

相転移の統計力学

野村 清英

平成31年7月5日

目次

第0章	序論	1
0.1	相転移と臨界現象	1
0.2	この講義の目標	2
0.3	文献紹介	2
第1章	様々な相転移現象	3
1.1	相図と臨界指数	4
1.1.1	一軸異方強磁性体	4
1.1.2	等方的(ハイゼンベルク)強磁性体	9
1.1.3	単純流体	9
1.2	簡単なモデルの例	11
1.2.1	磁性体	11
1.2.2	反強磁性	14
1.2.3	超流動、超伝導	14
1.2.4	流体	15
1.2.5	2元合金	16
第2章	平均場理論	17
2.1	自由エネルギーの平均場近似	17
2.2	ランダウ理論	20
2.2.1	臨界指数	21
2.2.2	ユニバーサリティと次元	22
2.2.3	対称性	22
2.2.4	連続対称性	22
2.3	相関関数の平均場理論(ランダウ理論)	23
2.3.1	フーリエ変換について	23
2.3.2	2点相関関数と並進対称性	24
2.3.3	空間変化を取り入れたランダウの自由エネルギー	25
2.3.4	波数空間での相関	25

2.3.5	実空間での相関関数	26
2.3.6	臨界指数	27
2.4	相互作用レンジと相関関数	27
2.4.1	帯磁率と相関関数	28
2.5	平均場理論の補正	28
第3章	厳密な理論	31
3.1	1次元イジングモデル(転送行列)	31
3.1.1	転送行列法による自由エネルギー	31
3.1.2	相転移	33
3.1.3	熱力学量	35
3.1.4	相関関数	36
3.2	無限レンジイジング模型	39
3.3	2次元イジングモデル	39
3.4	6-vertex model	40
第4章	スケーリング仮説	41
4.1	ランダウ理論の次元解析	41
4.1.1	段階1	42
4.1.2	段階2	42
4.2	次元解析と臨界指数	43
4.2.1	単位の変更	43
4.2.2	2点相関関数の次元解析	44
4.3	異常次元 (Anomalous dimension)	45
4.4	異常次元と漸近性	46
4.5	繰り込みと異常次元	47
4.6	スケーリング仮説(自由エネルギー)	47
4.6.1	臨界指数 α, β, γ の関係	48
4.6.2	臨界指数 β, γ, δ の関係	48
4.7	スケーリング仮説(相関関数)	49
4.8	相関距離とスケーリング	49
第5章	繰り込み群	51
5.1	ブロックスピン変換	51
5.2	イジングモデルのブロックスピン変換	51
5.2.1	1次元	51

5.2.2	高次元	52
5.3	一般論	52

第0章 序論

0.1 相転移と臨界現象

- 1次相転移:
 1. 自由エネルギーの1階微分が不連続、潜熱や体積
 2. 例としては、固体-液体の融解など
- 連続相転移と臨界現象：
 1. 自由エネルギーの1階微分は連続、高階微分に不連続や発散
 2. 様々な物理量(比熱、帯磁率(磁性体)、圧縮率(流体)、誘電率(誘電体))が発散したり特異性を示す。
- 自発的対称性の破れ
- 場の理論や高エネルギー物理との関連
- ユニバーサリティ：発散のべき指数はモデルの詳細によらない
- スケーリング則 (Widom)
- 繰り込み群 (Wilson, Anderson)
- 南部-Goldstone の定理
- Mermin-Wagner-Coleman の定理
- 厳密解：実は結構古い、ベーテ仮説 (H.A.Bethe,1931)、2次元イジングモデル (Onsager,1944) Six vertex モデルなど。単純な平均場近似ではダメということを示したことで、学問発展上の意義は大きい。
- 共形場理論 (1984-)：複素関数論を使って、2次元のユニバーサリティクラスを分類。超弦理論などのベースになっている。

0.2 この講義の目標

- 臨界現象の簡単な導入
- 平均場近似、ランダウ理論、揺らぎの相関
- スケーリング仮説
- 厳密解:1次元イジングモデル(転送行列),無限レンジイジングモデル等
- 繰り込み群

0.3 文献紹介

- “Scaling and Renormalization in Statistical Physics”
by J. L. Cardy (Cambridge lecture Notes in Physics)
- “Lectures On Phase Transitions And The Renormalization Group
(Frontiers in Physics)”
by N. Goldenfeld (Frontiers in Physics)
- “Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena”
by D. J. Amit (World Scientific Pub Co Inc)
- 「相転移・臨界現象の統計力学」西森 秀稔 著、培風館

第1章 様々な相転移現象

- 相関距離 (correlation length) ξ
 1. マクロ (巨視的) とミクロ (原子レベル) を区別する程度の長さ
 2. 普通、マクロな物体を分割しても、その性質 (密度, 比熱, 圧縮率, 磁化率など) はほとんど変わらない。しかしこの様な分割操作を繰り返し替えて分子程度の大きさになると、マクロな性質とは明かに異なる。したがってマクロとミクロの性質が変わるような距離スケールがあるはずで、これを相関距離 (*correlation length*) とよび、 ξ で表す。
 3. 物質中の揺らぎ (fluctuation) は、相関距離よりも十分遠い場合は互いに独立とみなせる。
 4. 通常、相関距離は原子間隔の数倍程度
 5. しかし、連続相転移の臨界点では相関距離が発散するので、あらゆるスケールの揺らぎを考慮しなければならない。
- 一次相転移 (first-order transition)
 1. 自由エネルギーの1次微分に不連続性がある。
 2. 例: 結晶-流体の相転移、液体-気体の相転移、強磁性体の低温相
 3. 相転移点で、2相 (もしくはもっと多くの相) が共存 → 密度や磁化などが不定
 4. 相転移点から少しでも離れると単一の相になる。
 5. 相関距離 ξ は有限
 6. 潜熱
 7. ヒステリシス (過冷却などで準安定状態 (metastable) になるため)

- 連続相転移 (continuous transition)
 1. 自由エネルギーの2次以上の微分に不連続性ないし発散がある。特異性が現れる点を臨界点 (critical point) と呼ぶ。
 2. 例: 液体と気体の臨界点, 磁性体のキュリー転移 (強磁性-常磁性転移), 液体ヘリウム4の超流動転移
 3. 秩序変数
 4. 自発的対称性の破れ
 5. 臨界点近くの性質
 - (a) 相関距離 ξ は発散し, 臨界点で無限になる。したがって揺らぎは全ての長さスケールで相関している。
 - (b) 臨界指数
様々な物理量 (比熱、帯磁率、圧縮率、誘電率) が発散し、べき乗的に振る舞う。そのべき指数を臨界指数 (critical exponent) とよぶ。
 - (c) ユニバーサリティ (普遍性)
臨界温度や臨界圧力などは物質によりそれぞれ異なるが、臨界指数はモデルの詳細によらず、対称性や空間次元のみによる。これをユニバーサリティ (universality) とよぶ。

1.1 相図と臨界指数

1.1.1 一軸異方強磁性体

強磁性体で重要な外部パラメーターは温度 T と磁場 H である。全ての熱力学量は、 $H = 0, T \leq T_c$ (T_c : 臨界温度) の線を除いて、温度 T と磁場 H のなめらかな関数である (図 1.1 参照)。

臨界温度以下 ($T < T_c$) の一定温度では、磁化 (magnetization) M は、磁場 H の関数として $H = 0$ で不連続である (図 1.2 (a) 参照)。このような不連続性は1次転移に特徴的なものであり、相関距離は有限である。

臨界点 (キュリー温度) T_c に低温側から近づいていくと、この不連続性は小さくなって、 T_c では0となる。また、相関距離 ξ は大きくなって、 T_c では無限大になる (図 1.2 (b) 参照)。 $H = 0, T = T_c$ の点は、1次転移が連続になるような臨界端点 (critical end point) の例である。

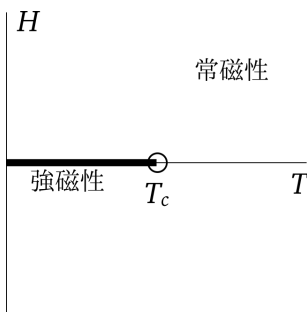
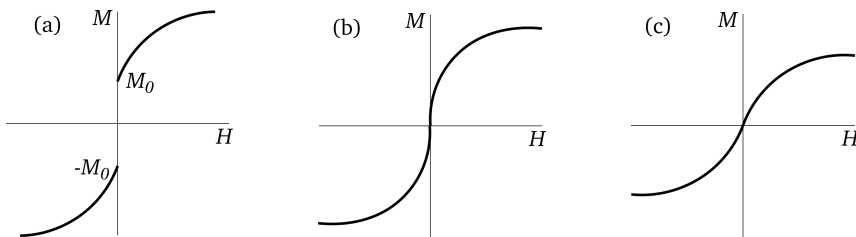


図 1.1: 強磁性体の相図

図 1.2: 様々な温度での磁場と磁化 (a) $T < T_c$; (b) $T = T_c$; (c) $T > T_c$

自発磁化、自発的対称性の破れ

$T < T_c$ では、 $H \rightarrow 0+$ と $H \rightarrow 0-$ の2つの極限で、異なる磁化の値 $\pm M_0$ (M_0 :自発磁化) をとる。どちらの値をとるかは過去の履歴による。これは、自発的対称性の破れ (spontaneous symmetry breaking) の例である。ハミルトニアンはスピンを全て反転させても不変にもかかわらず、低温側の熱平衡状態でこの対称性が破れている。この場合、自発磁化 M の値は磁気秩序の大きさを表しているのが秩序変数またはオーダーパラメーター (order parameter) と呼ぶ。

自発磁化は温度に対して連続に振る舞う (図 1.3 参照)。

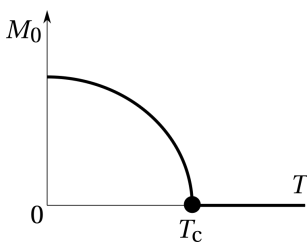


図 1.3: 自発磁化の温度依存性

帯磁率の発散

外部磁場 H を 0 に保ったまま温度 T を高温側から臨界点 T_c に近づけて行ったとする。磁化 M は 0 のままだが、 $T < T_c$ では自発磁化が現れるので、その前兆現象として、微小な磁場 H にたいしても大きな磁化が生じる。これに対応して T_c 近くでは帯磁率 (magnetic susceptibility) が発散する。

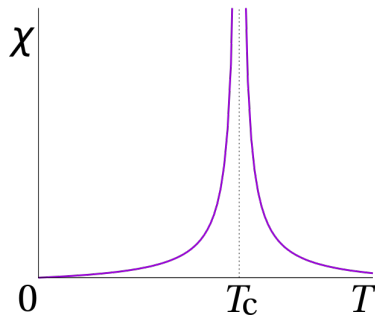


図 1.4: 帯磁率の温度依存性

臨界指数 (critical index)

臨界点の十分近くでは、多くの物理量がべき乗的な挙動を示す。強磁性体の場合のべき乗則を特徴づける臨界指数を定義しよう。その前に、臨界点からのズレを表す無次元量を以下のように導入する。

- 換算温度 (reduced temperature): $t \equiv (T - T_c)/T_c$
- 換算外部磁場 (reduced external field): $h \equiv H/(k_B T_c)$

すると、各種臨界指数は

1. α :

ゼロ磁場での比熱 C は、 t について、

$$C \propto A|t|^{-\alpha} \quad (1.1)$$

と振る舞う (t についてなめらかに振る舞う項は除く)。 α が正の場合 ($0 < \alpha < 1$) は比熱は温度 T の関数として発散し、負の場合 ($-1 < \alpha < 0$) はカスプ (連続だが微分が発散) となる。

原理的には高温側 ($t > 0$) からのべき指数 $C \approx A_+ t^{-\alpha_+}$ と、低温側 ($t < 0$) からのべき指数 $C \approx A_- (-t)^{-\alpha_-}$ は異なる可能性がある。しかし、繰り込み群の議論から $\alpha_+ = \alpha_-$ と言うことが分かるので、今後両者を区別せずに α と記す。

臨界指数 α はユニバーサルだが、臨界振幅 A (critical amplitude) はユニバーサルではないし、高温側と低温側では異なる ($A_+ \neq A_-$)。しかし比 A_-/A_+ はユニバーサルである。

2. β :

低温側 ($t < 0$) での自発磁化は t の関数として以下のように振る舞う (図 1.3 参照)。

$$M_0 \equiv \lim_{H \rightarrow 0^+} M \propto (-t)^\beta, \quad (0 < \beta < 1) \quad (1.2)$$

3. γ :

ゼロ磁場での帯磁率 (図 1.4 参照) は t の関数として以下のように振る舞う。

$$\chi \equiv \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H=0} \propto |t|^{-\gamma} \quad (1.3)$$

この臨界指数 γ も、 t の符号によって異なる可能性があるが、繰り込み群の議論からは同じ値でなければならない。

4. δ :

臨界温度 T_c ($t = 0$) では、磁化は磁場 h に対して次のように振る舞う (図 1.2 (b) 参照)。

$$M \propto |h|^{1/\delta} \quad (1.4)$$

5. ν :

ゼロ磁場 $h = 0$ では、相関距離 ξ は転移点で発散し、

$$\xi \propto |t|^{-\nu} \quad (1.5)$$

と振る舞う。

6. η :

臨界点直上 ($t = h = 0$) で、相関関数は距離 r にたいし指数関数的には減衰せず、次のようにべき乗的に振る舞う。

$$G(r) \propto r^{-d+2-\eta} \quad (1.6)$$

(d :空間次元)

7. z :

これまで述べた臨界指数は、平衡状態についてのものだった。非平衡状態に関する臨界現象としては、緩和時間 τ は臨界点に近づくと発散し、

$$\tau \propto \xi^z \quad (1.7)$$

のように振る舞う。 z は動的臨界指数と呼ばれる。

なお、ここで上げた臨界指数の全てが独立というわけではなく、後で見るように少数のスケールング次元 (scaling dimensions) で整理できる。

相関関数と相関距離 ξ の補足

1. 揺らぎの相関関数

秩序変数は空間的に揺らいでいる。磁性体の場合、場所 r のスピンを $s(r)$ とすると、揺らぎの相関関数は

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &\equiv \langle (s(\mathbf{r}) - \langle s(\mathbf{r}) \rangle)(s(\mathbf{r}') - \langle s(\mathbf{r}') \rangle) \rangle \\ &= \langle s(\mathbf{r})s(\mathbf{r}') \rangle - \langle s(\mathbf{r}) \rangle \langle s(\mathbf{r}') \rangle \end{aligned} \quad (1.8)$$

である。システムが並進対称ならば、 $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ で、さらに空間的に等方的なら $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ である。

2. 相関関数と相関距離

ξ が有限な場合には、相関関数は漸近的に

$$G(r) \propto \exp(-r/\xi)r^{-(d-1)/2} \quad (r \gg \xi) \quad (1.9)$$

と振る舞う (湯川ポテンシャルとの類似、平均場近似 (ランダウ理論) で後で導出予定)。

1.1.2 等方的 (ハイゼンベルク) 強磁性体

等方的 (ハイゼンベルク) 強磁性体の臨界現象は、1 軸異方磁性体と似ている。ただし、局所磁気モーメント (スピン) が回転対称ということから、低温相での自発磁化の向きと平行な局所磁化の揺らぎと、自発磁化に垂直な局所磁化の揺らぎを区別しなければならない。

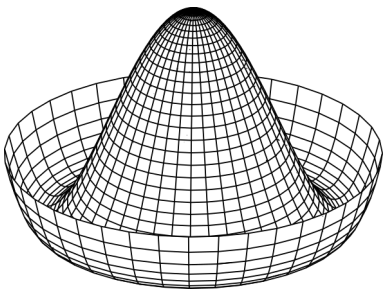


図 1.5: メキシカンハットポテンシャル

自発磁化の向きと平行な方向の帯磁率 (longitudinal susceptibility) の挙動は、1 軸異方磁性体の場合と類似していて、臨界点 T_c でのみ発散する。しかし自発磁化の向きと垂直な方向の帯磁率 (transverse susceptibility) は臨界点だけでなく $T < T_c$ の秩序相でも発散する。(cf. 南部 - Goldstone モード)

1.1.3 単純流体

He, Ne, Ar や CH_4 , SF_6 などの単純流体の相転移を議論する。

臨界温度 T_c , 臨界圧力 p_c , 臨界密度 ρ_c

臨界温度以下で、液体と気体の相境界を横切るときに、密度 ρ は不連続に変化する。相境界での液体の密度を ρ_L , 気体の密度を ρ_G とすると、2 相の密度差 $\rho_L - \rho_G$ は臨界点に近づくにつれて小さくなり、臨界点では 0 になる。

液体 - 気体転移を強磁性体と比較すると

- p が磁場 H に類似
- ρ が磁化 M に類似

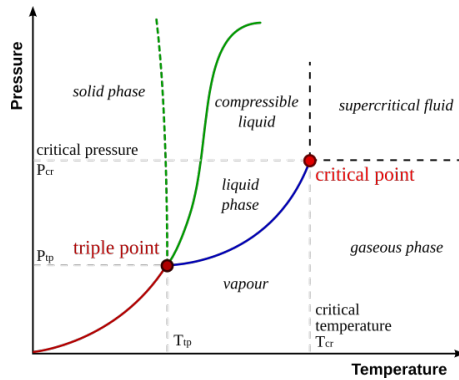


図 1.6: 物質の三態（固体－液体－気体）と温度、圧力の関係を示す相図の例。横軸が温度、縦軸が圧力、緑の実線が融解曲線、赤線が昇華曲線、青線が蒸発曲線、3つの曲線が交わる点が三重点 (triple point)。液体と気体の蒸発曲線は臨界点 (critical point) で終わる。

1. α :

$\rho = \rho_c$ での比熱 C_V

$$C_V \propto A|t|^{-\alpha} \quad (1.10)$$

2. β :

$$\rho_L - \rho_G \propto (-t)^\beta \quad (1.11)$$

3. γ : 等温圧縮率

$$\chi_T \propto |t|^{-\gamma} \quad (1.12)$$

4. δ :

$$p - p_c \propto |\rho_L - \rho_G|^\delta \quad (1.13)$$

臨界指数 ν と η は、 $G(r)$ を密度－密度の相関関数と定義しなおすと、強磁性体の場合と同様に定義できる。

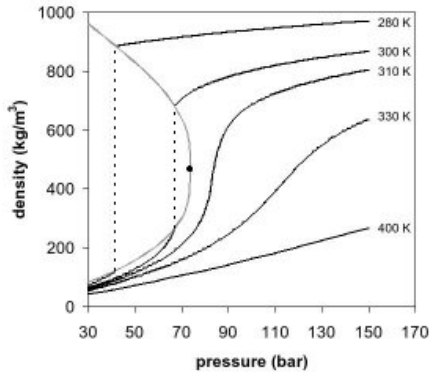


図 1.7: 二酸化炭素の圧力と密度の相図、横軸：圧力、縦軸：密度

1.2 簡単なモデルの例

平衡状態の分配関数：

$$Z = Tr \exp(-\beta\mathcal{H}) \quad (1.14)$$

(\mathcal{H} : ハミルトニアン、 $\beta = 1/(k_B T)$)

比較的簡単なハミルトニアンにたいしても、分配関数を求めるのは困難である。

しかし、臨界現象を使う場合、ユニバーサリティの現象から、モデルの詳細によらず議論できるので、詳しいパラメーターフィッティングの必要は無い。

ただし厳密解のあるモデルは、少数に限られる。

量子効果：有限温度の相転移と臨界現象については、量子効果を無視することが出来、古典系の相転移とみなしてよい。

1.2.1 磁性体

ハイゼンベルクモデル

等方的磁性体 (古典ハイゼンベルクモデル)

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{r,r'} J(r,r') s(r) \cdot s(r') - \mu \mathbf{H} \cdot \sum_r s(r) \quad (1.15)$$

スピン変数や、相互作用などについての簡単な説明

- $\mathbf{s}(\mathbf{r})$:

格子点 \mathbf{r} 上に局在した3成分のスピンで、

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}) = 1 \quad (1.16)$$

を満たす。

- $J(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$: 通常、相互作用は短距離 (遠距離では早く減衰)

$$|J(\mathbf{r}, \mathbf{r}')| \propto \exp(-A|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \quad (A > 0)$$

N.B. もし相互作用が長距離に及ぶか、相互作用がべき的に比較的ゆっくりと減衰する ($|J(\mathbf{r}, \mathbf{r}')| \propto |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-B}$) ならば、別のユニバーサリティクラスになる。

- $J(\mathbf{r}, \mathbf{r}') > 0$ なら強磁性

O(3) 対称性 :

外部磁場 $\mathbf{H} = 0$ の時は、上記ハミルトニアン (1.15) は回転対称である。つまり、全ての格子点上のスピンを一様に回転させたとき:

$$s^i(\mathbf{r}) \rightarrow s'^i(\mathbf{r}) \equiv \sum_{j=1}^3 O^{ij} s^j(\mathbf{r}) \quad (1.17)$$

(ここで、 $s^i(\mathbf{r})$ は格子点 \mathbf{r} 上のスピン \mathbf{s} の i 成分、 O^{ij} は3行3列の実直交行列 (${}^T O O = O^T O = E$))、

$$\mathbf{s}'(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{s}'(\mathbf{r}') = \mathbf{s}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}') \quad (1.18)$$

なので、変換後のハミルトニアンは同じ形をしている。

イジングモデル

結晶異方性などの影響で、ある軸方向のスピン自由度だけが寄与する場合、その軸方向の自由度のみを考慮すれば十分で

$$s(\mathbf{r}) = \pm 1 \quad (1.19)$$

と表せられる。

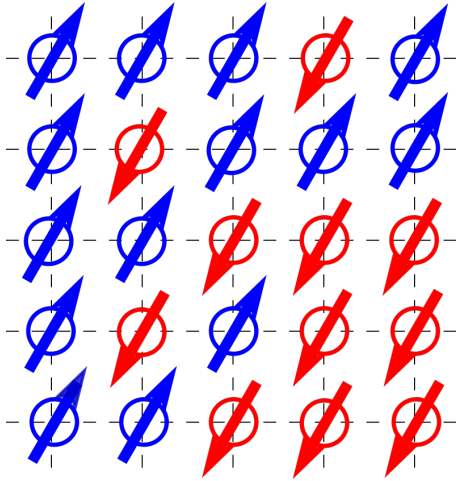


図 1.8: 2次元正方格子上的イジングモデル

これに対応するハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r}, \mathbf{r}') s(\mathbf{r}) \cdot s(\mathbf{r}') - \mu H \cdot \sum_{\mathbf{r}} s(\mathbf{r}) \quad (1.20)$$

で、イジングモデル (Ising model) と呼ばれる (図 1.8 参照)。

Z_2 対称性:

ゼロ磁場 $H = 0$ で、全ての格子点上のスピンを反転させたとき:

$$s(\mathbf{r}) \leftrightarrow -s(\mathbf{r}) \quad (1.21)$$

変換後のハミルトニアン (1.20) は同じ形をしている。

XY モデル

スピンのみが xy 面内のみを動くとした場合

$$(s^x(\mathbf{r}))^2 + (s^y(\mathbf{r}))^2 = 1 \quad (1.22)$$

と言う制約条件がつく。ハミルトニアンの形はハイゼンベルクモデルと同様。

$O(2)$ 対称性

外部磁場 $\mathbf{H} = 0$ の時、全ての格子点上のスピンを一様に回転させたとき:

$$s^i(\mathbf{r}) \rightarrow s'^i(\mathbf{r}) \equiv \sum_j O^{ij} s^j(\mathbf{r}) \quad (1.23)$$

(ここで、 $s^i(\mathbf{r})$ は格子点 \mathbf{r} 上のスピン s の i 成分、 O^{ij} は 2 行 2 列の実直交行列 (${}^T O O = O^T O = E$))、

$$\mathbf{s}'(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{s}'(\mathbf{r}') = \mathbf{s}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}') \quad (1.24)$$

なので、変換後のハミルトニアンは同じ形をしている。

1.2.2 反強磁性

ハイゼンベルクモデル (1.15) やイジングモデル (1.20) で、正方格子や立方格子 (一般に 2 つの副格子に分割可能な場合) で、相互作用が最近接でかつ $J(\mathbf{r}, \mathbf{r}') < 0$ の場合は、低温側で反強磁性 (Néel) 秩序を示す。な

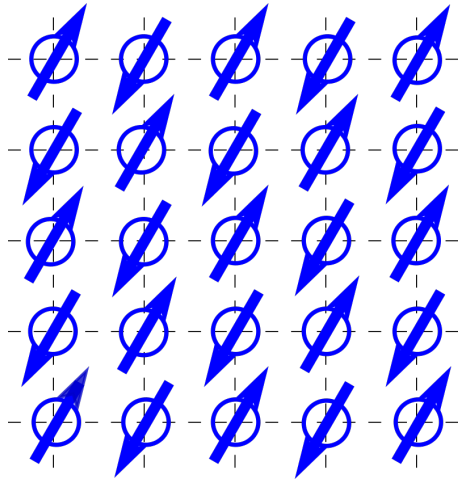


図 1.9: 2次元正方格子上的反強磁性イジングモデル、低温相

お、2 つの副格子の片方でスピンを反転させると、強磁性と等価になる。

1.2.3 超流動、超伝導

ヘリウム (${}^4\text{He}$) の超流動では、巨視的な量子状態に凝縮 (Bose-Einstein 凝縮) し、マクロな複素波動関数 $\Psi(\mathbf{r})$ で表される状態になる。

${}^4\text{He}$ の臨界現象については、量子的な性質を無視して、 $\Psi(\mathbf{r})$ を複素数の古典的オーダーパラメーターとみなしてよい。さらに超流動-常流動転移では、 $\Psi(\mathbf{r})$ の絶対値 $|\Psi(\mathbf{r})|$ の揺らぎは重要ではなく、 $\Psi(\mathbf{r})$ の位相の揺らぎが重要なので、数学的には XY スピンモデルと等価である。

U(1) 対称性:
複素秩序変数の位相を

$$\Psi(\mathbf{r}) \rightarrow \exp(i\theta)\Psi(\mathbf{r}) \quad (1.25)$$

と変えてもエネルギーや分配関数是不変である。

XY スピンモデルと同じユニバーサリティクラス (SO(2) と U(1) は群として同型)

1.2.4 流体

流体の大分配関数は、運動エネルギーについてはすぐ積分できるので、

$$\Xi = \sum_N \frac{\zeta^N}{N!} \int \exp\left(-\beta \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\right) d^3 r_1 \cdots d^3 r_N \quad (1.26)$$

となる(ここで、2体の相互作用ポテンシャル V のみを考慮した)。ポテンシャル V は至近距離では剛体芯斥力、ある程度の距離では引力的で $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \rightarrow \infty$ で十分早く小さくなる(図 1.10 参照)。

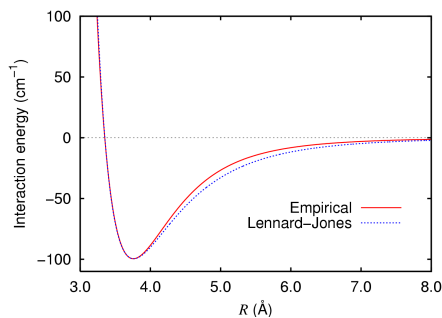


図 1.10: 原子間のポテンシャル。横軸は原子間距離(オングストローム)を、縦軸はポテンシャルエネルギーを表す。2つのアルゴン原子間のポテンシャルが赤い実線で、これをレナード=ジョーンズ・ポテンシャルでフィッティングしたものが青い点線である。

流体のモデルをさらに単純化して、格子ガスモデル(lattice gas model)にする。粒子は規則格子の上のみあるものとし、格子点 r にある粒子数 $n(r)$ は 0 または 1 のみに限るとする(剛体芯斥力に対応)。ポテンシヤ

ルの引力部分は $-2 \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r}, \mathbf{r}') n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}') (J > 0)$ で表す。すると

$$\Xi = \sum_{n(\mathbf{r})=0,1} \zeta^{\sum_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r})} \exp \left(2\beta \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r}, \mathbf{r}') n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}') \right) \quad (1.27)$$

さらに、 $s(\mathbf{r}) \equiv 2n(\mathbf{r}) - 1$ と定義しなおすと、 $s(\mathbf{r}) = \pm 1$ となる。すると式 (1.27) の指数の中の項は

$$\frac{1}{2}\beta \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r}, \mathbf{r}') s(\mathbf{r}) s(\mathbf{r}') + \beta H \sum_{\mathbf{r}} s(\mathbf{r}) \quad (1.28)$$

(ここで $H = \frac{1}{2} k_B T \ln \zeta + \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$) と書き換えられる。これは磁場中の強磁性イジングモデルと等価になる。

単純液体の場合は、自発的対称性の破れは無い。臨界点近傍では、近似的に Z_2 対称性が見られる。

1.2.5 2元合金

β -CuZn

高温相では無秩序 (体心方格子)、低温度相では秩序 (CsCl タイプ)。規則不規則転移 (連続的に状態変化)。やはり磁場中のイジングモデルと等価になる。

第2章 平均場理論

この章では平均場理論 (mean field theory) または平均場近似を紹介する。平均場理論はオーダーパラメーターが十分大きく、揺らぎが無視できる場合に有効で、相転移を定性的にかなりよく記述する。もちろん臨界点近傍で揺らぎが大きい場合は平均場理論の妥当性は成り立たない。

空間次元が十分大きな場合は、平均場理論による臨界指数が正確になることがある。

2.1 自由エネルギーの平均場近似

強磁性イジングモデルを例にして、平均場近似を紹介しよう。まず強磁性イジングモデルの分配関数 Z は

$$Z = Tr \exp \left(\frac{1}{2} \beta \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') s(\mathbf{r}) s(\mathbf{r}') + \beta H \sum_{\mathbf{r}} s(\mathbf{r}) \right) \quad (2.1)$$

($s(\mathbf{r}) = \pm 1$) である。 $J(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ は強磁性交換結合定数、 H は一様外部磁場である。また、 $\beta \equiv 1/(k_B T)$ としている。

交換相互作用がない場合 (つまり $J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 0$) は、分配関数 Z は1個のスピンの場合の直積になるので簡単に計算でき、

$$Z_0 = Tr \exp \left(\beta H \sum_{\mathbf{r}} s(\mathbf{r}) \right) = \left(\sum_{s=\pm 1} \exp(\beta H s) \right)^N = (2 \cosh \beta H)^N \quad (2.2)$$

(N はサイト数) である。この場合、外部磁場中のスピンの期待値、または1格子辺りの磁化 ($m = M/N = \langle s(\mathbf{r}) \rangle$) は

$$\langle s \rangle = \frac{\sum_{s=\pm 1} s \exp(\beta H s)}{\sum_{s=\pm 1} \exp(\beta H s)} = \tanh(\beta H) \quad (2.3)$$

と求まる。

平均場近似の基本的な考えは、相互作用のある場合の (2.1) を、より簡単な相互作用のない分配関数で近似しようというものである。磁場 H の元で有限な磁化 $m \equiv \langle s(\mathbf{r}) \rangle$ が生じる。まずハミルトニアンに含まれる、 $s(\mathbf{r})s(\mathbf{r}')$ (スピン自由度について 2 次) の項を次のように線形化して扱おう。揺らぎが小さい場合、スピンの平均からのズレ ($\delta s(\mathbf{r}) \equiv s(\mathbf{r}) - m$) は十分小さいと考えられるので、2 次以上の項を無視すると：

$$\begin{aligned} s(\mathbf{r})s(\mathbf{r}') &= (m + \delta s(\mathbf{r}))(m + \delta s(\mathbf{r}')) \\ &= m^2 + m(\delta s(\mathbf{r}) + \delta s(\mathbf{r}')) + O((\delta s)^2) \\ &\approx m^2 + m(\delta s(\mathbf{r}) + \delta s(\mathbf{r}')) \end{aligned} \quad (2.4)$$

これはさらに

$$s(\mathbf{r})s(\mathbf{r}') \approx m^2 + m(s(\mathbf{r}) - m + s(\mathbf{r}') - m) = m(s(\mathbf{r}) + s(\mathbf{r}')) - m^2 \quad (2.5)$$

と書き換えることができる。すると (2.1) の指数の中のハミルトニアンは

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}\beta \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}')s(\mathbf{r})s(\mathbf{r}') + \beta H \sum_{\mathbf{r}} s(\mathbf{r}) \\ &\approx \frac{1}{2}\beta \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}')(m(s(\mathbf{r}) + s(\mathbf{r}')) - m^2) + \beta H \sum_{\mathbf{r}} s(\mathbf{r}) \\ &= -\frac{1}{2}N\beta Jm^2 + \beta(Jm + H) \sum_{\mathbf{r}} s(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2.6)$$

と近似される。ここで、 $J \equiv \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ (並進対称性より J は場所によらない) である。

式 (2.6) で無視したのはスピン同士の揺らぎの相関である。したがって、平均場理論が正当化されるのは、揺らぎが十分小さい場合である。平均場近似での分配関数は (2.6) から、相互作用の無い場合の式 (2.2) と同様な手順で

$$Z \approx \exp\left(-\frac{1}{2}N\beta Jm^2\right) [2 \cosh \beta(Jm + H)]^N \quad (2.7)$$

と求められる。1 格子点当たりの自由エネルギー $f \equiv -(\beta N)^{-1} \ln Z$ は、平均場近似では

$$f_{MF}(H) = -\beta^{-1} \ln 2 + \frac{1}{2}Jm^2 - \beta^{-1} \ln \cosh \beta(Jm + H) \quad (2.8)$$

となる。自由エネルギー (2.8) は (磁化 m の関数ではなく) 磁場 H の関数として考えられる。また、(2.8) は H の関数として凸¹である。これまで磁化 m を決めてなかったが、磁化は自由エネルギー f を次のように微分して得られる。

$$m(H) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} \langle s(\mathbf{r}) \rangle_H = (\beta N)^{-1} \frac{\partial \ln Z(H)}{\partial H} = - \frac{\partial f}{\partial H} \quad (2.9)$$

平均場近似の自由エネルギー (2.8) を代入すると磁化は

$$m = \tanh \beta(Jm + H) \quad (2.10)$$

となるので、これから自己無撞着 (self-consistent) に決まる。さらに (2.10) を逆に解くと

$$H(m) = -Jm + \beta^{-1} \tanh^{-1} m \quad (2.11)$$

これまで考えた自由エネルギーは磁場の関数であった。これを磁化 m の関数として表そう。自由エネルギーをルジャンドル変換して

$$\tilde{f}(m) \equiv f(H) + H(m)m \quad (2.12)$$

としたものを考える ($d\tilde{f}/dH = 0$ に注意)。すると平均場近似での自由エネルギー $\tilde{f}_{MF}(m)$ は、(2.8) と (2.11) を使って、

$$\tilde{f}_{MF}(m) = -\beta^{-1} \ln 2 - \frac{1}{2} Jm^2 - \beta^{-1} \ln \left(\frac{1}{\sqrt{1-m^2}} \right) + \beta^{-1} m \tanh^{-1} m \quad (2.13)$$

となる。ところで外部磁場は

$$H = \frac{\partial \tilde{f}}{\partial m} \quad (2.14)$$

で与えられるので、(2.13) に当てはめてみると、(2.10) が再現される。外部磁場が無く、 m が十分小さい場合は、 \tilde{f} をテイラー展開して

$$\tilde{f}_{MF}(m) = \text{const.} + \frac{1}{2}(\beta^{-1} - J)m^2 + \frac{1}{12}\beta^{-1}m^4 + O(m^6) \quad (2.15)$$

が得られる (定数項を除くと)。この関数の m^4 の項の係数は常に正であるが、 m^2 の項の係数の符号は温度によって変わる。

¹cosh が下に凸 (2 回微分が 0 または正) で 1 以上ということ、ln が単調増加巻数ということから

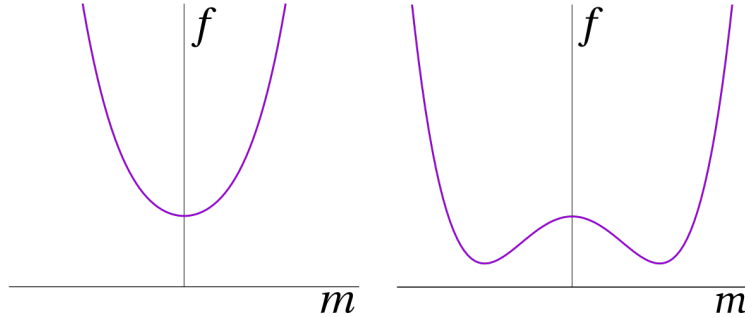


図 2.1: 平均場の自由エネルギーの関数形 (a) $T > T_c^{MF}$; (b) $T < T_c^{MF}$

高温 ($\beta^{-1} > J$ つまり $T > J/k_B$) では \tilde{f} の極小は $m = 0$ のみであり、常磁性相に対応する。低温 ($T < J/k_B$) では、 \tilde{f} の極小は $\pm m_0$ の2つになり、片方が実現するので、 $s \leftrightarrow -s$ の対称性が自発的に破れる (強磁性相)。以上のことは $T_c^{MF} = J/k_B$ は平均場近似での臨界温度とみなせることを示している。

もちろん、平均場近似では揺らぎを無視しているので、平均場近似での臨界温度 T_c^{MF} は正しい臨界温度 T_c とは異なる。通常、平均場近似からの臨界温度は、(揺らぎを取り入れた) 正しい臨界温度よりは上である。十分低次元 ($d < 2$) では、揺らぎが大きくなって、有限温度での秩序がまったく無くなる。

2.2 ランダウ理論

連続相転移の場合、臨界点に十分近いと、磁化 m (一般に秩序パラメーター) は十分小さいので、平均場近似の有効自由エネルギー密度は一般に以下のように展開できるだろう。

$$f_{MF} = f_0 + atm^2 + bm^4 - Hm + \dots \quad (2.16)$$

ここで係数 a, b は換算温度 $t \equiv (T - T_c^{MF})/T_c^{MF}$ や m にはよらず定数とみなせるとする (なお、 f_0 は t のみのなめらかな関数であっても良い)。また $a > 0, b > 0$ とする。

2.2.1 臨界指数

まず、有効自由エネルギー密度の磁化 m による微分は

$$\left. \frac{\partial f_{MF}}{\partial m} \right|_H = 2atm + 4bm^3 - H = 2m(at + 2bm^2) - H \quad (2.17)$$

である。

$H = 0$ かつ $t > 0$ では、 f_{MF} が極小となる条件と (2.17) から $m_0 = 0$ 、一方 $H = 0$ かつ $t < 0$ では、 f_{MF} の極小条件から

$$m_0 = \sqrt{-\frac{at}{2b}} \propto (-t)^{1/2} \quad (2.18)$$

である。したがって (1.2) に対応する臨界指数は $\beta = 1/2$ である。

$H \neq 0$ で $t > 0$ では、 f_{MF} の極小条件から、磁場が弱い極限で

$$m \approx \frac{H}{2at} \propto Ht^{-1} \quad (2.19)$$

つまり (1.3) に対応する臨界指数は $\gamma = 1$ である。また、 $H \neq 0$ かつ $t = 0$ では、

$$4bm^3 - H = 0 \quad \therefore m = \left(\frac{H}{4b}\right)^{1/3} \quad (2.20)$$

つまり (1.4) に対応する臨界指数は $\delta = 3$ である。

比熱についてはやや事情が複雑である。ゼロ磁場 $H = 0$ で $t > 0$ では、極小値 $m = 0$ での自由エネルギーは $f_{MF} = f_0$ である。一方、 $t < 0$ では自発磁化 $m_0 = \sqrt{-at/2b}$ なので、自由エネルギーは

$$f_{MF} = f_0 - \frac{a^2 t^2}{4b} \quad (2.21)$$

である。したがって、(自由エネルギーの t についての 2 階微分の) 比熱には不連続性がある。(このような比熱の不連続性は平均場近似に特有で、揺らぎをきちんと取り入れると比熱は発散するか、特異性を示す) これらをまとめると、比熱の臨界指数 (1.1) は $\alpha = 0$ である。

2.2.2 ユニバーサリティと次元

平均場近似で有効自由エネルギー (2.16) で記述されるモデルの臨界指数は、元のモデルの詳細によらないと言う意味で普遍的 (universal) だが、そればかりか平均場近似の臨界指数は空間次元によらない。

しかし1次元イジングモデルでは有限温度で相転移がないことが知られているので、平均場近似には明かに限界がある。実際、4次元以下 ($d < 4$) では平均場近似の結果は正しくない。

2.2.3 対称性

有効自由エネルギー密度 (2.16) は、時間反転 (つまりスピン反転 $s \leftrightarrow -s$ (磁化 $m \leftrightarrow -m$))、および磁場 $H \leftrightarrow -H$ の反転) に対して不変である。

逆にこの様な対称性を満たすように m, H および t の低次の項から展開すると (2.16) が得られる。

(?? 対称性以外の条件としては、自由エネルギーの安定性のため、

$$\lim_{|m| \rightarrow +\infty} f(m) = +\infty \quad (2.22)$$

である。??)

2.2.4 連続対称性

n 個の成分の秩序変数 m^α (α は $1 \leq \alpha \leq n$ の整数) を考えよう。さらに磁場が無いとき $O(n)$ 回転について対称とする。この場合のランダウの自由エネルギーは、式 (2.16) を一般化すると

$$f_{MF} = f_0 + at \sum_{\alpha=1}^n (m^\alpha)^2 + b \left(\sum_{\alpha=1}^n (m^\alpha)^2 \right)^2 \quad (2.23)$$

低温側 $t < 0$ では、有効自由エネルギーは、磁化の大きさ

$$\sum_{\alpha=1}^n (m^\alpha)^2 = (m_0)^2, \quad m_0 \equiv (-at/2b)^{1/2} \quad (2.24)$$

で極小値をとる。低温側では特定の磁化の向きをとるので、 $O(n)$ 対称性を破る。例えば1軸方向に秩序したとして、 $\mathbf{m}_0 = (m_0, 0, \dots)$ のように

なつたとしよう。この極小の近くで $m = m_0 + \delta m$ とすると、自由エネルギーは

$$f_{MF} = \text{const.} + 2a|t|(\delta m^1)^2 + \text{higher order terms} \quad (2.25)$$

と展開できる。この形が意味するのは、 $T < T_c$ で縦モード (longitudinal mode) δm^1 のみが有限の相関距離 $\xi \propto (2a|t|)^{-1/2}$ をもつ。横モード (transverse modes)(複数) の相関距離は無限大で、相関関数はべき乗的に減衰する。これは南部-Goldstone モードの一例である。

南部-Goldstone の定理によると、揺らぎをすべて取り入れても、対称性が破れている限り、横モードの相関距離は無限大のままである。

2.3 相関関数の平均場理論 (ランダウ理論)

これまで、秩序パラメーターが空間的に一様な場合について、平均場近似で自由エネルギーを求め、それから得られる様々な熱力学量 (磁化、帯磁率、比熱など) と臨界指数を求めた。この節では、秩序パラメーターが空間的に一様でない場合についての平均場近似を扱い、相関関数とその臨界指数を議論する。

2.3.1 フーリエ変換について

d 次元で体積 $V (= L^d)$ の有限系で周期的境界条件をとり、周期関数 $f(\mathbf{r})$ のフーリエ変換とその逆変換を

$$\begin{aligned} \tilde{f}(\mathbf{q}) &= \int_V d^d \mathbf{r} f(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}), \\ f(\mathbf{r}) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \tilde{f}(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.26)$$

と定義する。さらに $f(\mathbf{r})$ が実数関数の場合、 $\tilde{f}(-\mathbf{q}) = (\tilde{f}(\mathbf{q}))^*$ (* は複素共役) である。ところで、周期的境界条件から

$$\int d^d \mathbf{r} \exp(i(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}) = V \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \quad (2.27)$$

である。

体積無限大 $V \rightarrow \infty$ の極限では

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \rightarrow \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \quad (2.28)$$

例えば秩序変数 $m(\mathbf{r})$ のフーリエ変換は

$$\begin{aligned} \tilde{m}(\mathbf{q}) &= \int_V d^d \mathbf{r} m(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}), \\ m(\mathbf{r}) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \tilde{m}(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \end{aligned}$$

と表される。

2.3.2 2点相関関数と並進対称性

2点相関関数の Fourier 変換は

$$\langle \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(\mathbf{q}') \rangle = \int_V d^d \mathbf{r} \int_V d^d \mathbf{r}' \langle m(\mathbf{r}) m(\mathbf{r}') \rangle \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}') \quad (2.29)$$

さらに、並進対称な系では $\langle m(\mathbf{r}) m(\mathbf{r}') \rangle = G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ である。 $\mathbf{r} - \mathbf{r}' \equiv \mathbf{r}_d, \frac{1}{2}(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \equiv \mathbf{r}_{CG}$ と変数変換すると、

$$\begin{aligned} \mathbf{q} \cdot \mathbf{r} + \mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}' &= \mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_{CG} + \frac{1}{2}\mathbf{r}_d) + \mathbf{q}' \cdot (\mathbf{r}_{CG} - \frac{1}{2}\mathbf{r}_d) \\ &= (\mathbf{q} + \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}_{CG} + \frac{1}{2}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}_d \end{aligned}$$

を使って、

$$\begin{aligned} \langle \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(\mathbf{q}') \rangle &= \left(\int_V d^d \mathbf{r}_{CG} \exp(-i(\mathbf{q} + \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}_{CG}) \right) \int_V d^d \mathbf{r}_d G(\mathbf{r}_d) \exp(-\frac{i}{2}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}_d) \\ &= V \delta_{\mathbf{q}, -\mathbf{q}'} \int_V d^d \mathbf{r}_d G(\mathbf{r}_d) \exp(-\frac{i}{2}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}_d) \\ &= V \delta_{\mathbf{q}, -\mathbf{q}'} \int_V d^d \mathbf{r}_d G(\mathbf{r}_d) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_d) = V \delta_{\mathbf{q}, -\mathbf{q}'} \tilde{G}(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (2.30)$$

上記の式の導出には (2.27) を使った。

2.3.3 空間変化を取り入れたランダウの自由エネルギー

連続相転移の場合、臨界点に十分近いと、磁化 m (一般に秩序パラメータ) は十分小さいので、平均場近似の有効自由エネルギー密度は一般には以下のように展開できるだろう。

$$f_{MF} = f_0 + atm^2 + bm^4 + c(\nabla m)^2 - Hm + \dots \quad (2.31)$$

ここで係数 a, b, c は換算温度 t や m や位置にはよらず、定数とする。また $a, b, c > 0$ とする。さらに空間反転対称性から $m\nabla m$ のような項はない。

この場合の有効自由エネルギーは

$$F_{MF} = \int (f_0 + atm^2 + bm^4 + c(\nabla m)^2 - Hm) d^d \mathbf{r} \quad (2.32)$$

である。

さらに簡単にするため、ゼロ磁場 ($H = 0$) で高温相 ($t > 0$) をとり、

$$F_{MF} = \int (f_0 + atm^2 + c(\nabla m)^2) d^d \mathbf{r} \quad (2.33)$$

と4次の項を無視する。

これを使って次式が得られる。

$$\begin{aligned} F_{MF} &= \int (f_0 + atm^2 + c(\nabla m)^2) d^d \mathbf{r} \\ &= f_0 V + \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \int \frac{d^d \mathbf{r}}{V^2} ((at + c(-\mathbf{q} \cdot \mathbf{q}')) \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(\mathbf{q}')) \exp(i(\mathbf{q} + \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}) \\ &= f_0 V + \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \frac{1}{V} ((at + c(-\mathbf{q} \cdot \mathbf{q}')) \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(\mathbf{q}')) \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}', 0} \\ &= f_0 V + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} (at + c\mathbf{q}^2) \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(-\mathbf{q}) = f_0 V + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} (at + c\mathbf{q}^2) |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2 \end{aligned} \quad (2.34)$$

2.3.4 波数空間での相関

波数空間での相関は

$$\langle \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(\mathbf{q}') \rangle \equiv \frac{\int \prod_j d\tilde{m}(\mathbf{q}_j) \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(\mathbf{q}') \exp(-\beta F)}{\int \prod_j d\tilde{m}(\mathbf{q}_j) \exp(-\beta F)} \quad (2.35)$$

で定義されている。自由エネルギー (2.34) は波数 q ごとに独立な寄与からなる2次形式であるから、注目している波数 q, q' 以外についての積分は、分母と分子で同じ値になり打ち消しあうので、

$$\langle \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(\mathbf{q}') \rangle = \frac{\int d\tilde{m}(\mathbf{q}) d\tilde{m}(\mathbf{q}') \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(\mathbf{q}') \exp(-D_q |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2 - D_{q'} |\tilde{m}(\mathbf{q}')|^2)}{\int d\tilde{m}(\mathbf{q}) d\tilde{m}(\mathbf{q}') \exp(-D_q |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2 - D_{q'} |\tilde{m}(\mathbf{q}')|^2)} \quad (2.36)$$

となる(ここで、 $D_q \equiv \beta(at + cq^2)/V$)。さらに (2.30) $\langle \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(\mathbf{q}') \rangle = \delta_{q, -q'} \langle |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2 \rangle$ をあてはめて、

$$\begin{aligned} \langle \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(\mathbf{q}') \rangle &= \delta_{q, -q'} \langle |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2 \rangle \\ &= \delta_{q, -q'} \frac{\int d\tilde{m}(\mathbf{q}) |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2 \exp(-2D_q |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2)}{\int d\tilde{m}(\mathbf{q}) \exp(-2D_q |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2)} \end{aligned} \quad (2.37)$$

$\tilde{m}(\mathbf{q})$ は複素数だが、これを $\tilde{m}(\mathbf{q}) = |\tilde{m}(\mathbf{q})| \exp(i\theta_q)$ と極座標表示すると

$$d\tilde{m}(\mathbf{q}) = |\tilde{m}(\mathbf{q})| d|\tilde{m}(\mathbf{q})| d\theta_q$$

したがって

$$\begin{aligned} \langle |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2 \rangle &= \frac{\int_0^\infty |\tilde{m}(\mathbf{q})| d|\tilde{m}(\mathbf{q})| |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2 \exp(-2D_q |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2)}{\int_0^\infty |\tilde{m}(\mathbf{q})| d|\tilde{m}(\mathbf{q})| \exp(-2D_q |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2)} \\ &= \frac{\int_0^\infty d(|\tilde{m}(\mathbf{q})|^2) |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2 \exp(-2D_q |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2)}{\int_0^\infty d(|\tilde{m}(\mathbf{q})|^2) \exp(-2D_q |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2)} \\ &= \frac{1}{2D_q} = \frac{Vk_B T}{2(at + cq^2)}, \end{aligned} \quad (2.38)$$

$$\tilde{G}(\mathbf{q}) = \frac{k_B T}{2(at + cq^2)} \quad (2.39)$$

が得られる。

2.3.5 実空間での相関関数

したがって実空間の相関関数は

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}) &\equiv \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \tilde{G}(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{k_B T}{2(at + cq^2)} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) = \frac{k_B T}{2cV} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})}{\mathbf{q}^2 + \xi^{-2}} \end{aligned} \quad (2.40)$$

なお、

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{c}{at}} \quad (2.41)$$

である。体積無限大では (2.28) を使って、

$$G(\mathbf{r}) = \frac{k_B T}{2c} \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})}{q^2 + \xi^{-2}} \quad (2.42)$$

である。実空間での相関関数は漸近的に

$$G(r) \propto \exp(-r/\xi) r^{-(d-1)/2}, \quad (d: \text{空間次元}) \quad (2.43)$$

となるので、 ξ を相関距離と見なしてよい。なお、(2.42) は Ornstein-Zernike 形の相関関数と呼ばれる。

2.3.6 臨界指数

1. 平均場近似で $\xi \propto t^{-1/2}$ ということから、相関距離の臨界指数 (1.5) は $\nu = 1/2$ となる。
2. 臨界点直上 $t = 0$ では、 $\xi^{-1} = 0$ なので

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}) &= \frac{k_B T}{2c} \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})}{q^2} \\ &= \frac{k_B T}{2c} r^{2-d} \int \frac{d^d \mathbf{q}'}{(2\pi)^d} \frac{\exp(i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{n})}{q'^2}, \quad (\mathbf{n} = \mathbf{r}/r) \\ &\propto r^{2-d} \end{aligned} \quad (2.44)$$

ここで、 $\mathbf{q} = \mathbf{q}'/r$ ($r \equiv |\mathbf{r}|$) と変数変換すると、 \mathbf{q}' についての積分は r 依存性がなくなることを使った。

臨界指数 (1.6) は $\eta = 0$ となる。

2.4 相互作用レンジと相関関数

$$\frac{1}{2} \beta \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') s(\mathbf{r}) s(\mathbf{r}') \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned}
s(\mathbf{r})s(\mathbf{r}') &= (m + \delta s(\mathbf{r}))(m + \delta s(\mathbf{r}')) \\
&= m^2 + m(\delta s(\mathbf{r}) + \delta s(\mathbf{r}')) + O((\delta s)^2) \\
&\approx m^2 + m(\delta s(\mathbf{r}) + \delta s(\mathbf{r}')) \tag{2.46}
\end{aligned}$$

これはさらに

$$s(\mathbf{r})s(\mathbf{r}') \approx m^2 + m(s(\mathbf{r}) - m + s(\mathbf{r}') - m) = m(s(\mathbf{r}) + s(\mathbf{r}')) - m^2 \tag{2.47}$$

2.4.1 帯磁率と相関関数

(2.39) 戻って、 $\tilde{G}(\mathbf{k} = 0)$ を求めると、これは帯磁率に該当し、

$$\tilde{G}(\mathbf{k} = 0) = \chi \approx \frac{\text{const.}R^{-2}}{\xi^{-2}} \propto t^{-1} \tag{2.48}$$

つまり、 $\gamma = 1$ である。

2.5 平均場理論の補正

平均場近似では、揺らぎの1次の項までの寄与を考慮し、 $\sum_{r'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta s(\mathbf{r})\delta s(\mathbf{r}')$ という項 (揺らぎの2次からの寄与) が微小であるとしてきた。この項の平均場近似での期待値が、平均場近似のエネルギーの期待値と比較して微小ならば、平均場近似は辻褄があっている。この節では平均場近似が妥当である条件を調べよう。

まず、平均場近似の揺らぎの1次の項からのエネルギーへの期待値は、 $f_{MF} \approx J(1 - \beta J)m_0^2 \approx J(1 - \beta J)^2 (m_0 \propto t^{1/2} \propto (1 - \beta J)^{1/2})$ より、臨界温度近くでは

$$\frac{\partial(\beta f_{MF})}{\partial \beta} \approx Jt \tag{2.49}$$

と振る舞う。

次に揺らぎの2次からの寄与の期待値は、

$$\sum_{r'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \langle \delta s(\mathbf{r})\delta s(\mathbf{r}') \rangle \approx JG(0) \approx \frac{\text{const.}J}{R^2} \int_{BZ} \frac{d^d k}{\mathbf{k}^2 + \xi^{-2}} \tag{2.50}$$

である (d :空間次元)。ここで $J(r)$ が (臨界点近くでは) 相関関数に比べ、ずっと短距離であることを使っている。最後の積分は第一 Brillouin zone (BZ) 全体にまたがる。

$\xi \rightarrow \infty$ での特異な挙動に注目する。そこで Brillouin zone での積分を、 $|\mathbf{k}| < a^{-1}$ (a :格子間隔) までの球積分で近似する

$$\int_{|\mathbf{k}| < a^{-1}} \frac{d^d k}{\mathbf{k}^2 + \xi^{-2}} = \int_{|\mathbf{k}| < a^{-1}} \frac{d^d k}{\mathbf{k}^2} - \xi^{-2} \int_{|\mathbf{k}| < a^{-1}} \frac{d^d k}{\mathbf{k}^2(\mathbf{k}^2 + \xi^{-2})} \quad (2.51)$$

第1項の積分は ξ によらず、エネルギー密度への揺らぎからの定数の寄与である。第2項の積分

$$\int_{|\mathbf{k}| < a^{-1}} \frac{d^d k}{\mathbf{k}^2(\mathbf{k}^2 + \xi^{-2})}$$

は $d < 4$ のときは $a \rightarrow 0$ の極限でも収束する。そこで $\mathbf{k}' = \mathbf{k}\xi$ と変数変換すると

$$\int_{|\mathbf{k}| < \infty} \frac{d^d k}{\mathbf{k}^2(\mathbf{k}^2 + \xi^{-2})} = \xi^{4-d} \int_{|\mathbf{k}'| < \infty} \frac{d^d k'}{\mathbf{k}'^2(\mathbf{k}'^2 + 1)}$$

なので、 $\xi \rightarrow \infty$ で (2.51) の第2項は ξ^{2-d} に比例する。

結局、(2.49) と (2.50) をまとめると、温度に依存する揺らぎのエネルギー密度への寄与は、 $J\xi^{2-d}/R^2 \ll Jt$ ならば、平均場近似では無視できる。平均場近似では $\xi = Rt^{-1/2}$ なので、これは

$$\xi^{4-d} \ll R^4 \quad (2.52)$$

ということで、いわゆるギンツブルクの判定条件 (Ginzburg criterion) に当たる。

空間次元が4次元以下 ($d < 4$) では、臨界温度に近づくと相関距離 ξ は大きくなり、いずれは条件 (2.52) が破られてしまい、平均場近似は破綻する。ただし平均場近似が破綻する温度範囲は、 R による。多くの系では R は格子間隔 a 程度なので、臨界点に近づくと平均場近似は破綻する。しかし R が十分大きな系 (たとえば第1種超伝導体の場合クーパ対程度で格子間隔の数十から数百倍) では、平均場近似は臨界温度の十分近くまで良い近似となっている。

空間次元が4次元以上 ($d > 4$) では、補正項の寄与はよりおとなしいもので、平均場近似での臨界指数はそのまま、(臨界温度など) 大きさを変える程度である。

空間次元が4次元 ($d = 4$) は、短距離相互作用イジングモデルの上部臨界次元 (upper critical dimension) とよばれる。なお、ユニバーサリティクラスが異なれば、上部臨界次元も違う。

第3章 厳密な理論

3.1 1次元イジングモデル(転送行列)

1次元強磁性イジングモデル(最近接相互作用)のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -J \sum_i S_i S_{i+1} - \mu H \sum_i S_i \quad (J > 0) \quad (3.1)$$

である。ここで次のように定義すると

$$K \equiv \beta J, \quad h \equiv \beta \mu H \quad (3.2)$$

すると N 個のスピン of 分配関数は

$$Z(K, h, N) = \text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}) = \sum_{\{S\}} \exp \left[K \sum_i S_i S_{i+1} + h \sum_i S_i \right] \quad (3.3)$$

となる。

3.1.1 転送行列法による自由エネルギー

周期的境界条件 $S_{N+1} = S_1$ で以下の分配関数を考える。

$$Z(K, h, N) = \text{Tr} \exp \left[K \sum_i S_i S_{i+1} + h \sum_i S_i \right] \quad (3.4)$$

上記の分配関数を書き換えると、

$$\begin{aligned} Z(K, h, N) &= \sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \left[\exp \left(K S_1 S_2 + \frac{h}{2} (S_1 + S_2) \right) \right] \cdot \left[\exp \left(K S_2 S_3 + \frac{h}{2} (S_2 + S_3) \right) \right] \\ &\cdots \left[\exp \left(K S_N S_1 + \frac{h}{2} (S_N + S_1) \right) \right] \end{aligned} \quad (3.5)$$

これは、行列要素が

$$T_{S_i, S_j} = \exp\left(K S_i S_j + \frac{h}{2}(S_i + S_j)\right) \quad (3.6)$$

となるような行列 T の行列積と見なすことができる。行列 T はまた、

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T_{1,1} & T_{1,-1} \\ T_{-1,1} & T_{-1,-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(K+h) & \exp(-K) \\ \exp(-K) & \exp(K-h) \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

のように表すことができる。すると、分配関数は

$$Z(K, h, N) = \sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} T_{S_1, S_2} T_{S_2, S_3} T_{S_3, S_4} \cdots T_{S_N, S_1} \quad (3.8)$$

周期的境界条件を考慮すると、分配関数は

$$Z(K, h, N) = \text{Tr}(\mathbf{T}^N) \quad (3.9)$$

\mathbf{T}^N を計算するのに、 T を以下のように相似変換して扱おうと便利である。

$$\mathbf{T}' = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{S} \quad (3.10)$$

さらに、 T は実対称行列であるので

$$\mathbf{T}' = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{S} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

のように対角化できる（これは常に成り立つわけではない。実際、次近接相互作用のあるイジングモデルでは転送行列は対称ではなくなる）。

すると、trace の性質より

$$\text{Tr}(\mathbf{T}^N) = \text{Tr}(\mathbf{T}'^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (3.12)$$

次の節で示すように $\lambda_1 \neq \lambda_2$ である。とくに $\lambda_1 > \lambda_2$ とすると、

$$\begin{aligned} Z(K, h, N) &= \lambda_1^N \left(1 + \left[\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right]^N\right) \\ &\approx \lambda_1^N (1 + O(\exp(-\alpha N))) \quad (\alpha \equiv \ln(\lambda_1/\lambda_2) > 0) \end{aligned} \quad (3.13)$$

自由エネルギーは

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{F(K, h, N)}{N} = -k_B T \ln \lambda_1 \quad (3.14)$$

行列 T の固有値を具体的に求めるには以下の行列式を扱う。

$$\det \begin{pmatrix} \exp(K+h) - \lambda & \exp(-K) \\ \exp(-K) & \exp(K-h) - \lambda \end{pmatrix} = 0 \quad (3.15)$$

これを解くと、

$$\lambda_{1,2} = \exp(K) \left[\cosh h \pm \sqrt{\sinh^2 h + \exp(-4K)} \right] \quad (3.16)$$

したがって

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{F(K, h, N)}{N} &= -k_B T \ln \left\{ \exp(K) \left[\cosh h + \sqrt{\sinh^2 h + \exp(-4K)} \right] \right\} \\ &= -J - k_B T \ln \left[\cosh h + \sqrt{\sinh^2 h + \exp(-4K)} \right] \end{aligned} \quad (3.17)$$

3.1.2 相転移

$T > 0$

1次元イジングモデル (3.3) で有限温度 ($T > 0$) では、 K と h が実数ということ considering、式 (3.17) は解析的である。したがって相転移は起きない。もう少し丁寧に述べると、相転移の起きる可能性があるのは、

1. 転送行列の最大固有値が非解析的
2. 転送行列の最大固有値と次の大きさの固有値に縮退が起きる場合
3. 転送行列の最大固有値が0になる場合

のいずれかが起きる場合に限定される。

一般に、分配関数が転送行列の形で書ける場合、以下の定理が使える。

Perron-Frobenius の定理： $N \times N$ の有限次元の行列 A で、全ての行列要素が正 ($A_{i,j} > 0$) の場合、最大固有値と対応する固有状態は

1. 実数で正である。
2. 縮退しない。

3. $A_{i,j}$ の解析関数である。

1次元系で有限のレンジの相互作用の転送行列は有限行列で、Perron-Frobenius の定理が当てはまる。したがって、有限温度 ($T > 0$) では相転移が起きない。

2次元以上では、転送行列が無限次元になるので、Perron-Frobenius の定理が当てはまらず、有限温度で相転移が起きることがある。

$T = 0$

$T \rightarrow 0$ の極限、つまり $K \rightarrow \infty$ を考えよう。1次元イジングモデルの転送行列の最大固有値は

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \exp(K) \left[\cosh h + \sqrt{\sinh^2 h + \exp(-4K)} \right] \\ &\approx \exp(K) \left[\cosh h + \sqrt{\sinh^2 h (1 + O(\exp(-4K)))} \right] \\ &= \exp(K) [\cosh h + |\sinh h|(1 + O(\exp(-4K)))]\end{aligned}\quad (3.18)$$

ここで

$$\cosh h + |\sinh h| = \exp(|h|)\quad (3.19)$$

(h が正と負の場合に分けて扱おうと直ぐ示せる) であることを使うと

$$\lambda_1 = \exp(K + |h|)\quad (3.20)$$

となるので、自由エネルギーは

$$F = -Nk_B T(K + |h|) + O(T^2)\quad (3.21)$$

$T = 0$ では

$$F = -N(J + |H|)\quad (3.22)$$

となる。磁化は

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial H} = \begin{cases} 1 & H > 0; \\ -1 & H < 0 \end{cases}\quad (3.23)$$

となり、非解析的に振る舞う。

3.1.3 熱力学量

ゼロ磁場 ($h = 0$)

磁場 0 の場合の比熱などについて議論する。転送行列の固有値 (3.16) から

$$\lambda_1 = \exp(K) [1 + \exp(-2K)] = 2 \cosh K \quad (3.24)$$

したがって、熱力学的極限 ($N \rightarrow \infty$) で $Z = (2 \cosh K)^N$ である。自由エネルギーは

$$F = -k_B T N [K + \ln(1 + \exp(-2K))] \quad (3.25)$$

$$\frac{F}{N} = \begin{cases} -J & T \rightarrow 0 (K \rightarrow \infty) \\ -k_B T \ln 2 & T \rightarrow \infty (K \rightarrow 0) \end{cases} \quad (3.26)$$

内部エネルギーは

$$\begin{aligned} E &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \\ &= -N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln(2 \cosh \beta J) \\ &= -N J \tanh \beta J \end{aligned} \quad (3.27)$$

比熱は

$$\begin{aligned} C &= \frac{dE}{dT} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{dE}{d\beta} \\ &= \frac{N J^2}{k_B T^2} \cosh^{-2}(J/k_B T) \end{aligned} \quad (3.28)$$

比熱に特異性はないが、 $J \approx k_B T$ に比熱のピークが見られる (Schottky 比熱)。

有限磁場 ($h \neq 0$)

次に、磁化と帯磁率について議論しよう。まず

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{F(K, h, N)}{N} = -J - k_B T \ln \left[\cosh h + \sqrt{\sinh^2 h + \exp(-4K)} \right] \quad (3.29)$$

磁化は

$$\begin{aligned}
 m &= -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial H} = -\frac{1}{Nk_B T} \frac{\partial F}{\partial h} \\
 &= \frac{\partial}{\partial h} \ln \left[\cosh h + \sqrt{\sinh^2 h + \exp(-4K)} \right] \\
 &= \frac{\sinh h}{\sqrt{\sinh^2 h + \exp(-4K)}} \tag{3.30}
 \end{aligned}$$

帯磁率は

$$\begin{aligned}
 \chi_T &\equiv \frac{\partial m}{\partial H} = \frac{1}{k_B T} \frac{\partial m}{\partial h} \\
 &= \frac{1}{k_B T} \exp(-4K) \cosh h (\sinh^2 h + \exp(-4K))^{-3/2} \tag{3.31}
 \end{aligned}$$

特にゼロ磁場での帯磁率は

$$\chi_T|_{H=0} = \frac{\exp(2K)}{k_B T} = \frac{\exp(2J/k_B T)}{k_B T} \tag{3.32}$$

高温極限と、低温極限での挙動は

$$\chi_T \approx \begin{cases} \frac{1}{k_B T} & (T \rightarrow \infty) \text{(Curie の法則)} \\ \frac{\exp(2J/k_B T)}{k_B T} & (T \rightarrow 0) \end{cases} \tag{3.33}$$

3.1.4 相関関数

転送行列の方法を使って相関関数を計算できる。まず i サイトのスピン
の期待値は

$$\begin{aligned}
 \langle S_i \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \exp(-\beta \mathcal{H}) S_i \\
 &= \frac{1}{Z} \sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} [T_{S_1, S_2} T_{S_2, S_3} \cdots T_{S_{i-1}, S_i} S_i T_{S_i, S_{i+1}} \cdots T_{S_N, S_1}] \tag{3.34}
 \end{aligned}$$

転送行列の i サイト近くの成分を抜き出すと

$$\sum_{S_i} T_{S_{i-1}, S_i} S_i T_{S_i, S_{i+1}} \tag{3.35}$$

である。これを次のような行列の形で表す。

$$A_{ab} = \sum_{S_i} T_{a,S_i} T_{S_i,b} S_i \quad (3.36)$$

または

$$\mathbf{A} = \mathbf{T} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \mathbf{T} \quad (3.37)$$

これはパウリ行列の一つ σ_z を、転送行列 \mathbf{T} ではさんだものと見なすことができる。trace の性質を用いると

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}(\sigma_z \mathbf{T}^N) \quad (3.38)$$

ここで行列の相似変換 (3.10) を使うと

$$\langle S_i \rangle = \frac{\text{Tr}[\mathbf{S}^{-1} \sigma_z \mathbf{S} (\mathbf{T}')^N]}{\text{Tr}(\mathbf{T}')^N} \quad (3.39)$$

転送行列 \mathbf{T} の固有値 λ_1 に対する固有ベクトルを

$$\mathbf{T} X^{(1)} = \lambda_1 X^{(1)}, \quad X^{(1)} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

とし、転送行列 \mathbf{T} の固有値 λ_2 に対する固有ベクトルを

$$\mathbf{T} X^{(2)} = \lambda_2 X^{(2)}, \quad X^{(2)} = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

とすると、 \mathbf{S} は

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} \quad (3.42)$$

である。さらに

$$\mathbf{S}^{-1} \sigma_z \mathbf{S} = \begin{pmatrix} e & g \\ f & k \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

と表すことができる。ところで

$$(\mathbf{T}')^N = \begin{pmatrix} \lambda_1^N & 0 \\ 0 & \lambda_2^N \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

であったので、

$$\langle S_i \rangle = \frac{e\lambda_1^N + k\lambda_2^N}{\lambda_1^N + \lambda_2^N} \quad (3.45)$$

$N \rightarrow \infty$ の極限では、 $\lambda_1 > \lambda_2$ より

$$\langle S_i \rangle \approx e \quad (3.46)$$

と求まる。

同様にして、2点相関関数は

$$\langle S_i S_{i+j} \rangle = \frac{\text{Tr} [(S^{-1}\sigma_z S)(T')^j (S^{-1}\sigma_z S)(T')^{N-j}]}{\text{Tr} (T')^N} \quad (3.47)$$

$N \rightarrow \infty$ の極限では

$$\langle S_i S_{i+j} \rangle \approx e^2 + gf \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^j \quad (3.48)$$

となる。

まとめると、揺らぎの相関関数は

$$\begin{aligned} G(i, i+j) &= \langle S_i S_{i+j} \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_{i+j} \rangle \\ &= gf \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^j \\ &= gf \exp[-j \ln(\lambda_1/\lambda_2)] \end{aligned} \quad (3.49)$$

と距離に対して指数関数的にふるまう。これから相関距離 ξ は

$$\xi = \frac{1}{\ln(\lambda_1/\lambda_2)} \quad (3.50)$$

となる。1次元強磁性イジングモデル(最近接相互作用)では $\lambda_1 > \lambda_2$ より、相関関数は有限温度 ($T > 0$) で指数関数的に減衰する。

ゼロ磁場 ($h = 0$) では、転送行列の固有値は (3.16) から

$$\lambda_1 = 2 \cosh K, \quad \lambda_2 = 2 \sinh K \quad (3.51)$$

なので、

$$\xi = \frac{1}{\ln \coth K} \quad (3.52)$$

注意：

1. 相関距離 ξ は $\lambda_1 \neq \lambda_2$ である限り発散しない。一般に、転送行列の最大固有値に縮退が無ければ相転移は起きない。
2. 有限磁場 ($h \neq 0$) では $\lambda_1 > \lambda_2$ なので相転移は起きない。
3. ゼロ磁場 ($h = 0$) では低温極限 ($T \rightarrow 0; K \rightarrow \infty$) で、 $\lambda_2/\lambda_1 \rightarrow 1$ なので、温度 $T = 0$ で相転移が起きる。

3.2 無限レンジイジング模型

相互作用が無限レンジに渡るイジングモデルは

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \sum_{i \neq j} S_i S_j \quad (S_i = \pm 1) \quad (3.53)$$

で定義される。和は $i (i = 1, 2, \dots, N)$ および $j (j = 1, 2, \dots, N)$ の全ての組み合わせについてとる。

このモデルで $N \rightarrow \infty$ の極限で、平均場近似が正しい結果を与える。

3.3 2次元イジングモデル

2次元イジングモデルで磁場0の場合には、厳密解がある (L. Onsager, 1944)。

$$H = -J \sum_i \sigma_{i,j}^z \sigma_{i+1,j}^z + \sigma_{i,j}^z \sigma_{i,j+1}^z \quad (3.54)$$

転送行列の方法を用いて解くことができる。

“Two-Dimensional Ising Model as a Soluble Problem of Many Fermions”
by T. D. SCHULTZ, D.C. MATTIS, and E. H. LIEB: Rev. Mod. Phys.
Vol. 36, p.856 (1964)

2次元イジングモデルを転送行列で表す

→

(非等方極限で)1次元量子スピン系 ($T = 0$) Transverse Ising

$$H = -J \sum_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - h \sum_i \sigma_i^x \quad (3.55)$$

)

→

Jordan-Wigner 変換 (非局所変換) で 1 次元 Fermion 系に

→

Bogoliubov 変換で Fermion 系を対角化

臨界指数

1. $\alpha = 0$ ただし、比熱は対数発散
2. $\beta = 1/8$
3. $\gamma = 7/4$
4. $\delta = 15$
5. $\nu = 1$
6. $\eta = 1/4$

3.4 6-vertex model

Berezinskii-Kosterlitz-Thouless(BKT) 転移との関連

第4章 スケーリング仮説

スケーリング仮説では、次元解析に基づいてスケール変換に対する性質を調べることで、複数の臨界指数の関係式を導く。

4.1 ランダウ理論の次元解析

ランダウ理論の有効自由エネルギーは

$$F = \int (atm^2 + bm^4 + c(\nabla m)^2) d\mathbf{r} \quad (4.1)$$

で、分配関数は

$$Z = \int Dm \exp(-\beta F) \quad (4.2)$$

であった。まずオーダーパラメーターや係数を以下のように定義しなおす。

$$\phi \equiv (2\beta c)^{1/2} m, \quad r_0 \equiv \frac{at}{c}, \quad u_0 \equiv \frac{b}{\beta c^2} \quad (4.3)$$

とすると、

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}\{\phi\} \equiv \beta F = \int \left(\frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + \frac{1}{2}r_0\phi^2 + \frac{1}{4}u_0\phi^4 \right) d\mathbf{r} \quad (4.4)$$

次に

1. 式 (4.4) の中の各物理量の次元を調べる。
2. 次に (4.4) を無次元化した量 φ, \bar{u}_0 で書き直す。

を行う。

4.1.1 段階1

まず \mathcal{H}_{eff} は無次元 $[\mathcal{H}_{\text{eff}}] = 1$ である (今後、物理量 X の次元を $[X]$ で表す)。すると、(4.4) の各項は無次元で無ければならない。 L を長さの単位としたとき、

$$\left[\int d^d \mathbf{r} (\nabla \phi)^2 \right] = 1 \rightarrow L^d \cdot L^{-2} [\phi]^2 = 1 \quad (4.5)$$

という関係より、オーダーパラメーター ϕ の次元は、

$$[\phi] = L^{1-d/2} \quad (4.6)$$

となる。同様に、 r_0 の次元は

$$\begin{aligned} \left[r_0 \int d^d \mathbf{r} \phi^2 \right] &= 1, \\ \rightarrow [r_0] \cdot L^d \cdot [\phi]^2 &= [r_0] \cdot L^d \cdot L^{2-d} = 1, \\ \therefore [r_0] &= L^{-2}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

u_0 の次元は

$$\begin{aligned} \left[u_0 \int d^d \mathbf{r} \phi^4 \right] &= 1, \\ \rightarrow [u_0] \cdot L^d \cdot [\phi]^4 &= [u_0] \cdot L^d \cdot L^{4-2d} = 1, \\ \therefore [u_0] &= L^{d-4}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

4.1.2 段階2

(4.7) から、 r_0 を長さのスケールを定義するのに使うと便利である。以下のように物理量を無次元化する

$$\varphi \equiv \frac{\phi}{L^{1-d/2}}; \quad \mathbf{x} \equiv \frac{\mathbf{r}}{L}; \quad \bar{u}_0 \equiv \frac{u_0}{L^{d-4}}; \quad L \equiv r_0^{-1/2} \quad (4.9)$$

すると、(4.2) の分配関数は

$$\begin{aligned} Z(\bar{u}_0) &= \int D\varphi \exp[-\mathcal{H}_0\{\varphi\} - \mathcal{H}_{\text{int}}\{\varphi\}] \\ \mathcal{H}_0 &\equiv \int \left(\frac{1}{2} (\nabla \varphi)^2 + \frac{1}{2} \varphi^2 \right) d\mathbf{x}, \quad \mathcal{H}_{\text{int}} \equiv \int \left(\frac{1}{4} \bar{u}_0 \varphi^4 \right) d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (4.10)$$

となる。

$\mathcal{H}_{\text{int}} = 0$ ならば分配関数の計算は、ガウス積分に帰着する。 $|\bar{u}_0| \ll 1$ ならば、以下の摂動展開ができるように思える

$$\begin{aligned} Z &= \int D\varphi \exp(-\mathcal{H}_0) \exp(-\mathcal{H}_{\text{int}}) \\ &= \int D\varphi \exp(-\mathcal{H}_0) \left(1 - \mathcal{H}_{\text{int}} + \frac{1}{2!} (\mathcal{H}_{\text{int}})^2 - \dots \right) \end{aligned} \quad (4.11)$$

残念な事に、この前提条件 ($|\bar{u}_0| \ll 1$) は、空間次元が 4 次元以下で臨界点近傍ではうまくいかない。実際

$$\bar{u}_0 = u_0 r_0^{(d-4)/2} = u_0 (a/c)^{(d-4)/2} t^{(d-4)/2} \quad (4.12)$$

つまり、 $d < 4$ では、 $t \rightarrow 0$ で $\bar{u}_0 \rightarrow \infty$ になるので、臨界点近傍で摂動論は破綻する。これに対して 4 次元以上 ($d > 4$) では、 $t \rightarrow 0$ で $\bar{u}_0 \rightarrow 0$ なので摂動論は機能する。

なお、摂動論の各項が発散しても、適切な無限和をとることで収束することがある。(Borel 和可能)

4.2 次元解析と臨界指数

4.2.1 単位の変更

物理量 Q_P は、実際には $Q_P = Q[Q]$ とあらわされる。ここで記号 $[Q]$ は物理量 Q に対応する単位で、 Q はその単位で測った数値とする。

単位の変更で、数値 Q は変わるが、 Q_P は不変である。

例：長さを表すのに、メートルを使うか、センチメートルを使うか、フィートを使うかにより、数値は異なるが、同じ実体を表している。

次に単位の変更を考える。例として面積 S をとろう。面積は $[S] = L^2$ の次元を持つ。長さの単位を L から L' に変更すると、面積をあらわす数値は S' に変わるが、 $S'L'^2 = SL^2$ または $S' = S(L/L')^2$ がなりたつ。別の例としては波数 k がある。波数は $[k] = L^{-1}$ の次元を持ち、単位の変換に対して $k' = k(L/L')^{-1}$ と振る舞う。

4.2.2 2点相関関数の次元解析

例として、2点相関関数の次元解析を行う。2点相関関数は

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv \langle \phi(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}') \rangle = \frac{\int D\phi \exp(-\mathcal{H}_{\text{eff}}\{\phi\})\phi(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}')}{\int D\phi \exp(-\mathcal{H}_{\text{eff}}\{\phi\})} \quad (4.13)$$

である。したがって、2点相関関数の次元は

$$[G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] = [\phi]^2 = L^{2-d} \quad (4.14)$$

次に波数空間 \mathbf{k} で考えよう。2点相関関数を Fourier 変換した \tilde{G} は

$$\tilde{G}(\mathbf{k}) = \frac{1}{V} \int d^d \mathbf{x} d^d \mathbf{y} \exp(-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{y})) G(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (4.15)$$

したがって \tilde{G} の次元は

$$[\tilde{G}(\mathbf{k})] = L^{-d} L^{2d} L^{2-d} = L^2 \quad (4.16)$$

仮に長さの単位を L から $L' \equiv \epsilon L$ と変更したとすると、 \tilde{G} は $\tilde{G}' L'^2 = \tilde{G} L^2$ にしたがって変わるので、

$$\tilde{G}'(\mathbf{k}') = \epsilon^{-2} \tilde{G}(\mathbf{k}) \quad (4.17)$$

となる (ここで $\mathbf{k}' = \epsilon \mathbf{k}$)。これは相関関数の次元解析による一般的な結果である。

ガウシアン近似の場合に確認してみよう。

$$\tilde{G}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\mathbf{k}^2 + r_0} \quad (4.18)$$

長さをスケールしなおすと、(4.7) から $r'_0 = \epsilon^2 r_0$ なので、

$$\tilde{G}'(\mathbf{k}') = \frac{1}{\epsilon^2 \mathbf{k}^2 + \epsilon^2 r_0} = \epsilon^{-2} \tilde{G}(\mathbf{k}) \quad (4.19)$$

この場合には (4.17) が成立する。

臨界温度 T_c ではどうなるだろうか? 臨界指数 η を定義するのに、長波長 ($|\mathbf{k}| \rightarrow 0$) では、

$$\tilde{G}(\mathbf{k}, T_c) \propto k^{-2+\eta} \quad (4.20)$$

となることを使っていた。長さの単位を変更すると

$$\tilde{G}'(\mathbf{k}') \approx \epsilon^{-2+\eta} \tilde{G}(\mathbf{k}) \quad (4.21)$$

となる。これは、 $\eta = 0$ (ランダウ理論) の場合をのぞき、一般的な次元解析の結果 (4.17) と一致しない。

臨界指数 ν の考察からも同様な不一致が見られる。相関距離 ξ は $[\xi] = L$ の次元を持つ。ところで、 $r_0 \propto t$ で、 r_0 の次元は $[r_0] = L^{-2}$ なので、

$$\xi \propto r_0^{-1/2} \propto t^{-1/2} \quad (4.22)$$

この臨界指数 ($\nu = 1/2$) はランダウ理論の結果その物だが、実験結果や2次元イジングモデルの厳密解などとは一致しない。

4.3 異常次元 (Anomalous dimension)

前節で見たように、単純な次元解析と臨界現象とは辻褄が合わなかった。

その原因として、長さの次元を持つスケールとして相関距離 ξ のみを考えたことがあり、元々の物理系での格子間隔 a (または短距離でのカットオフ Λ^{-1}) を次元解析で考慮してこなかった。

臨界温度 T_c 直上での相関関数 (4.20) について、格子間隔 a を取り入れて

$$\tilde{G}(\mathbf{k}, T_c) \propto a^\eta k^{-2+\eta} \quad (4.23)$$

とすると、スケール変換で

$$\tilde{G}'(\mathbf{k}', T_c) = \epsilon^{-2} \tilde{G}(\mathbf{k}, T_c) \quad (4.24)$$

($a' = \epsilon^{-1}a, k' = \epsilon k$ に注意) となるので、(4.17) と辻褄が合う。

同様に、臨界点から離れた ($r_0 \neq 0$) での、相関距離 ξ については

$$[\xi] = L; \quad [a] = L; \quad [r_0] = L^{-2} \quad (4.25)$$

なので、これらを組み合わせて

$$\xi = r_0^{-1/2} f(r_0 a^2) \quad (4.26)$$

と考えられる。 $f(x)$ が 0 付近で

$$f(x) \approx x^\theta, \quad (x \rightarrow 0) \quad (4.27)$$

のように振る舞うとすると、臨界点近く $t \rightarrow 0$ で、

$$\xi \propto t^{-1/2+\theta} a^{2\theta} \quad (4.28)$$

臨界指数 ν の定義 $\xi \propto t^{-\nu}$ と比較すると

$$\nu = \frac{1}{2} - \theta \quad (4.29)$$

臨界指数のランダウ理論と違う部分を、異常次元 (anomalous dimension) θ と呼ぶ。

4.4 異常次元と漸近性

常識的には、臨界点に近づいて相関距離 ξ が発散すると、格子間隔などミクロな距離 a は無視できるはずである。つまり、 $a/\xi \ll 1$ を 0 と置き換えても良いはずである。この場合、最終的な式には a が表れないので、臨界指数は平均場近似によるものと一致するはずである。しかしながら、上記の考察は現実の臨界現象とは辻褄が合わない。

では、ミクロな長さスケールはどのようにマクロな長さでの相関に影響するのか? 異常次元の存在自体はミクロな長さスケールによるが、異常次元の値はミクロな長さスケールに依存しない。数学的にはこれは以下のようにまとめられる。ミクロな長さスケール a と、相関距離 ξ に依存する量 F を考える。 $F(x)$ が $x \rightarrow 0$ の極限で特異性を持たない場合に限って、 $F(a/\xi)$ の関数の中の a/ξ を 0 にすることが正当化される。この極限では以下の 3 つの場合が考えられる。

1.

$$F(x) \rightarrow 0 \quad (x \rightarrow 0) \quad (4.30)$$

2.

$$F(x) \approx x^{-\sigma} \Phi(x) \quad (x \rightarrow 0) \quad (4.31)$$

(σ は正の定数 ($\sigma > 0$)、また $\Phi(x)$ は原点近くで正則な関数)

3. 上記2つのどれでもない場合

臨界現象は2つ目の場合に該当する。

なお、臨界現象以外でも、異常次元が出る場合がある最も古く知られている物理例は衝撃波である。

4.5 繰り込みと異常次元

場の理論での繰り込み (renormalization) と異常次元の関係について議論する。ここで場の理論とは汎関数積分で表されるようなものである。このような場の理論は統計力学だけでなく、量子場の理論でのグリーン関数の計算にも登場する。

量子場の理論の初期には、量子力学と(電磁場など)古典場を組み合わせで整合性のある理論が構築できると期待されていた。しかし、いくつかの量を計算すると発散が見つかったことで、この期待は破られた。

$$\langle \phi(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}') \rangle = \int_0^\infty \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{1}{k^2 + r_0} \exp(i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')) \quad (4.32)$$

$\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ では

$$\langle \phi(\mathbf{r})^2 \rangle = \int_0^\infty \frac{S_d k^{d-1} dk}{(2\pi)^d} \frac{1}{k^2 + r_0} \quad (4.33)$$

(ここで S_d は d 次元の単位球の表面積である)。被積分項は $k \rightarrow \infty$ で k^{d-3} と振る舞うので、積分は $d \geq 2$ で発散する。

4.6 スケーリング仮説(自由エネルギー)

自由エネルギー密度の特異な部分 (singular part)

$$f_s(t, h) = |t|^{2-\alpha} F_f(ht^{-\Delta}) \quad (4.34)$$

関数 $F_f(x)$ は $x \rightarrow 0$ では定数になるとする。また $F_f(x)$ の微分も原点付近で定数になるとする。

一方 $x \rightarrow \infty$ ではべき的な特異性を持つとする。

なお、 $|t|^{2-\alpha}$ の項は、ゼロ磁場 ($h = 0$) での比熱の特異部分 ($c_V \propto |t|^{-\alpha}$) を説明するため。

4.6.1 臨界指数 α, β, γ の関係

まずゼロ磁場での臨界指数 α, β, γ の関係を調べる。
磁化は

$$m(t, h) = -\frac{1}{k_B T_c} \frac{\partial f_s}{\partial h} \propto |t|^{2-\alpha-\Delta} F'_f(ht^{-\Delta}) \quad (4.35)$$

$h \rightarrow 0$ の極限を考え、低温側 ($t < 0$) での自発磁化の挙動 $m \propto t^\beta$ と比較すると

$$\beta = 2 - \alpha - \Delta \quad (4.36)$$

次に等温磁化率は

$$\chi_T(t, h) = \frac{\partial m}{\partial h} \propto t^{2-\alpha-2\Delta} F''_f(ht^{-\Delta}) \quad (4.37)$$

$h \rightarrow 0$ の極限を考え、 $\chi_T \propto t^{-\gamma}$ を比較すると

$$-\gamma = 2 - \alpha - 2\Delta \quad (4.38)$$

(4.36) $\times 2 -$ (4.38) として Δ を消去すると

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (4.39)$$

(Rushbrooke のスケーリング関係式)

4.6.2 臨界指数 β, γ, δ の関係

次に臨界温度上 $t = 0$ での有限磁場での臨界指数 δ との関係を調べる。
有限磁場で $t \rightarrow 0$ とすると、 $ht^{-\Delta}$ は発散する。そこで

$$F'_f(x) \propto x^\lambda \quad (\text{as } x \rightarrow \infty) \quad (4.40)$$

と仮定しよう。

$$m(t, h) \propto t^\beta F'_f(ht^{-\Delta}) \propto t^\beta (ht^{-\Delta})^\lambda \propto |t|^{\beta-\Delta\lambda} h^\lambda \quad (4.41)$$

有限磁場 $h (\neq 0)$ で、換算温度 $t \rightarrow 0$ としたとき、磁化は (0 でも無限大でもない) 有限の値になるはずだが、この条件を満たすためには

$$\beta = \Delta\lambda \quad (4.42)$$

でなければならない。この条件 $\beta - \Delta\lambda = 0$ では、(4.41) は

$$m(t=0, h) \propto h^\lambda \quad (4.43)$$

となる。臨界指数 δ の定義と比較して

$$\lambda = \frac{1}{\delta} \quad (4.44)$$

となる。

(4.42) と (4.44) から

$$\beta\delta = \Delta \quad (4.45)$$

ところで (4.36)-(4.38) から $\Delta = \beta + \gamma$ であるので

$$\beta\delta = \beta + \gamma \quad (4.46)$$

4.7 スケーリング仮説 (相関関数)

自由エネルギー密度に対するスケーリング関数と同様な方法で、2点相関関数から、臨界指数 ν, η に関する関係式を導くことができる。

2点相関関数

$$G(\mathbf{r}, t, h) = r^{-d+2-\eta} F_G(rt^\nu, ht^{-\Delta}) \quad (4.47)$$

$$2 - \alpha = d\nu \quad (4.48)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (4.49)$$

(Josephson の関係) これらは次元 d を含み、hyperscaling の例である。

4.8 相関距離とスケーリング

自由エネルギー密度 f_s の次元は $[f_s] = L^{-d}$ なので、

$$\frac{f_s}{k_B T} \approx \xi^{-d} (A + B_1(l_1/\xi)^{\sigma_1} + \dots) \quad (4.50)$$

のように表される。

臨界点近傍 ($t \rightarrow 0$) では、相関距離は $\xi \propto t^{-\nu}$ のように振る舞うので

$$\frac{f_s}{k_B T} \propto t^{\nu d} \quad (4.51)$$

$$c_V = -T \frac{\partial^2 f_s}{\partial T^2} \approx t^{\nu d - 2} = t^{-\alpha} \quad (4.52)$$

第5章 繰り込み群

5.1 ブロックスピン変換

5.2 イジングモデルのブロックスピン変換

5.2.1 1次元

ブロックスピン変換の例として、ゼロ磁場での1次元イジングモデルつまり、換算ハミルトニアン $\mathcal{H} = -K \sum_i s_i s_{i+1}$ 、分配関数 $Z = \text{Tr} \exp(-\mathcal{H})$ 、の問題を考える。このモデルは転送行列法などで厳密に解くことができるが、(三つ組スピンでの) ブロックスピン変換で扱ってみよう。多数決ルール代わりに、三つ組スピンの中央のスピン自由度だけで代表するルールを採用する ($T(s'; s_1, s_2, s_3) = \delta_{s', s_2}$)。これは、それぞれのブロックの端のスピン自由度について trace をとることを意味する。

2つの隣接するブロックを考える。ブロックの真ん中の $s'_1 \equiv s_2$ と $s'_2 \equiv s_5$ のスピンを固定して、 s_3 と s_4 のスピンについて和をとろう。分配関数で、これらの自由度に関する部分は

$$\exp(K s_2 s_3) \exp(K s_3 s_4) \exp(K s_4 s_5) = \exp(K s'_1 s_3) \exp(K s_3 s_4) \exp(K s_4 s'_2) \quad (5.1)$$

ところで、 $s_3 s_4 = \pm 1$ を考慮すると

$$\exp(K s_3 s_4) = \cosh K + s_3 s_4 \sinh K = \cosh K (1 + x s_3 s_4), \quad (x \equiv \tanh K) \quad (5.2)$$

と書き直すことができる。他の項についても同様にすると、

$$\begin{aligned} & (\cosh K)^3 (1 + x s'_1 s_3) (1 + x s_3 s_4) (1 + x s_4 s'_2) \\ &= (\cosh K)^3 (1 + x s'_1 s_3 + x s_3 s_4 + x s_4 s'_2 + x^2 s'_1 s_3 s_3 s_4 + x^2 s_3 s_4 s_4 s'_2 + x^2 s_4 s'_2 s'_1 s_3 + x^3 s'_1 s_3 s_3 s_4 s_4 s'_2) \end{aligned} \quad (5.3)$$

$s_3 = \pm 1$ と $s_4 = \pm 1$ について和をとると、 $(s_3)^2 = (s_4)^2 = 1$ を考慮すると、 (s_3, s_4) の奇数次の項は消え、偶数次の項のみ残るので

$$2^2(\cosh K)^3(1 + x^3 s'_1 s'_2) \quad (5.4)$$

これは、定数項を別にすると、 $\exp(K' s'_1 s'_2)$ のボルツマン因子の形である。ただし、

$$K' = \tanh^{-1} [(\tanh K)^3] \quad (5.5)$$

である。ブロックスピン変換後の分配関数 $Z = Tr \exp(\mathcal{H}'(s'))$ は

$$\mathcal{H}'(s') = Ng(K) - K' \sum_i s'_i s'_{i+1} \quad (5.6)$$

ここで N は元の全サイト数で、

$$g(K) = -\frac{1}{3} \ln \left[\frac{(\cosh K)^3}{\cosh K'} \right] - \frac{2}{3} \ln 2 \quad (5.7)$$

である。

変数 $x = \tanh K$ で扱おうと、繰り込み群方程式 (5.5) は $x' = x^3$ と単純化される。 $K = J/K_B T$ から、高温相は $x \rightarrow 0+$ に対応し、低温相は $x \rightarrow 1-$ に対応する。この操作 ($x' = x^3$) を繰り返し実行してみると、 x が厳密に 1 ($T = 0$) でない限り、 x は 0 に近づく。繰り込み群としては、 $x = 0$ と $x = 1$ に固定点 (fixed point) があるが、 $x = 1$ は不安定固定点で、 $x = 0$ は安定固定点にあたる。

この節で扱った例では、 $b = 3$ である。無次元の相関長は

$$\xi(x') = b^{-1} \xi(x), \quad (x' = x^b) \quad (5.8)$$

にしたがって変換する。

$$\xi(x) = \frac{const.}{\ln x} = \frac{const.}{\ln \tanh K} \quad (5.9)$$

5.2.2 高次元

5.3 一般論

$$K'_a - K_a^* \approx \sum_b T_{ab}(K'_b - K_b^*) \quad (5.10)$$

$$T_{ab} = \left. \frac{\partial K'_a}{\partial K_b} \right|_{K=K^*} \quad (5.11)$$

行列 T の固有値を λ^i 、対応する左固有ベクトルを e^i とすると

$$\sum_a e_a^i T_{ab} = \lambda^i e_b^i \quad (5.12)$$

$$u_i \equiv \sum_a e_a^i (K_a - K_a^*) \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} u'_i &= \sum_a e_a^i (K'_a - K_a^*) \\ &= \sum_{a,b} e_a^i T_{ab} (K_b - K_b^*) \\ &= \sum_b \lambda^i e_b^i (K_b - K_b^*) = \lambda^i u_i \end{aligned} \quad (5.14)$$

$$\lambda^i = b^{y_i} \quad (5.15)$$

- $y_i > 0$ relevant
- $y_i < 0$ irrelevant
- $y_i = 0$ marginal