epsilon_2(X) + e\epsilon_1(X)^3$$

但し、 $S_u(X)$ ($S_l(X)$) は X にある帯の上側(下側)の境界にあるスピンを表す。

一方、 $L = (N-1)/2$ とおくと、 $S_u(X)$ ($S_l(X)$) は $S_c(X+L)$ ($S_c(X-L)$)

研究会報告

L)) と同じスピンを表すので、次の関係式が成り立つだろう :

$$(16) \quad \langle S_c(X+L) \rangle = \langle S_u(X) \rangle, \quad \langle S_c(X-L) \rangle = \langle S_l(X) \rangle$$

しかし、 $S_c(X+L)$ ($S_c(X-L)$) は (13) から計算されるものである。上式は (5) に代わる非一様系でのベーテ型セルフ・コンシステンシイ条件である。

これらの式から次の差分方程式が得られる

$$(17) \quad \sigma(X+L) + \sigma(X-L) = [d/a]\sigma(X) + [(e-b)/4a]\sigma(X)^3$$

但し、ここで関係式 $d_1 + d_2 = d$ を用いた。

(17) は (8) で決められた、系のバルクの相転移点より高温側では、指数関数的に減衰する解を持ち、相関長 ξ を与える :

$$(18) \quad \sigma(X) \simeq A \exp(-X/\xi), \quad \xi \simeq \bar{\xi}[N, K_c(N)]\epsilon^{-1/2}$$

但し、ここでは $\sigma(X) = \epsilon_1(X) + \epsilon_2(X)$ 、3次の項は無視した。臨界点直上では、3次の項を考慮すれば、べき乗的な減衰が得られる、

$$(19) \quad \langle S(X) \rangle \simeq \bar{m}_i/X$$

上の定式化は次のような一番簡単な非一様な外場中の系にも応用できる :

$$(20) \quad H(X) = H_0 \cos(qX)$$

この時、(17) において、3次の項の代わりに外場の1次に比例した項が現れる。ここで特別解として

$$(21) \quad \sigma(X) = AH(X)$$

を求めると、系の臨界点での外場 (20) に対する応答が得られる :

$$(22) \quad \chi_q \simeq \bar{\chi}_q[N, K_c(N)]/q^2, \quad q \ll 1/N$$

これは平均場近似においては相関関数の臨界指数 η がゼロになることに対応する。

§ 4 CAMによる臨界点、臨界指数の計算

前の二章で、我々は2次元イジングスピン系の相転移に於ける静的臨界現象を平均場近似を用いて調べた。よく知られているように、このように得られた臨界指数は、平均場近似を構成するに使われた帯の幅によらず、古典値のまま変わらない。しかし、これはCAMの立場からみると都合の良いことで、この古典値と真の値のずれは、近似を系統的に行った時に得られる近似的臨界点の真のものからのずれ (近似の度合) と平均場臨界係数の関係 (コヒーレント異常) から計算される。つまり、次のコヒーレント異常関係式が導かれる :

$$(23) \quad \bar{Q} \simeq B\delta(N)^{-\psi}, \quad \delta(N) = [T_c(N) - T_c^*]/T_c^*$$

$$(24) \quad \varphi = \varphi_0 + \psi/\mu$$

我々は幅3、5、7の帯について数値計算を行い、幅が大きくなるにつれて、それぞれの物理量の平均場臨界係数が、その古典値の真の値からのずれに従い、系統的に大きくなったり、小さくなったりして、コヒーレント異常を示すことを確かめた。定量的には一様な外場への応答関数については、3組のデータを用いて、(23)にある3つのパラメータを決めた。帯磁率から求められた臨界点 T_c^* 及び5、7の帯の平均場臨界係数を用いて、他の臨界指数を計算した。

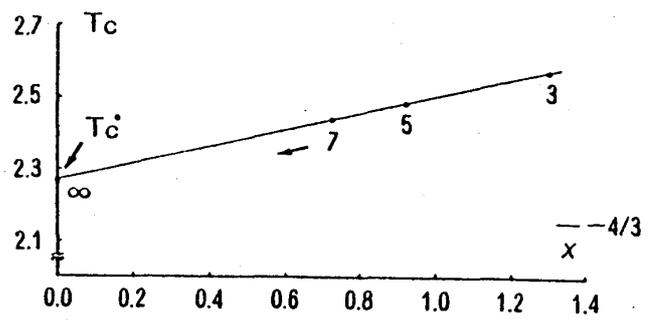


図2 $x [N, T_c(N)]^{-4/3} - T_c$ グラフ、直線は $r=7/4$ を意味する。

但し、高温側の比熱に関しては、(23)で決めて真の臨界点は $T_c^*=1.306$ となり、他の物理量からの計算結果と矛盾するので、対数でフィットした結果 $T_c^*=2.288$ が得られ、比熱は対数発散と結論した。一方、比熱のギャップを示す指数 α_g が負であることはギャップが近似の割合を上げるにつれて小さくなることを意味する。また、 η' は半無限系の誘導磁化のべき乗的減衰を記述する臨界指数である。

T_c^*	r	β	δ	α	α_Δ	ν	η	η'
2.271	1.749	0.131	15.1	0	-0.026	0.97	0.21	0.134
2.269	1.75	0.125	15	0	-	1	0.25	0.125

比較のため、上の表に厳密解あるいはスケーリング則から予測される臨界指数の値を下欄に記入した。結果から分かるように、ベーテ型平均場転送行列CAMは割合小さい系から無限系での真の臨界点や臨界指数を高い精度で計算できる。

§5 スケーリング則

臨界指数に関するスケーリング則もCAMの枠組内で解析的に成り立つことが判る。なぜならば、ここで行われた平均場近似は全てオーダパラメータの平均場や外場の展開(3)(4)に帰着し、あらゆる平均場係数はそれらの展開にある係数から求まるから、それらは独立ではなく、次のような関係式で結ばれる

研究会報告

$$(25) \quad \bar{m}_c^3 = \bar{m}_s^2 \bar{\chi}, \quad \bar{m}_s^2 = \bar{\chi} \Delta C, \quad \bar{\chi} = \bar{\chi}_q \bar{\xi}^2, \quad \bar{m}_i = \sqrt{2\bar{\xi}} \bar{m}_s$$

故に、近似の度合を上げていくときそれぞれの平均場臨界係数が勝手な異常を示すのではなくて、異常の度合にいくつかの制約関係がある。CAMの立場からみれば、それらの関係がまさに真の臨界指数が満たすべきスケーリング則にほかならない。実際に(25)に(23)を代入し、それぞれの臨界指数の古典値を使えば、(25)が次のようなスケーリング則に化ける

$$(26) \quad \beta(\delta - 1) = \gamma, \quad \alpha_\Delta + 2\beta + \gamma = 2, \quad \nu(2 - \eta) = \gamma, \quad \nu\eta^i = \beta$$

このようにスケーリング則を満たしている古典的臨界指数、及びそれらの真の臨界指数のずれの間に成り立つ関係から、真の臨界指数の満たすべきスケーリング則が導けることは、CAMの非常に面白い理論構造のひとつの側面である。

また、我々の数値計算の結果が高い精度で上のスケーリング則を満たすことも確かめられた。

§ 6 終わりに

このように、イジング・スピン系の色々な静的臨界指数をCAMによって非常に高い精度で計算した。以上は一つの例に過ぎないが、この計算の結果によって、CAMという新しい一般的な手法はその他の系の相転移、臨界現象の研究に非常に有望であることがいえるだろう。2次元では、平均場転送行列CAMが特に有効なので、例えばパーコレーション問題やアニマル問題への応用が目下進んでいる。

参考文献：

- 1) M. Suzuki: J. Phys. Soc. Jpn. 55(1986) 4205;
- 2) M. Suzuki, M. Katori and X. Hu: ibid 56(1987) 3092.
- 3) M. Katori and M. Suzuki: ibid 56(1987) 3113;
- 4) X. Hu, M. Katori and M. Suzuki: ibid 56(1987) 3865;
- 5) X. Hu and M. Suzuki: ibid 57(1988) 791.