

# 相転移の統計力学

野村 清英

2023年10月19日



# 目次

<b>第0章</b>	<b>序論</b>	<b>1</b>
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
<b>第1章</b>	<b>様々な相転移現象</b>	<b>3</b>
1.1	相関距離、一次相転移、連続相転移 . . . . .	3
1.1.1	相関距離 (correlation length) $\xi$ . . . . .	3
1.1.2	一次相転移 (first-order transition) . . . . .	3
1.1.3	連続相転移 (continuous transition) . . . . .	4
1.2	相図と臨界指数 . . . . .	5
1.2.1	一軸異方強磁性体 . . . . .	5
1.2.2	臨界指数 (critical index) . . . . .	8
1.2.3	等方的 (ハイゼンベルク) 強磁性体 . . . . .	11
1.2.4	単純流体 . . . . .	11
1.3	簡単なモデルの例 . . . . .	13
1.3.1	磁性体 . . . . .	14
1.3.2	反強磁性 . . . . .	16
1.3.3	超流動 . . . . .	17
1.3.4	超伝導 . . . . .	17
1.3.5	流体 . . . . .	18
1.3.6	2元合金 . . . . .	19
1.4	相転移現象の小まとめ . . . . .	19
1.4.1	非解析性 (不連続、発散) の由来 . . . . .	19
1.4.2	温度0での相転移 . . . . .	19
1.4.3	南部-Goldstone モードと低温現象 . . . . .	19
<b>第2章</b>	<b>平均場理論</b>	<b>21</b>
2.1	自由エネルギーの平均場近似 . . . . .	21

2.1.1	導入	21
2.1.2	$m$ の関数としての自由エネルギー	24
2.1.3	注意	25
2.2	ランダウ理論	25
2.2.1	臨界指数	25
2.2.2	ユニバーサリティと次元、対称性	27
2.2.3	連続対称性	27
2.3	相関関数の平均場理論 (ランダウ理論)	28
2.3.1	フーリエ変換について	28
2.3.2	2点相関関数と並進対称性	29
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	30
2.3.4	波数空間での相関	30
2.3.5	実空間での相関関数	31
2.3.6	臨界指数	32
2.3.7	秩序相での相関	32
2.4	相互作用レンジと相関関数	33
2.4.1	帯磁率と相関関数	35
2.5	平均場理論の補正	36
2.6	問題	38
<b>第3章</b>	<b>厳密な理論</b>	<b>45</b>
3.1	1次元イジングモデル (転送行列)	45
3.1.1	転送行列法による自由エネルギー	45
3.1.2	相転移	47
3.1.3	熱力学量	49
3.1.4	相関関数	50
3.2	無限レンジイジング模型	53
3.3	2次元イジングモデル	53
3.4	6-vertex model	54
<b>第4章</b>	<b>スケーリング仮説</b>	<b>55</b>
4.1	ランダウ理論の次元解析	55
4.1.1	段階1	56
4.1.2	段階2	56
4.2	次元解析と臨界指数	57
4.2.1	単位の変更	57

4.2.2	2点相関関数の次元解析 . . . . .	58
4.3	異常次元 (Anomalous dimension) . . . . .	59
4.4	異常次元と漸近性 . . . . .	60
4.5	繰り込みと異常次元 . . . . .	61
4.6	スケーリング仮説 (自由エネルギー) . . . . .	61
4.6.1	臨界指数 $\alpha, \beta, \gamma$ の関係 . . . . .	62
4.6.2	臨界指数 $\beta, \gamma, \delta$ の関係 . . . . .	62
4.7	スケーリング仮説 (相関関数) . . . . .	63
4.8	相関距離とスケーリング . . . . .	63
<b>第5章</b>	<b>繰り込み群概説</b> . . . . .	<b>65</b>
5.1	ブロックスピン変換 . . . . .	65
5.2	イジングモデルのブロックスピン変換 . . . . .	67
5.2.1	1次元 . . . . .	67
5.2.2	高次元 . . . . .	69
5.3	一般論 . . . . .	71
5.4	自由エネルギーのスケーリング . . . . .	74
5.5	臨界指数 . . . . .	75
5.5.1	臨界指数とスケーリング関数 . . . . .	75
5.5.2	臨界指数間の関係式 . . . . .	77
5.5.3	リスケールファクター $b$ の意味 . . . . .	78
5.6	相関関数の繰り込み . . . . .	79
5.7	問題 . . . . .	81
<b>付録A</b>	<b>鞍点法 (saddle point method)</b> . . . . .	<b>83</b>
<b>付録B</b>	<b>公式</b> . . . . .	<b>87</b>
B.1	双曲線関数 . . . . .	87
<b>付録C</b>	<b>多変数 Gauss 積分</b> . . . . .	<b>89</b>
C.1	問題 . . . . .	90



# 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、潜熱や密度変化
  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 (spontaneous symmetry breaking)

系のラグランジアンやハミルトニンや分配関数は対称性を保っているが、基底状態または自由エネルギー最低の状態が対称性を破っている現象。
- 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
- 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
- スケーリング仮説
- 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

## 1.1 相関距離、一次相転移、連続相転移

### 1.1.1 相関距離 (correlation length) $\xi$

1. 普通、マクロ (巨視的) 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 (原子レベル) 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、 $\xi$  で表す。
2. 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。揺らぎの相関は、 $\exp(-r/\xi)$  ( $r$  は2点間の距離) のように指数関数的に減衰する。
3. 通常、相関距離は原子間隔の数倍程度
4. 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。

### 1.1.2 一次相転移 (first-order transition)

自由エネルギーの1次微分に不連続性がある現象を、一次相転移 (first-order transition) と言う。

例: 結晶-流体の相転移、液体-気体の相転移。また、強磁性体の低温相で外部磁化を変化させた場合。

1. 相転移点で、2相以上が共存 → 密度や磁化などが不定
2. 相転移点から少しでも離れると単一の相になる。

3. 相関距離  $\xi$  は有限

## 4. 潜熱 (latent heat)

融解熱や蒸発熱など、物質の相が変化するときに必要な熱エネルギーの総量。

## 5. 準安定状態 (metastable)

準安定状態は、真の安定状態では無いが、大きな乱れが与えられない限り安定に存在できるような状態。準安定状態は小さな乱れに対しては安定だが、大きな乱れが与えられると不安定になり、真の安定状態へ変化する。準安定状態は非平衡状態なので、いつかは真の安定状態へ変化するが、その変化の時間が非常に長い。

一次相転移でよく見られる。過冷却や過熱 (突沸)、過飽和状態、常温・常圧におけるダイヤモンドなど。

## 6. ヒステリシス (hysteresis)

ある系の状態が、現在加えられている外場だけでなく、過去に加わった外場に依存して変化的こと。履歴現象とも呼ぶ。一次相転移近くでは、準安定状態があるため。

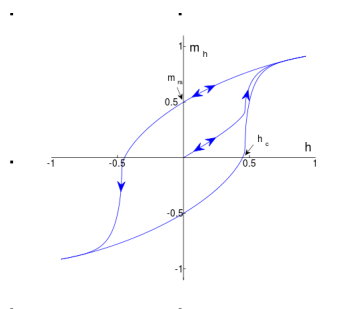


図 1.1: 強磁性体のヒステリシス

### 1.1.3 連続相転移 (continuous transition)

自由エネルギーの1次微分は連続だが、2次以上の微分に不連続性ないし発散がある現象を、**連続相転移 (continuous transition)**と言う。特異性が現れる点を**臨界点 (critical point)**と呼ぶ。

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

1. 秩序変数
2. 自発的対称性の破れ
3. 臨界点近くの性質
  - (a) 相関距離  $\xi$  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 (例:  $C \propto |t|^{-\alpha}, \chi \propto |t|^{-\gamma}$ ) に振る舞う。そのべき指数 ( $\alpha, \gamma$  など) 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。

## 1.2 相図と臨界指数

### 1.2.1 一軸異方強磁性体

常磁性 (paramagnetism) とは、外部磁場が無いときには磁化を持たず、外部磁場がある時はその方向に弱く磁化するような磁性である。一方、(鉄やコバルトなど) 強磁性 (ferromagnetism) では、外部磁場が無いときでも磁化 (自発磁化) がある。強磁性を示す物質でも、十分高温になれば常磁性となる。この転移温度をキュリー温度 (Curie temperature) または**臨界温度 (critical temperature)** とよび、 $T_c$  で表す。強磁性体には、安定な磁化の方向 (磁化容易軸) があるものがある。一つの結晶軸の方向のみが磁化容易軸になっている強磁性体を一軸異方強磁性体とよぶ。

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 1.2)。

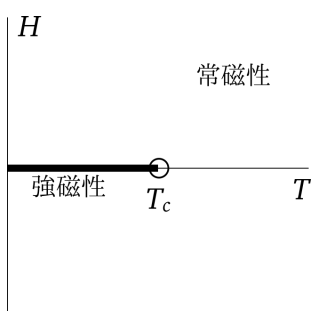


図 1.2: 強磁性体の相図,  $H = 0, T \leq T_c$  では自発磁化あり

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 1.3 (a))。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)  $T_c$  に低温側から近づくと磁化の不連続性は小さくなり、 $T_c$  では連続になるが微分は発散している (図 1.3 (b))。  $H = 0, T = T_c$  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。

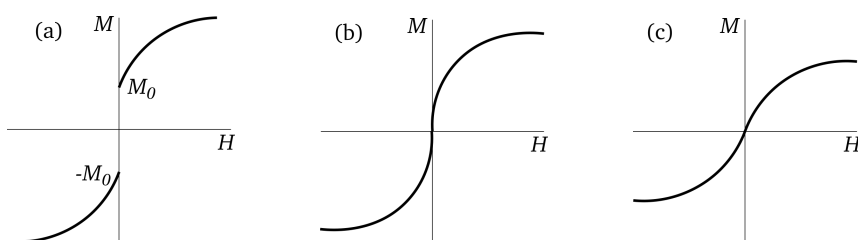


図 1.3: 様々な温度での磁場と磁化 (a)  $T < T_c$ ; (b)  $T = T_c$ ; (c)  $T > T_c$

### 自発磁化と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。自発磁化  $M_0$  の値は磁気秩序の大きさを表しているので**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である (図 1.4)。

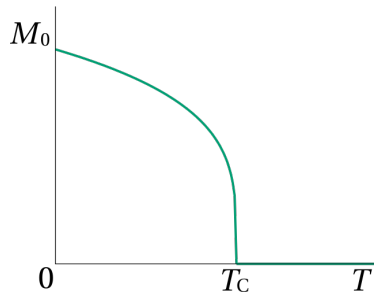


図 1.4: 自発磁化の温度依存性

### 帯磁率の発散

外部磁場  $H = 0$  で温度  $T$  を高温側から臨界点  $T_c$  に近づけると、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  $T_c$  では帯磁率 (magnetic susceptibility) が発散する。同様に低温側から近づいても帯磁率は発散している (図 1.5)。

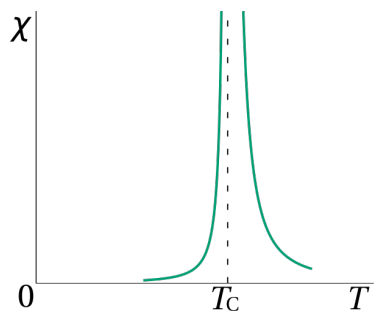


図 1.5: 帯磁率の温度依存性

### 比熱の発散

外部磁場  $H = 0$  で温度  $T$  を変化させると、臨界温度  $T_c$  で比熱 (specific heat) が発散する。(図 1.6)。

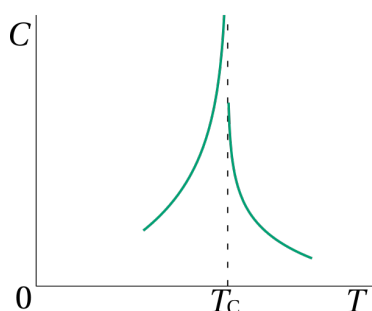


図 1.6: 比熱の温度依存性

### 1.2.2 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.  $\alpha$ :

ゼロ磁場での比熱  $C$  は、 $t$  について、

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

と振る舞う ( $t$  についてなめらかに振る舞う項は除く)。  $\alpha$  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  $\alpha$  と記す。

臨界指数  $\alpha$  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 ( $A_+ \neq A_-$ )。しかし臨界振幅の比  $A_-/A_+$  はユニバーサルである。

2.  $\beta$ :

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 1.4)。

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

3.  $\gamma$ :

ゼロ磁場での帯磁率 (図 1.5 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  $\gamma$  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.  $\delta$ :

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 1.3 (b))。

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

5.  $\nu$ :

ゼロ磁場  $h = 0$  では、相関距離  $\xi$  は転移点で発散し、

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

と振る舞う。

6.  $\eta$ :

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  $\tau$  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リング次元 (scaling dimensions) で整理できる。

### 相関関数と相関距離 $\xi$ 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  $\mathbf{r}$  のスピンを  $s(\mathbf{r})$  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、 $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  かつ  $\langle s(\mathbf{r}) \rangle = \langle s(\mathbf{r}') \rangle = \langle s \rangle$  なので、

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle s(\mathbf{r})s(\mathbf{r}') \rangle - (\langle s \rangle)^2 \quad (1.9)$$

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

$\xi$  が有限な場合には、相関関数は漸近的に

$$G(r) \propto \exp(-r/\xi)r^{-(d-1)/2} \quad (r \gg \xi) \quad (1.10)$$

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)。



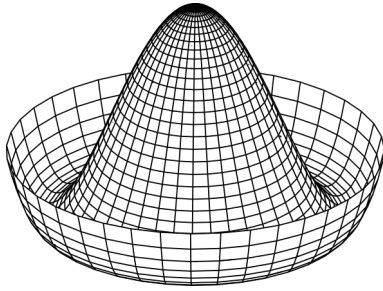


図 1.7: メキシカンハットポテンシャル

### 1.2.3 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。

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)

自発磁化に垂直な局所磁化の揺らぎは、スピン波 (spin wave) に対応する (図 1.8)。スピン波の励起エネルギーは、波長が長くなると小さくなり、gapless である。

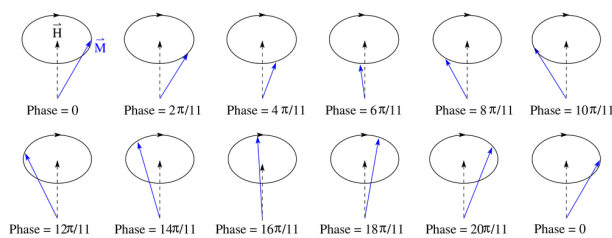


図 1.8: スピン波

### 1.2.4 単純流体

He, Ne, Ar や  $\text{CH}_4$ ,  $\text{SF}_6$  などの単純流体の相転移を議論する。

液体と気体の臨界点は、臨界温度  $T_c$ 、臨界圧力  $p_c$ 、臨界密度  $\rho_c$  で与えられる。

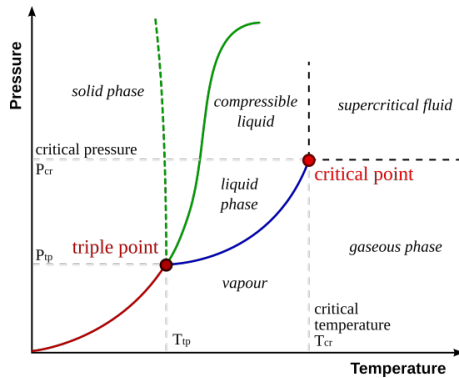


図 1.9: 物質の三態 (固体-液体-気体) と温度、圧力の関係を示す相図の例。横軸が温度、縦軸が圧力、緑の実線が融解曲線、赤線が昇華曲線、青線が蒸発曲線、3つの曲線が交わる点が三重点 (triple point)。液体と気体の蒸発曲線は臨界点 (critical point) で終わる。

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  $\rho$  は不連続に変化する。相境界での液体の密度を  $\rho_L$ 、気体の密度を  $\rho_G$  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。

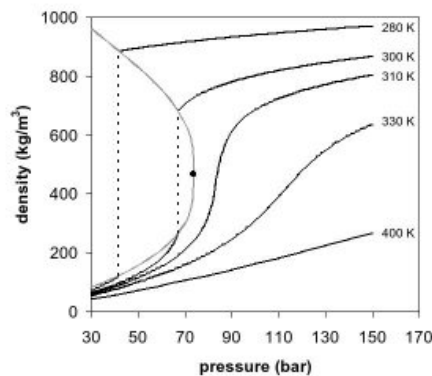


図 1.10: 二酸化炭素の圧力と密度の相図、横軸：圧力、縦軸：密度

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

- $\rho$  が磁化  $M$  に類似

1.  $\alpha$ :

$\rho = \rho_c$  での比熱  $C_V$

$$C_V \approx A|t|^{-\alpha} \quad (1.11)$$

2.  $\beta$ :

$$\rho_L - \rho_G \propto (-t)^\beta \quad (1.12)$$

3.  $\gamma$ : 等温圧縮率

$$\chi_T \propto |t|^{-\gamma} \quad (1.13)$$

4.  $\delta$ :

$$p - p_c \propto |\rho_L - \rho_G|^\delta \quad (1.14)$$

臨界指数  $\nu$  と  $\eta$  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。

## 1.3 簡単なモデルの例

平衡状態の分配関数：

$$Z = \text{Tr} \exp(-\beta\mathcal{H}) \quad (1.15)$$

( $\mathcal{H}$ : 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。

### 1.3.1 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)

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{s}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}') - \mu \mathbf{H} \cdot \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{s}(\mathbf{r}) \quad (1.16)$$

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、

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}) = 1 \quad (1.17)$$

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、別のユニバーサルティクラスになる。

- $J(\mathbf{r}, \mathbf{r}') > 0$  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 (1.16) 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:

$$s^i(\mathbf{r}) \rightarrow s'^i(\mathbf{r}) \equiv \sum_{j=1}^3 O^{ij} s^j(\mathbf{r}) \quad (1.18)$$

(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 ( ${}^T O O = O^T O = E$ )),

$$\mathbf{s}'(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{s}'(\mathbf{r}') = \mathbf{s}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}') \quad (1.19)$$

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

$$s(\mathbf{r}) = \pm 1 \quad (1.20)$$

と表せられる。

これに対応するハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r}, \mathbf{r}') s(\mathbf{r}) \cdot s(\mathbf{r}') - \mu H \cdot \sum_{\mathbf{r}} s(\mathbf{r}) \quad (1.21)$$

で、イジングモデル (Ising model) と呼ばれる (図 1.11)。

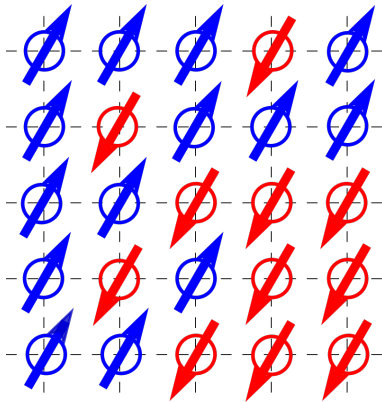


図 1.11: 2次元正方格子上的イジングモデル

$Z_2$  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:

$$s(\mathbf{r}) \leftrightarrow -s(\mathbf{r}) \quad (1.22)$$

変換後のハミルトニアン (1.21) は同じ形をしている。

### XY モデル

スピンの  $xy$  面内のみを動くとした場合

$$(s^x(\mathbf{r}))^2 + (s^y(\mathbf{r}))^2 = 1 \quad (1.23)$$

と言う制約条件がつく。ハミルトニアンの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:

$$s^i(\mathbf{r}) \rightarrow s'^i(\mathbf{r}) \equiv \sum_j O^{ij} s^j(\mathbf{r}) \quad (1.24)$$

(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 ( ${}^T O O = O^T O = E$ ))、

$$\mathbf{s}'(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{s}'(\mathbf{r}') = \mathbf{s}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{s}(\mathbf{r}') \quad (1.25)$$

なので、変換後のハミルトニアンは同じ形をしている。

### 1.3.2 反強磁性

ハイゼンベルクモデル (1.16) やイジングモデル (1.21) 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

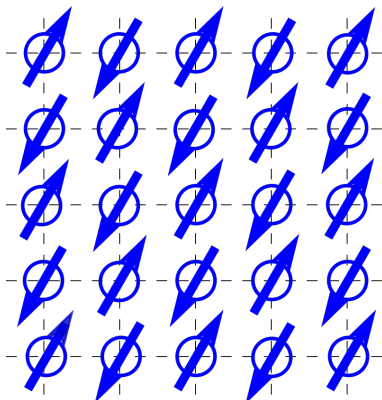


図 1.12: 2次元正方格子上の反強磁性イジングモデル、低温相

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。

### 1.3.3 超流動

ヘリウム ( $^4\text{He}$ ) はボソンなので、十分低温では Bose-Einstein 凝縮 (BEC) し、マクロな複素波動関数  $\Psi(\mathbf{r})$  で表される状態になる。これにより粘性の無い超流動状態になる。

$^4\text{He}$  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

$$\Psi(\mathbf{r}) \rightarrow \exp(i\theta)\Psi(\mathbf{r}) \quad (1.26)$$

と変えてもエネルギーや分配関数は不変である。

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)

### 1.3.4 超伝導

金属では電子はフェルミ縮退している。何らかの原因で電子対に引力が働くと、電子対は実効的にボソンのように振る舞う (クーパー対, Cooper pair)。十分低温でクーパー対が BEC すると、電気抵抗 0 の超伝導状態となる。

典型的な金属の超伝導状態でのクーパー対は、相互のスピンの singlet を組み、軌道状態は s 波となる。この場合の超伝導を説明するのが BCS 理論である。

BCS 超伝導状態はマクロな複素波動関数  $\Psi(\mathbf{r})$  で表される状態になる。

ただし、BCS 超伝導状態では、相互作用距離がクーパー対程度で格子間隔の数十 ~ 数百倍であるので、臨界現象が強く現れる温度領域は極めて狭く、平均場近似によく従っているように見える。

### 1.3.5 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、

$$\Xi = \sum_N \frac{\zeta^N}{N!} \int \exp\left(-\beta \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\right) d^3 r_1 \cdots d^3 r_N \quad (1.27)$$

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 1.13）。

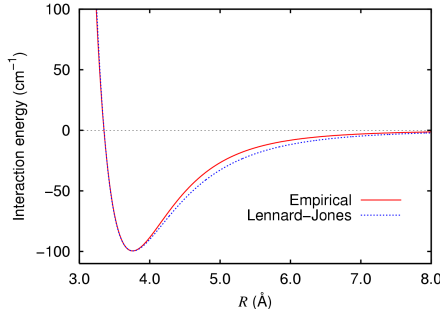


図 1.13: 原子間のポテンシャル。横軸は原子間距離（オングストローム）を、縦軸はポテンシャルエネルギーを表す。2つのアルゴン原子間のポテンシャルが赤い実線で、これをレナード＝ジョーンズ・ポテンシャルでフィッティングしたものが青い点線である。

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にもみあるものとし、格子点  $\mathbf{r}$  にある粒子数  $n(\mathbf{r})$  は 0 または 1 のみに限るとする（剛体芯斥力に対応）。ポテンシャルの引力部分は  $-2 \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r}, \mathbf{r}') n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')$  ( $J > 0$ ) で表す。すると

$$\Xi = \sum_{n(\mathbf{r})=0,1} \zeta^{\sum_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r})} \exp\left(2\beta \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r}, \mathbf{r}') n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')\right) \quad (1.28)$$

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 (1.28) の指数の中の項は

$$\frac{1}{2} \beta \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r}, \mathbf{r}') s(\mathbf{r}) s(\mathbf{r}') + \beta H \sum_{\mathbf{r}} s(\mathbf{r}) \quad (1.29)$$



(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。

### 1.3.6 2元合金

$\beta$ -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。

## 1.4 相転移現象の小まとめ

### 1.4.1 非解析性 (不連続、発散) の由来

有限系では分配関数や自由エネルギーはパラメータに対しなめらか (高階微分も連続)  $\rightarrow$  相転移は起きない。

相転移や自発的対称性の破れが起きるのは、(粒子数や体積など) 無限極限である。

### 1.4.2 温度0での相転移

量子多体系では温度0でもパラメーターを変えると、相転移が起きることがある。

### 1.4.3 南部-Goldstone モードと低温現象

連続的対称性が自発的に破れる場合、gapless な励起が出現する。これを南部-Goldstone モードとよぶ。

#### 1. 固体比熱

フォノンの分散関係は  $E \propto |\mathbf{k}|$  である。デ바이理論から、(絶縁体)結晶の低温比熱  $C(T)$  は

$$C(T) \propto T^3 \quad (1.30)$$

と振る舞い、実験ともよく合う。

この場合はフォノンが、(並進対称性の破れに対する)南部-Goldstoneモードに対応する。

## 2. ハイゼンベルク強磁性体

スピン波理論(ブロッホ他)から、ハイゼンベルク強磁性体の分散関係は  $E \propto \mathbf{k}^2$  で、低温の自発磁化  $M(T)$  と、低温比熱は

$$M(0) - M(T) \propto T^{3/2} \quad (1.31)$$

$$C(T) \propto T^{3/2} \quad (1.32)$$

と振る舞い、実験ともよく合う。

この場合はスピン波が、(スピンの回転対称性の破れに対する)南部-Goldstoneモードに対応する。

## 3. 弱く相互作用するボソン系の超流動 (BEC)

U(1)対称性の破れに伴う、南部-Goldstoneモード、分散関係は  $E \propto |\mathbf{k}|$  である。

## 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。平均場理論は秩序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。ただし臨界点近傍で揺らぎが大きい場合は平均場理論は妥当ではない。

### 2.1 自由エネルギーの平均場近似

#### 2.1.1 導入

強磁性イジングモデルを例に平均場近似を紹介する。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 ( $J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 0$ ) 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格子あたりの磁化 ( $m = M/N = \langle s(\mathbf{r}) \rangle$ ) 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

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

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、 $J \equiv \sum_{\mathbf{r}} J(\mathbf{r})$  である。また、

$$\sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') s(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \sum_{\mathbf{r}} s(\mathbf{r}) = J \sum_{\mathbf{r}} s(\mathbf{r}) \quad (2.7)$$

等を使っている。

式 (2.2) と同様な手順で、平均場近似の分配関数 (2.6) を計算すると

$$Z \approx \exp\left(-\frac{1}{2}N\beta Jm^2\right) [2 \cosh \beta(Jm + H)]^N \quad (2.8)$$

となる。1 格子点当たりの自由エネルギー  $f \equiv -(\beta N)^{-1} \ln Z$  は、

$$f_{MF} = -\beta^{-1} \ln 2 + \frac{1}{2}Jm^2 - \beta^{-1} \ln \cosh \beta(Jm + H) \quad (2.9)$$

となる。1 格子点当たりの磁化  $m$  は  $f$  を磁場で微分して得られる。

$$m(H) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} \langle s(\mathbf{r}) \rangle_H = (\beta N)^{-1} \frac{\partial \ln Z(H)}{\partial H} = -\frac{\partial f}{\partial H} \quad (2.10)$$

平均場近似の自由エネルギー (2.9) を代入すると磁化は

$$m = \tanh \beta(Jm + H) \quad (2.11)$$

で、 $H$  の関数として自己無撞着 (self-consistent) に求まる。この様にして決めた自由エネルギー (2.9) は磁化  $m$  にはよらないので、

$$\frac{\partial f_{MF}}{\partial m} = 0 \quad (2.12)$$

であり、この条件からも (2.11) が得られる。

$f_{MF}$  (2.9) をテイラー展開して  $\ln \cosh x \approx \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{12}x^4$  を使って

$$f_{MF} \approx -\beta^{-1} \ln 2 + \frac{1}{2}J(1 - \beta J)m^2 + \frac{1}{12}\beta^{-1}(\beta J)^4 m^4 - \beta^{-1}JHm \quad (2.13)$$

が得られる。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。

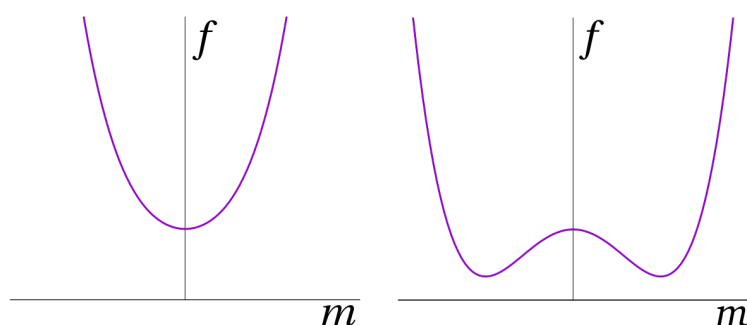


図 2.1: 平均場の自由エネルギーの関数形 (a)  $T > T_c^{MF}$ ; (b)  $T < T_c^{MF}$

高温 ( $\beta^{-1} > J$  つまり  $T > J/k_B$ ) では  $f_{MF}$  の極小は  $m = 0$  のみで、常磁性相に対応する。低温 ( $T < J/k_B$ ) では、 $f_{MF}$  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)。以上より  $T_c^{MF} = J/k_B$  は平均場近似での臨界温度とみなせる。

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。低次元では揺らぎが大きくなり、ある次元以下では有限温度での秩序が全く無くなる。(下部臨界次元 (lower critical dimension))

### 2.1.2 $m$ の関数としての自由エネルギー

これまで考えた自由エネルギーは磁場  $H$  の関数であったので、 $m$  の関数として考えるのはやや不自然である。そこで自由エネルギーを磁化  $m$  の関数として表し直す。自由エネルギーをルジャンドル変換して

$$\tilde{f}(m) \equiv f(H) + Hm \quad (2.14)$$

としよう ( $d\tilde{f}/dH = 0$  に注意)。

(2.11) から

$$1 - m^2 = \frac{1}{\cosh^2 \beta(Jm + H)}, \quad \therefore \cosh \beta(Jm + H) = \frac{1}{\sqrt{1 - m^2}} \quad (2.15)$$

また (2.11) を逆に解くと

$$\beta(H + Jm) = \operatorname{artanh} m \left( = \frac{1}{2} \ln \frac{1+m}{1-m} \right) \quad (2.16)$$

である。これらから  $\tilde{f}_{MF}(m)$  は、

$$\tilde{f}_{MF}(m) = -\beta^{-1} \ln 2 - \frac{1}{2} Jm^2 - \beta^{-1} \ln \left( \frac{1}{\sqrt{1 - m^2}} \right) + \beta^{-1} m \operatorname{artanh} m \quad (2.17)$$

となる。この場合磁場は

$$H = \frac{\partial \tilde{f}}{\partial m} \quad (2.18)$$

で与えられる。

$$f_{MF}(m) \equiv \tilde{f}_{MF}(m) - Hm \quad (2.19)$$

とすると、これは磁場  $m$  の関数であり、

$$\frac{\partial}{\partial m} f_{MF}(m) = 0 \quad (2.20)$$

から (2.16) が得られる。

最後に、(2.19) を  $m$  が小さいとして展開すると

$$f_{MF}(m) \approx -\beta^{-1} \ln 2 + \frac{1}{2}(\beta^{-1} - J)m^2 + \frac{\beta^{-1}}{12}m^4 - Hm \quad (2.21)$$

### 2.1.3 注意

1. (2.9), (2.17) は、磁化  $m$  の関数としてみたとき、下に凸でない領域を含んでいる。したがって、そのままでは熱力学的な自由エネルギーと解釈できない。
2. 変分的な方法で、平均場近似の自由エネルギーが真の自由エネルギーの上限を与えることをきちんと示すことができる。
3. Hubbard-Stratonovich 変換して、二体相互作用項を補助スカラー場で線形化し、離散的なスピン変数について和をとって消去する方法がある (章末問題参照)。

$$Z = \sqrt{\frac{\beta J N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dm \exp(-\beta N f(m)), \quad (2.22)$$

さらに鞍点法を使い近似すると、 $Z = C \exp(-\beta N f_{min})$  となる ( $f_{min}$  は  $f(m)$  の最小値、係数  $C$  は  $N$  によらない)。これが (2.9) の最も素直な解釈だろう。

## 2.2 ランダウ理論

連続相転移の臨界点に十分近いと、磁化  $m$  (秩序パラメーター) は十分小さく、平均場近似の有効自由エネルギー密度は  $m$ ,  $t \equiv (T - T_c^{MF})/T_c^{MF}$ ,  $h \equiv H/(k_B T_c^{MF})$  で以下のように展開できる。

$$f_{MF} = f_0 + atm^2 + bm^4 - dhm + \dots \quad (2.23)$$

ここで  $f_0, a, b, d$  は  $m, h$  によらず、 $t$  には弱く依存する。また  $a, b, d > 0$  である。例えば (2.13), (2.21) では、 $f_0 \approx -J \ln 2$ ,  $a \approx \frac{J}{2}$ ,  $b \approx \frac{1}{12}J$ ,  $d \approx J$  である。

### 2.2.1 臨界指数

まず、ランダウ自由エネルギー密度 (2.23) の磁化  $m$  による微分は

$$\left. \frac{\partial f_{MF}}{\partial m} \right|_h = 2atm + 4bm^3 - dh = 2m(at + 2bm^2) - dh \quad (2.24)$$

である。

1.  $h = 0$  かつ  $t > 0$  では、 $f_{MF}$  の極小条件と (2.24) から  $m_0 = 0$ 。  
 $h = 0$  かつ  $t < 0$  では、

$$m_0 = \sqrt{-\frac{at}{2b}} \approx \sqrt{3}(-t)^{1/2} \quad (2.25)$$

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。

2. (2.24) を  $h$  で微分し、 $f_{MF}$  の極小条件を考慮すると

$$\frac{\partial m}{\partial h}(2at + 12bm^2) - d = 0 \quad (2.26)$$

従って

$$\chi = \left. \frac{\partial m}{\partial h} \right|_{h=0} = \frac{d}{2at + 12bm_0^2} = \begin{cases} \frac{d}{2a}t^{-1} \approx t^{-1} & (t > 0) \\ \frac{d}{4a}(-t)^{-1} \approx \frac{1}{2}(-t)^{-1} & (t < 0) \end{cases} \quad (2.27)$$

つまり (1.3) に対応する臨界指数は  $\gamma = 1$  である。

3.  $h \neq 0$  かつ  $t = 0$  では、

$$4bm^3 - dh = 0 \quad \therefore m = \left(\frac{dh}{4b}\right)^{1/3} \approx (3)^{1/3}h^{1/3} \quad (2.28)$$

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

4. 比熱についてはやや事情が複雑である。

$h = 0$  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、

$$f_{MF} = f_0 - \frac{a^2t^2}{4b} \quad (2.29)$$

である。したがって、比熱

$$C = -T \frac{\partial^2 f}{\partial T^2} = -\frac{T}{(T_c^{MF})^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \quad (2.30)$$

は高温相 ( $t > 0$ ) で  $C = 0$ 、秩序相で  $C = \frac{1+t}{T_c^{MF}} \frac{a^2}{2b} \approx \frac{3}{2}k_B$  で不連続だが、発散はない。比熱の臨界指数 (1.1) は  $\alpha = 0$  である。

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。



### 2.2.2 ユニバーサリティと次元、対称性

ランダウ自由エネルギー密度 (2.23) 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無いので (次章)、平均場近似には明かに限界がある。実際、4 次元以下では平均場近似は正しくない。

ランダウ自由エネルギー密度 (2.23) は、時間反転 (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 (2.23) が得られる。強磁性イジングモデルではこの対称性の議論は当たり前だが、秩序パラメーターや格子がより複雑な対称性を持つときはランダウ自由エネルギーを求めるときに大事な手がかりになる。

### 2.2.3 連続対称性

$n$  個の成分の秩序変数  $m^\alpha$  ( $\alpha$  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自由エネルギー密度は、式 (2.23) を一般化すると

$$\begin{aligned} f_{MF} &= f_0 + at \sum_{\alpha=1}^n (m^\alpha)^2 + b \left( \sum_{\alpha=1}^n (m^\alpha)^2 \right)^2 \\ &= f_0 + at(\mathbf{m})^2 + b((\mathbf{m})^2)^2 \end{aligned} \quad (2.31)$$

である。

$\mathbf{m} = \mathbf{m}_0 + \delta\mathbf{m}$  と展開し、(2.31) に代入すると

$$\begin{aligned} f_{MF} &= f_0 + at(\mathbf{m}_0)^2 + b(\mathbf{m}_0^2)^2 + (2at + 4b(\mathbf{m}_0)^2)\mathbf{m}_0 \cdot \delta\mathbf{m} \\ &\quad + (at + 2b(\mathbf{m}_0)^2)(\delta\mathbf{m})^2 + 4b(\mathbf{m}_0 \cdot \delta\mathbf{m})^2 + O(|\delta\mathbf{m}|^3) \end{aligned} \quad (2.32)$$

極小条件は  $(at + 2b(\mathbf{m}_0)^2)\mathbf{m}_0 \cdot \delta\mathbf{m} = 0$  つまり、 $\mathbf{m}_0 = 0$  ( $t > 0$ ) または  $(\mathbf{m}_0)^2 = -at/(2b)$  ( $t < 0$ ) である。高温相の  $\mathbf{m}_0 = 0$  の場合は、

$$f_{MF} = f_0 + at(\delta\mathbf{m})^2 \quad (2.33)$$

である。

秩序相の  $(\mathbf{m}_0)^2 = -at/(2b)$  の場合は、特定の磁化の向き  $\frac{\mathbf{m}_0}{|\mathbf{m}_0|}$  をとり、 $O(n)$  対称性を破る。このとき

$$f_{MF} = f_0 - \frac{a^2 t^2}{4b} - 2at(\delta\mathbf{m}_{\parallel})^2 + O(|\delta\mathbf{m}|^3),$$

$$\delta\mathbf{m}_{\parallel} \equiv \left( \delta\mathbf{m} \cdot \frac{\mathbf{m}_0}{|\mathbf{m}_0|} \right) \frac{\mathbf{m}_0}{|\mathbf{m}_0|} \quad (2.34)$$

となる。このランダウ自由エネルギー密度と、次節の相関関数の議論を組み合わせると、秩序相では自発磁化に平行な縦モード (longitudinal mode)  $\delta\mathbf{m}_{\parallel}$  のみが有限の相関距離  $\xi \propto (-2at)^{-1/2}$  をもつ。一方、自発磁化に垂直な横モード (transverse modes)  $\delta\mathbf{m}_{\perp} \equiv \delta\mathbf{m} - \delta\mathbf{m}_{\parallel}$  (自由度  $n - 1$  個) の相関距離は無限大で、相関関数はベキ乗的に減衰する。後者は**南部-Goldstone モード (Nambu-Goldstone modes)** の例である。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)

これまでは、秩序パラメーターが空間的に一様な場合について、平均場近似の自由エネルギーから、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

$$\tilde{f}(\mathbf{q}) = \int_V d^d\mathbf{r} f(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}), \quad f(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \tilde{f}(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (2.35)$$

と定義する。さらに  $f(\mathbf{r})$  が実数関数の場合、 $\tilde{f}(-\mathbf{q}) = (\tilde{f}(\mathbf{q}))^*$  である。例えば、秩序パラメーター  $m(\mathbf{r})$  のフーリエ変換は

$$\tilde{m}(\mathbf{q}) = \int_V d^d\mathbf{r} m(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}), \quad m(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \tilde{m}(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (2.36)$$

と表される。

ところで、周期的境界条件をつかうと、以下の関係式が示される。

$$\int_V d^d \mathbf{r} \exp(i(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}) = V \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \quad (2.37)$$

体積無限大  $V \rightarrow \infty$  の極限では

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \rightarrow \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \quad (2.38)$$

### 2.3.2 2点相関関数と並進対称性

秩序パラメーターを、次のように平均とそのゆらぎのように表す

$$m(\mathbf{r}) = \langle m(\mathbf{r}) \rangle + \delta m(\mathbf{r}) = m_0 + \delta m(\mathbf{r}) \quad (2.39)$$

(並進対称な場合、 $\langle m(\mathbf{r}) \rangle = m_0$  なので)。このとき、

$$\langle \delta m(\mathbf{r}) \rangle = 0 \quad (2.40)$$

2点相関関数については、

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &\equiv \langle (m(\mathbf{r}) - \langle m(\mathbf{r}) \rangle)(m(\mathbf{r}') - \langle m(\mathbf{r}') \rangle) \rangle \\ &= \langle m(\mathbf{r})m(\mathbf{r}') \rangle - m_0^2 \end{aligned} \quad (2.41)$$

秩序パラメーターの Fourier 変換の 2点相関関数は、(2.36) を使って、

$$\langle \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(\mathbf{q}') \rangle = \int_V d^d \mathbf{r} \int_V d^d \mathbf{r}' \langle m(\mathbf{r})m(\mathbf{r}') \rangle \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}') \quad (2.42)$$

ここで  $\mathbf{r} - \mathbf{r}' \equiv \mathbf{r}_d$ ,  $\frac{1}{2}(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \equiv \mathbf{r}_{CG}$  と変数変換すると、

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

および (2.37) を使って、

$$\begin{aligned} &\langle \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(\mathbf{q}') \rangle \\ &= \left( \int_V d^d \mathbf{r}_{CG} \exp(-i(\mathbf{q} + \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}_{CG}) \right) \int_V d^d \mathbf{r}_d (G(\mathbf{r}_d) + m_0^2) \exp(-\frac{i}{2}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}_d) \\ &= V \delta_{\mathbf{q}, -\mathbf{q}'} \int_V d^d \mathbf{r}_d (G(\mathbf{r}_d) + m_0^2) \exp(-\frac{i}{2}(\mathbf{q} - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}_d) \\ &= V \delta_{\mathbf{q}, -\mathbf{q}'} \int_V d^d \mathbf{r}_d (G(\mathbf{r}_d) + m_0^2) \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_d) \\ &= V \delta_{\mathbf{q}, -\mathbf{q}'} (\tilde{G}(\mathbf{q}) + V m_0^2 \delta_{\mathbf{q}, 0}) \end{aligned} \quad (2.43)$$

### 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

ランダウ自由エネルギー密度で空間変化を取り入れる。

$$f_{MF}(\mathbf{r}) = f_0 + at(m(\mathbf{r}))^2 + b(m(\mathbf{r}))^4 + c(\nabla m(\mathbf{r}))^2 - dh(\mathbf{r})m(\mathbf{r}) + \dots \quad (2.44)$$

ここで係数  $a, b, c, d$  は  $t, m$  や  $\mathbf{r}$  によらない定数とする。また  $a, b, c, d > 0$  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。

この場合のランダウ自由エネルギーは

$$F_{MF} = \int f_{MF}(\mathbf{r}) d^d \mathbf{r} \quad (2.45)$$

である。並進対称性や空間反転対称性は  $F_{MF}$  の段階で議論する。

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、

$$F_{MF} = \int (f_0 + at(m(\mathbf{r}))^2 + c(\nabla m(\mathbf{r}))^2) d^d \mathbf{r} \quad (2.46)$$

と4次の項を無視する。この場合  $\langle m(\mathbf{r}) \rangle = m_0 = 0$  である。

式 (2.46) に (2.36) を代入して次式が得られる。

$$\begin{aligned} F_{MF} &= \int (f_0 + at(m(\mathbf{r}))^2 + c(\nabla m(\mathbf{r}))^2) d^d \mathbf{r} \\ &= f_0 V + \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \int \frac{d^d \mathbf{r}}{V^2} ((at + c(-\mathbf{q} \cdot \mathbf{q}')) \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(\mathbf{q}')) \exp(i(\mathbf{q} + \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}) \\ &= f_0 V + \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \frac{1}{V} ((at + c(-\mathbf{q} \cdot \mathbf{q}')) \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(\mathbf{q}')) \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}', 0} \\ &= f_0 V + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} (at + c\mathbf{q}^2) \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(-\mathbf{q}) \\ &= f_0 V + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} (at + c\mathbf{q}^2) |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2 \end{aligned} \quad (2.47)$$

### 2.3.4 波数空間での相関

波数空間での秩序パラメーターの相関は

$$\langle \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(\mathbf{q}') \rangle \equiv \frac{\int \prod_j d\tilde{m}(\mathbf{q}_j) \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(\mathbf{q}') \exp(-\beta F)}{\int \prod_j d\tilde{m}(\mathbf{q}_j) \exp(-\beta F)} \quad (2.48)$$

で定義されている。ランダウ自由エネルギー (2.47) は波数  $\mathbf{q}$  ごとに独立な  $\tilde{m}(\mathbf{q})$  からなる2次形式で、注目している波数  $\mathbf{q}, \mathbf{q}'$  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、

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

$$D_{\mathbf{q}} \equiv \beta(at + c\mathbf{q}^2)/V \quad (2.49)$$

となる。さらに (2.43) 式をあてはめて、

$$\begin{aligned} \langle \tilde{m}(\mathbf{q}) \tilde{m}(\mathbf{q}') \rangle &= \delta_{\mathbf{q}, -\mathbf{q}'} \langle |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2 \rangle \\ &= \delta_{\mathbf{q}, -\mathbf{q}'} \frac{\int d\tilde{m}(\mathbf{q}) |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2 \exp(-2D_{\mathbf{q}} |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2)}{\int d\tilde{m}(\mathbf{q}) \exp(-2D_{\mathbf{q}} |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2)} \end{aligned} \quad (2.50)$$

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

$$d\tilde{m}(\mathbf{q}) = |\tilde{m}(\mathbf{q})| d|\tilde{m}(\mathbf{q})| d\theta_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2} d(|\tilde{m}(\mathbf{q})|^2) d\theta_{\mathbf{q}}$$

で、積分は絶対値  $|\tilde{m}(\mathbf{q})|$  と位相  $\theta_{\mathbf{q}}$  について行う。しかしランダウ自由エネルギー (2.47) には位相は現れないので  $\theta_{\mathbf{q}}$  の積分は定数となり、(2.50) の分母と分子で打ち消す。したがって、 $|\tilde{m}(\mathbf{q})|^2 \equiv y_{\mathbf{q}}$  として積分すると、

$$\langle |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2 \rangle = \frac{\int_0^{\infty} dy_{\mathbf{q}} (y_{\mathbf{q}} \exp(-2D_{\mathbf{q}} y_{\mathbf{q}}))}{\int_0^{\infty} dy_{\mathbf{q}} \exp(-2D_{\mathbf{q}} y_{\mathbf{q}})} = \frac{1}{2D_{\mathbf{q}}} = \frac{Vk_B T}{2(at + c\mathbf{q}^2)}, \quad (2.51)$$

$$\therefore \tilde{G}(\mathbf{q}) = \frac{k_B T}{2(at + c\mathbf{q}^2)} \quad (2.52)$$

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

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}) &\equiv \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \tilde{G}(\mathbf{q}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{k_B T}{2(at + c\mathbf{q}^2)} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) = \frac{k_B T}{2cV} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})}{\mathbf{q}^2 + \xi^{-2}}, \end{aligned} \quad (2.53)$$

ただし

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{c}{at}} \quad (2.54)$$

とした。体積無限大では (2.38) を使って、

$$G(\mathbf{r}) = \frac{k_B T}{2c} \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})}{\mathbf{q}^2 + \xi^{-2}} \quad (2.55)$$

である。実空間での相関関数は漸近的に

$$G(r) \propto \exp(-r/\xi) r^{-(d-1)/2}, \quad (d: \text{空間次元}) \quad (2.56)$$

となるので (問題参照)、 $\xi$  を相関距離と見なしてよい。なお、(2.55) は Ornstein-Zernike 形の相関関数と呼ばれる。

### 2.3.6 臨界指数

1. (2.54) 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

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}) &= \frac{k_B T}{2c} \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})}{\mathbf{q}^2} \\ &= \frac{k_B T}{2c} r^{2-d} \int \frac{d^d \mathbf{q}'}{(2\pi)^d} \frac{\exp(i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{n})}{\mathbf{q}'^2} \propto r^{2-d}. \\ &(r \equiv |\mathbf{r}|, \mathbf{n} = \mathbf{r}/r, \mathbf{q}' = \mathbf{q}r) \end{aligned} \quad (2.57)$$

ここで、 $\mathbf{q}'$  についての積分は  $r$  依存性がなくなることを使った。

したがって (1.6) の臨界指数は、 $\eta = 0$  となる。

### 2.3.7 秩序相での相関

$m(\mathbf{r}) = m_0 + \delta m(\mathbf{r})$  と展開し、(2.44) に代入すると

$$\begin{aligned} f_{MF} &= f_0 + atm_0^2 + bm_0^4 - dhm_0 + (2atm_0 + 4bm_0^3 - dh)\delta m(\mathbf{r}) \\ &\quad + (at + 6bm_0^2)(\delta m(\mathbf{r}))^2 + c(\nabla \delta m(\mathbf{r}))^2 \end{aligned} \quad (2.58)$$

簡単のため  $h = 0$  とする。極小条件は  $2atm_0 + 4bm_0^3 = 0$  つまり、 $m_0 = 0$  ( $t > 0$ ) または  $m_0^2 = -at/(2b)$  ( $t < 0$ ) である。 $m_0 = 0$  の場合は、

$$f_{MF} = f_0 + at(\delta m(\mathbf{r}))^2 + c(\nabla \delta m(\mathbf{r}))^2 \quad (2.59)$$

で (2.46) と等価である。一方秩序相の  $m_0^2 = -at/(2b)$  の場合、

$$f_{MF} = f_0 - \frac{a^2}{4b}t^2 + (-2at)(\delta m(\mathbf{r}))^2 + c(\nabla \delta m(\mathbf{r}))^2 \quad (2.60)$$

ところで相関関数は  $\langle \delta m(\mathbf{r}) \rangle = 0$  なので、

$$\langle m(\mathbf{r})m(\mathbf{r}') \rangle = m_0^2 + \langle \delta m(\mathbf{r})\delta m(\mathbf{r}') \rangle = m_0^2 + G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.61)$$

秩序相の  $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  を高温相と同様にして計算すると

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{c}{-2at}} \quad (2.62)$$

となる。

$O(n)$  など連続対称性の場合 (2.2.3 節)、縦モード  $\delta m_{\parallel}(\mathbf{r})$  の相関は上記と同じ、一方横モードの相関距離は秩序相では  $\xi = \infty$  である。

## 2.4 相互作用レンジと相関関数

この節では、ハミルトニアンから (2.44) の  $(\nabla m)^2$  の係数を求める。磁化が空間的に変化するとして、 $m(\mathbf{r})$  と表し、(2.5) と同様に近似すると

$$s(\mathbf{r})s(\mathbf{r}') \approx m(\mathbf{r})s(\mathbf{r}') + m(\mathbf{r}')s(\mathbf{r}) - m(\mathbf{r})m(\mathbf{r}') \quad (2.63)$$

したがって、

$$\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') s(\mathbf{r})s(\mathbf{r}') \approx \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') (m(\mathbf{r})s(\mathbf{r}') + m(\mathbf{r}')s(\mathbf{r}) - m(\mathbf{r})m(\mathbf{r}')) \quad (2.64)$$

2.1 節の (2.8) と同様に、 $s(\mathbf{r}) = \pm 1$  について和をとって分配関数を求め、自由エネルギーの形にすると

$$F_{MF} \approx -N\beta^{-1} \ln 2 - (\beta)^{-1} \sum_{\mathbf{r}} \ln \cosh \beta \left( \sum_{\mathbf{r}'} J(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) m(\mathbf{r}') \right) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) m(\mathbf{r})m(\mathbf{r}') \quad (2.65)$$

$m(\mathbf{r})$  が小さいとして、 $\ln \cosh x \approx \frac{1}{2}x^2$  で近似すると、

$$F_{MF} \approx -N\beta^{-1} \ln 2 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) m(\mathbf{r}) m(\mathbf{r}') - \frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{r}} \left( \sum_{\mathbf{r}'} J(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) m(\mathbf{r}') \right) \left( \sum_{\mathbf{r}''} J(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}) m(\mathbf{r}'') \right) \quad (2.66)$$

ここで、

$$J(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}) \approx J(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') + (r'_i - r_i) \partial_i J(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') + \frac{1}{2} (r'_i - r_i) (r'_j - r_j) \partial_i \partial_j J(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') \quad (2.67)$$

と近似し、さらに  $\sum_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv J$  および

$$\sum_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') (r'_i - r_i) = 0 \quad (2.68)$$

( $J(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  が偶関数より) を使うと、

$$F_{MF} \approx -N\beta^{-1} \ln 2 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) m(\mathbf{r}) m(\mathbf{r}') - \frac{\beta J}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) m(\mathbf{r}) m(\mathbf{r}') - \frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{r}''} J(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \frac{1}{2} (r'_i - r_i)^2 \partial_i \partial_i J(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') m(\mathbf{r}') m(\mathbf{r}'') \quad (2.69)$$

$J(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  が回転対称の場合はさらに (これが怪しい)

$$\sum_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') (r'_i - r_i)^2 X_{ii} = \sum_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} \frac{J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') (r'_j - r_j)^2}{d} X_{ii} = 2JR^2 X_{ii},$$

$$R^2 \equiv \frac{\frac{1}{2d} \sum_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') (\mathbf{r}' - \mathbf{r})^2}{\sum_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} J(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (2.70)$$

なので、

$$F_{MF} \approx -N\beta^{-1} \ln 2 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) m(\mathbf{r}) m(\mathbf{r}') - \frac{\beta J}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) m(\mathbf{r}) m(\mathbf{r}') - \frac{\beta JR^2}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \partial_i \partial_i J(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) m(\mathbf{r}') m(\mathbf{r})$$

$$= -N\beta^{-1} \ln 2 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \left( (1 - \beta J) J(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) - \beta JR^2 \partial_i \partial_i J(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \right) m(\mathbf{r}) m(\mathbf{r}') \quad (2.71)$$



さらに

$$m(\mathbf{r}') \approx m(\mathbf{r}) + (r'_i - r_i) \partial_i m(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} (r'_i - r_i)(r'_j - r_j) \partial_i \partial_j m(\mathbf{r}) \quad (2.72)$$

と近似し、これまでと同様な手順 (2.68), (2.70) で式変形し、部分積分で境界項を無視すると、

$$F_{MF} \approx -N\beta^{-1} \ln 2 + \frac{J(1-\beta J)}{2} \sum_{\mathbf{r}} (m(\mathbf{r}))^2 + \frac{(2\beta J - 1)}{2} JR^2 \sum_{\mathbf{r}} \partial_i m(\mathbf{r}) \partial_i m(\mathbf{r}) \quad (2.73)$$

したがって、(2.45) の係数は

$$c = \frac{2\beta J - 1}{2} JR^2 \approx \frac{1}{2} JR^2 \quad (2.74)$$

(相転移温度近くでは  $\beta J \approx 1$  なので) となる。この形は、次元解析でも導かれる。

### 2.4.1 帯磁率と相関関数

波数空間での相関関数 (2.52) を、相関距離  $\xi$  (2.54)、相互作用レンジ  $R$  (2.70), (2.74) 及び平均場近似の相転移温度  $T_c^{MF} = J/k_B$  を使い書き直し、相転移温度近くでは  $\beta J \approx 1$  から

$$\tilde{G}(\mathbf{q}) = \frac{k_B T}{2(at + c\mathbf{q}^2)} = \frac{k_B T}{2c(\xi^{-2} + \mathbf{q}^2)} \approx \frac{R^{-2}}{\xi^{-2} + \mathbf{q}^2} \quad (2.75)$$

となる。

さらに、 $a \approx J/2$  と (2.54), (2.74) から、

$$\xi \approx Rt^{-1/2} \quad (2.76)$$

である。

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

$$\chi = \tilde{G}(\mathbf{q} = 0) \approx R^{-2} \xi^2 \approx t^{-1} \quad (2.77)$$

で、 $\chi$  は  $R$  によらない。また臨界指数  $\gamma = 1$  である。

同じく実空間での相関関数 (2.55) は

$$G(\mathbf{r}) \approx R^{-2} \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})}{\mathbf{q}^2 + \xi^{-2}} \quad (2.78)$$

となる。

## 2.5 平均場理論の補正

この節では平均場近似の限界を考察しよう。秩序パラメーターの平均値が揺らぎよりも充分大きい、つまり

$$\langle(\delta m)^2\rangle \ll \langle m\rangle^2 \quad (2.79)$$

であれば、平均場近似は妥当である。

1. まず、(2.13) または (2.25) から秩序相 ( $t < 0$ ) で

$$\langle m\rangle^2 = (m_0)^2 \approx -3t \quad (2.80)$$

2. 次に

$$\langle(\delta m)^2\rangle = G(0) \approx R^{-2} \int_{BZ} \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{\mathbf{q}^2 + \xi^{-2}} \quad (2.81)$$

である。最後の積分は第一 Brillouin zone (BZ) 全体にまたがる。

$\xi \rightarrow \infty$  での (2.81) の挙動に注目する。Brillouin zone での積分を、 $|\mathbf{q}| < a^{-1}$  ( $a$ : 格子間隔) までの球積分で近似する。

- (a)  $d < 2$

簡単のため  $a \rightarrow 0$  の極限を扱う。 $\mathbf{q}' = \mathbf{q}\xi$  と変数変換すると

$$\int_{|\mathbf{q}| < \infty} \frac{d^d \mathbf{q}}{\mathbf{q}^2 + \xi^{-2}} = \xi^{2-d} \int_{|\mathbf{q}'| < \infty} \frac{d^d \mathbf{q}'}{\mathbf{q}'^2 + 1} \quad (2.82)$$

となる。積分  $\int \frac{d^d \mathbf{q}'}{\mathbf{q}'^2 + 1}$  は  $d < 2$  では収束するので、(2.82) は  $\xi^{2-d}$  に比例する。

- (b)  $2 < d < 4$

$d > 2$  では、(2.82) の積分は発散する。そこで

$$\int_{|\mathbf{q}| < a^{-1}} \frac{d^d \mathbf{q}}{\mathbf{q}^2 + \xi^{-2}} = \int_{|\mathbf{q}| < a^{-1}} \frac{d^d \mathbf{q}}{\mathbf{q}^2} - \xi^{-2} \int_{|\mathbf{q}| < a^{-1}} \frac{d^d \mathbf{q}}{\mathbf{q}^2(\mathbf{q}^2 + \xi^{-2})} \quad (2.83)$$

のように分解する。第1項の積分は  $\xi$  によらない定数である。第2項の積分は  $2 < d < 4$  のときは  $a \rightarrow 0$  の極限でも収束する。そこで  $\mathbf{q}' = \mathbf{q}\xi$  と変数変換すると

$$\int_{|\mathbf{q}| < \infty} \frac{d^d \mathbf{q}}{\mathbf{q}^2(\mathbf{q}^2 + \xi^{-2})} = \xi^{4-d} \int_{|\mathbf{q}'| < \infty} \frac{d^d \mathbf{q}'}{\mathbf{q}'^2(\mathbf{q}'^2 + 1)} \quad (2.84)$$

なので、(2.83) の第2項は  $\xi^{2-d}$  に比例する。

(c)  $4 < d < 6$ 

$$\begin{aligned}
& \int_{|q| < a^{-1}} \frac{d^d q}{q^2 + \xi^{-2}} \\
&= \int_{|q| < a^{-1}} \frac{d^d q}{q^2} - \xi^{-2} \int_{|q| < a^{-1}} \frac{d^d q}{(q^2)^2} + \xi^{-4} \int_{|q| < a^{-1}} \frac{d^d q}{(q^2)^2 (q^2 + \xi^{-2})}
\end{aligned} \tag{2.85}$$

のように分解する。最後の項について、前と同じ議論を当てはめると  $\xi^{2-d}$  に比例する。

結局 (2.81) は  $\xi \rightarrow \infty$  で  $\xi^{2-d} R^{-2}$  に比例し、(2.80) と比較すると、

$$\xi^{2-d} R^{-2} \ll |t| \tag{2.86}$$

ならば、平均場近似がよく成り立つ。さらに平均場近似で  $\xi \approx R|t|^{-1/2}$  を使って  $t$  を消去すると

$$\xi^{4-d} \ll R^4 \tag{2.87}$$

で、**ギンツブルクの判定条件 (Ginzburg criterion)** と呼ばれる。

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  $\xi$  は大きくなり、いずれは条件 (2.87) 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  $d$  以外に、相互作用レンジ  $R$  にもよる。(2.86) に  $\xi \approx R|t|^{-1/2}$  を使い  $\xi$  を消去すると、

$$|t|^{4-d} \gg R^{-2d} \tag{2.88}$$

である。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ー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非常に近く ( $t \approx 10^{-12}$ ) 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、ギンツブルクの判定条件は常に満たされる。したがって揺らぎによる補正を取り入れても、平均場近似での臨界指数はそのままであり、臨界温度などの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。

## 2.6 問題

1. 無限レンジ相互作用イジングモデルと Hubbard-Stratonovich 変換  
 $N$  個のスピンが相互作用するハミルトニアン

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j} S_i S_j, \quad (S_i = \pm 1, J > 0) \quad (2.89)$$

で定義される、無限レンジ相互作用のイジングモデルを考える。和は  $1 \leq i, j \leq N$  ( $i, j$  は整数) の全ての組み合わせについてとる。

- (a) 分配関数を計算し

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp \left[ \frac{\beta J}{2N} \left( \sum_i S_i \right)^2 \right] \quad (2.90)$$

を示しなさい。和  $\sum_{\{S_i\}}$  は全てのスピン配位についてとる。

- (b) 実変数  $x, y$  とパラメータ  $a > 0$  について、ガウス積分を使い、

$$\exp \left( \frac{ax^2}{2N} \right) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\sqrt{2\pi/Na}} \exp \left( -\frac{Nay^2}{2} + axy \right) \quad (2.91)$$

となることを示しなさい。ヒント：右辺を平方完成してみる。

- (c) 前問の結果を使い、分配関数 (2.90) が

$$Z = C_2 \sum_{\{S_i\}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp(\mathcal{L}), \quad \mathcal{L} = \frac{NC_3 y^2}{2} + C_4 y \sum_i S_i \quad (2.92)$$

となることを示し、係数  $C_2, C_3, C_4$  を求めなさい。

- (d) 前問のように書き換えると、分配関数でのスピン変数についての和は各  $S_i$  ごとに独立になっている。このことを使い、

$$Z = C_2 \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp(\mathcal{L}'), \quad \mathcal{L}' = \frac{NC_3 y^2}{2} + NC_5 \ln(2 \cosh C_6 y) \quad (2.93)$$

となることを示し、係数  $C_5, C_6$  を求めなさい。

ここで使った方法は、Hubbard-Stratonovich 変換または補助場の方法とよばれ、統計力学の他、場の量子論などでも広く使われている。

## 2. 無限レンジ相互作用イジングモデル

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j} S_i S_j, \quad (S_i = \pm 1, J > 0) \quad (2.94)$$

の分配関数は、Hubbard-Stratonovich 変換により、

$$Z = \sqrt{\frac{\beta J N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp(-\beta N f(y)), \quad f(y) \equiv \frac{Jy^2}{2} - \beta^{-1} \ln(2 \cosh \beta J y) \quad (2.95)$$

と書き換えられる。

- (a) 関数  $f(y)$  の極大、極小、無限大での漸近形などを求め、グラフを書きなさい。温度  $1/\beta$  によりグラフの概形が異なる。
- (b) なめらかな実関数  $g(x)$  にたいする積分

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(\lambda g(x)) dx \quad (2.96)$$

で、 $\lambda$  が十分大きい極限 ( $\lambda \rightarrow +\infty$ ) での  $I(\lambda)$  を求めよう。これについて鞍点法 (saddle point method) を説明しなさい。 $g(x)$  に極大が複数ある時はどう扱うか？

- (c) 次に鞍点法を用いて、分配関数 (2.95) は  $N \rightarrow \infty$  の極限で、

$$Z = C_7 \exp(-N\beta f(y_0)) \quad (2.97)$$

の形になることを示し、 $y_0$  が満たすべき条件式を書き下しなさい。また、係数  $C_7$  は  $N$  によらないことも確かめなさい。

3. 磁場  $H$  下の無限レンジ相互作用イジングモデルを扱う。

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad (S_i = \pm 1, J > 0) \quad (2.98)$$

- (a) Hubbard-Stratonovich 変換を行い、

$$Z = \sqrt{\frac{\beta J N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp(-\beta N f(y)),$$

$$f(y) \equiv \frac{Jy^2}{2} - \beta^{-1} \ln(2 \cosh \beta (Jy + H)) \quad (2.99)$$

となることを導きなさい。

(b) (2.99) にたいして、 $f(y)$  の最小値  $y_0$  が、

$$y_0 = \tanh \beta(Jy_0 + H) \quad (2.100)$$

を満たすことを確かめなさい。

次に  $N \rightarrow \infty$  で鞍点法を用いて自由エネルギーを表しなさい。

(c) 外部磁場  $H$  と 1 格子点当たりの磁化  $m$  は、分配関数を通して

$$(\beta N)^{-1} \frac{\partial \ln Z}{\partial H} = m \quad (2.101)$$

という関係である。

これを使って、(2.99) 式の  $f(y)$  の最小値  $y_0$  が、磁化  $m$  と同一視されることを示しなさい。

(d) 磁場  $H = 0$  の場合に、式 (2.100) の  $y_0$  について、 $|\beta J y_0| \ll 1$  として近似解を求めなさい。これを使い、 $m_0 \propto (-t)^\beta$  の臨界指数  $\beta$  を求めなさい。なお、 $t \equiv (1 - \beta J)/(\beta J)$  である。

(e) 帯磁率

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial H} \quad (2.102)$$

を計算しなさい。

次にゼロ磁場での帯磁率を高温側と低温側で計算し、 $\chi \propto |t|^{-\gamma}$  で定義される臨界指数  $\gamma$  を求めなさい。

(f) 臨界温度  $t = 0$  での磁場と磁化の振る舞いを調べ、 $m \propto |h|^{1/\delta}$  で定義される臨界指数  $\delta$  を求めなさい。

(g) 自由エネルギーを求めなさい。これから比熱に対する臨界指数  $\alpha$  を求めなさい。

4. 最近接相互作用のイジングモデルに対して、Hubbard-Stratonovich 変換と鞍点法を用いて、平均場近似を示そう。

次のハミルトニアン

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j - \sum_i H_i S_i, \quad (S_i = \pm 1) \quad (2.103)$$

で定義されるイジングモデルを考える。ここで  $i$  と  $j$  が最近接の場合  $J_{ij} = J > 0$  で、それ以外では  $J_{ij} = 0$  とする。

まず、多変数のガウス積分の次の恒等式

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N \left( \frac{dx_i}{\sqrt{2\pi}} \right) \exp \left( -\frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j + x_i B_i \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\det A}} \exp \left( \frac{1}{2} B_i (A^{-1})_{ij} B_j \right) \end{aligned} \quad (2.104)$$

( $\mathbf{A}$  は  $N$  行  $N$  列の実対称行列で正定値、 $\mathbf{B}$  は任意の実ベクトル) をつかって、連続自由度の汎関数の形に書き直そう。

- (a) i. (2.103) に対する分配関数を  $Z = \text{Tr} \exp(-\beta\mathcal{H})$  とする。恒等式 (2.104) で、 $(A^{-1})_{ij} = \beta^{-1} J_{ij}$  および  $B_i = \beta S_i$  として、 $Z$  を多変数のガウス積分の形で表しなさい。

- ii. 次に  $S_i = \pm 1$  の自由度について和をとることで

$$\begin{aligned} Z &= C \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N d\psi_i \exp[-\beta S(\{\psi_i\}, \{H_i\}, \{J_{ij}\})], \\ S &\equiv \frac{1}{2} (\psi_i - H_i) (J^{-1})_{ij} (\psi_j - H_j) - \frac{1}{\beta} \sum_i \ln(2 \cosh \beta \psi_i) \end{aligned} \quad (2.105)$$

となることを確かめなさい。

これにより、分配関数を汎関数積分の形に表せた。格子間隔が小さい極限  $a \rightarrow 0$  では、 $\psi_i$  は場の量  $\psi(\mathbf{r})$  となる。

- (b) 鞍点法を用いると、分配関数は  $Z \approx \exp(-\beta S(\bar{\psi}_i))$  (ここで  $\bar{\psi}_i$  は  $S$  を最小とするような場の値) と近似できる。

- i.  $\bar{\psi}_i$  が満たすべき方程式を導きなさい。  
ii. 次に、場所  $i$  での磁化

$$m_i \equiv \langle S_i \rangle = -\frac{\partial F}{\partial H_i} \approx -\frac{\partial S}{\partial H_i} \quad (2.106)$$

が、 $m_i = \tanh \beta \bar{\psi}_i$  となることを示しなさい。

- iii. さらに  $H_i$  を  $m_j$  の関数として表しなさい。

(ヒント)

$$\frac{\partial H_k}{\partial H_l} = \delta_{kl}, \quad \frac{\partial \psi_k}{\partial \psi_l} = \delta_{kl}$$

および

$$\frac{\partial H_k}{\partial \psi_l} = 0, \quad \frac{\partial \psi_k}{\partial H_l} = 0$$

(c) 平均場近似との関係

$\psi_i = \bar{\psi}_i$  での  $S$  の値を  $\bar{S}$  とする。平均場近似は自由エネルギーを  $F \approx \bar{S}$  とすることに当たる。このとき次のように

$$\bar{S}(\{m_i\}) = \frac{1}{2} J_{ij} m_i m_j - \frac{1}{\beta} \sum_i \ln \left( \frac{2}{\sqrt{1 - m_i^2}} \right) \quad (2.107)$$

となることを示しなさい。

5.  $d$  次元の2点相関関数は、平均場近似では

$$G(\mathbf{r}) = \frac{k_B T}{2c} \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d \mathbf{q} \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})}{\mathbf{q}^2 + \xi^{-2}} \quad (2.108)$$

と表される。これを具体的に求めてみよう。

(a) まず、

$$[-\nabla^2 + \xi^{-2}] G(\mathbf{r}) = \frac{k_B T}{2c} \delta(\mathbf{r}) \quad (2.109)$$

となることを確かめなさい。

等方性から (2.109) は  $d$  次元空間で回転対称で、 $G(\mathbf{r})$  は原点からの距離  $r \equiv \sqrt{\sum_{j=1}^d x_j^2}$  のみの関数である。

(b) 関数  $f(r)$  について  $d$  次元極座標で

$$\nabla^2 f(r) = r^{-(d-1)} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^{(d-1)} \frac{\partial f(r)}{\partial r} \right) \quad (2.110)$$

となることを示そう。

i.

$$\frac{\partial f(r)}{\partial x_i} = \frac{x_i}{r} \frac{\partial f(r)}{\partial r} \quad (2.111)$$

を示しなさい。



ii. 次に

$$\frac{\partial^2 f(r)}{\partial x_i^2} = \frac{x_i^2}{r^2} \frac{\partial^2 f(r)}{\partial r^2} + \left( \frac{1}{r} - \frac{x_i^2}{r^3} \right) \frac{\partial f(r)}{\partial r} \quad (2.112)$$

を示しなさい。

iii. 最後に

$$\sum_{i=1}^d \frac{\partial^2 f(r)}{\partial x_i^2} = \frac{\partial^2 f(r)}{\partial r^2} + \left( \frac{d}{r} - \frac{r^2}{r^3} \right) \frac{\partial f(r)}{\partial r} \quad (2.113)$$

を示し、式 (2.110) となることを確認しなさい。

(c)  $\xi^{-1} = 0$  の場合を扱う。  $G(r) = c_1 r^{\alpha_1}$  として (2.109) 式および (2.110) 式を使って計算し、  $r > 0$  で (2.109) 式が 0 となる条件からべき指数  $\alpha_1$  を求めなさい。

(d) 次に  $\xi^{-1} > 0$  の場合を考える。

i. まず、直交座標で  $\boldsymbol{\rho} \equiv \mathbf{r}/\xi$  と変数変換すると (2.109) 式は

$$[-\nabla^2 + 1] G(\boldsymbol{\rho}\xi) = g\delta(\boldsymbol{\rho}), \quad (g \equiv \frac{k_B T}{2c} \xi^{2-d}) \quad (2.114)$$

となることを確認しなさい。

ヒント: 1次元のデルタ関数で  $\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$  ( $a$ : 定数)。

ii. 次に、 $\mathcal{G}(\boldsymbol{\rho}) \equiv \frac{1}{g} G(\boldsymbol{\rho}\xi)$  とし、さらに (2.110) を使って  $d$  次元極座標で表すと

$$\left[ -\rho^{-(d-1)} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho^{(d-1)} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + 1 \right] \mathcal{G}(\rho) = \delta(\rho), \quad (2.115)$$

となることを確認しなさい。

iii.  $\mathcal{G}(\rho) = c_2 \rho^{\alpha_2} \exp(-\rho)$  を (2.115) 式の左辺に代入して計算しなさい。さらに、 $\rho \rightarrow \infty$  で  $\rho^{\alpha_2} \exp(-\rho)$  と  $\rho^{\alpha_2-1} \exp(-\rho)$  の係数が 0 となる条件から、べき指数  $\alpha_2$  を求めなさい。

iv. 以上をまとめて  $G(r)$  の漸近形を、 $r$  と  $\xi$  を使って表しなさい。なお、 $d = 3$  の場合は湯川ポテンシャルの形になる。

参考: (2.115) の一般解は変形ベッセル関数 (modified Bessel function) で表すことができる。

6.  $O(n)$  対称性

(a) ランダウ自由エネルギーを

$$f_{MF} = f_0 + at(\mathbf{m})^2 + b((\mathbf{m})^2)^2 \quad (2.116)$$

とする。

$\mathbf{m} = \mathbf{m}_0 + \delta\mathbf{m}$  と展開し、(2.31) に代入して、 $\delta\mathbf{m}$  の2次まで計算しなさい。計算過程を示すこと。

- (b) 高温相と秩序相について極小とそれからの揺らぎを説明しなさい。秩序相では、自発磁化に平行な longitudinal mode  $\delta\mathbf{m}_{\parallel} \equiv \left(\delta\mathbf{m} \cdot \frac{\mathbf{m}_0}{|\mathbf{m}_0|}\right) \frac{\mathbf{m}_0}{|\mathbf{m}_0|}$  で記述しなさい。
- (c)  $\delta\mathbf{m}_{\parallel}$  と transverse modes  $\delta\mathbf{m}_{\perp} \equiv \delta\mathbf{m} - \delta\mathbf{m}_{\parallel}$  が直交することを確かめなさい。
- (d) ランダウ自由エネルギーで空間的な揺らぎを取り入れ、

$$f_{MF} = f_0 + at(\mathbf{m}(\mathbf{r}))^2 + b((\mathbf{m}(\mathbf{r}))^2)^2 + c(\nabla(\mathbf{m}(\mathbf{r})))^2 \quad (2.117)$$

とする。これに  $\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \mathbf{m}_0 + \delta\mathbf{m}(\mathbf{r})$  を代入して、 $\delta\mathbf{m}(\mathbf{r})$  の2次まで計算しなさい。

次に秩序相で、ランダウ自由エネルギーの極小からの揺らぎを  $\delta\mathbf{m}_{\parallel}(\mathbf{r})$  と  $\delta\mathbf{m}_{\perp}(\mathbf{r})$  に分けて記述しなさい。

## 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  $N$  個のスピンの分配関数は

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

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  $\mathbf{T}$  の行列積と見なすことができる。行列  $\mathbf{T}$  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、 $\mathbf{T}$  を以下のように相似変換して扱うと便利である。

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

さらに、 $\mathbf{T}$  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い）。すると、trace の性質  $\text{Tr}(\mathbf{A}\mathbf{B}) = \text{Tr}(\mathbf{B}\mathbf{A})$  より

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\mathbf{T}^N) &= \text{Tr}((\mathbf{S}\mathbf{T}'\mathbf{S}^{-1})^N) = \text{Tr}(\mathbf{S}(\mathbf{T}')^N\mathbf{S}^{-1}) = \text{Tr}((\mathbf{T}')^N\mathbf{S}^{-1}\mathbf{S}) \\ &= \text{Tr}(\mathbf{T}'^N) = \lambda_1^N + \lambda_2^N \end{aligned} \quad (3.12)$$

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  $\mathbf{T}$  の固有値を具体的に求めるには以下の行列式を扱う。

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

つまり、 $\lambda^2 - 2(\exp(K) \cosh h)\lambda + (\exp(2K) - \exp(-2K)) = 0$ 。これを解くと、

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

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  $\mathbf{A}$  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

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

比熱は

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

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)。また、高温極限 ( $T \rightarrow \infty$ ) では  $\cosh(J/k_B T) \approx 1$  より

$$C = \frac{N J^2}{k_B T^2} \cosh^{-2}(J/k_B T) \approx \frac{N J^2}{k_B T^2} \rightarrow 0 \quad (3.29)$$

低温極限では  $\cosh(J/k_B T) \approx \frac{1}{2} \exp(J/k_B T)$  より

$$C = \frac{N J^2}{k_B T^2} \cosh^{-2}(J/k_B T) \approx \frac{4N J^2}{k_B T^2} \exp(-2J/k_B T) \rightarrow 0 \quad (3.30)$$

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

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{F(K, h, N)}{N} = -J - k_B T \ln \left[ \cosh h + \sqrt{\sinh^2 h + \exp(-4K)} \right] \quad (3.31)$$

磁化は

$$\begin{aligned} m &= -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial H} = -\frac{1}{N k_B T} \frac{\partial F}{\partial h} \\ &= \frac{\partial}{\partial h} \ln \left[ \cosh h + \sqrt{\sinh^2 h + \exp(-4K)} \right] \\ &= \frac{\sinh h}{\sqrt{\sinh^2 h + \exp(-4K)}} \end{aligned} \quad (3.32)$$

帯磁率は

$$\begin{aligned} \chi_T &\equiv \frac{\partial m}{\partial H} = \frac{1}{k_B T} \frac{\partial m}{\partial h} \\ &= \frac{1}{k_B T} \exp(-4K) \cosh h (\sinh^2 h + \exp(-4K))^{-3/2} \end{aligned} \quad (3.33)$$

特にゼロ磁場での帯磁率は

$$\chi_T|_{H=0} = \frac{\exp(2K)}{k_B T} = \frac{\exp(2J/k_B T)}{k_B T} \quad (3.34)$$

高温極限と、低温極限での挙動は

$$\chi_T \approx \begin{cases} \frac{1}{k_B T} & (T \rightarrow \infty) \text{(Curie の法則)} \\ \frac{\exp(2J/k_B T)}{k_B T} & (T \rightarrow 0) \end{cases} \quad (3.35)$$

## 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

$$\begin{aligned} \langle S_i \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \exp(-\beta \mathcal{H}) S_i \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} [T_{S_1, S_2} T_{S_2, S_3} \cdots T_{S_{i-1}, S_i} S_i T_{S_i, S_{i+1}} \cdots T_{S_N, S_1}] \end{aligned} \quad (3.36)$$



転送行列の  $i$  サイト近くの成分を抜き出すと

$$\sum_{S_i} T_{S_{i-1}, S_i} S_i T_{S_i, S_{i+1}} \quad (3.37)$$

である。これを次のような行列の形で表す。

$$A_{ab} = \sum_{S_i} T_{a, S_i} T_{S_i, b} S_i \quad (3.38)$$

または

$$\mathbf{A} = \mathbf{T} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \mathbf{T} \quad (3.39)$$

これはパウリ行列の一つ  $\sigma_z$  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

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}(\sigma_z \mathbf{T}^N) \quad (3.40)$$

ここで行列の相似変換 (3.10) を使うと

$$\langle S_i \rangle = \frac{\text{Tr}[\mathbf{S}^{-1} \sigma_z \mathbf{S} (\mathbf{T}')^N]}{\text{Tr}(\mathbf{T}')^N} \quad (3.41)$$

転送行列  $\mathbf{T}$  の固有値  $\lambda_1$  に対する固有ベクトルを

$$\mathbf{T} X^{(1)} = \lambda_1 X^{(1)}, \quad X^{(1)} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (3.42)$$

とし、転送行列  $\mathbf{T}$  の固有値  $\lambda_2$  に対する固有ベクトルを

$$\mathbf{T} X^{(2)} = \lambda_2 X^{(2)}, \quad X^{(2)} = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

とすると、 $\mathbf{S}$  は

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

である。さらに

$$\mathbf{S}^{-1} \sigma_z \mathbf{S} = \begin{pmatrix} e & g \\ f & k \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

と表すことができる。ところで

$$(\mathbf{T}')^N = \begin{pmatrix} \lambda_1^N & 0 \\ 0 & \lambda_2^N \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

であったので、

$$\langle S_i \rangle = \frac{e\lambda_1^N + k\lambda_2^N}{\lambda_1^N + \lambda_2^N} \quad (3.47)$$

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

$$\langle S_i \rangle \approx e \quad (3.48)$$

と求まる。

同様にして、2点相関関数は

$$\langle S_i S_{i+j} \rangle = \frac{\text{Tr} [(\mathbf{S}^{-1} \sigma_z \mathbf{S})(\mathbf{T}')^j (\mathbf{S}^{-1} \sigma_z \mathbf{S})(\mathbf{T}')^{N-j}]}{\text{Tr}(\mathbf{T}')^N} \quad (3.49)$$

$N \rightarrow \infty$  の極限では

$$\langle S_i S_{i+j} \rangle \approx e^2 + gf \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^j \quad (3.50)$$

となる。

まとめると、揺らぎの相関関数は

$$\begin{aligned} G(i, i+j) &= \langle S_i S_{i+j} \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_{i+j} \rangle \\ &= gf \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^j \\ &= gf \exp[-j \ln(\lambda_1/\lambda_2)] \end{aligned} \quad (3.51)$$

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  $\xi$  は

$$\xi = \frac{1}{\ln(\lambda_1/\lambda_2)} \quad (3.52)$$

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

$$\lambda_1 = 2 \cosh K, \quad \lambda_2 = 2 \sinh K \quad (3.53)$$

なので、

$$\xi = \frac{1}{\ln \coth K} \quad (3.54)$$

注意：

1. 相関距離  $\xi$  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

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2N} \sum_{i \neq j} S_i S_j \quad (S_i = \pm 1) \quad (3.55)$$

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)。

$$H = -J \sum_i \sigma_{i,j}^z \sigma_{i+1,j}^z + \sigma_{i,j}^z \sigma_{i,j+1}^z \quad (3.56)$$

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 Field Ising model

$$H = -J \sum_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - h \sum_i \sigma_i^x \quad (3.57)$$

( $\sigma$  はパウリ行列)

→  
 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  $\varphi, \bar{u}_0$  で書き直す。

を行う。

### 4.1.1 段階1

まず  $\mathcal{H}_{\text{eff}}$  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、

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

と言う関係より、オーダーパラメーター  $\phi$  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  $\eta$  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  $\nu$  の考察からも同様な不一致が見られる。相関距離  $\xi$  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  $\xi$  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  $\Lambda^{-1}$ ) 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  $\xi$  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  $\nu$  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)  $\theta$  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  $\xi$  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  $\xi$  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限り、 $F(a/\xi)$  の関数の中の  $a/\xi$  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.

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

( $\sigma$  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。この様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 $\alpha, \beta, \gamma$ の関係

まずゼロ磁場での臨界指数  $\alpha, \beta, \gamma$  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、 $\chi_T \propto |t|^{-\gamma}$  と比較すると

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

(4.36)  $\times 2 -$  (4.38) として  $\Delta$  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 $\beta, \gamma, \delta$ の関係

次に臨界温度上  $t = 0$  での有限磁場での臨界指数  $\delta$  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  $\delta$  の定義 ( $m \propto |h|^{1/\delta}$ ) 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  $\nu, \eta$  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 繰り込み群概説

スケーリング理論では、臨界現象をマクロに現象論的に扱い、臨界指数間の関係を導いた。これに対し繰り込み群ではミクロなモデルから臨界現象を導き、臨界指数などを計算する。繰り込み群には摂動論的繰り込み群など複数の手法があるが、この章では、実空間繰り込み群としてブロックスピン変換から紹介する。ブロックスピン変換は系統的な計算には向いてないが、直感的なので繰り込み群の概念の説明には適している。また、臨界固定点の概念や relevant, irrelevant, marginal など説明する。

### 5.1 ブロックスピン変換

平均場近似では系全体のオーダーパラメーターの平均を一度にとっていた。これに対し、部分的にオーダーパラメーターの平均をとってこよう。そのままでは扱い難いので元のモデルと同じオーダーパラメーターで表すようにするが、各相互作用の結合定数は変化する。このような操作を繰り返し行うことで、臨界現象の性質を調べることができる。特に臨界点はこのような変換で不変なものに対応する。

具体例として、2次元正方格子上的イジングスピンで、各々9個のスピンを含む  $3 \times 3$  の複数のブロックへの分割をかんがえる。それぞれのブロックに対して、新に  $s' = \pm 1$  の変数を取り、ブロック内の複数のスピンの上向きが多い場合  $s' = +1$ 、それ以外は  $s' = -1$  とする。

元々のモデルは次の分配関数で記述される。

$$Z = \text{Tr}_s \exp(-\mathcal{H}(s)) \quad (5.1)$$

ただし、温度  $T$  は、 $K = J/k_B T$  のようにして換算結合定数に組み入れている。多数決のルールは、次のような射影演算子

$$T(s; s_1, \dots, s_9) = \begin{cases} 1 & s' \sum_i s_i > 0 \text{ の場合} \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases} \quad (5.2)$$

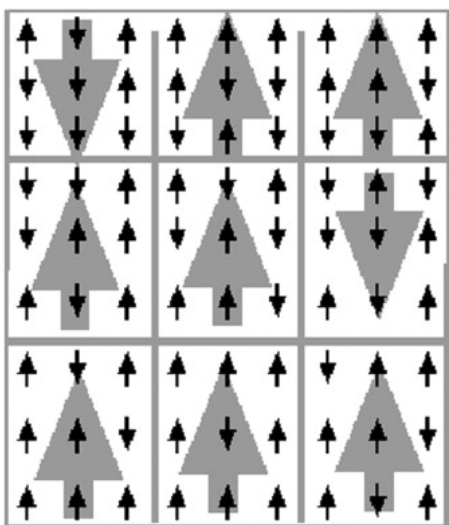


図 5.1: ブロックスピン変換、 $3 \times 3$  のブロック単位で多数決で新たなスピン変数を決める

をトレースにはさむことで実現される。このとき、新しい換算ハミルトニアンを以下のように定義する。

$$\exp(-\mathcal{H}'(s')) \equiv Tr_s \prod_{blocks} T(s'; s_i) \exp(-\mathcal{H}(s)) \quad (5.3)$$

注意すべきこととして、 $\sum_{s'} T(s'; s_i) = 1$  なので、

$$Tr_{s'} \exp(-\mathcal{H}'(s')) = Tr_s \exp(-\mathcal{H}(s)) \quad (5.4)$$

つまり分配関数は元のもの、ブロックスピン変換後のもので同一である。

換算ハミルトニアン  $\mathcal{H}$  の複数の結合定数を  $\{K\} \equiv \{K_1, K_2, \dots\}$  とベクトルのように表す。仮に元のモデルでは最近接相互作用の項  $K_1$  しかなく他の結合定数は  $K_i = 0$  としても、繰り込み変換後には他の相互作用が生じる。そこで繰り込み群変換によって、全ての可能な結合定数の組の変換を考え、

$$\{K'\} = \mathcal{R}(\{K\}) \quad (5.5)$$

と表す。イジングモデルでは、 $s \rightarrow -s$  で不変な相互作用 ( $\sum_j s_j s_{j+1}$  のような偶数の  $s$  の積からなる項) にたいする偶の結合定数と、奇の結合定数 ( $\sum_j s_j$  のような奇数の  $s$  の積からなる項) に分けられる。最初に奇の結合定数が無ければ、繰り込み変換しても奇の結合定数はでてこない。



## 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。

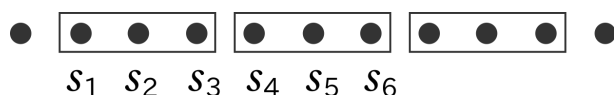


図 5.2: 1次元イジングモデルの隣接する2つのブロック

図 5.2 のように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

$$\exp(K s_2 s_3) \exp(K s_3 s_4) \exp(K s_4 s_5) = \exp(K s'_1 s_3) \exp(K s_3 s_4) \exp(K s_4 s'_2) \quad (5.6)$$

ところで、 $s_3 s_4 = \pm 1$  を考慮すると

$$\exp(K s_3 s_4) = \cosh K + s_3 s_4 \sinh K = \cosh K (1 + x s_3 s_4), \quad (x \equiv \tanh K) \quad (5.7)$$

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、(5.6) は

$$\begin{aligned} & (\cosh K)^3 (1 + x s'_1 s_3) (1 + x s_3 s_4) (1 + x s_4 s'_2) \\ &= (\cosh K)^3 (1 + x s'_1 s_3 + x s_3 s_4 + x s_4 s'_2 + x^2 s'_1 s_3 s_3 s_4 + x^2 s_3 s_4 s_4 s'_2 + x^2 s_4 s'_2 s'_1 s_3 + x^3 s'_1 s_3 s_3 s_4 s_4 s'_2) \end{aligned} \quad (5.8)$$

となる。 $s_3 = \pm 1$  と  $s_4 = \pm 1$  について和をとると、例えば

$$\begin{aligned} & \sum_{s_3=\pm 1} s'_1 s_3 = s'_1 (1 - 1) = 0, \\ & \sum_{s_3=\pm 1} \sum_{s_4=\pm 1} s'_1 s_3 s_3 s_4 = \sum_{s_3=\pm 1} s'_1 s_3 s_3 \sum_{s_4=\pm 1} s_4 = \sum_{s_3=\pm 1} s'_1 s_3 s_3 (1 - 1) = 0 \end{aligned}$$

のようになるので、 $s_3, s_4$  について偶数次の項のみ残り、また  $(s_3)^2 = (s_4)^2 = 1$  なので、(5.8) を  $s_3, s_4$  について和をとったものは

$$2^2(\cosh K)^3(1 + x^3 s'_1 s'_2) \quad (5.9)$$

となる。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 ((5.7) と同様な操作)。ただし、

$$K' = \tanh^{-1} [(\tanh K)^3] \quad (5.10)$$

である。結局、系全体の分配関数は、ブロックスピン変換後の形  $Z = \text{Tr}_{s'} \exp(-\mathcal{H}'(s'))$  で表された。ここで、 $\mathcal{H}'(s')$  は

$$\mathcal{H}'(s') = Ng(K) - K' \sum_i s'_i s'_{i+1} \quad (5.11)$$

また  $N$  は元の全サイト数で、

$$g(K) = -\frac{1}{3} \ln \left[ \frac{(\cosh K)^3}{\cosh K'} \right] - \frac{2}{3} \ln 2 \quad (5.12)$$

である。

変数  $x = \tanh K$  で扱おうと、繰り込み群方程式 (5.10) は

$$x' = x^3 \quad (5.13)$$

と単純化される。 $K = J/k_B T$  から、高温極限 ( $T \rightarrow \infty, K \rightarrow 0$ ) は  $x \rightarrow 0+$  に対応し、低温極限は  $x \rightarrow 1-$  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。このことは、長距離の自由度は有効温度が高温のハミルトニアンで記述されることを意味し、相関距離有限の常磁性相にあたる。 $x < 1$  に当たる系は最終的にこの領域に繰り込まれるので、この領域全体が常磁性と結論できる。ちょうど  $x = 1 (T = 0)$  だけが例外である。

繰り込み群としては、 $x = 0$  と  $x = 1$  に**固定点 (fixed point)** があるが、 $x = 1 (T = 0)$  は不安定固定点で、 $x = 0 (T = \infty)$  は安定固定点にあたる。 $x = \tanh K$  ということと、 $K = J/k_B T$  を考慮すると、 $x = 0$  は  $K = 0 (T = \infty)$  の高温極限、 $x = 1$  は  $K = \infty (T = 0)$  の低温極限に対応するので、繰り込み群の流れは図 5.3 のようになる。

相関長自体は繰り込み群変換で変わらない。しかし、格子間隔  $a$  で計った無次元の相関長は、ブロックスピン変換で基準となる格子間隔が変わ

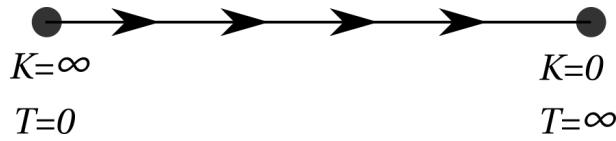


図 5.3: 1次元イジングモデルの繰り込み群の流れ

るので、変化する。この節で扱った例では、ブロック変換のスケール変換因子  $b = 3$  である。無次元の相関長は、ブロック変換で

$$\xi(x') = b^{-1}\xi(x), \quad (5.14)$$

にしたがって変換する。ここで  $x' = x^b$  である。 $\xi(x^b) = b^{-1}\xi(x)$  の解は

$$\xi(x) = \frac{C}{\ln x} = \frac{C}{\ln \tanh K} \quad (5.15)$$

である。この相関距離は、転送行列の方法で求めたもの (3.54) と係数を除いて一致している。相関距離  $\xi$  は有限だが、低温極限では

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{C}{\ln(\tanh K)} \approx \frac{C}{\ln(1 - 2\exp(-2K))} \approx \frac{C}{-2\exp(-2K)} \\ &= C' \exp(2J/(k_B T)) \end{aligned} \quad (5.16)$$

のように急激に大きくなる。

### 5.2.2 高次元

高次元では、高温極限  $K = 0$  が安定固定点は一次元と同じだが、1次元とは異なり低温極限  $K = \infty$  は安定固定点になる。1次元での低温極限 ( $K \rightarrow \infty$ ) でのブロック繰り込み変換は、(5.10) から  $K' \approx K - \frac{1}{2} \ln 3$  であったが、これは低温極限ではスピンのほとんど揃っているためである。

2次元で低温極限ではスピンのほとんど揃っているので、スケールファクター  $b$  でブロックスピン変換すると図 5.4 のようにブロック界面近くのスピンによる寄与が主なので  $K' \approx bK$  となる。これを一般化すると  $d$  次元では

$$K' \approx b^{d-1}K, \quad (\text{as } K \rightarrow \infty) \quad (5.17)$$

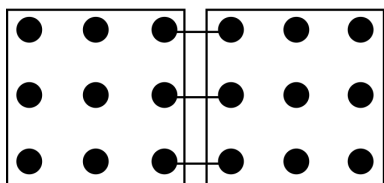


図 5.4: 隣接する 2 次元ブロックでの界面相互作用

となる。これから  $d > 1$  では  $K' > K$  で  $K^{-1} = 0$  が安定固定点になる。一般に次元  $d$  が下がるほど秩序は起きにくくなり、特定のユニバーサリティクラスである次元以下で秩序が起きなくなるが ( $d \leq d_l$ ), この  $d_l$  を下部臨界次元 (lower critical dimension) と呼ぶ。イジングモデルのように離散的対称性の場合、 $d_l = 1$  だが、連続的対称性の場合には  $d_l = 2$  である。

イジングモデルで  $d > 1$  では、低温極限  $K = \infty (T = 0)$  と高温極限  $K = 0 (T = \infty)$  の両方が安定固定点なので、繰り込み群の流れからすると、有限温度で不安定固定点が必要にならない (図 5.5)。この繰り込

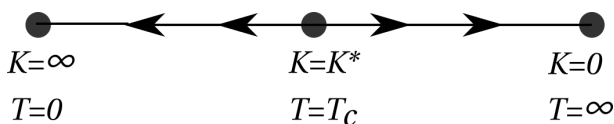


図 5.5: 高次元イジングモデルの繰り込み群の流れの概念図

み固定点は臨界点に対応する。これを確認するため、相関距離の繰り込み  $\xi(K) = b\xi(K')$  を考える。高温側の換算結合定数  $K_0$  に対応するある温度で、相関距離  $\xi = \xi_0 = O(1)$  となるとする。繰り込み固定点から高温側の  $K < K^*$  から始めて、 $K_0$  近くに到達するまでに繰り込み変換を  $n(K)$  回繰り返したとする。すると、 $\xi(K) = \xi_0 b^{n(K)}$  となる。  $K$  が固定点  $K^*$  に近づくとつれ、それぞれの繰り込み変換での  $K$  の変化は非常に小さくなり、したがって  $n(K)$  は大きくなる。  $K \rightarrow K^*$  で  $n(K) \rightarrow \infty$  なので、 $\xi(K) \rightarrow \infty$  となり、これは臨界点を意味する。

さらに固定点近くでの繰り込み群変換を調べると臨界指数  $\nu$  が求められる。不安定固定点は定義から  $K^* = \mathcal{R}(K^*)$  である。  $K - K^*$  が充分小

さいとき

$$\begin{aligned}
 K' \equiv \mathcal{R}(K) &= \mathcal{R}(K^* + (K - K^*)) \\
 &\approx \mathcal{R}(K^*) + (K - K^*)\mathcal{R}'(K^*) \\
 &= K^* + \exp(\ln(\mathcal{R}'(K^*))) (K - K^*) \\
 &= K^* + \exp(y \ln b) (K - K^*) = K^* + b^y (K - K^*) \quad (5.18)
 \end{aligned}$$

と書ける。ここで  $y \equiv \ln \mathcal{R}'(K^*) / \ln b$  と定義している。ところで、相関距離  $\xi$  は臨界点近くで

$$\xi(K) \approx A(K - K^*)^{-\nu} \quad (5.19)$$

とふるまう。 $\xi(K) = b\xi(K')$  に代入し、(5.18) を使うと

$$A(K - K^*)^{-\nu} = bA(K' - K^*)^{-\nu} = bA(b^y(K - K^*))^{-\nu} = b^{1-y\nu}A(K - K^*)^{-\nu} \quad (5.20)$$

で、 $\nu = 1/y$  となる。これは、臨界指数が固定点近くの繰り込み群変換の微分で与えられるという例になっている。

しかし、1次元とは違い、高次元では繰り込みの過程で次近接相互作用などが現れる。例えば図 5.6 で、ブロック 2 の角のスピンの和をとることを考えると、ブロック 1 やブロック 3 のスピンと結合しているので、ブロック変換後のスピンでは次近接相互作用が生じる。したがって、図 5.5 のようなパラメーター一個の繰り込み群の流れは単純化しすぎである。

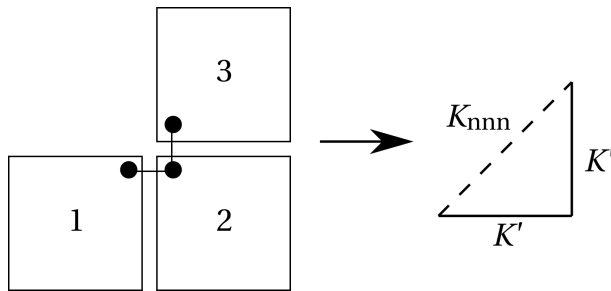


図 5.6: 繰り込み変換での次近接相互作用

## 5.3 一般論

この節では、可能な全ての結合定数の空間で、繰り込み群固定点が1つ存在するという一般的な前提からの結論を調べてみる。繰り込み群変換は

$\{K'\} = \mathcal{R}(\{K\})$  の形で表される。 $\mathcal{R}$  は変換手法によるし、また距離をスケールしなおすパラメーター  $b$  による。繰り込み固定点  $\mathcal{R}(\{K^*\}) = \{K^*\}$  が一つ存在するとしよう。繰り込み群変換  $\mathcal{R}$  が固定点で微分可能として、固定点近傍で繰り込み群方程式を以下のように線形化する。

$$K'_a - K_a^* \approx \sum_b T_{ab}(K_b - K_b^*) \quad (5.21)$$

ここで

$$T_{ab} = \left. \frac{\partial K'_a}{\partial K_b} \right|_{K=K^*} \quad (5.22)$$

行列  $T$  の固有値を  $\lambda^i$ 、対応する左固有ベクトルを  $e^i$ 、つまり

$$\sum_a e_a^i T_{ab} = \lambda^i e_b^i \quad (5.23)$$

とする ( $T_{ab}$  は対称行列とは言えないので、右固有ベクトルと左固有ベクトルは異なる)。

ここで、**スケール変数 (scaling variables)** を

$$u_i \equiv \sum_a e_a^i (K_a - K_a^*) \quad (5.24)$$

と定義する。すると、

$$\begin{aligned} u'_i &= \sum_a e_a^i (K'_a - K_a^*) \\ &= \sum_{a,b} e_a^i T_{ab} (K_b - K_b^*) \\ &= \sum_b \lambda^i e_b^i (K_b - K_b^*) = \lambda^i u_i \end{aligned} \quad (5.25)$$

である。ここで、

$$\lambda^i = b^{y_i} \quad (5.26)$$

で定義される量  $y_i$  を導入すると便利である。 $y_i$  は繰り込み群の固有値とよばれ、後で述べるように臨界指数と関係する。以下の3つの場合を区別する。

- $y_i > 0$

スケーリング変数  $u_i$  は **relevant** と呼ばれ、繰り込み群変換を繰り返すと固定点から  $u_i$  は遠ざかる。

- $y_i < 0$

$u_i$  は **irrelevant** と呼ばれ、固定点に近いところから出発して、繰り込み群変換を繰り返すと  $u_i$  は 0 に向かう。

- $y_i = 0$

$u_i$  は **marginal** と呼ばれる。線形化された繰り込み群方程式からは、固定点に近づくか遠ざかるかは判定できない。このような例は、4次元でのイジングモデルや、2次元の XY モデルでの Berezinskii-Kosterlitz-Thouless 転移などにみられる。

$n$  個の relevant な固有値を持つ固定点を考える。固定点近くで、結合定数は  $n'$  個の次元を持つものとする。すると  $(n' - n)$  個の irrelevant な固有値があることになり、固定点近傍で  $(n' - n)$  次元の超曲面上の点が固定点に流れ込む。固定点近傍では irrelevant な固有値によって張られる線形空間だが、連続性から固定点まわりの有限な領域でこの超曲面が存在すると期待される。これは臨界面 (critical surface) と呼ばれる。というのも、この超曲面上の各点に対応する系の長距離の性質は、固定点によって支配され、そこでの相関距離は無限大になるからである。

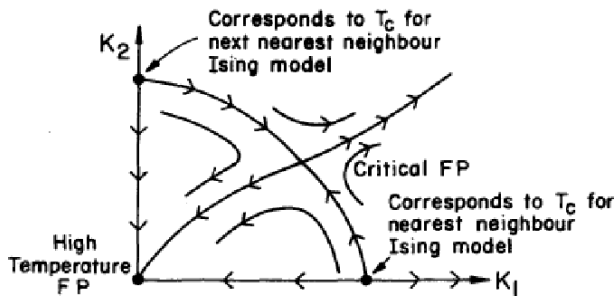


図 5.7:

磁場 0 の場合限定して、relevant と irrelevant なスケーリング変数の振る舞いを例示する。 $K_1$  を最近接相互作用の結合定数、 $K_2$  を次近接相互作用の結合定数とする。relevant な固有値が 1 つ、irrelevant な固有値が 1 つの場合の臨界固定点近傍の繰り込み群の流れは図 5.7 のようにな

る。この例で、固定点に引き寄せられる点の集合は曲線をなすが、これは臨界面の例である。

このようにすると、ユニバーサリティクラスは、ある特定の固定点に流れ込む全ての臨界モデルからなる事になる。異なるユニバーサリティクラスには、異なる固定点に対応する。

## 5.4 自由エネルギーのスケーリング

短距離相互作用のイジングモデルの臨界現象を考える。この場合は relevant な熱的スケーリング変数  $u_t$  で固有値  $y_t$  のもの1つと、relevant な磁場のスケーリング変数  $u_h$  で固有値  $y_h$  のもの1つがある。relevant な変数  $(u_t, u_h)$  は、臨界固定点  $t = h = 0$  で0にならなければならないことと、対称性 ( $h \rightarrow -h$  で  $u_t$  は偶関数、 $u_h$  は奇関数) より

$$u_t = t/t_0 + O(t^2, h^2) \quad (5.27)$$

$$u_h = h/h_0 + O(th) \quad (5.28)$$

と展開できる。ここで、 $t_0$  と  $u_0$  は non-universal な定数である。

繰り込み群変換の性質のひとつに、分配関数を保つということがあった。

$$Z = Tr_s \exp(-\mathcal{H}(s)) = Tr_{s'} \exp(-\mathcal{H}'(s')) \quad (5.29)$$

結合定数  $\{K\}$  の関数としての、サイト当たりの換算自由エネルギー  $f(\{K\}) \equiv -N^{-1} \ln Z$  を考える。繰り込みの過程で、結合定数は繰り込み群方程式にしたがって変化する。これに加え、定数項  $Ng(\{K\})$  が自由エネルギーに加わる。

$$\exp(-Nf(\{K\})) = \exp(-Ng(\{K\}) - N'f(\{K'\})) \quad (5.30)$$

ここで、 $N' = b^{-d}N$  はブロックの総数である。これから、サイト当たりの自由エネルギーの基本的な変換則は

$$f(\{K\}) = g(\{K\}) + b^{-d}f(\{K'\}) \quad (5.31)$$

である。相関距離とは違い、繰り込み群で自由エネルギーは非斉次に変換する。しかし、自由エネルギーの特異な成分は

$$f_s(\{K\}) = b^{-d}f_s(\{K'\}) \quad (5.32)$$



のように斉次に変換する。固定点近くでは、スケーリング変数で表すことができ、

$$f_s(u_t, u_h) = b^{-d} f_s(b^{y_t} u_t, b^{y_h} u_h) = b^{-nd} f_s(b^{ny_t} u_t, b^{ny_h} u_h) \quad (5.33)$$

となる。最後の表現では、繰り込み群操作を  $n$  回反復している。この反復操作で、変数  $u_t$  と  $u_h$  は増大するので、 $n$  はあまり大きくはできない。そこで、 $|b^{ny_t} u_t| = u_{t0}$  で反復を止めることにする。この式を  $n$  について解くと、 $b^{ny_t} = |u_{t0}/u_t|$  つまり  $b^n = |u_{t0}/u_t|^{1/y_t}$  なので、

$$f_s(u_t, u_h) = |u_t/u_{t0}|^{d/y_t} f_s(\pm u_{t0}, u_h |u_t/u_{t0}|^{-y_h/y_t}) \quad (5.34)$$

物理変数の  $t$  と  $h$  で書き直すと、 $u_{t0}$  は  $t_0$  を定義しなおすことで吸収できるので、

$$f_s(t, h) = |t/t_0|^{d/y_t} \Phi\left(\frac{h/h_0}{|t/t_0|^{y_h/y_t}}\right) \quad (5.35)$$

となる。ここで、 $\Phi$  はスケーリング関数である。(ただし、 $t > 0$  と  $t < 0$  については、別個のスケーリング関数である)

## 5.5 臨界指数

自由エネルギーの特異部分のスケーリング則 (5.35) から、様々な臨界指数が得られる。

スケーリング関数  $\Phi$  は原点で正則である。つまり  $\Phi(0)$  は有限な値をとる。微分  $\Phi'(0), \Phi''(0), \dots$  についても同様である。

### 5.5.1 臨界指数とスケーリング関数

#### 1. 比熱 ( $h = 0$ )

(5.35) を  $t$  で微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} &= (d/y_t) |t/t_0|^{d/y_t-1} \Phi\left(\frac{h/h_0}{|t/t_0|^{y_h/y_t}}\right) \\ &+ |t/t_0|^{d/y_t} (h/h_0) (-y_h/y_t) |t/t_0|^{-y_h/y_t-1} \Phi'\left(\frac{h/h_0}{|t/t_0|^{y_h/y_t}}\right) \end{aligned} \quad (5.36)$$

さらに微分して,  $h = 0$  とすると,

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \right|_{h=0} = (d/y_t)(d/y_t - 1)|t/t_0|^{d/y_t-2}\Phi(0) \quad (5.37)$$

よって比熱の臨界指数  $c \propto |t|^{-\alpha}$  は

$$\alpha = 2 - d/y_t \quad (5.38)$$

## 2. 自発磁化 ( $h = 0$ )

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial f}{\partial h} \right|_{h=0} &= |t/t_0|^{d/y_t}(1/h_0)|t/t_0|^{-y_h/y_t} \Phi' \left( \frac{h/h_0}{|t/t_0|^{y_h/y_t}} \right) \Big|_{h=0} \\ &= |t/t_0|^{(d-y_h)/y_t}(1/h_0)\Phi'(0) \\ &\propto (-t)^{(d-y_h)/y_t} \end{aligned} \quad (5.39)$$

と,  $m \propto (-t)^\beta$  を比較して

$$\beta = \frac{d - y_h}{y_t} \quad (5.40)$$

## 3. 帯磁率

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial h^2} \right|_{h=0} &= \frac{\partial}{\partial h} \left[ |t/t_0|^{(d-y_h)/y_t}(1/h_0)\Phi' \left( \frac{h/h_0}{|t/t_0|^{y_h/y_t}} \right) \right] \Big|_{h=0} \\ &= [|t/t_0|^{(d-y_h)/y_t}(1/h_0)(1/h_0)|t/t_0|^{-y_h/y_t}\Phi''(0)] \\ &\propto |t|^{(d-2y_h)/y_t} \end{aligned} \quad (5.41)$$

と,  $\chi \propto |t|^{-\gamma}$  を比べて,

$$\gamma = \frac{2y_h - d}{y_t} \quad (5.42)$$

## 4. 臨界指数 $\delta$

磁化  $M$  は

$$M = \frac{\partial f}{\partial h} = |t/t_0|^{(d-y_h)/y_t}(1/h_0)\Phi' \left( \frac{h/h_0}{|t/t_0|^{y_h/y_t}} \right) \quad (5.43)$$

である。有限磁場  $h \neq 0$  で  $t \rightarrow 0$  とすると、 $\Phi'()$  の関数の引数の  $\frac{h/h_0}{|t/t_0|^{y_h/y_t}}$  が発散している。そこで

$$\Phi'(x) \propto x^\Delta, \quad (x \rightarrow \infty) \quad (5.44)$$

と仮定しよう。すると、

$$M \propto |t/t_0|^{(d-y_h)/y_t} \left( \frac{h/h_0}{|t/t_0|^{y_h/y_t}} \right)^\Delta = |t/t_0|^{(d-y_h)/y_t - \Delta y_h/y_t} (h/h_0)^\Delta \quad (5.45)$$

となる。 $(d - y_h) - \Delta y_h < 0$  の場合、 $t \rightarrow 0$  で  $M$  が発散する。一方  $(d - y_h) - \Delta y_h > 0$  では、 $t \rightarrow 0$  で  $M$  は 0 になる。したがって  $M$  が 0 でない有限値に留まるためには、

$$\Delta = (d - y_h)/y_h \quad (5.46)$$

でなければならない。したがって  $t = 0$  で

$$M \propto h^\Delta = h^{(d-y_h)/y_h} \quad (5.47)$$

$M \propto |h|^{1/\delta}$  と比較して

$$\delta = \frac{y_h}{d - y_h} \quad (5.48)$$

### 5.5.2 臨界指数間の関係式

以上の関係式から  $y_t, y_h$  および  $d$  を消去しよう。

1. (5.40) と (5.42) から、 $y_h$  を消去すると

$$2\beta + \gamma = \frac{d}{y_t} \quad (5.49)$$

である。さらに (5.38) を使うと  $y_t$  も消去でき臨界指数間の関係式

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 - \frac{d}{y_t} + \frac{d}{y_t} = 2 \quad (5.50)$$

が得られる。

2. (5.48) から

$$1 + \delta = 1 + \frac{y_h}{d - y_h} = \frac{d}{d - y_h} \quad (5.51)$$

が得られる. これと (5.40) から

$$\beta(1 + \delta) = \frac{d - y_h}{y_t} \frac{d}{d - y_h} = \frac{d}{y_t} \quad (5.52)$$

さらに (5.38) をつかうと

$$\alpha + \beta(1 + \delta) = 2 \quad (5.53)$$

を満たしている。

### 5.5.3 リスケールファクター $b$ の意味

ブロックスピン変換では変換後の格子は元の格子と同じ耕造でなければならぬので, スケーリング因子  $b$  は強く制約を受けている。

しかし摂動論的繰り込み群など他の方法を使う場合は, スケーリング因子  $b$  を任意にとることができる. そこで無限小変換の極限  $b = 1 + \delta l$  で  $\delta l \ll 1$  を扱うと役に立つ. この時結合定数  $\{K\}$  は

$$K_a \rightarrow K_a + \frac{dK_a}{dl} \delta l + O(\delta l^2) \quad (5.54)$$

と変換する. 繰り込み群方程式は

$$\frac{dK_a}{dl} = -\beta_a(\{K\}) \quad (5.55)$$

という微分方程式の形になる.

$$T_{ab} = \delta_{ab} - \frac{\partial \beta_a}{\partial K_b} \delta l \quad (5.56)$$

$$(1 + \delta l)^{y_i} \approx 1 + y_i \delta l \quad (5.57)$$

$$-\frac{\partial \beta_a}{\partial K_b} \quad (5.58)$$

## 5.6 相関関数の繰り込み

自由エネルギーの繰り込みの変換則 (5.31) は、分配関数が繰り込みで不変という事に基づいていた。しかし、長距離自由度の確率分布はすべて繰り込み群で不変であるので、相関関数の長距離の挙動についても同様な変換則が当てはまるはずである。イジングモデルの2点相関関数

$$G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \mathcal{H}) \equiv \langle s(\mathbf{r}_1)s(\mathbf{r}_2) \rangle_{\mathcal{H}} - \langle s(\mathbf{r}_1) \rangle_{\mathcal{H}} \langle s(\mathbf{r}_2) \rangle_{\mathcal{H}} \quad (5.59)$$

の繰り込みを考える。

$G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \mathcal{H})$  は、ハミルトニアンに非一様な磁場を加え、

$$\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} - \sum_{\mathbf{r}} h(\mathbf{r})s(\mathbf{r}) \quad (5.60)$$

自由エネルギーを  $h(\mathbf{r})$  について偏微分することでも求められる。

$$G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{\partial^2}{\partial h(\mathbf{r}_1)\partial h(\mathbf{r}_2)} \ln Z(h) \Big|_{h(\mathbf{r})=0} \quad (5.61)$$

繰り込まれたハミルトニアンは同じ形

$$\mathcal{H}'(s') - \sum_{\mathbf{r}'} h'(\mathbf{r}')s'(\mathbf{r}') \quad (5.62)$$

になる (ここで  $h'(\mathbf{r}') = b^{y_h}h(\mathbf{r})$  である)。繰り込み群は、全体としての分配関数を保つので、

$$\frac{\partial^2 \ln Z'(h')}{\partial h'(\mathbf{r}'_1)\partial h'(\mathbf{r}'_2)} = \frac{\partial^2 \ln Z(h)}{\partial h(\mathbf{r}_1)\partial h(\mathbf{r}_2)} \quad (5.63)$$

この等式の両辺を吟味する。左辺は繰り込まれたハミルトニアン  $\mathcal{H}'$  で定義されたアンサンブルでのブロックスピンの相関関数に他ならない。格子間隔単位で測ったとき、各点の距離はファクター  $b$  だけ縮小される。したがって左辺は  $G((\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/b, \mathcal{H}')$  となる。右辺については、以下のように考える。ブロック1で局所的に微小変換  $h'(\mathbf{r}'_1) \rightarrow h'(\mathbf{r}'_1) + \delta h'(\mathbf{r}'_1)$  を行う。これはこのブロック内のスピンにかかる磁場  $h(\mathbf{r}_i)$  を  $\delta h(\mathbf{r}_i) = b^{-y_h}\delta h'(\mathbf{r}'_1)$  だけ変化させることに対応する。ということで、右辺は

$$b^{-2y_h} \langle (s_1^{(1)} + s_2^{(1)} + \dots)(s_1^{(2)} + s_2^{(2)} + \dots) \rangle_{\mathcal{H}} \quad (5.64)$$

となる。ここでブロック1内のスピンを  $s_i^{(1)}$  , ブロック2内のスピンを  $s_i^{(2)}$  とした。各ブロックには  $b^d$  個のスピンのがあるので、(5.64) は  $b^{2d}$  個の2点相関関数の和になる。 $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \gg b$  ならば、これらの相関関数はほとんど等しい。したがって、固定点近くの相関関数の変換則は

$$G((\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)/b, \mathcal{H}') = b^{2(d-y_h)} G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \mathcal{H}) \quad (5.65)$$

となる。相互作用が等方的なら、相関関数は距離  $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  のみによる。

臨界点近くで、一様磁場を  $h = 0$  とすると、

$$G(r, t) = b^{-2(d-y_h)} G(r/b, b^{y_t} t) \quad (5.66)$$

となる。自由エネルギーの場合と同様に、この式による繰り込み操作を  $n$  回反復するが、 $b^{ny_t}(t/t_0) = 1$  で止める。そうすると

$$G(r, t) = |t/t_0|^{2(d-y_h)/y_t} \Psi(r/|t/t_0|^{-1/y_t}) \quad (5.67)$$

が得られる。

$t \neq 0$  で  $r \gg 1$  ならば、相関関数  $G$  は  $\exp(-r/\xi)$  とふるまうはずである。(5.67) から  $\xi \propto |t|^{-1/y_t}$  になるので、

$$\nu = 1/y_t \quad (5.68)$$

臨界点  $t = 0$  では、(5.66) を  $r/b^n = O(r_0)$  となるまで繰り返す。すると、 $G(r) \propto r^{-2(d-y_h)}$  となるので、

$$\eta = d + 2 - 2y_h \quad (5.69)$$

相関関数の臨界指数  $\nu, \eta$  と他の臨界指数の関係は

$$\alpha = 2 - d\nu \quad (5.70)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (5.71)$$

となる。

以上の結果を導いた前提には、ハミルトニアンの相互作用距離が充分短距離ということがある。長距離相互作用の場合には成り立たない。

## 5.7 問題

1. (a)

$$\exp(K' s'_1 s'_2) \quad (5.72)$$

を, (5.7) と同じような方法で式変形しなさい. 次に  $K'$  として (5.10) を代入しなさい.

(b) (5.11) と (5.12) をつかって,

$$Tr_{s'} \exp(-\mathcal{H}'(s')) \quad (5.73)$$

を計算しなさい.





## 付録A 鞍点法 (saddle point method)

鞍点法は、最急降下法 (method of steepest descents) ともよばれる。  
次の積分

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(\lambda f(x)) dx \quad (\text{A.1})$$

を扱おう。ここで  $f(x)$  は

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} f(x) < 0 \quad (\text{A.2})$$

という関数で、 $\lambda$  は十分大きな正の実数である。

### 1. 極大が1つの時

$f(x)$  を極大点  $x_0$  近傍で展開すると、1次の微係数は0、2次の微係数は負なので

$$f(x) \approx f(x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^2 f''(x_0) = f(x_0) - \frac{1}{2}(x - x_0)^2 |f''(x_0)| \quad (\text{A.3})$$

これを  $I(\lambda)$  に代入してガウス積分を行うと、

$$\begin{aligned} I(\lambda) &\approx \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\lambda f(x_0) - \frac{\lambda}{2}(x - x_0)^2 |f''(x_0)|\right) dx \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda |f''(x_0)|}} \exp(\lambda f(x_0)) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

- (a) 積分を複素変数に拡張すると、 $z = x_0$  は実軸方向には関数  $f(z)$  の極大だが、虚軸方向では極小で、馬の鞍のような形状をしているので鞍点法と呼ばれる。

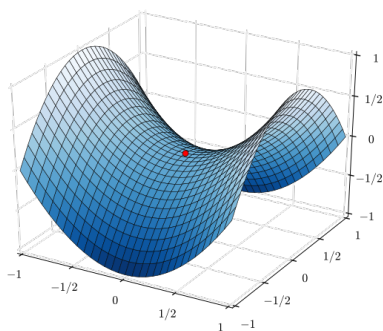


図 A.1: 鞍点の例:  $z = x^2 - y^2$  のグラフ

(b) 3次以上の微分の寄与は  $\lambda \rightarrow \infty$  では無視できる。例えば3次まで展開すると

$$I(\lambda) \approx \exp(\lambda f(x_0)) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{\lambda}{2}(x-x_0)^2 f''(x_0) + \frac{\lambda}{3!}(x-x_0)^3 f'''(x_0)\right) dx \quad (\text{A.5})$$

$x - x_0 = t/\sqrt{|f''(x_0)|\lambda}$  と変数変換すると、

$$I(N) \approx \frac{\exp(\lambda f(x_0))}{\sqrt{|f''(x_0)|\lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{t^2}{2} + \frac{f'''(x_0)}{3!\sqrt{\lambda}|f''(x_0)|^{3/2}} t^3\right) dt \quad (\text{A.6})$$

したがって  $\lambda \rightarrow \infty$  では2次より大きな項は無視してよい。

2. 極大点 ( $f'(x_{0,i}) = 0, f''(x_{0,i}) < 0$ ) を満たす  $x_{0,i}$  が複数のとき

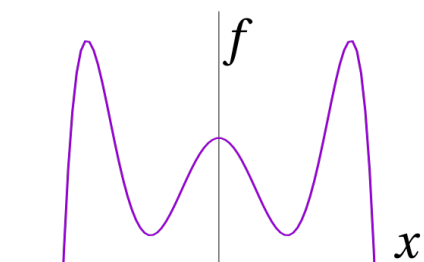


図 A.2: 極大が複数のグラフ

$$I(\lambda) \approx \sum_i \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda|f''(x_{0,i})|}} \exp(\lambda f(x_{0,i})) \quad (\text{A.7})$$

$\lambda \rightarrow \infty$  の極限では

$$\exp(\lambda c_1) + \exp(\lambda c_2) \approx \exp(\lambda c_1) \quad (c_1 > c_2) \quad (\text{A.8})$$

より最大値の寄与のみが残る。さらに最大値に縮退がある場合 ( $f(x_{max,j}) = f(x_{max})$ ) は

$$I(\lambda) \approx \exp(\lambda f(x_{max})) \sum_j \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda|f''(x_{max,j})|}} \quad (\text{A.9})$$



## 付録B 公式

### B.1 双曲線関数

1.

$$\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1 \quad (\text{B.1})$$

$$1 - \tanh^2 x = \frac{\cosh^2 x - \sinh^2 x}{\cosh^2 x} = \frac{1}{\cosh^2 x} \quad (\text{B.2})$$

2. 微分

$$\frac{d}{dx} \sinh x = \cosh x, \quad \frac{d}{dx} \cosh x = \sinh x, \quad (\text{B.3})$$

$$\frac{d}{dx} \tanh x = \frac{d}{dx} \left( \frac{\sinh x}{\cosh x} \right) = \frac{\cosh^2 x - \sinh^2 x}{\cosh^2 x} = \frac{1}{\cosh^2 x} \quad (\text{B.4})$$

3. 逆関数

$$\operatorname{artanh} x = \frac{1}{2} \ln \frac{1+x}{1-x} \quad (\text{B.5})$$

4. Taylor 展開

$$\sinh x = x + \frac{1}{6}x^3 + \frac{1}{120}x^5 + \dots \quad (\text{B.6})$$

$$\cosh x = 1 + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{24}x^4 + \dots \quad (\text{B.7})$$

$$\tanh x = x - \frac{1}{3}x^3 + \frac{2}{15}x^5 + \dots \quad (\text{B.8})$$



## 付録C 多変数 Gauss 積分

多変数のガウス積分は、統計力学の分配関数や場の理論のファインマン経路積分で登場する汎関数 (functional) で、重要な役割を果たす。また、物理以外でも統計学での多変数正規分布 (multivariate normal distribution) で多変数のガウス積分は重要である。

以下、アインシュタインの縮約記法 (同じ項で添字が重なる場合は、その添字について和を取ると言うルール:  $A_{ij}x_j \equiv \sum_j A_{ij}x_j$ ) を使う。

1. この時、次の恒等式が成り立つ。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N \left( \frac{dx_i}{\sqrt{2\pi}} \right) \exp \left( -\frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j \right) = \frac{1}{\sqrt{\det \mathbf{A}}} \quad (\text{C.1})$$

ここで  $\mathbf{A}$  は  $N$  行  $N$  列の実対称行列であり、さらに正定値 (全ての固有値が正値) である。また積分変数  $\mathbf{x}$  は実ベクトルである。

2. 1 次の項を持つ多変数ガウス積分

さらに次の恒等式がなりたつ。

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^N \left( \frac{dx_i}{\sqrt{2\pi}} \right) \exp \left( -\frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j + x_i B_i \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\det \mathbf{A}}} \exp \left( \frac{1}{2} B_i (A^{-1})_{ij} B_j \right) \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

( $\mathbf{A}$  は  $N$  行  $N$  列の実対称行列で正定値、 $\mathbf{B}$  は実ベクトル)。

## C.1 問題

### 1. 多変数ガウス積分

(C.1) の恒等式を示そう。

- (a) 実対称行列  $\mathbf{A}$  はある直交行列により対角化可能である。  
このことを使い、(C.1) 式の左辺は各成分ごとに独立な積分にでき、ガウス積分の積の形であることを示しなさい。また、積分変数  $\mathbf{x}$  はどのように変数変換されるかを答えなさい。  
なお、変数変換のヤコビアンは 1 とする (次で示す)。
- (b) 前問の直交行列による変数変換のヤコビアンが  $\pm 1$  であることを示しなさい。
- (c) ガウス積分を実行し、さらに正方行列  $\mathbf{X}, \mathbf{Y}$  についての関係式

$$\begin{aligned} \det(\mathbf{XY}) &= \det(\mathbf{X}) \det(\mathbf{Y}), \\ \det(\mathbf{X}^{-1}) &= (\det \mathbf{X})^{-1}, \quad \det(\mathbf{X}^T) = \det \mathbf{X} \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

を用いて、(C.1) を示しなさい。

2. (a) 実対称で正定値な行列  $\mathbf{A}$  には逆行列が存在する事を説明しなさい。

- (b) 変数変換  $y_i = x_i - (A^{-1})_{ij} B_j$  を行い、

$$-\frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j + x_i B_i = -\frac{1}{2} y_i A_{ij} y_j + \frac{1}{2} B_i (A^{-1})_{ij} B_j \quad (\text{C.4})$$

を示しなさい。

- (c) 多変数のガウス積分 (C.1) を行い、恒等式 (C.2) を示しなさい。

### 3. Wick の定理

摂動論的繰り込み群や、ファインマンダイアグラムの基本となる Wick の定理について考察する。

- (a) 多重ガウス積分に対する、2点相関関数を

$$\langle x_q x_r \rangle \equiv \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=1}^N \left( \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi}} \right) x_q x_r \exp \left( -\frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j \right)}{\int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=1}^N \left( \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi}} \right) \exp \left( -\frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j \right)} \quad (\text{C.5})$$



と定義する ( $\mathbf{A}$  は  $N$  行  $N$  列の実対称で正定値の係数行列)。このとき、

$$\langle x_q x_r \rangle = (A^{-1})_{qr} \quad (\text{C.6})$$

となることを示そう。

これを示すのに、多変数のガウス積分の以下の恒等式を使う。

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{n=1}^N \left( \frac{dx_n}{\sqrt{2\pi}} \right) \exp \left( -\frac{1}{2} x_i A_{ij} x_j + x_i B_i \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\det A}} \exp \left( \frac{1}{2} B_i (A^{-1})_{ij} B_j \right) \equiv Z(\mathbf{B}) \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

i.

$$\frac{\partial Z(\mathbf{B})}{\partial B_q} \quad (\text{C.8})$$

を計算しなさい。  $\mathbf{B} = 0$  の時、どのような値になるか？  
(ヒント)

$$\frac{\partial B_k}{\partial B_l} = \delta_{kl}, \quad \frac{\partial x_k}{\partial B_l} = 0$$

ii.

$$\frac{\partial^2 Z(\mathbf{B})}{\partial B_q \partial B_r} \quad (\text{C.9})$$

を計算しなさい。

iii. 式 (C.6) を示しなさい。

(b) 4点相関関数について、前問と同様な定義と手順で

$$\langle x_a x_b x_c x_d \rangle = \langle x_a x_b \rangle \langle x_c x_d \rangle + \langle x_a x_c \rangle \langle x_b x_d \rangle + \langle x_a x_d \rangle \langle x_b x_c \rangle \quad (\text{C.10})$$

を示しなさい。