

# 統計力学特論 (学部) ・ 統計力学 I(大学院)

宮下 精二

TA: 鳩村 拓矢 (宮下研 M2)

2015 年 7 月 17 日

このノートは、平成 27 年度夏学期の「統計力学特論 (学部)・統計力学 I(大学院)」の講義ノートです。表紙の日付は最終更新日を表します。講義は宮下先生により行われてますが、このノートは宮下研 M2 の鳩村が作成しています。誤植等を見つけたら鳩村 ([hatomura@spin.phys.s.u-tokyo.ac.jp](mailto:hatomura@spin.phys.s.u-tokyo.ac.jp)) まで連絡をお願いします。なお、板書に追記や省略を行っているので、実際の講義の板書とは異なる部分が存在します。

初回のスライドによる導入を以下に簡単にまとめておきます。

Keywords:

1. 気相・液相相転移 (gas-liquid phase transition)
2. 臨界点 (critical point)
3. 格子気体模型 (lattice gas model) → イジング模型 (Ising model)

$$H = -\phi_0 \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j - \mu \sum_i n_i, \quad n = 0 \text{ (for vacancy)}, \quad n = 1 \text{ (for occupation)}. \quad (1)$$

$$\downarrow \quad \sigma_i = \pm 1, \quad n_i = \frac{\sigma_i + 1}{2}. \quad (2)$$

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \quad \sigma_i = 0 \text{ (for vacancy)}, \quad \sigma_i = 1 \text{ (for occupation)}, \quad (J = \phi_0/4, \quad h = (z\phi_0 + 2\mu)/4) \quad (3)$$

4. 統計力学は相転移を記述できるか? → L. Onsager (1944), C. N. Yang (1952)
5. モンテカルロシミュレーション (Monte Carlo simulation)
6. XY 模型, Potts 模型

また、全体を通しての注意点として、格子系を考えると、特に記載がない限りは正方格子を仮定しています。ただし、次元 (配位数) はそのときによってことなります。

# 目次

第 1 章	平均場近似	5
1.1	平均場近似	5
1.2	平均場近似の自由エネルギー	7
1.3	現象論的自由エネルギー (phenomenological free energy, Ginzburg-Landau (GL) の自由エネルギー) $f(m, T, H)$	7
1.4	Bragg-Williams 近似	8
1.5	磁場中での相転移	9
1.6	空間依存性がある場合の平均場近似	10
第 2 章	ゆらぎ	15
2.1	ゆらぎ	15
2.2	平均場近似でのゆらぎ	16
2.3	低次元でのゆらぎ	17
2.4	くりこみ群の考え方	20
2.5	波数空間くりこみ群	22
2.6	Berezinskii-Kosterlitz-Thouless 転移 [3]	24
第 3 章	転送行列法	27
3.1	経路積分と転送行列	27
第 4 章	フラストレーション	31
4.1	フラストレーション	31
第 5 章	Monte Carlo 法	33
5.1	Monte Carlo 法	33
5.2	マルコフ鎖, 確率過程, マスター方程式	33
5.3	量子系の統計力学, 量子モンテカルロ法	35
第 6 章	レポート課題	37
6.1	中間レポート (2015/06/01 締切)	37
	参考文献	39



## 第 1 章

# 平均場近似

### 1.1 平均場近似

まず, 以下のような Ising Hamiltonian とその分配関数を考えます:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (1.1)$$

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum \sigma_i, \quad \sigma_i = \pm 1, \quad (1.2)$$

$$\sum \sigma_i = M. \quad (1.3)$$

$J = 0$ , すなわち, 独立なスピンの集まりを考えた場合, 分配関数と自由エネルギーは以下ようになります:

$$Z = \sum_{\sigma_i = \pm 1} e^{\beta H \sum \sigma_i} = \prod_i \left( \sum_{\sigma_i = \pm 1} e^{\beta H \sigma_i} \right) = (2 \cosh(\beta H))^N, \quad (1.4)$$

$$F = -k_B T N \ln[2 \cosh(\beta H)]. \quad (1.5)$$

$J \neq 0$  の場合の分配関数は,

$$Z = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + \beta H \sum \sigma_i}, \quad (1.6)$$

となり, 一般には解くことができません. そこで, これを解析するために用いる手法の一つが平均場近似です. 平均場近似では, 図 1.1 のように,  $i$  番目のスピンに注目したときに, その最近接のスピン  $\sigma_j$  を平均値  $\langle \sigma_j \rangle = m$  で置き換える近似です. すなわち, 式 (1.2) は,  $-J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum \sigma_i \rightarrow -(Jzm + H) \sum \sigma_i \equiv \mathcal{H}_{\text{MF}}^{(1)}$  のようになります. ただし, ここで  $z$  は最近接のスピンの数を表します. 例えば, 2次元正方格子を考えた場合には  $z = 4$  のようになります. この

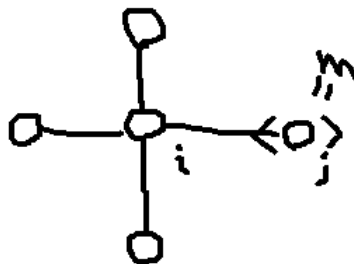


図 1.1 平均場近似のイメージ

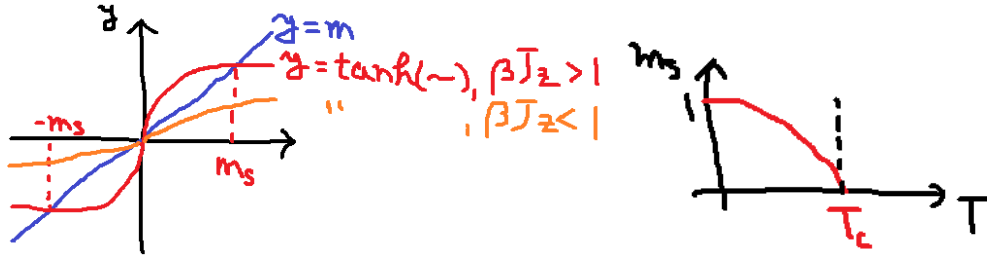


図 1.2 自己無撞着方程式の解

平均場近似の下では、分配関数の計算を実行できます。また、磁化も計算することができて、

$$m = \langle \sigma_i \rangle = \frac{\text{Tr} \sigma_i e^{\beta \mathcal{H}_{\text{MF}}^{(1)}}}{\text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{MF}}^{(1)}}} = \frac{\sum_{\sigma} \sigma e^{\beta(Jz m + H)\sigma}}{\sum_{\sigma} e^{\beta(Jz m + H)\sigma}} = \tanh(\beta Jz m + \beta H), \quad (1.7)$$

となります。この式を自己無撞着方程式と言います：

$$m = \tanh(\beta Jz m + \beta H). \quad (1.8)$$

自己無撞着方程式の解は、 $H = 0$  のときには図 1.2 のようになっています。  $\beta Jz < 1$  (高温) のときには  $m = 0$  のみで自発磁化は存在せず、  $\beta Jz > 1$  (低温) のときに  $m = 0, \pm m_s$  となり自発磁化が生じます。

次に、この模型の臨界指数について見ていきます。式 (1.8) を  $H = 0$  のときにテイラー展開すると、

$$m = \tanh(\beta Jz m) = \beta Jz m - \frac{1}{3}(\beta Jz m)^3 + \dots, \quad (1.9)$$

となるので、

$$m_s \propto (T_c - T)^{1/2} = (T_c - T)^{\beta}, \quad (1.10)$$

であることがわかります。すなわち、自発磁化の臨界指数は

$$\beta = 1/2, \quad (1.11)$$

となります。帯磁率については、 $m = m_s + \chi H$  として式 (1.8) を  $H$  について展開すれば、

$$m_s + \chi H = \tanh(\beta Jz m_s) + \frac{\beta(Jz\chi + 1)H}{\cosh^2(\beta Jz m_s)} + \dots, \quad (1.12)$$

となるので、

$$\chi \propto (T - T_c)^{-1} = (T - T_c)^{-\gamma}, \quad (1.13)$$

なることがわかります。すなわち、帯磁率の臨界指数は

$$\gamma = 1, \quad (1.14)$$

です。比熱の臨界指数は後で定義する自由エネルギーの微分から計算できます。

## 1.2 平均場近似の自由エネルギー

簡単のため  $H = 0$  の場合を考えます.  $\sigma_i = (\sigma_i - m) + m$  として, ゆらぎ  $(\sigma_i - m)$  が微小量であることを仮定すれば,

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i - m + m)(\sigma_j - m + m) \\ &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} [(\sigma_i - m)(\sigma_j - m) + m(\sigma_j - m) + m(\sigma_i - m) + m^2] \\ &\approx -J \sum_{\langle i,j \rangle} [m(\sigma_i + \sigma_j) - m^2] = -Jzm \sum_{i=1}^N \sigma_i + \frac{JzN}{2} m^2 \equiv \mathcal{H}_{\text{MF}},\end{aligned}\quad (1.15)$$

となります. このとき, 分配関数と自由エネルギー (ただし, 自由エネルギーは  $H \neq 0$  の表式) は

$$\begin{aligned}Z_{\text{MF}} &= \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{MF}}} \\ &= \text{Tr} e^{\beta Jzm \sum \sigma_i - \frac{\beta JzN}{2} m^2} \\ &= [2 \cosh(\beta Jzm)]^N e^{-\frac{\beta JzN}{2} m^2} \\ &= e^{-\left\{ \frac{\beta Jz}{2} m^2 - \ln[2 \cosh(\beta Jzm)] \right\} N},\end{aligned}\quad (1.16)$$

$$F(m, T, H) = F(m) = -k_B T \ln Z_{\text{MF}} = \frac{Jz}{2} m^2 - k_B T \ln[2 \cosh(\beta Jzm + \beta H)],\quad (1.17)$$

となります. この自由エネルギー  $F(m, T, H)$  は秩序変数に関するポテンシャルのようなものを表しており, 通常熱力学的な自由エネルギー  $F(T, H)$  との違いに注意が必要です. この自由エネルギーが秩序変数  $m$  について極小をとることを課せば,

$$\frac{\partial F(m)}{\partial m} = 0 \rightarrow Jzm - k_B T \tanh(\beta Jzm + \beta H) \beta Jz = 0,\quad (1.18)$$

すなわち,

$$m = \tanh(\beta Jzm + \beta H),\quad (1.19)$$

となり, 自己無撞着方程式が得られます.

## 1.3 現象論的自由エネルギー (phenomenological free energy, Ginzburg-Landau (GL) の自由エネルギー) $f(m, T, H)$

次に, 現象論的自由エネルギーを考えます. 対称性の議論などから, 自由エネルギーが秩序変数  $m$  の冪,

$$f(m) = am^2 + bm^4 + cm^6 + \dots - hm,\quad (1.20)$$

で与えられると仮定します. このとき, 状態方程式は

$$\frac{\partial f(m)}{\partial m} = 2am + 4bm^3 - h + o(m^3),\quad (1.21)$$

となります. 物理的な要請より,  $b > 0$  なので,  $a > 0$  では自発磁化は生じず,  $a < 0$  のときに自発磁化が存在します (図 1.3). つまり,  $a$  は  $(T - T_c)$  の奇数次であることがわかります. さらに, 式 (1.13) との整合性から 1 次, すなわち,

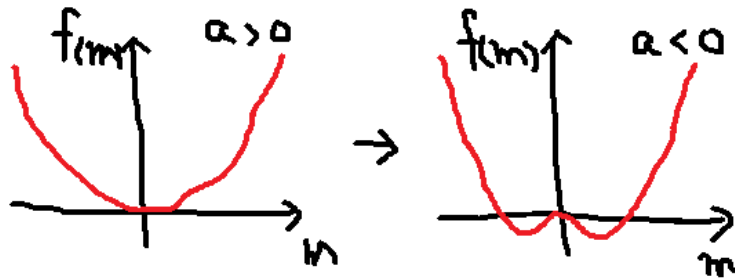


図 1.3 現象論的自由エネルギーによる自発磁化

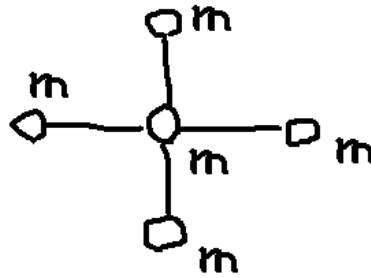


図 1.4 Bragg-Williams 近似のイメージ

$a = a_0(T - T_c)$  と書けることがわかります:

$$a > 0, \quad 2am - h = 0, \quad m = \frac{h}{2a} = \chi h, \quad \chi = \frac{1}{2a} = \frac{1}{2a_0(T - T_c)}, \quad (1.22)$$

$$a < 0, \quad 2|a| = 4bm^2, \quad m = \sqrt{\frac{|a|}{2b}} \sim |T - T_c|^{\frac{1}{2}}. \quad (1.23)$$

$T = T_c$  では、 $4bm^3 = h$  となるので、 $m \propto h^{\frac{1}{3}} = h^{\frac{1}{2}}$  より  $\delta = 3$  が得られます。

## 1.4 Bragg-Williams 近似

この節では別のタイプの平均場近似である Bragg-Williams 近似 (図 1.4) を取り扱います。自由エネルギーは、

$$F = E - TS, \quad (1.24)$$

与えられます。ここで、 $E$  はエネルギー

$$E = -N \frac{Jz}{2} m^2 - HNm, \quad (1.25)$$

であり、 $S$  は情報論的エントロピー

$$S = -k_B \sum_{s: \text{all states}} p(s) \ln p(s), \quad (1.26)$$

です。  $p(s)$  を

$$p(s) \rightarrow \prod_{i=1}^N p_i(\sigma_i), \quad (1.27)$$

$$p_i(\sigma_i) = \begin{cases} p_i(+), \\ p_i(-), \end{cases} \quad (1.28)$$



とすれば,

$$\begin{aligned} S &= -k_B \sum_{\{\sigma_i = \pm 1\}} p_1 p_2 \cdots p_N \ln p_1 \cdots p_N \\ &= -k_B N [p(+)\ln p(+) + p(-)\ln p(-)] \\ &= -k_B N \left\{ \frac{1+m}{2} \ln \frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2} \ln \frac{1-m}{2} \right\}, \end{aligned} \quad (1.29)$$

$$F = -N \frac{Jz}{2} m^2 - HNm + k_B T N \left\{ \frac{1+m}{2} \ln \frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2} \ln \frac{1-m}{2} \right\}, \quad (1.30)$$

となります。ここで

$$\begin{cases} p_i(+)+p_i(-)=1 \\ p_i(+)-p_i(-)=m \end{cases}, \quad (1.31)$$

すなわち,

$$\begin{cases} p_i(+)=\frac{1+m}{2} \\ p_i(-)=\frac{1-m}{2} \end{cases}, \quad (1.32)$$

を用いました。

続いて、ここで得られた自由エネルギーが 1.1, 1.2 節で得られた結果とコンシステントかどうかみていきます。状態方程式

$$\frac{\partial F(m)}{\partial m} = 0, \quad (1.33)$$

を課すと,  $f = F/N$  として

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial m} &= -Jzm - H + k_B T \left\{ \frac{1}{2} \ln \frac{1+m}{2} + \frac{1+m}{2} \frac{1}{1+m} - \frac{1}{2} \ln \frac{1-m}{2} + \frac{1-m}{2} \frac{-1}{1-m} \right\} \\ &= -Jzm - H + \frac{1}{2} k_B T \ln \frac{1+m}{1-m} = 0, \end{aligned} \quad (1.34)$$

となります。これは

$$m = \tanh(\beta Jzm + \beta H), \quad (1.35)$$

と等しいので, Bragg-Williams 近似はこれまでの平均場近似とコンシステントであることがわかりました。ただし、ここで関係式

$$\tanh^{-1} X = \frac{1}{2} \ln \frac{1+X}{1-X}, \quad (1.36)$$

を用いました。

## 1.5 磁場中での相転移

1.3 節の図 1.3 は、外場が 0 であるときの概略図でした。この節では、外場が有限の場合を考えたいと思います。

外場が有限のときには、図 1.5 のように、二つの縮退した基底状態にエネルギー差が生じます。すなわち、真の平衡状態である基底状態と、局所的には安定性をもつが平衡状態ではない準安定状態 (metastable state) の二つが現れます。また、さらに強い外場を加えると、準安定状態は消滅します。このような点をスピノーダル点 (spinodal point) といいます。

続いて、磁化過程 (magnetization process)  $m(H)$  を通して、準安定状態とスピノーダル点を理解していきます。図 1.6 は自己無撞着方程式の解の概略図になってますが、s.p. がスピノーダル点、ヒステリシスを形成している部分で基底状態でない部分が準安定状態になっています。ここで、 $m(H)$  は  $H$  について多価関数であるが、 $H$  は  $m$  についてそう

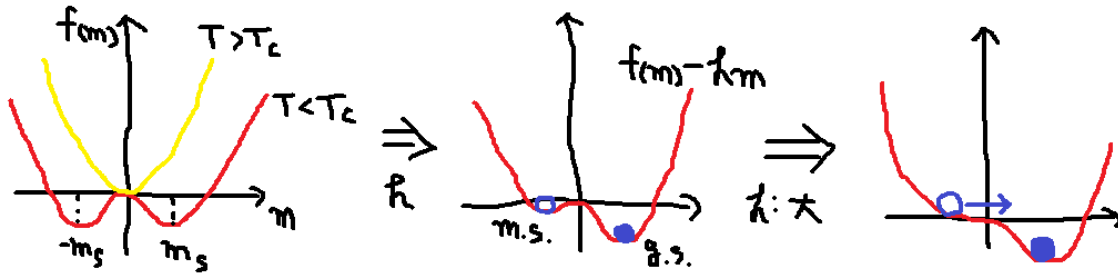


図 1.5 準安定状態とスピノーダル点

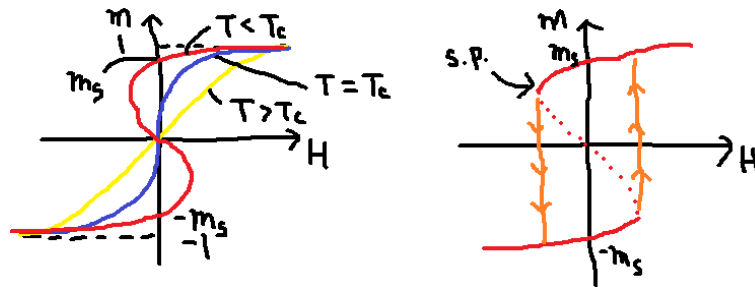


図 1.6 磁化過程と準安定状態およびスピノーダル点

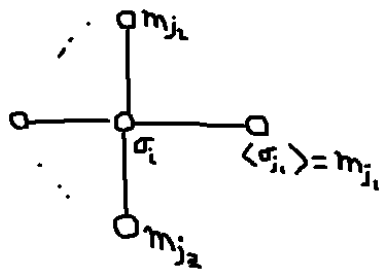


図 1.7 空間依存性がある場合の平均場近似のイメージ

ではないので、容易に扱うことができます。すなわち、

$$m = \tanh(\beta J z m + \beta H), \tag{1.37}$$

を  $H$  について解けば

$$H(m) = \frac{k_B T}{2} \ln \frac{1+m}{1-m} - J z m, \tag{1.38}$$

となるので、これを  $m$  で微分して整理すればスピノーダル点やそこでの磁化の値などを得ることができます。

### 1.6 空間依存性がある場合の平均場近似

今までの平均場近似では、注目している格子点のまわりはすべて同じとして取り扱ってきましたが、この節ではまわりの格子点の磁化を区別した場合を考えます (図 1.7)。

格子点  $i$  の磁化は

$$m_i = \langle \sigma_i \rangle = \frac{\text{Tr} \sigma_i e^{\beta J(m_{j_1} + \dots + m_{j_z})\sigma_i + \beta H_i \sigma_i}}{\text{Tr} e^{\beta J(\dots)\sigma_i + \beta H_i \sigma_i}}, \tag{1.39}$$

で与えられます。すなわち、

$$m_i = \tanh[\beta J(m_{j_1} + \dots + m_{j_z}) + \beta H_i], \tag{1.40}$$

となります。  $T > T_c$ ,  $m_i \ll 1$  のときには,

$$m_i \approx \beta J(m_{j_1} + \cdots + m_{j_z}) + \beta H_i, \quad (1.41)$$

とすることができますが、Fourier 変換

$$\begin{cases} \langle \sigma_{\vec{k}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \langle \sigma_j \rangle e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} \\ \langle \sigma_j \rangle = \sum_{\vec{k}} \langle \sigma_{\vec{k}} \rangle e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} \end{cases}, \quad (1.42)$$

を用いると,

$$\sum_{\vec{k}} \langle \sigma_{\vec{k}} \rangle e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} = \beta J \sum_{\vec{k}} \langle \sigma_{\vec{k}} \rangle (e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_{j_1}} + \cdots + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_{j_z}}) + \beta H_i, \quad (1.43)$$

となります。さらに、両辺に  $e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_i}$  をかけて  $i$  について和をとれば,

$$\langle \sigma_{\vec{k}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \beta H_i e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} + \beta J (e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_1} + \cdots + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_z}) \langle \sigma_{\vec{k}} \rangle, \quad (1.44)$$

を得ます。すなわち,

$$\langle \sigma_{\vec{k}} \rangle = \frac{\frac{1}{N} \sum_i \beta H_i e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}}{1 - \beta J \sum_m e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_m}}, \quad (1.45)$$

となります。ここで,

$$\begin{aligned} 1 - \beta J \sum_m e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_m} &= 1 - \beta J \sum_{m=1}^{z/2} 2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{\delta}_m) \\ &= 1 - \beta J z + \beta J (k_x^2 + k_y^2 + \cdots) + \cdots \\ &= 1 - \beta J z + \beta J k^2 + \cdots, \end{aligned} \quad (1.46)$$

となるので、十分小さい  $k = |\vec{k}|$  に対して

$$\langle \sigma_{\vec{k}} \rangle \approx \beta \frac{H_{\vec{k}}}{1 - \beta J z + \beta J k^2}, \quad (1.47)$$

を得ます。ここで,

$$H_{\vec{k}} \equiv \frac{1}{N} \sum_i H_i e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}, \quad (1.48)$$

としました。

相関関数を

$$G_{ij} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle, \quad (1.49)$$

で定義します。式 (1.39) より

$$\frac{\partial \langle \sigma_j \rangle}{\partial H_i} = \frac{\beta \text{Tr} \sigma_j \sigma_i e^{[\cdots]}}{\text{Tr} \cdots} - \frac{\beta \text{Tr} \sigma_j e^{[\cdots]} \text{Tr} \sigma_i e^{[\cdots]}}{(\text{Tr} \cdots)^2} = \beta [\langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle], \quad (1.50)$$

が得られるので、原点を基準とした相関関数は

$$G(\vec{r}_j) \equiv G_{0j} = \langle \sigma_0 \sigma_j \rangle - \langle \sigma_0 \rangle \langle \sigma_j \rangle = \frac{\partial \langle \sigma_j \rangle}{\partial H_0} \frac{1}{\beta}, \quad (1.51)$$

で与えられます。これを Fourier 変換すると

$$G(\vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_j G(\vec{r}_j) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_j} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial H_0} \langle \sigma_{\vec{k}} \rangle, \quad (1.52)$$

となるので、式 (1.47) を用いれば

$$G(\vec{k}) = \frac{\frac{1}{N} e^{i\vec{k}\cdot\vec{0}}}{1 - \beta Jz + \beta Jk^2} = \frac{1}{N} \frac{1}{1 - \beta Jz + \beta Jk^2}, \quad (1.53)$$

を得ます。これをさらに Fourier 逆変換することによって、もとの相関関数の表式

$$G(\vec{r}) = \sum_k e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} G(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\vec{k} \frac{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{1 - \beta Jz + \beta Jk^2}, \quad (1.54)$$

を得ることができます。ここで

$$\sum_k = \frac{N}{(2\pi)^d} \int d\vec{k}, \quad (1.55)$$

を用いました。また、関係式

$$\frac{1}{(2\pi)^d} \int \frac{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{a^2 + k^2} d\vec{k} = \frac{1}{r} e^{-ar}, \quad r = |\vec{r}|, \quad (1.56)$$

を用いれば積分を評価することができます。相関長 (correlation length)  $\xi$  は

$$\xi = a^{-1} = \frac{1 - \beta Jz}{\beta J}, \quad (1.57)$$

で与えられ、 $r \gg \xi$  では Ornstein-Zernike 型

$$G(\vec{r}) \propto \frac{1}{r^{\frac{d-1}{2}}} e^{-r/\xi}, \quad (1.58)$$

$r \ll \xi$  では

$$G(\vec{r}) \propto \frac{1}{r^{d-2}} \rightarrow \frac{1}{r^{d-2}} e^{-r/\xi}, \quad (1.59)$$

のように振る舞う。相関長の臨界指数は、

$$\xi^{-2} = \frac{1 - \beta Jz}{\beta J} \sim T - T_c, \quad (1.60)$$

であることから、

$$\xi \propto (T - T_c)^{-\frac{1}{2}} = (T - T_c)^{-\nu}, \quad \nu = \frac{1}{2}, \quad (1.61)$$

であることがわかる。また、異常次元  $\eta$  は

$$G(\vec{r}) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}, \quad \eta = 0 \quad (1.62)$$

で定義されます。臨界指数をまとめると、比熱

$$C \propto (T - T_c)^{-\alpha}, \quad \alpha = 0, \quad (1.63)$$

磁化

$$m \propto (T - T_c)^\beta, \quad \beta = \frac{1}{2}, \quad (1.64)$$

$$m \propto H^{\frac{1}{\delta}}, \quad \delta = 3, \quad T = T_c, \quad (1.65)$$

帯磁率

$$\chi \propto (T - T_c)^{-\gamma}, \quad \gamma = 1, \quad (1.66)$$

となります。

次に, GL 自由エネルギーに空間依存性を導入します。すなわち,

$$f(m) = am^2 + bm^4 + \dots - hm, \quad (1.67)$$

において,  $m \rightarrow m(\vec{r})$  とすることを考えます。このとき, GL 自由エネルギーはいわゆる  $\phi^4$  模型

$$f(m) \rightarrow F[\{m(\vec{r})\}] = \int d\vec{r} [(\nabla m)^2 + am^2 + bm^4 - hm], \quad m(\vec{r}), \quad (1.68)$$

となります。ここで, 第 1 項は強磁性相互作用を表します。これに対して

$$\frac{\delta F}{\delta m} = 0, \quad (1.69)$$

を課せば,

$$-2\nabla^2 m + 2am + 4bm^3 - h = 0, \quad (1.70)$$

を得ます。  $h = 0$  のとき,

$$-2\nabla^2 m + 2am + 4bm^3 = 0, \quad (1.71)$$

の解を,  $a < 0, T < T_c, (a \propto |T - T_c|)$  かつ一次元として考えると, 例えば

$$m(x) = A \tanh(x/\xi), \quad \xi = \sqrt{\frac{|a|}{2}}, \quad A = \sqrt{\frac{|a|}{2b}}, \quad \xi \propto \sqrt{|a|} \propto (T - T_c)^{\frac{1}{2}}, \quad \nu = 1/2, \quad (1.72)$$

が得られると思います。



## 第 2 章

# ゆらぎ

### 2.1 ゆらぎ

物理量  $A$  に対して, 平均値  $\langle A \rangle$ , ゆらぎ (分散)  $\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$  を考えます. ここで, 平均は

$$\langle \dots \rangle = \frac{\text{Tr} \dots e^{-\beta \mathcal{H}}}{\text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}}, \quad (2.1)$$

で定義されます. さらに,  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - aA$ ,  $a$  は  $A$  に共役な力 (外場) とすれば, 分配関数および  $A$  の平均値は

$$Z(a) = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_0 + \beta a A}, \quad (2.2)$$

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr} A e^{-\beta \mathcal{H}}}{Z(a)} = \frac{\partial}{\partial(\beta a)} \ln Z(a), \quad (2.3)$$

となります. また, ゆらぎは

$$\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \frac{\text{Tr} A^2 e^{-\beta \mathcal{H}}}{Z} - \left( \frac{\text{Tr} A e^{-\beta \mathcal{H}}}{Z} \right)^2 = \frac{\partial}{\partial(\beta a)^2} \ln Z, \quad (2.4)$$

です. ゆらぎと応答の関係は

$$\chi_{AA} = \frac{\partial}{\partial a} \langle A \rangle = \beta \frac{\partial}{\partial(\beta a)} \frac{\partial}{\partial(\beta a)} \ln Z(a) = \frac{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}{k_B T}, \quad (2.5)$$

で与えられ, Kirkwood の関係と呼ばれています. また, 高次の応答は

$$\chi^{(m)} = \frac{\partial^m}{\partial a^m} \langle A \rangle = \beta^m \frac{\partial^{m+1}}{\partial(\beta a)^{m+1}} \ln Z(a) = \beta^m \langle A^{m+1} \rangle_c, \quad (2.6)$$

のように与えられます. ここで,  $\langle A^{m+1} \rangle_c$  を  $(m+1)$  次のキュムラント (cumulant) と言います. 例えば,

$$\langle A^3 \rangle_c = \langle A^3 \rangle - 3\langle A^2 \rangle \langle A \rangle + 2\langle A \rangle^3, \quad (2.7)$$

のようになります. なお, 自由エネルギーが  $\ln Z(a) = -\beta F$  で与えられるので応答関数はすべて  $O(N)$  となります.

続いて, 応答と相関の関係について見ていきます. 具体的に,

$$A = M = \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad a = H, \quad (2.8)$$

とおくと,

$$\begin{aligned}
 \chi_{MM} &= \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{k_B T} \\
 &= \frac{1}{k_B T} \left\{ \left\langle \sum_{i=1}^N \sigma_i \sum_{j=1}^N \sigma_j \right\rangle - \left\langle \sum_{i=1}^N \sigma_i \right\rangle \left\langle \sum_{j=1}^N \sigma_j \right\rangle \right\} \\
 &= \frac{1}{k_B T} \left\{ \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle) (\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle) \rangle \right\}, \tag{2.9}
 \end{aligned}$$

さらに並進対称性があると

$$= \frac{1}{k_B T} \left\{ N \sum_{j=1}^N (\sigma_1 - \langle \sigma_1 \rangle) (\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle) \right\} = \frac{1}{k_B T} \left\{ N \sum_{j=1}^N C(1, j) \right\}, \tag{2.10}$$

と変形することができます. ここで, サイト 1 と  $j$  の距離  $r_{1j} = r$  とすると  $C(1, j) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} e^{-r/\xi}$  となるので,

$$= \frac{N}{k_B T} \int_V d^d \vec{r} \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2+\eta}} \approx \frac{N}{k_B T} \xi^{2-\eta} \int_{V'} d^d \vec{x} \frac{e^{-x}}{x^{d-2+\eta}}, \tag{2.11}$$

となります. すなわち, 1 スピン当たりの帯磁率  $\chi_0$ ,  $\chi_{MM} = N\chi_0$  は

$$\chi_0 \propto \xi^{2-\eta}, \tag{2.12}$$

という振る舞いをするのがわかります.

## 2.2 平均場近似でのゆらぎ

長距離相互作用 (無限レンジ) 模型 (Husimi-Temperley 模型) を考えます:

$$\mathcal{H} = -\frac{Jz}{2N} \left( \sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^2 - H \left( \sum_{i=1}^N \sigma_i \right). \tag{2.13}$$

このとき, 分配関数は

$$\begin{aligned}
 Z &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{-\beta \mathcal{H}} \\
 &= \sum_{M=-N}^N {}_N C_{N+} e^{\beta \frac{Jz}{2N} M^2 + \beta H M} \\
 &= \int_{-1}^1 dm e^{\beta \frac{Jz}{2N} N^2 m^2 + \beta H N m - N \left[ \frac{1+m}{2} \ln \frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2} \ln \frac{1-m}{2} \right]}, \tag{2.14}
 \end{aligned}$$

で与えられます. ただし, ここで

$$\begin{cases} N_+ + N_- = N \\ N_+ - N_- = M \end{cases}, \quad N_{\pm} = \frac{N \pm M}{2}, \quad N! \approx N^N e^{-N}, \quad m = M/N, \tag{2.15}$$

などを用いました. また,  $N$  体のときの磁化の二乗の平均は

$$\langle M^2 \rangle_N = \begin{cases} T > T_c & O(N) \\ T = T_c & O(N^{3/2}), \\ T < T_c & O(N^2) \end{cases} \tag{2.16}$$



で与えられます。これはレポート課題になっているので導出してみてください。

以下では、別の方法を用いた計算を紹介します。分配関数の計算において、

$$\begin{aligned}
Z &= \text{Tr} e^{\beta \frac{Jz}{2N} (\sum \sigma_i)^2 + \beta H \sum \sigma_i} \\
&= \text{Tr} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2} + x (\sqrt{\frac{\beta Jz}{N}} \sum_{i=1}^N \sigma_i) + \beta H \sum_{i=1}^N \sigma_i} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2}} 2^N \cosh^N \left( x \sqrt{\frac{\beta Jz}{N}} + \beta H \right), \tag{2.17}
\end{aligned}$$

$x = \sqrt{N}y$  において、

$$= \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{Ny^2}{2} + N \ln(2 \cosh[y\sqrt{\beta Jz} + \beta H])}, \tag{2.18}$$

を得ます。ここで

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2} + ax} = e^{\frac{1}{2}a^2}, \tag{2.19}$$

を用いました。このとき、 $K = \beta Jz$  として

$$\langle M^2 \rangle = \frac{2N}{Z} \frac{\partial Z}{\partial K}, \tag{2.20}$$

$$\frac{\partial Z}{\partial K} = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} N \tanh(\sqrt{K}y) \frac{y}{2\sqrt{K}} e^{-N\left(\frac{y^2}{2} - \ln 2 \cosh(\sqrt{K}y)\right)} dy, \quad H = 0, \tag{2.21}$$

となります。この場合も、式 (6.2) と同じ結果を得ることができます。

また、この模型の臨界指数は、以前求めた平均場近似の臨界指数とは異なります。

## 2.3 低次元でのゆらぎ

この節では、低次元系におけるゆらぎを考えます。まずは 1 次元 Ising 模型を取り扱います：

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} - H \sum_{i=1}^N \sigma_i. \tag{2.22}$$

以下では  $H = 0$  の場合を考えます。分配関数は

$$\begin{aligned}
Z &= \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}} \\
&= \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} e^{\beta J (\sigma_1 \sigma_2 + \dots + \sigma_{N-1} \sigma_N)} \\
&= 2 \sum_{\{\tau_i = \pm 1\}} e^{\beta J (\tau_1 + \dots + \tau_{N-1})} \\
&= 2 [2 \cosh \beta J]^{N-1}, \tag{2.23}
\end{aligned}$$

となります。ここで、デュアル変換

$$\sigma_i \sigma_{i+1} = \tau_i = \pm 1, \tag{2.24}$$

を用いました。この表式は明らかに特異性をもたないので有限温度に相転移は現れません。次に、この系における相関関数を計算します:

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_i \sigma_j \rangle &= \langle \tau_i \tau_{i+1} \cdots \tau_{j-1} \rangle \\
&= 2 \sum_{\{\tau_i = \pm 1\}} e^{\beta J \tau_1} \cdots e^{\beta J \tau_{i-1}} \tau_i e^{\beta J \tau_i} \cdots \tau_{j-1} e^{\beta J \tau_{j-1}} e^{\beta J \tau_j} \cdots e^{\beta J \tau_{N-1}} / Z \\
&= \frac{2[2 \cosh \beta J]^{N-1-(j-i)} [2 \sinh \beta J]^{(j-i)}}{2[2 \cosh \beta J]^{N-1}} \\
&= (\tanh \beta J)^{j-i} \\
&= e^{\ln[\tanh \beta J](j-i)} \\
&= e^{-(j-i)/\xi}.
\end{aligned} \tag{2.25}$$

ここで、相関長  $\xi$  は

$$\xi = -\ln \tanh \beta J, \tag{2.26}$$

で定義されます。

次に、1次元 XY 模型を考えます:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{N-1} \cos(\theta_i - \theta_{i+1}) - H \sum_{i=1}^N \cos \theta_i. \tag{2.27}$$

XY 模型と Ising 模型では、ドメインウォールを作るときに必要なエネルギーが異なります。(この部分についてはそのうち加筆します)

次に、XY 模型における調和近似 (変異に関して 2 次) を考えます:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) - H \sum_{i=1}^N \cos \theta_i \\
&\approx E_0 + \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\theta_i - \theta_j)^2 + \frac{H}{2} \sum_{i=1}^N \theta_i^2 \\
&= E_0 + \sum_{\vec{k}} \frac{J}{2} \left[ 2 - \cos k_x - \cos k_y + \frac{H}{2} \right] \theta_{\vec{k}} \theta_{-\vec{k}},
\end{aligned} \tag{2.28}$$

ただし、ここでは 2次元の場合を考えました。また、

$$E_0 = -\frac{Jz}{2}N - NH, \quad \theta_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \theta_j e^{i\vec{k}\vec{r}_j}, \quad \theta_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \theta_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{r}_j}, \tag{2.29}$$

などを用いました。ここで変数範囲は  $-\pi < \theta_i < \pi$  から  $-\infty < \theta_i < \infty$  とすることができ、このとき、

$$\langle \cos \theta_j \rangle = \langle e^{i\theta_j} \rangle = e^{-\frac{1}{2}\langle \theta_j^2 \rangle} \tag{2.30}$$

が成り立ちます。また,

$$\begin{aligned}
\langle \theta_j^2 \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \langle \theta_j^2 \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left\langle \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \theta_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} \sum_{\vec{k}'} \theta_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_j} \right\rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{i(\vec{k} + \vec{k}') \cdot \vec{r}_j} \langle \theta_{\vec{k}} \theta_{\vec{k}'} \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \langle \theta_{\vec{k}} \theta_{-\vec{k}} \rangle, \tag{2.31}
\end{aligned}$$

であり,

$$\langle \theta_{\vec{k}} \theta_{-\vec{k}} \rangle = \frac{1}{\frac{J}{2}(2 - \cos k_x - \cos k_y) + H/2}, \tag{2.32}$$

より

$$\begin{aligned}
\langle \theta_j^2 \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\vec{k} \frac{k_B T}{\frac{J}{2}(2 - \cos k_x - \cos k_y) + H/2} \\
&\simeq \frac{2\pi k_B T}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{4k}{Jk^2 + 2H} \rightarrow \infty, \tag{2.33}
\end{aligned}$$

となるから,

$$\langle \cos \theta_j \rangle = e^{-\frac{1}{2}\langle \theta_j^2 \rangle} \rightarrow 0 \quad (H \rightarrow 0), \tag{2.34}$$

となります。このとき,

$$\int_0^\Lambda \frac{d^d \vec{k}}{k^2}, \tag{2.35}$$

は1,2次元で赤外発散 (infrared divergence) と呼ばれる発散をもつ。3次元の場合には,

$$\langle \vec{S}_{\vec{k}} \cdot \vec{S}_{-\vec{k}} \rangle < \frac{k_B T}{J(3 - \cos k_x - \cos k_y - \cos k_z)} < \frac{k_B T}{\frac{1}{2}Jk^2}, \tag{2.36}$$

が成り立ち,

$$\begin{aligned}
1 &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \vec{S}_j^2 = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \vec{S}_{\vec{k}} \cdot \vec{S}_{-\vec{k}} \\
&= m^2 + \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{\vec{k} \neq 0} d\vec{k} \langle \vec{S}_{\vec{k}} \cdot \vec{S}_{-\vec{k}} \rangle, \tag{2.37}
\end{aligned}$$

であることから

$$m^2 > 1 - \frac{k_B T}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \frac{1}{k^2}, \tag{2.38}$$

を得ます。この積分は有限なので十分小さな  $T$  で必ず  $m > 0$  となり、低温で長距離秩序があることがわかります。詳しくは、参考文献 [1, 2] などを読んでみてください。

## 2.4 くりこみ群の考え方

この節からは、くりこみ群の考え方を見ていきます。2次相転移における相関長の発散の様子,  $T \rightarrow T_c, \xi \rightarrow \infty$  を

$$t = \frac{T - T_c}{T_c}, \quad \xi \propto t^{-\nu} \quad (2.39)$$

とする。ここで  $\nu$  は相関長の臨界指数である。このとき、距離のスケールを  $b$  倍したとき、実効的温度（相互作用の強さ） $(\beta J)$  がどのように変わるかを考えます。スケールを  $b$  倍したとき、相関長は

$$\xi \rightarrow \xi/b \quad (2.40)$$

となります。このとき、 $\xi(T)$  に対して、 $\xi(T') = \xi(T)/b$  となる実効温度  $T'$  を考えると、

$$\xi' = \xi/b = \frac{1}{b} |t|^{-\nu} = |t'|^{-\nu}, \quad (2.41)$$

すなわち、

$$\frac{|t|^{-\nu}}{|t'|^{-\nu}} = b, \quad (2.42)$$

となります。あるいは、変形して

$$\nu = \frac{\ln b}{\ln \left| \frac{t'}{t} \right|}, \quad (2.43)$$

となります。

次に、スケール変換の下での Ising 模型:

$$e^{-\beta \mathcal{H}} = e^{\beta J \sum \sigma_i \sigma_j + \beta H \sum \sigma_i}, \quad (2.44)$$

の振る舞いをみていきます。すなわち、 $K = \beta J$  の変化を調べます。スケール変換に関するパラメータの変化を

$$\mathbf{K}' = R_b(\mathbf{K}) = \begin{pmatrix} K'_1 \\ \vdots \\ K'_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_b^1(K_1, \dots, K_M) \\ \vdots \\ R_b^M(K_1, \dots, K_M) \end{pmatrix}, \quad (2.45)$$

とします。ここでハミルトニアン中のパラメータ  $K_1 = \beta J, K_2 = \beta H, \dots, K_M = \dots$  などとしました。固定点 (fixed point)  $\mathbf{K}^*$  は

$$\mathbf{K}^* = R_b(\mathbf{K}^*), \quad (2.46)$$

により定義されます。これはつまり、 $\xi = 0, \infty$  (臨界点) であることを意味します。次に、固定点からのずれ

$$\delta \mathbf{K} = \mathbf{K} - \mathbf{K}^*, \quad (2.47)$$

を考えます。このとき、スケール変換は

$$\delta \mathbf{K}' = R_b(\delta \mathbf{K}) = \mathbf{K}' - \mathbf{K}^*, \quad (2.48)$$

となります。 $\mathbf{K}^*$  のまわりで線形化することを考えると、

$$\delta \mathbf{K}' = T \delta \mathbf{K}, \quad (2.49)$$

$$T_{ij} = \left. \frac{\partial R_b^i(K_1, \dots, K_M)}{\partial K_j} \right|_{\mathbf{K}=\mathbf{K}^*}, \quad (2.50)$$

となります。さらに、 $T$  の固有値問題を考え、

$$T u_i = \lambda_i u_i, \quad i = 1, \dots, M, \quad (2.51)$$

とします.  $u_i$  をスケーリング変数といい,  $\lambda_i > 1$  なら有意味 (relevant) 変数,  $\lambda_i < 1$  なら有意味でない (irrelevant) 変数,  $\lambda_i = 1$  なら marginal な変数といいます. marginal な変数の場合には, さらに高次を調べなければなりません. また,  $\lambda_i = b^{y_i}$  と書いた場合には,  $y_i = \frac{\ln \lambda_i}{\ln b} > 0$  なら有意味,  $y_i < 0$  なら有意味でないとなります.

次に, 無限小のスケーリング変換

$$b \rightarrow e^{\delta l}, \quad \delta l \ll 1, \quad (2.52)$$

を考えます. このとき,

$$\mathbf{u}' = R_b(\mathbf{u}) = T\mathbf{u} = \begin{pmatrix} b^{y_1} & & \\ & \ddots & \\ & & b^{y_M} \end{pmatrix} \mathbf{u} \approx \begin{pmatrix} 1 + y_1 \delta l & & \\ & \ddots & \\ & & 1 + y_M \delta l \end{pmatrix} \mathbf{u}, \quad (2.53)$$

となるので, 一回のスケーリング変換における変化は

$$\delta \mathbf{u} = \mathbf{u}' - \mathbf{u} = \begin{pmatrix} y_1 & & \\ & \ddots & \\ & & y_M \end{pmatrix} \mathbf{u} \delta l, \quad (2.54)$$

すなわち,

$$\frac{\delta \mathbf{u}}{\delta l} = \begin{pmatrix} y_1 & & \\ & \ddots & \\ & & y_M \end{pmatrix} \mathbf{u}, \quad (2.55)$$

となります.

次に, 粗視化の考え方をみていきます. 例として周期的境界条件下での一次元 Ising 模型を考えます:

$$Z = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N = \pm 1} e^{K(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \cdots + \sigma_N \sigma_1)}. \quad (2.56)$$

ここで  $K = \beta J$  としました. このとき, 偶数番目のスピンについて和を取ることを考えます:

$$Z = \left( \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \cdots \right) \left( \sum_{\sigma_2 = \pm 1} \cdots \right) e^{K(\cdots)} \quad (2.57)$$

$$= \text{Tr}' 2 \cosh[K(\sigma_1 + \sigma_3)] \cdots \quad (2.58)$$

$$= \text{Tr}' \tilde{A} e^{K'(\sigma_1 \sigma_3 + \cdots)}. \quad (2.59)$$

ただし,  $\text{Tr}'$  は奇数番目のスピンについての和を表し,  $\tilde{A}$  や  $K'$  は変換されたパラメータを表します. このとき,

$$K' = \frac{1}{2} \ln \cosh(2K), \quad b = 2 \quad (2.60)$$

となります. 低温および高温極限では

$$K' = \begin{cases} K^2, & K \ll 1 \quad (T \rightarrow \infty) \\ K - \frac{1}{2} \ln 2 - \frac{1}{2} e^{-4K}, & K \gg 1 \quad (T \rightarrow 0) \end{cases}, \quad (2.61)$$

となります. このときには, 有限の  $K$  に固定点をもたず, 任意の有限な  $K$  は  $K = 0$  にくりこまれることがわかります. すなわち, この模型は有限温度で相転移をもちません.

次に, 二次元での粗視化を考えます. 粗視化の方法としては, 副格子をトレースアウトすることを考えます. まず, ある一つのスピン  $\sigma_0$  の和を取ることを考えます:

$$\sum_{\sigma_0 = \pm 1} e^{K\sigma_0(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)} = A e^{K_1(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_1) + K_2(\sigma_1 \sigma_3 + \sigma_2 \sigma_4) + K_4 \sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}. \quad (2.62)$$

このとき,  $\sigma_i$  ( $i = 1, \dots, 4$ ) は  $\sigma_0$  の最近接のスピンであり,  $K_1, K_2, K_4$  は変換されたパラメータである. 変換前と比べると,

$$\begin{cases} K \rightarrow K_1 = \frac{1}{8} \ln \cosh(4K) \\ 0 \rightarrow K_2 = \frac{1}{8} \ln \cosh(4K) \\ 0 \rightarrow K_4 = \frac{1}{8} \ln \cosh(4K) - \frac{1}{2} \ln \cosh(2K) \\ 0 \rightarrow A = 2 \cosh^{1/8}(4K) \cosh^{1/2}(2K) \end{cases}, \quad (2.63)$$

という対応関係があることがわかります. すなわち, くりこむたびにパラメータの数が増えてしまいます. そこで, 近似を用いることを考えます. まわりの余計な相互作用を取り込むため, factor 4 をかけると

$$K \rightarrow K' = 4 \times \frac{1}{8} \ln \cosh(4K), \quad (2.64)$$

となり, 有限の  $K$  に固定点が現れます. すなわち, 有限温度において相転移が現れます.

以上で用いたような, 実空間において粗視化をおこなうくりこみ群を実空間くりこみ群の方法といいます.

## 2.5 波数空間くりこみ群

$\phi^4$  モデル:

$$\mathcal{H} = - \sum J_{ij} m_i m_j - \lambda \sum_i (m_i^2 - 1)^2, \quad (2.65)$$

を考える. 連続空間で考えると,

$$m(\mathbf{r}') = m(\mathbf{r}) + (\mathbf{r} - \mathbf{r}') \nabla m(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 \nabla^2 m(\mathbf{r}) + \dots, \quad (2.66)$$

として,

$$\mathcal{H} = \int \left[ \frac{1}{2} J a^2 R^2 (\nabla m(\mathbf{r}))^2 - (2\lambda + J) m(\mathbf{r})^2 + \lambda m(\mathbf{r})^4 + \dots \right] d\mathbf{r}, \quad (2.67)$$

が得られる. ここで  $a$  は格子間隔であり, 変数変換:

$$m(\mathbf{r})^2 \rightarrow \frac{a^{d-2}}{J R^2} \phi(\mathbf{r})^2, \quad (2.68)$$

を行えば,

$$\mathcal{H} = \int \left[ \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{1}{2} t a^{-2} \phi(\mathbf{r})^2 + u a^{d-4} \phi(\mathbf{r})^4 \right] d\mathbf{r}, \quad (2.69)$$

を得る. ここで  $t = \frac{2\lambda + J}{J R^2}$ ,  $u = \frac{\lambda}{J R^2}$  とした. Fourier 変換:

$$\phi_{\mathbf{k}} = \int d\mathbf{r} \phi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad \phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{k} \phi_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (2.70)$$

を用いると,

$$\mathcal{H} = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{k} \frac{1}{2} \mathbf{k}^2 \phi_{\mathbf{k}} \phi_{-\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \frac{t a^{-2}}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{k} \phi_{\mathbf{k}} \phi_{-\mathbf{k}} + \frac{u a^{d-4}}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}_1 \int d\mathbf{k}_2 \int d\mathbf{k}_3 \phi_{\mathbf{k}_1} \phi_{\mathbf{k}_2} \phi_{\mathbf{k}_3} \phi_{-\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3}, \quad (2.71)$$

と書くことができる. ここで, 1 項目の係数を保存するために,  $\phi_{\mathbf{k}} \rightarrow \zeta \phi_{\mathbf{k}}$  と波動関数を変換する:

$$\phi_{\mathbf{k}} \phi_{-\mathbf{k}} \rightarrow \zeta^2 \phi_{\mathbf{k}} \phi_{-\mathbf{k}}. \quad (2.72)$$

$0 \leq k \leq \Lambda$  とし, スケールを  $b$  倍することを考える. すなわち,  $\Lambda/b \leq k \leq \Lambda$  の範囲を積分し,  $\Lambda/b \rightarrow \Lambda$  と再スケールすることを考える. 一般に, ハミルトニアンを

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \sum_{i=1} g_i \mathcal{H}_i \quad (2.73)$$

とおくと,

$$\begin{aligned} \text{Tre}^{-\mathcal{H}} &= \text{Tre}^{-\mathcal{H}_0} \frac{\text{Tre}^{-\mathcal{H}_0 - \sum_i g_i \mathcal{H}_i}}{\text{Tre}^{-\mathcal{H}_0}} = \text{Tre}^{-\mathcal{H}_0} \langle e^{-\sum_i g_i \mathcal{H}_i} \rangle_0 \\ &= \text{Tre}^{-\mathcal{H}_0} e^{-\sum_i g_i \langle \mathcal{H}_i \rangle_0 + \frac{1}{2} \sum_i g_i g_j \langle \mathcal{H}_i \mathcal{H}_j \rangle_c + \dots} \end{aligned} \quad (2.74)$$

が成り立つ. ここで,  $\mathcal{H}_0 = \frac{1}{2} k^2 \phi_{\mathbf{k}} \phi_{-\mathbf{k}}$  とする. このとき, 第2項は

$$\frac{1}{2} \frac{t a^{-2}}{(2\pi)^d} \left\langle \int_0^\Lambda d\mathbf{k} \phi_{\mathbf{k}} \phi_{-\mathbf{k}} \right\rangle_0 = \frac{1}{2} \frac{t b^2 (a')^{-2}}{(2\pi)^d} \left( \frac{1}{Z_0(a')} \int \mathcal{D}\phi_{\mathbf{k}}^{\leq} e^{-\mathcal{H}(a')} \int_{k'}^{\leq} d\mathbf{k} \phi_{\mathbf{k}}^{\leq} \phi_{-\mathbf{k}}^{\leq} + \text{const.} \right) \quad (2.75)$$

となり, 変換  $a^{-1} \rightarrow b(a')^{-1}$  により  $t \rightarrow t b^2$  と変換されるように見える. 次に,  $u$  についての項

$$u a^{d-4} \left\langle \int_0^\Lambda d\mathbf{k}_1 \int_0^\Lambda d\mathbf{k}_2 \int_0^\Lambda d\mathbf{k}_3 \phi_{\mathbf{k}_1} \phi_{\mathbf{k}_2} \phi_{\mathbf{k}_3} \phi_{-\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3} \right\rangle_0 \quad (2.76)$$

の変換は,  $k_1, k_2, k_3 < \Lambda/b$  のとき  $u \rightarrow u b^{4-d}$ ,  $k_1 > \Lambda/b$  (ひとつだけ) のとき  $u \rightarrow 0$ ,  $k_1, k_2 > \Lambda/b$  のとき

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_{\mathbf{k}_1} \phi_{\mathbf{k}_2} e^{-\frac{1}{2} k^2 \phi_{\mathbf{k}} \phi_{-\mathbf{k}}} / Z_0 = \frac{(2\pi)^d}{|\mathbf{k}_1|^2} \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}), \quad (2.77)$$

となる. この寄与は無視することができないので, 取り入れなければならない. すなわち,

$$6 u a^{d-4} \left( \frac{1}{Z_0(a')} \int \mathcal{D}\phi_{\mathbf{k}}^{\leq} e^{-\mathcal{H}_0(a')} \int_0^{\Lambda/b} \phi_{\mathbf{k}_1}^{\leq} \phi_{-\mathbf{k}_1}^{\leq} \int_k^{>} \frac{1}{|\mathbf{k}|^2} \right), \quad (2.78)$$

を  $t$  の項への寄与とする. ここで,

$$\int_{\Lambda/b}^{\Lambda} d\mathbf{k} \frac{1}{|\mathbf{k}|^2} = a^{-(d-2)} \int_{1-1/b}^1 d\mathbf{x} \frac{1}{|\mathbf{x}|^2} \equiv a^{-(d-2)} A_b, \quad (2.79)$$

とする. ただし, ここで  $\mathbf{k} = \Lambda \mathbf{x}$ ,  $\Lambda = 1/a$  とした. 以上をまとめると,

$$\begin{cases} t \rightarrow t' = b^2 t + 12 u A_b b^2 + \dots \\ u \rightarrow u' = u b^{4-d} \end{cases}, \quad (2.80)$$

となる. さらに,  $\phi \rightarrow \zeta \phi$ ,  $\zeta^2 = b^{-\eta}$  を考えれば

$$\begin{cases} t' = b^{2-\eta} (t + 12 u A_b) \\ u' = b^{4-d-2\eta} u \end{cases}, \quad (2.81)$$

となる. 固定点は明らかに  $t^* = u^* = 0$  (Gauss 固定点) のみである.

$t = t^* + \delta t$ ,  $u = u^* + \delta u$  とすると

$$\begin{pmatrix} \delta t' \\ \delta u' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b^2 & b^2 u A_b \\ 0 & b^{4-d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta t \\ \delta u \end{pmatrix}, \quad (2.82)$$

を得る. このとき

$$\begin{cases} y_t = 2 \\ y_u = 4 - d \end{cases}, \quad (2.83)$$

であるから,  $4 > d$  で負となる. このような場合, 臨界指数などにずれが出てくるため,  $u$  は危険な変数と呼ばれる. ここで,  $\mathcal{O}(u)$  では Gauss fixed point (平均場) しか得られなかったため,  $\mathcal{O}(u^2)$  を考え, 高次の項からのくりこみを取り入れることを考える (これについては, 講義ノートにアップする宮下先生による補足ノートを参照してください).

## 2.6 Berezinskii-Kosterlitz-Thouless 転移 [3]

$n = 2, d = 2$  の場合を考える (2次元 XY 模型). すなわち, ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) - H \sum_{i=1}^N \cos \theta_i \quad (2.84)$$

で与えられる. 低温なら  $\theta_i - \theta_j \ll 1$  であるから,

$$\mathcal{H} \approx \frac{J}{2} \sum (\theta_i - \theta_j)^2 + \frac{H}{2} \sum \theta_i^2 \quad (2.85)$$

となる. Fourier 変換

$$\theta_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \theta_j e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j}, \quad \theta_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \theta_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j} \quad (2.86)$$

を導入すれば, ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &\approx E_g + \frac{J}{2} \sum_{\vec{k}} (4 - 2 \cos(k_x a_x) - 2 \cos(k_y a_y)) \theta_{\vec{k}} \theta_{-\vec{k}} \\ &\approx E_g + \frac{J}{2} \sum k^2 \theta_{\vec{k}} \theta_{-\vec{k}}, \end{aligned} \quad (2.87)$$

となる.  $a \rightarrow ba$  で不変, すなわち, くりこみ不変なのですべての点が臨界点であり, 前回の結果からゆらぎが発散する. つまり, 長距離秩序がない. また,

$$\langle \cos(\theta_i - \theta_j) \rangle = \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle = \langle e^{i(\theta_i - \theta_j)} \rangle = e^{-\frac{1}{2} \langle (\theta_i - \theta_j)^2 \rangle}, \quad (2.88)$$

であり, 並進対称性を利用すると

$$\begin{aligned} \langle (\theta_j - \theta_0)^2 \rangle &= \frac{1}{N} \left\langle \sum_n (\theta_{j(n)} - \theta_n)^2 \right\rangle \\ &= \frac{2k_B T}{J} \int_0^{2\pi/a} \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^2} \frac{1 - e^{-i\vec{k}\vec{r}}}{k^2} \\ &= \frac{k_B T}{\pi J} \ln \frac{r}{a}, \quad (r \gg a), \quad \vec{r} = \vec{r}_j - \vec{r}_0, \end{aligned} \quad (2.89)$$

が得られるので, 相関関数は

$$\langle \mathbf{S}_0 \mathbf{S}_r \rangle = e^{-\frac{1}{2} \frac{k_B T}{\pi J} \ln \frac{r}{a}} = \left( \frac{r}{a} \right)^{-\frac{k_B T}{2\pi J}}, \quad (2.90)$$

と与えられる. ただしここで,

$$g(r) = \int_0^{2\pi/a} \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \frac{1 - e^{i\vec{k}\vec{r}}}{k^2} = \frac{1}{2\pi} \ln \frac{r}{a} + \text{const.}, \quad r \gg a, \quad (2.91)$$

を用いた. これでは任意の温度で冪型の減衰になってしまうので, 高温で exp 型の減衰を出すために周期性を考慮する必要がある.

また, 相転移の特徴づけとして渦 (vortex) を考える. すなわち, 渦がない低温と渦が効いてくる高温を考えることにする. 渦度  $n$  を以下の表式で定義する:

$$\int \Delta \theta_i = 2\pi n. \quad (2.92)$$



このとき,

$$\theta(r) - \theta(r+1) \sim \frac{1}{r}, \quad (2.93)$$

であり, 渦が一つあるとエネルギーは

$$E_V = \int_0^{L^2} (\nabla\theta)^2 d\vec{r} = 2\pi \int_0^L \frac{1}{r^2} r dr \sim A \ln L, \quad (2.94)$$

だけ増加する. エントロピーは

$$S = k_B \ln L^2 = 2k_B \ln L, \quad (2.95)$$

であるから,

$$E - TS = A \ln L - 2k_B T \ln L = (A - 2k_B T) \ln L, \quad (2.96)$$

となる. つまり,  $T > A/2k_B$  なら渦が発生した方が得であり,  $T < A/2k_B$  なら渦が発生しない方が得である. より詳細に調べるため,

$$\nabla\theta(\vec{r}) = \nabla\theta_{\text{SW}}(\vec{r}) + \nabla\theta_V(\vec{r}), \quad (2.97)$$

というように, 無回転成分 (irrotational part)  $\nabla \times (\nabla\theta_{\text{SW}}(\vec{r})) = 0$  と無発散成分 (Source-free)  $\nabla \cdot (\nabla\theta_V(\vec{r})) = 0$  にわけて

$$\int d\vec{r} \nabla\theta_{\vec{r}} = 2\pi n, \quad (2.98)$$

より

$$\nabla \times \nabla\theta_V(\vec{r}) = 2\pi\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)n\vec{e}_z, \quad (2.99)$$

を得る. 簡単な計算から

$$-\nabla^2(\nabla\theta_V(\vec{r})) = \nabla \times (2\pi\rho(\vec{r})\vec{e}_z), \quad (2.100)$$

のように書くことができ, その解は

$$\nabla\theta(\vec{r}) = \nabla \times \int_V \frac{d\vec{r}'}{a^2} g(\vec{r} - \vec{r}') 2\pi\rho(\vec{r}')\vec{e}_z, \quad (2.101)$$

で与えられる. ここで

$$\nabla^2 g = \delta(\vec{r}), \quad (2.102)$$

および

$$g(r) = \frac{1}{2\pi} \ln \frac{r}{a}, \quad (2.103)$$

である. ゆえに,

$$\begin{aligned} \beta\mathcal{H} &= \frac{K}{2} \int d\vec{r} (\nabla\theta)^2 \\ &= \frac{K}{2} \int d\vec{r} (\nabla\theta_{\text{SW}})^2 + (2\pi)^2 \frac{K}{2} \int d\vec{r} \int \frac{d\vec{r}'_1}{a^2} \int \frac{d\vec{r}'_2}{a^2} \rho(\vec{r}'_1)\rho(\vec{r}'_2) (\nabla g(\vec{r} - \vec{r}'_1)) (\nabla g(\vec{r} - \vec{r}'_2)) \\ &= \frac{K}{2} \int d\vec{r} (\nabla\theta_{\text{SW}})^2 - \pi K \int_{|r-r'|>a} \frac{d\vec{r}d\vec{r}'}{a^4} \rho(\vec{r})\rho(\vec{r}') \ln \frac{|\vec{r} - \vec{r}'|}{a} + \pi K \tilde{C} \int_{|r-r'|<a} \frac{d\vec{r}d\vec{r}'}{a^4} \rho(\vec{r})\rho(\vec{r}') - 2\pi^2 CK \left\{ \int \frac{d\vec{r}}{a} \rho(\vec{r}) \right\}^2 \end{aligned} \quad (2.104)$$

ただし,  $r \geq a$  では上で定義した  $g(\vec{r})$  で,  $r < a$  では  $\tilde{C}$  と置くものとする. あるいは,

$$\beta\mathcal{H} = \frac{K}{2} \int d\vec{r} (\nabla\theta_{\text{SW}})^2 - \pi K \sum_{i \neq j} n_i n_j \ln \frac{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}{a} + \pi K \tilde{C} \sum_i n_i^2 - 2\pi^2 CK \left\{ \sum_i n_i \right\}^2, \quad (2.105)$$

と書くことができる. ここで,  $n_i = \pm 1$  とする. このとき, 最終項を除いたものを 2 次元 Coulomb gas 模型という ( $\pi K = J, \pi K \tilde{C} = \mu$  とすればよい).

次に, この模型をくりこみ群の方法で解析することを考える. すなわち, 渦のコア (Coulomb gas 模型の電荷) の半径  $\tau$  を  $\tau \rightarrow \tau + d\tau, \tau = a$  とすることを考える.  $e^{-\beta\pi K \tilde{C}} \equiv \hat{K}$  とすると, 分配関数は

$$Z = \sum_{\{n_i\}} \frac{1}{(n_i!)^2} \hat{K}^{2n} \int_{D_{2n}} d\vec{r}_{2n} \cdots \int_{D_1} d\vec{r}_1 \exp \left( \beta \sum p_i p_j \ln \left| \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{\tau} \right| \right), \quad (2.106)$$

となる. ただし, ここで  $p_i = \sqrt{\pi J} n_i$  である. Kosterlitz の論文 [3] によると, くりこみの操作により

$$\beta p^2 \rightarrow \beta p^2 \left( 1 - (2\pi)^2 (\beta p^2) (\hat{K} \tau^2)^2 \frac{d\tau}{\tau} \right), \quad (2.107)$$

$$\hat{K} \tau^2 \rightarrow \hat{K} \tau^2 \left( 1 - (\beta p^2 - 2) \frac{d\tau}{\tau} \right), \quad (2.108)$$

と変換される. 変数変換

$$x = \beta p^2 - 2, \quad (2.109)$$

$$y = 2\pi \hat{K} \tau^2, \quad (2.110)$$

を行うと

$$\frac{dx}{d \ln \tau} = -(2\pi)^2 (\beta p^2)^2 \left( \frac{y}{4\pi} \right)^2 = - \left( \frac{\beta p^2}{2} \right)^2 y^2 \simeq -y^2 \quad (2.111)$$

$$\frac{dy^2}{d \ln \tau} = -2xy^2 \quad (2.112)$$

ここで  $x \approx 0, \beta p^2 \simeq 2$  を用いた. これより,  $x^2 - y^2 = \text{const.}$  であることがわかる. また,  $\ln \tau = l$  として

$$\frac{dl}{dx} = -\frac{1}{y^2} = -\frac{1}{x^2 + Ct}, \quad -Ct = x^2 - y^2, \quad (2.113)$$

つまり,

$$l(x) = -\frac{1}{\sqrt{Ct}} \tan^{-1} \frac{x}{\sqrt{Ct}} + \text{const.}, \quad (2.114)$$

であり,

$$\ln \frac{\tau_0}{\tau} = -l(x) + l(0) = \frac{1}{\sqrt{Ct}} \tan^{-1} \left( \frac{x}{\sqrt{Ct}} \right), \quad (2.115)$$

となる. すなわち

$$\frac{\tau}{\tau_i} = e^{l(x)-l(x_i)} = \exp \left( \frac{1}{\sqrt{Ct}} \left( \tan^{-1} \frac{x_i}{\sqrt{Ct}} - \tan^{-1} \frac{x}{\sqrt{Ct}} \right) \right), \quad (2.116)$$

が成り立ち,  $x = 0, \tau \rightarrow \xi$  で

$$\frac{\xi}{\tau_i} = e^{\frac{1}{\sqrt{Ct}} \left( \tan^{-1} \frac{x_i}{\sqrt{Ct}} \right)} \sim e^{\frac{\pi}{2\sqrt{Ct}}} = e^{\frac{\alpha}{\sqrt{t}}}, \quad (2.117)$$

となる. ただしここで  $\tan^{-1} \left( \frac{x_i}{\sqrt{Ct}} \right) = \tan^{-1} \left( \frac{\infty}{\sqrt{Ct}} \right) = \frac{\pi}{2}$  とした. ここで,  $\xi \propto t^{-\nu}$  であるから,  $\nu = \infty$  である. すなわち, KT 転移をこえると冪減衰が exp 減衰に変化する. 特に, 臨界点直上では  $\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_r \rangle \sim r^{-1/4}$  となる.

## 第3章

# 転送行列法

助教の森さんによる代講です。

### 3.1 経路積分と転送行列

経路積分法と転送行列法は、 $d$ 次元量子系と  $d+1$ 次元古典系の対応関係として理解することができます。まずは、経路積分からみていきます。 $d$ 次元量子系を考え、分配関数において、指数関数部分を  $M$  分割し、間に完全系の条件式をはさむことを考えます：

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} \\ &= \sum_{\varphi_0} \langle \varphi_0 | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} | \varphi_0 \rangle \\ &= \sum_{\{\varphi\}} \langle \varphi_0 | e^{-\Delta\beta \hat{\mathcal{H}}} | \varphi_{M-1} \rangle \langle \varphi_{M-1} | e^{-\Delta\beta \hat{\mathcal{H}}} | \varphi_{M-2} \rangle \langle \varphi_{M-2} | \cdots | \varphi_1 \rangle \langle \varphi_1 | e^{-\Delta\beta \hat{\mathcal{H}}} | \varphi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.1)$$

ここで、

$$\beta = M\Delta\beta, \quad (3.2)$$

としました。さらに、

$$\langle \varphi_i | e^{-\Delta\beta \hat{\mathcal{H}}} | \varphi_{i-1} \rangle \equiv e^{-W(\varphi_i, \varphi_{i-1})}, \quad (3.3)$$

と定義すると、

$$Z = \sum_{\{\varphi\}} e^{-\sum_{i=0}^{M-1} W(\varphi_{i+1}, \varphi_i)}, \quad (3.4)$$

と書くことができる。このとき、 $e$ の肩に乗っているのを  $d+1$ 次元の古典ハミルトニアンとしてみなすことができ、 $W(\varphi_{i+1}, \varphi_i)$  は古典変数  $\varphi_{i+1}$ ,  $\varphi_i$  の間の相互作用とみなせる。これが経路積分法の概要です。

これの逆の発想が転送行列法になります。具体例として、1次元 Ising 模型での転送行列法を考えます：

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (3.5)$$

このスピン鎖を、1個の量子スピンの虚時間発展とみなすことを考えます。すなわち、

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{\sigma_j = \pm 1\}} e^{-\beta \mathcal{H}} \\ &= \sum_{\{\sigma_j = \pm 1\}} e^{\frac{\beta h}{2} \sigma_1} e^{\frac{\beta h}{2} \sigma_1 + \beta J \sigma_1 \sigma_2 + \frac{\beta h}{2} \sigma_2} e^{\frac{\beta h}{2} \sigma_2 + \beta J \sigma_2 \sigma_3 + \frac{\beta h}{2} \sigma_3} \cdots e^{\frac{\beta h}{2} \sigma_{N-1} + \beta J \sigma_{N-1} \sigma_N + \frac{\beta h}{2} \sigma_N} e^{\frac{\beta h}{2} \sigma_N}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

としたときに,

$$e^{\frac{\beta h}{2}\sigma_i + \beta J\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{\beta h}{2}\sigma_{i+1}} \equiv \langle \sigma_i | \hat{T} | \sigma_{i+1} \rangle, \quad (3.7)$$

と定義すると,

$$Z = \sum_{\{\sigma_j = \pm 1\}} e^{\frac{\beta h}{2}\sigma_1} \langle \sigma_1 | \hat{T} | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | \hat{T} | \sigma_3 \rangle \cdots \langle \sigma_{N-1} | \hat{T} | \sigma_N \rangle e^{\frac{\beta h}{2}\sigma_N}, \quad (3.8)$$

と書けます. この  $\hat{T}$  は, 虚時間発展の演算子として理解できると思います. さらに, 完全系の条件を用いると

$$Z = \sum_{\sigma_1, \sigma_N} e^{\frac{\beta h}{2}\sigma_1} \langle \sigma_1 | \hat{T}^{N-1} | \sigma_N \rangle e^{\frac{\beta h}{2}\sigma_N}, \quad (3.9)$$

となります. また, 周期的境界条件を課した場合には,

$$Z_{\text{PBC}} = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \langle \sigma_1 | \hat{T}^N | \sigma_1 \rangle = \text{Tr} \hat{T}^N, \quad (3.10)$$

という形で与えられます. 基底を

$$|\sigma = +1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\sigma = -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

とすると,

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J+h)} \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

となります. 適当なユニタリ変換を用いて

$$\hat{T} = U \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} U^\dagger, \quad (\lambda_1 > \lambda_2), \quad (3.13)$$

のように対角化すると,

$$Z = \sum_{\sigma, \sigma' = \pm 1} e^{\frac{\beta h}{2}(\sigma + \sigma')} \langle \sigma | U \begin{pmatrix} \lambda_1^{N-1} & 0 \\ 0 & \lambda_2^{N-1} \end{pmatrix} U^\dagger | \sigma' \rangle, \quad (3.14)$$

となります. このとき,  $N \rightarrow \infty$  では  $\lambda_1^{N-1} \gg \lambda_2^{N-1}$  であるから,  $c$  を定数として  $Z \sim c\lambda_1^{N-1}$  とみなすことができます. したがって, 例えば単位スピン当たりの自由エネルギーは

$$f = -\frac{k_B T}{N} \ln Z \approx -k_B T \ln \lambda_1, \quad (3.15)$$

のようになります. すなわち,  $2^N$  個の和の問題が  $2 \times 2$  の行列の最大固有値問題とすることができました.

次に, Pauli 行列を用いる方法を考えます:

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

これらを用いると,

$$\langle \sigma | \hat{T} | \sigma' \rangle = e^{\frac{\beta h}{2}\sigma} e^{\beta J\sigma\sigma'} e^{\frac{\beta h}{2}\sigma'} \equiv \langle \sigma | \hat{T}_1 \hat{T}_2 \hat{T}_3 | \sigma' \rangle, \quad (3.17)$$

を得ます. ここで

$$\hat{T}_1 = \hat{T}_3 = e^{\frac{\beta h}{2}\sigma^z}, \quad \hat{T}_2 = \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix}, \quad (3.18)$$

としました. このとき

$$\tanh \tilde{K} = e^{-2\beta J}, \quad (3.19)$$

とすれば,

$$\hat{T}_2 = \frac{1}{\sqrt{\sinh \tilde{K} \cosh \tilde{K}}} e^{\tilde{K}\sigma^x}, \quad (3.20)$$

と表すことができます。すなわち

$$\hat{T} = \hat{T}_1 \hat{T}_2 \hat{T}_3 = \frac{1}{\sqrt{\sinh \tilde{K} \cosh \tilde{K}}} e^{\frac{\beta h}{2} \sigma^z} e^{\tilde{K} \sigma^x} e^{\frac{\beta h}{2} \sigma^z}, \quad (3.21)$$

となります。これは、 $z$  方向と  $x$  方向に磁場がかかった量子スピンとみなすことができます。すなわち、 $\hat{T}$  の最大固有値を求めるということは、このような量子スピン系の基底状態を求めることと等価であることがわかります。

次に、 $h = 0$  のときのスピン期待値とスピン相関関数を考えます：

$$h = 0, \quad \hat{T} = \frac{1}{\sqrt{\sinh \tilde{K} \cosh \tilde{K}}} e^{\tilde{K} \sigma^x}. \quad (3.22)$$

このとき、固有値・固有関数は

$$|\uparrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle), \quad \lambda_1 = \frac{e^{\tilde{K}}}{\sqrt{\sinh \tilde{K} \cosh \tilde{K}}}, \quad (3.23)$$

$$|\downarrow_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle), \quad \lambda_2 = \frac{e^{-\tilde{K}}}{\sqrt{\sinh \tilde{K} \cosh \tilde{K}}}, \quad (3.24)$$

となります。以下、簡単のために周期的境界条件を考えると

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle &= \frac{1}{Z_{\text{PBC}}} \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i \sigma_j e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (i < j) \\ &= \frac{1}{Z_{\text{PBC}}} \text{Tr} \hat{T}^{i-1} \sigma^z \hat{T}^{j-i} \sigma^z \hat{T}^{N-j+1} \\ &= \frac{1}{Z_{\text{PBC}}} \{ \lambda_1^{N+i-j} \langle \uparrow_x | \sigma^z \hat{T}^{j-i} \sigma^z | \uparrow_x \rangle + \lambda_2^{N+i-j} \langle \downarrow_x | \sigma^z \hat{T}^{j-i} \sigma^z | \downarrow_x \rangle \}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

となる。このとき

$$\sigma^z |\uparrow_x\rangle = |\downarrow_x\rangle, \quad \sigma^z |\downarrow_x\rangle = |\uparrow_x\rangle, \quad (3.26)$$

であるから、

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{Z_{\text{PBC}}} \{ \lambda_1^{N+i-j} \lambda_2^{j-i} + \lambda_2^{N+i-j} \lambda_1^{j-i} \}, \quad (3.27)$$

を得る。ここで  $Z_{\text{PBC}} \approx \lambda_1^N$  であるから

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \approx \left( \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right)^{i-j} = \exp(-|i-j|/\xi), \quad \xi^{-1} = \ln \frac{\lambda_1}{\lambda_2}, \quad (3.28)$$

となります。また、一つのスピンの平均も同様に考えることができます。例えば、境界状態としてそれぞれアップとダウンに固定したものを考えると、

$$\langle \sigma_i \rangle = \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{i-1} - \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{N-i} = e^{-(i-1)/\xi} - e^{-(N-i)/\xi}, \quad (3.29)$$

となります。

次に梯子格子 Ising 模型での転送行列法を考えます。この場合には、2 個のスピンの相互作用しながら虚時間発展するとみなすことができます：

$$\mathcal{H} = -J \sum_j (\sigma_{1j} \sigma_{1,j+1} + \sigma_{2j} \sigma_{2,j+1}) - J' \sum_j \sigma_{1j} \sigma_{2j}. \quad (3.30)$$

このとき、転送行列は  $4 \times 4$  の行列となり

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} e^{2K+K'} & 1 & 1 & e^{-2K+K'} \\ 1 & e^{2K-K'} & e^{-2K-K'} & 1 \\ 1 & e^{-2K-K'} & e^{2K-K'} & 1 \\ e^{-2K+K'} & 1 & 1 & e^{2K+K'} \end{pmatrix}, \quad K = \beta J, \quad K' = \beta J', \quad (3.31)$$

で与えられる。ただし、このとき基底は

$$\{|+1, +1\rangle, |+1, -1\rangle, |-1, +1\rangle, |-1, -1\rangle\}, \quad (3.32)$$

で張っている。よって、先ほどと同様にこの問題において自由エネルギーを計算することは  $4 \times 4$  の行列の最大固有値を求める問題と等価になる。このとき、以下の Perron-Frobenius の定理より必ず最大固有値が存在し、相関長は発散しない。これは、有限系において相転移が存在しないことと対応している。転送行列のスピン表示を考えると、

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 | \hat{T} | \sigma'_1 \sigma'_2 \rangle = e^{\frac{K'}{2} \sigma_1 \sigma_2 + K(\sigma_1 \sigma'_1 + \sigma_2 \sigma'_2)} e^{\frac{K'}{2} \sigma'_1 \sigma'_2}, \quad (3.33)$$

より

$$\hat{T} = \frac{1}{\sinh \tilde{K} \cosh \tilde{K}} e^{\frac{K'}{2} \sigma_1^z \sigma_2^z} e^{\tilde{K}(\sigma_1^x + \sigma_2^x)} e^{\frac{K'}{2} \sigma_1^z \sigma_2^z} \quad (3.34)$$

となることがわかる。これは、 $z$  方向に相互作用があつて  $x$  方向に磁場がかかった 2 個の量子スピンとみなすことができる。

より一般に  $M \times N$  個の梯子格子を考えても同様の結果が得られる。そのため、このような系を  $M$  個の横磁場 Ising 模型という。

**定理 1 (Perron-Frobenius の定理)** 以下の条件を満たす  $d \times d$  行列  $A$ ;

1.  $\forall i, j$  について  $A_{ij} \geq 0, A_{ij} \in \mathbb{R}$
2. 正の実数  $n$  が存在し  $(A^n)_{ij} > 0$

において、固有値のうち一つは実数であり、対応する固有ベクトルは全ての成分が正の実数となる。この固有値を  $\lambda_1$  とすると  $\lambda_1 > |\lambda_i|, \forall i$ .

## 第 4 章

# フラストレーション

### 4.1 フラストレーション

フラストレーションにおいては、自由エネルギー

$$F = E - TS, \quad (4.1)$$

におけるエネルギー  $E$  とエントロピー  $S$  の競合が重要になってきます。通常、絶対零度におけるエントロピー密度は熱力学的極限で 0 になりますが、フラストレーションをもつ系では有限の値が残ります。これを残留エントロピーとよびます。例えば、三角格子の場合は  $S(0)/Nk_B = 0.3383\dots$ 、Villain 模型の場合は  $S(0)/Nk_B = 0.2916\dots$ 、かごめ格子の場合は  $S(0)/Nk_B = 0.502\dots$  となります。また、三角格子は辺を共有するタイプのフラストレーション系であるが、かごめ格子は点を共有するタイプのフラストレーション系であるため、かごめ格子の方がよりフラストレートした系であり、このようなタイプの系を頂点共有格子といいます。

次に、フラストレーションをもつ系での相転移を考えます。具体的には、三角格子反強磁性体

$$\mathcal{H} = J_{\text{nn}} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - J_{\text{nnn}} \sum_{\langle\langle i,k \rangle\rangle} \sigma_i \sigma_k, \quad (4.2)$$

を考えます。この模型は目方模型とよばれ、nn は最近接 (nearest neighbor)、nnn は次近接 (next nearest neighbor) を表し、和の記号はそれぞれ最近接および次近接の和を取ることを意味します。このハミルトニアンに対して平均場近似を用いて各副格子の平均値を計算すると、

$$\begin{cases} m_A = \langle \sigma_A \rangle = \tanh(-\beta J_{\text{nn}}(3m_B + 3m_C) + 6J_{\text{nnn}}m_A + \beta H) \\ m_B = \langle \sigma_B \rangle = \tanh(-\beta J_{\text{nn}}(3m_C + 3m_A) + 6J_{\text{nnn}}m_B + \beta H), \\ m_C = \langle \sigma_C \rangle = \tanh(-\beta J_{\text{nn}}(3m_A + 3m_B) + 6J_{\text{nnn}}m_C + \beta H) \end{cases} \quad (4.3)$$

となります。これを解析すると、高温側から  $m_A = m_B = m_C$  となる disordered phase,  $m_A = -m_B, m_C = 0$  となる partially disordered phase, それぞれ磁化の大きさが異なる 3-sublattice phase, 一つだけ磁化の大きさが異なる 2-sublattice phase のように相転移が起きることがわかります。このように徐々に起きる相転移を逐次相転移とよびます。





## 第 5 章

# Monte Carlo 法

### 5.1 Monte Carlo 法

分配関数

$$Z = \sum_{\text{all states } \{i\}} e^{-\beta E_i}, \quad (5.1)$$

を考え、これの各エネルギーに属する状態の重みを計算したい。このときの方法の一つは、状態  $i$  を一様に発生する方法です。このとき、

$$A = \sum_{\text{sample}} e^{-\beta E_i} \simeq Z, \quad (5.2)$$

$$B = \sum_{\text{sample}} E_i e^{-\beta E_i} \simeq \langle E_i \rangle Z, \quad (5.3)$$

として、エネルギー期待値を

$$B/A \simeq \langle E \rangle, \quad (5.4)$$

のように計算することができます。この方法を単純サンプリングといいます。単純サンプリングは、 $N$  が大きいと間違った結果を出すことが知られています。これは、一様に状態を発生させた場合には、平衡状態以外の状態を多くサンプリングしてしまうことが原因です。そこで、各状態  $i$  が  $e^{-\beta E_i}$  に比例する確率で現れるように状態を発生させることを考えます。すなわち、エネルギー期待値を

$$\frac{\sum_{\text{重みつき sampling}} E_i}{\sum_{\text{重みつき sampling}} 1} = \langle E_i \rangle, \quad (5.5)$$

と計算します。これが統計力学におけるモンテカルロ法の基本的なアイデアです。また、この乱数の発生方法としてはマルコフ鎖の方法を用います。

### 5.2 マルコフ鎖, 確率過程, マスター方程式

状態の変化を単位時間当たりの遷移確率  $\{w_{i \rightarrow j}\}$  で与えるとします。また、状態  $i$  の出現する確率を  $p_i, i = 1, \dots, M$ , とし、確率分布を  $\vec{p} = (p_1, \dots, p_M)$  で表すとします。例えば、スピン 1 個の場合の確率分布は  $\vec{p} = (p_+, p_-)$  のように表せ、その時間発展は

$$\begin{cases} p_+(t + \Delta t) = p_+(t)(1 - w_{+ \rightarrow -} \Delta t) + p_-(t)w_{- \rightarrow +} \Delta t \\ p_-(t + \Delta t) = p_+(t)w_{+ \rightarrow -} \Delta t + p_-(t)(1 - w_{- \rightarrow +} \Delta t) \end{cases}, \quad (5.6)$$

によって与えられます。このような方程式を Master equation といい、 $\{w_{i \rightarrow j}\}$  が過去の状態によらないとき Markov 過程といいます。また、マスター方程式を

$$\vec{p}(t + \Delta t) = L(\Delta t)\vec{p}(t), \quad (5.7)$$

と書いたときの  $L(\Delta t)$  を時間発展演算子といいます。一般の場合には、 $L(\Delta t)$  の行列成分は

$$\begin{cases} L_{ij} = w_{j \rightarrow i}\Delta t, & \text{for } i \neq j \\ L_{ii} = 1 - \sum_{j \neq i} w_{i \rightarrow j}\Delta t \end{cases}, \quad (5.8)$$

と書くことができます。このとき、明らかに確率保存則  $\sum_i L_{ij} = 1$  が成立することはわかると思います。さらに、 $L$  は  $p$  によらないため、

$$\vec{p}(t + n\Delta t) = (L(\Delta t))^n \vec{p}(t), \quad \vec{p}(t) = |p(t)\rangle, \quad (5.9)$$

と書くことができます。ここで固有値問題を考えて

$$L(\Delta t)|\phi_i\rangle = \lambda_i|\phi_i\rangle, \quad (5.10)$$

とおけば、初期状態

$$|p(0)\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle, \quad (5.11)$$

に対して

$$\vec{p}(n\Delta t) = L^n \vec{p}(0) = L^n \sum_{i=1}^M c_i |\phi_i\rangle = \sum_{i=1}^M c_i \lambda_i^n |\phi_i\rangle \rightarrow c_{\max} \lambda_{\max}^n |\phi_{\max}\rangle, \quad \text{for large } n, \quad (5.12)$$

となります。ここで  $\lambda_{\max}$  は  $L$  の最大固有値を表します。このときの相対誤差は

$$\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_{\max}}\right)^n \rightarrow 0, \quad \text{as } n \rightarrow \infty, \quad (5.13)$$

です。ここで重要なのは、 $\lambda_{\max}$  が非縮退でない一意的な分布に収束しないことです。これを保障するのがペロン・フロベニウスの定理です。ペロン・フロベニウスの定理が成り立つためには、 $L_{ij} = w_{j \rightarrow i}\Delta t \geq 0$  において“=”でない必要があるので、マルコフ仮定のエルゴード性；“ある  $n$  があって  $(L^n)_{ij} > 0$  となる。すなわち、全ての状態間 ( $i \rightarrow j$ ) の遷移が存在する”ことが重要になってきます。

また、 $\sum_{j=1}^n p_j(t) = 1 \rightarrow \sum_{j=1}^n p_j(t + \Delta t) = 1$  が成り立つので、

$$\vec{p}(0) \rightarrow \vec{p}(t) = \vec{p}(n\Delta t) = L^n \vec{p}(0) = \vec{p}_{\text{stationary}}, \quad (5.14)$$

であるためには  $\lambda_{\max} = 1$ ,  $c_{\max} = 1$  でなければならないことが直ちにわかります。すなわち、

$$\sum_{j=1}^M \phi_{\max}^{(j)} = 1, \quad \sum_{j=1}^M \phi_{k \neq \max}^{(j)} = 0, \quad (5.15)$$

となります。つまり、

$$\vec{p}(n\Delta t) = \vec{p}_{\text{st}} + \sum_{i=1, \neq \max}^M c_i \lambda_i^n |\phi_i\rangle = \vec{p}_{\text{st}} + \sum_{i=1, \neq \max}^M c_i e^{-n|\ln \lambda_i|} |\phi_i\rangle, \quad \vec{p}_{\text{st}} = |\phi_{\max}\rangle, \quad (5.16)$$

と書くことができます。これは、 $|\phi_i\rangle$  は定常分布を  $i$  番目のモードで変形させる分布、 $c_i$  はその強度、 $\tau_i = 1/|\ln \lambda_i|$  はそのモードの緩和時間と解釈できることを示しています。

続いて、熱平衡状態の実現について考えます。すなわち、 $\vec{p}_{\text{st}} = \vec{p}_{\text{eq}}$  となるように  $L$  を決めます。ここで、

$$\vec{p}_{\text{eq}} = L\vec{p}_{\text{eq}} = (p_{\text{eq}}^1, \dots, p_{\text{eq}}^M), \quad (5.17)$$

であり,

$$p_{\text{eq}}^{(m)} = p_{\text{eq}}^{(m)} \left(1 - \sum_{l \neq m} w_{m \rightarrow l} \Delta t\right) + \sum_{l \neq m} p_{\text{eq}}^{(l)} w_{l \rightarrow m} \Delta t, \quad (5.18)$$

です. 熱平衡状態実現のための条件は

$$0 = - \sum_{l \neq m} (w_{m \rightarrow l} \Delta t p_{\text{eq}}^{(m)} - w_{l \rightarrow m} \Delta t p_{\text{eq}}^{(l)}), \quad p_{\text{eq}}^{(m)} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_m}, \quad (5.19)$$

であるから, detailed balance

$$w_{m \rightarrow l} p_{\text{eq}}^{(m)} = w_{l \rightarrow m} p_{\text{eq}}^{(l)}, \quad (5.20)$$

を満たすようにすればよいことがわかります. これを満たすような遷移確率はいくらでも考えることができるので, 選び方によって熱浴法 (Glauber 法) や Metropolis 法などとよばれています.

また,  $p(t)$  の時間発展は微分形で表すことができ,

$$\frac{\partial \vec{p}(t)}{\partial t} = \mathcal{L} \vec{p}(t) \quad (5.21)$$

と表すことができます. これもマスター方程式とよばれています.

### 5.3 量子系の統計力学, 量子モンテカルロ法

量子系の場合には, 分布関数

$$p(i) \propto \langle i | e^{-\beta \mathcal{H}} | i \rangle = \sum_m \langle i | E_m \rangle \langle E_m | i \rangle e^{-\beta E_m} \quad (5.22)$$

を直接計算することは困難な場合があるので, 経路積分の方法

$$\begin{aligned} \langle i | e^{-\beta \mathcal{H}} | i \rangle &= \langle i | e^{-\beta \mathcal{H}/M} e^{-\beta \mathcal{H}/M} \dots e^{-\beta \mathcal{H}/M} | i \rangle \\ &= \sum_{j_1, \dots, j_{M-1}} \langle i | e^{-\beta \mathcal{H}/M} | j_1 \rangle \langle j_1 | \dots \langle j_{M-1} | e^{-\beta \mathcal{H}/M} | i \rangle, \end{aligned} \quad (5.23)$$

を用いることを考えます.  $M$  が十分大きければ

$$e^{-\beta \mathcal{H}/M} \rightarrow 1 - \frac{\beta}{M} \mathcal{H}, \quad (5.24)$$

とできるので, それぞれ

$$\langle j_k | e^{-\beta \mathcal{H}/M} | j_{k+1} \rangle \simeq \langle j_k | \left(1 - \frac{\beta}{M} \mathcal{H}\right) | j_{k+1} \rangle = \left( \delta_{j_k j_{k+1}} - \frac{\beta}{M} \langle j_k | \mathcal{H} | j_{k+1} \rangle \right), \quad (5.25)$$

とすることができます. 量子モンテカルロ法とは, この虚時間方向の経路についてもモンテカルロ法を適用する手法です. すなわち,  $d$  次元実空間の量子系を,  $(d+1)$  次元の古典空間としてとらえてモンテカルロ法を適用します. このとき, 詳細つり合いの条件式は

$$\frac{W_{j_p \rightarrow j'_p}}{W_{j'_p \rightarrow j_p}} = \frac{\langle j_{p-1} | e^{-\frac{\beta}{M} \mathcal{H}} | j'_p \rangle \langle j'_p | e^{-\frac{\beta}{M} \mathcal{H}} | j_{p+1} \rangle}{\langle j_{p-1} | e^{-\frac{\beta}{M} \mathcal{H}} | j_p \rangle \langle j_p | e^{-\frac{\beta}{M} \mathcal{H}} | j_{p+1} \rangle}, \quad (5.26)$$

となります.

次に, スピン系での例をみていきます. 具体例として, 横磁場イジング模型

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \Gamma \sigma_i^x, \quad (5.27)$$

を考えます. この模型は,  $J > \Gamma$  で秩序相 ( $T = 0$  で  $\langle \sigma^z \rangle = 0$ ),  $J < \Gamma$  で無秩序相 ( $T = 0$  で  $\langle \sigma^z \rangle \neq 0$ ) となることが知られています. このとき,

$$e^{-\frac{\beta}{M}\mathcal{H}} \rightarrow e^{\frac{\beta}{M}(J\sum\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z)}e^{\frac{\beta}{M}\Gamma\sum\sigma^x} + o\left(\frac{\beta}{M}\right), \quad (5.28)$$

のように分解することができます. これを Suzuki-Trotter 分解といいます. 一般に,

$$e^{A+B} = (e^{A/n}e^{B/n})^n, \quad \text{as } n \rightarrow \text{大}, \quad (5.29)$$

を Trotter 公式といいます. ここで,

$$\langle \sigma_i | e^{\frac{\beta\Gamma}{M}\sigma_i^x} | \sigma'_i \rangle = Ae^{K_{ST}\sigma_i\sigma'_i}, \quad (5.30)$$

という形でおくことを考えると,

$$e^{\frac{\beta\Gamma}{M}\sigma^x} = \cosh\frac{\beta\Gamma}{M} + \sigma^x \sinh\frac{\beta\Gamma}{M}, \quad (5.31)$$

より

$$\begin{cases} \cosh\frac{\beta\Gamma}{M} = Ae^{K_{ST}} \\ \sinh\frac{\beta\Gamma}{M} = Ae^{-K_{ST}} \end{cases}, \quad (5.32)$$

となるので,

$$\begin{cases} A^2 = \cosh\frac{\beta\Gamma}{M} \sinh\frac{\beta\Gamma}{M} \\ K_{ST} = -\frac{1}{2} \ln \tanh\frac{\beta\Gamma}{M} \end{cases}, \quad (5.33)$$

を得ることができます. これに対してモンテカルロ法を適用すると, 高温では虚時間方向に, 低温では実空間方向に揃った状態が得られることがわかります.

次に, 1次元 Heisenberg 模型

$$\mathcal{H} = J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1}, \quad (5.34)$$

を考える. このとき,

$$\begin{aligned} e^{-\beta\mathcal{H}} &= e^{-\beta J(\sigma_1\sigma_2+\sigma_2\sigma_3+\dots+\sigma_N\sigma_1)} \\ &= e^{-\beta J[(\sigma_1\sigma_2+\sigma_3\sigma_4+\dots)+(\sigma_2\sigma_3+\sigma_4\sigma_5+\dots)]}, \end{aligned} \quad (5.35)$$

のような分割をして Suzuki-Trotter 分解を行えば実際に計算を実行することができます.

以上のような量子モンテカルロ法の問題点として, 例えば二次元の三角格子反強磁性体に対して適用すると, 経路の重みが負になる negative sign problem が現れることがあります.

## 第 6 章

# レポート課題

### 6.1 中間レポート (2015/06/01 締切)

1. 長距離相互作用模型 (Husimi-Temperley 模型) を考える:

$$\mathcal{H} = -\frac{Jz}{2N} \left( \sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^2 - H \left( \sum_{i=1}^N \sigma_i \right). \quad (6.1)$$

$N$  体ときの磁化の二乗の平均が

$$\langle M^2 \rangle_N = \begin{cases} T > T_c & O(N) \\ T = T_c & O(N^{3/2}), \\ T < T_c & O(N^2) \end{cases} \quad (6.2)$$

となることを講義ノート 2.2 節前半の方法で示せ.

2. 次のスケーリング関係式:

$$\begin{cases} \alpha + 2\beta + \gamma = 2 & \text{Rushbrook の関係式} \\ \gamma = \beta(\delta - 1) & \text{Widom の関係式} \\ \gamma = (2 - \eta)\nu & \text{Fisher の関係式} \\ \alpha + \beta(1 + \delta) = 2 & \text{Griffis の関係式} \\ \alpha = 2 - d\nu & \text{Josephson の関係式} \end{cases}, \quad (6.3)$$

をカダノフのスケーリング:

$$f(\mathbf{u}) = b^{-d} f(\mathbf{u}') = b^{-d} f(b^{y_1} u_1, b^{y_2} u_2, \dots), \quad (6.4)$$

から導け.



## 参考文献

- [1] J. Frölich *et al.*, Phys. Rev. Lett. **36**, 804 (1976).
- [2] F. J. Dyson *et al.*, J. Stat. Phys. **18**, 335 (1978).
- [3] J. M. Kosterlitz, J. Phys. C **7**, 1046 (1974).