

相転移の統計力学 講義ノート

中西 秀

2018 年 3 月 30 日

目次

第0章	はじめに	5
第1章	相転移現象とその普遍性	7
1.1	物質の三態	7
1.2	磁気相転移	7
1.3	秩序変数と相転移の次数	10
1.4	臨界現象と相転移の普遍性	11
1.5	臨界指数	11
1.5.1	さまざまな臨界指数	13
1.6	相転移の理論の目標	13
1.7	臨界指数の間に成り立つ不等式	13
第2章	相転移の古典論	17
2.1	Van der Waals の非理想気体の理論	17
2.1.1	Maxwell 構築	18
2.1.2	臨界点と対応状態の法則	20
2.1.3	Van der Waals 気体の臨界指数	21
2.1.4	理想 Van der Waals 気体の自由エネルギー	24
2.2	磁気相転移の平均場理論	26
2.2.1	磁性体の格子模型	26
2.2.2	イジング模型の平均場理論	26
2.2.3	平均場理論の臨界指数	28
2.3	対相関関数と Ornstein-Zernike 理論	30
2.3.1	密度密度相関関数	30
2.3.2	密度相関と等温圧縮率	32
2.3.3	密度相関と光散乱	33
2.3.4	Ornstein-Zernike 理論	35
第3章	厳密解の得られる系	39
3.1	1次元イジング模型	39
3.1.1	対スピン相関	40
3.1.2	零磁界帯磁率	41
3.2	1次元系での相転移の不存在性	42
3.3	転送行列の方法	43
第4章	ランダウの古典的現象論	47
4.1	ランダウの自由エネルギー	47
4.2	自由エネルギーのオーダーパラメタ展開	48

4.3	ランダウ理論による臨界指数	49
4.4	空間変化がある場合のランダウ理論	50
4.4.1	空間変化する磁場に対する応答	51
4.4.2	揺動散逸定理	52
4.5	ランダウの現象論の問題点	53
4.5.1	Ginzburg 判定基準	53
第 5 章	スケール理論	55
5.1	一般化同次式	55
5.2	臨界点近傍での磁化の振舞	56
5.3	スケーリング仮設	57
第 6 章	繰り込み群の方法	59
6.1	Kadanoff 構築 : ブロックスピンの方法	59
6.2	繰り込み群の理論の基本的アイデア	63
6.2.1	繰り込み変換	64
6.2.2	繰り込み変換の解釈	67
6.2.3	固定点付近での繰り込み変換の振舞	67
6.2.4	大域的な繰り込み変換の振舞:	69
6.2.5	臨界指数	70
6.3	具体例 : 三角格子上のイジング模型	72
付 録 A	汎関数	77
A.1	汎関数微分	77
A.2	汎関数積分	79

第0章 はじめに

この講義では、特に相転移と臨界現象について議論します。

温度など環境のパラメタを連続的に変化させていった時に系の振舞が突然変化する、いわゆる相転移現象は、物理学の扱う現象の中でも最も劇的で不思議なものの一つです。その理論は、素粒子の場の理論で考案された繰り込みの考え方を転用して発展しました。また逆に、対称性の破れや平均場理論など、物性物理学で発展した相転移現象に関する理論や考え方は素粒子や原子核、宇宙論にも応用されています。

1970年代以降、相転移現象に対する理解が深まるにつれて発展してきた現象論的考え方や、巨視的ユニバーサリティ、異常次元、繰り込み、スケーリングなどの統計物理学上の概念は、相転移の理論を越えて現代物理学全般に深い影響を与えています。伝統的な物理学の自然の理解の仕方は、「巨視的な現象の多様性にもかかわらず、その背景にある微視的自然法則には普遍性がある」というものです。つまり、天上の惑星の運動も、地上のリンゴの運動も、更に分子の運動さえも、見かけは違うが同じ物理法則に従っているというわけです。ところが、相転移現象には「対象の微視的多様性を超えて巨視的現象には普遍性が存在する」ことが見出され、現代物理学の発展に新たな方向性を提示しました。例えば、水と鉄の相転移は微視的にはまったく異なる別の現象であるにもかかわらず、相転移現象の巨視的な側面に注目するとある種の共通性があることが明らかになりました。どのようにして微視的な違いが隠されて、巨視的な振る舞いに普遍性が現れるのでしょうか？ その普遍的な振る舞いにはどのようなものがあるのでしょうか？ これまでの物理学とは逆の方向、即ち巨視的な普遍性の探求です。

また最近では、経済現象や社会現象で見られる恐慌やパニックなどの突然の変化にもある種の普遍性が指摘され、それを相転移や物理学の概念やモデルを使って理解しようという試みも行なわれています。

この講義の基礎となる科目は、熱力学、統計力学 I, II です。受講生はこれらの科目の内容を理解している必要があります。

これは、相転移の統計力学の講義をする為に作った講義ノートです。講義中にノートをとる負担を軽減する為に配布します。講義に出席せずにノートだけを見ても内容は理解できません。講義の内容と合わせて利用して下さい。

また、本格的に勉強するには、このノートだけでは十分ではありません。適当なテキストで勉強されることをお勧めします。

以下に、この講義ノートを作成するのに参考にした本をあげておきます。

- 「相転移と臨界現象」(スタンリー 著、東京図書、1974年)
この講義ノートを作るのにもっとも参考にした教科書。
熱力学、統計力学の復習から、相転移の現象論、古典理論、スケール理論までが比較的良くまとまっている。ただし、繰り込み理論については触れられていない。
- “Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group”
(Nigel Goldenfeld, Addison-Wesley Publishing Company(1992))
繰り込み理論については、この本の第9章を参考にした。繰り込みの解釈や異常次元についての考え方が詳しく述べられている。

その他の参考書

- 「相転移と臨界現象」
(ゲプハルト・クライ 著、吉岡書店)
- 岩波講座 現代物理学の基礎 (第2版) 5 「統計物理学」
(久保亮五・戸田盛和 著、岩波書店)
- “Modern Theory of Critical Phenomena”
(Shang-Keng Ma, Benjamin)
- “Statistical Mechanics of Phase Transitions”
(J.M. Yeomans, Clarendon Press, Oxford (1992))
- “Scaling and Renormalization in Statistical Physics”
(J. Cardy, Cambridge University Press (1996))

比較的最近のレビュー、教科書

- Andrea Pelissetto and Ettore Vicari, Physics Reports 368 (2002) 549-727. “Critical phenomena and renormalization-group theory”
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157302002193>
- 西森秀稔、「相転移・臨界現象の統計物理学」
培風館、2005年、新物理学シリーズ

第1章 相転移現象とその普遍性

1.1 物質の三態

多くの物質は、温度や圧力に応じて気体、液体、固体の3つの相 (*phase*) をとる。いわゆる物質の三態である。それぞれの相の中にも、固体には様々な結晶構造があり、また、液体にも配向秩序を持った液晶相と呼ばれている相をとる物質もある。複数の物質を含む混合系では、それらが混合したり分離したり規則的に配置したりして、いくつもの相をとることもある。温度や圧力などのパラメタを変化させた時に、これらの相の間を突然移り変わる現象を相転移 (*phase transition*) という。

単純な一成分系では、圧力 P 、体積 V 、温度 T で系の状態を記述されるが、平衡状態ではそれらの間に状態方程式と呼ばれる関係があるので、そのうちの2つで系の状態を指定できる。最も一般的には、物質は三態と呼ばれる気体、液体、固体の3つの相をとる。それらの移り変わり、特に、三重点 (*triple point*)、臨界点 (*critical point*)、2相共存、圧縮率 (*compressibility*) の発散などが、 $P - T$ 平面、 $P - \rho$ 平面、 $\rho - T$ 平面で、それぞれどのように表されるか理解することは重要である。

1.2 磁気相転移

固体を構成する磁性原子内には、電子スピンの全体として打ち消されずに残っており、これらのスピンは、量子力学的な相互作用を通じて、隣接するスピンから影響を受けている。温度が高い時には、熱揺らぎのためにそれぞれの原子上のスピンは無秩序な方向を向く、いわゆる常磁性相をとる。しかし、スピン間相互作用のために、温度が低くなるとある温度で突然、スピンの向きがある方向に揃った強磁性や、互い違いの向きになった反強磁性などの秩序相 (*ordered phase*) を示すことがある。

強磁性相では、磁化 M 、外部磁場 H 、温度 T によって系を記述できるが、それらの間にも関係があり、その関係も状態方程式と呼ばれている。外部磁場がない場合 ($H = 0$) には、強磁性物質はキュリー温度で常磁性相から強磁性相へ2次の相転移を示す。強磁性相転移付近の相の振舞を $H - T$ 平面、 $H - M$ 平面、 $M - T$ 平面で表すと、臨界点付近の気体・液体相の相図と似ており、磁場と圧力、磁化と密度が対応している。特に、臨界点での帯磁率 (*susceptibility*) の発散が、気液相転移での圧縮率の発散に対応している。

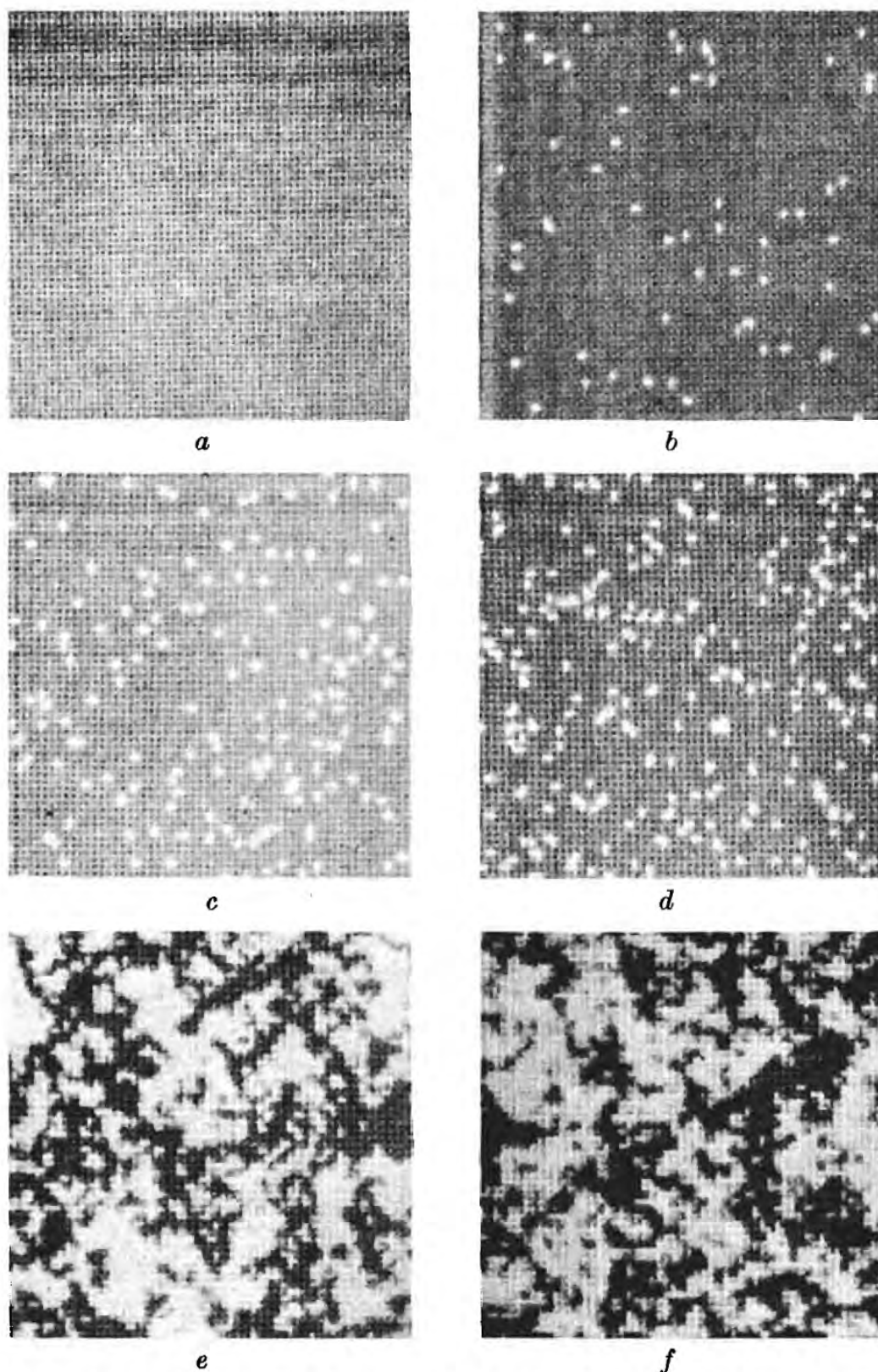


FIG. 1.5. Schematic indication of the lattice-gas model of a fluid system. Fig. 1.4 (which contains 8×20 cells) should be interpreted as representing a relatively small portion of this lattice (which contains 64×64 cells). (a) is the completely ordered state (which exists only at $T = 0$); (b), $T \simeq \frac{1}{4}T_c$; (c), $T \simeq \frac{1}{2}T_c$; (d), $T \simeq \frac{3}{4}T_c$; (e), $T \simeq T_c$; (f), $T \gtrsim T_c$. This illustration and the associated temperatures are to be regarded as purely *schematic*. In fact, the figure was constructed from a computer simulation of the time-dependent aspects of the two-dimensional Ising model and actually represents rather different phenomena (cf. Appendix E). After Ogita *et al.* (1969).

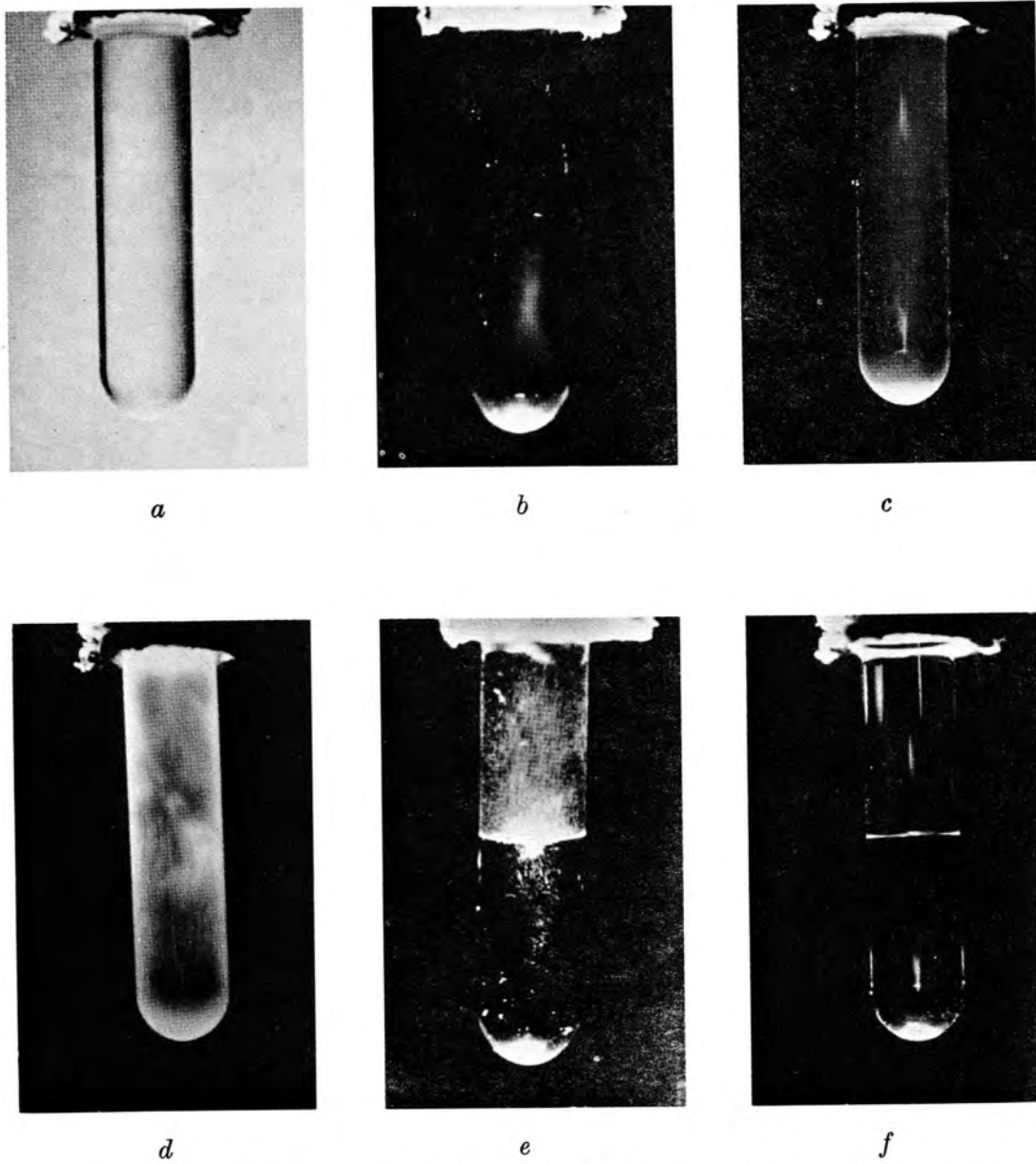


FIG. 1.6. Behaviour of a fluid as the temperature is lowered past the critical temperature: (a), $T \gg T_c$; (b), $T \gtrsim T_c$; (c), $T \simeq T_c$; (d), $T \lesssim T_c$; (e), $T < T_c$; and (f), $T \ll T_c$. The fluid shown is the binary mixture cyclohexane-aniline. After Ferrell (1968).

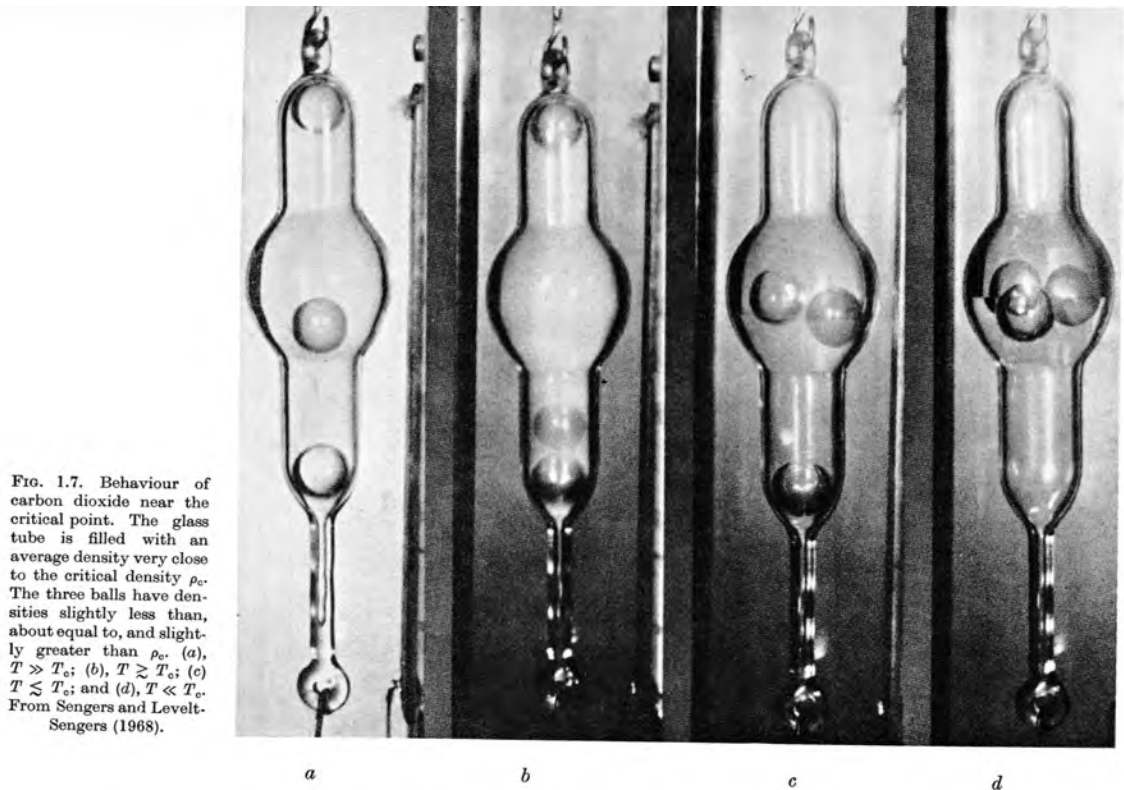


FIG. 1.7. Behaviour of carbon dioxide near the critical point. The glass tube is filled with an average density very close to the critical density ρ_c . The three balls have densities slightly less than, about equal to, and slightly greater than ρ_c . (a), $T \gg T_c$; (b), $T \gtrsim T_c$; (c), $T \lesssim T_c$; and (d), $T \ll T_c$. From Sengers and Levelt-Sengers (1968).

1.3 秩序変数と相転移の次数

相転移点で最も特異な振舞をする物理量を秩序変数 (*order parameter*) あるいはオーダーパラメタという。例えば、強磁性相転移では磁化 M 、気体液体相転移では気相と液相の密度差 $\Delta\rho = \rho_l - \rho_g$ が秩序変数である。しかし、実験により相転移が存在することが明らかでも、何をその相転移の秩序変数ととるべきかは明らかでないこともある。例えば、超伝導相転移は発見されてから理解されるまで半世紀かかったが、理解されるまで秩序変数の実体は不明であった。

一次の相転移 (不連続相転移) では、温度などのパラメタの変化に対して、相転移点で秩序変数が不連続に変化する。一般に、潜熱 (*latent heat*) が発生するのが特徴である。臨界点以外での気体液体相転移、気体や液体から固体への相転移は一次の相転移である。それに対して二次の相転移 (連続相転移) では、転移点での特異性がそれより弱く、秩序変数の値にはとび (不連続性) がない。臨界点での気体液体相転移、外部磁場がゼロでの強磁性相転移などがその例である。二次の相転移点近傍では物理量の揺らぎが大きくなり、相転移点で圧縮率や帯磁率などの感受率 (*susceptibility*) が発散する。このような二次の相転移点近傍で起こる現象を臨界現象 (*critical phenomena*) と呼ぶ。

相転移の多くは、系の対称性が自発的に破れる現象 (*spontaneous symmetry breaking*) とみなせる。すなわち、系が本来持っていた対称性が平衡状態で破れてしまうのである。強磁性相転移を例にとると、もともと系は電子スピンの全体としてどちらを向いても同等であるにも関わらず、強磁性相ではスピンの特定の方向に揃った状態が平衡状態として実現してしまう。もちろん、系に異方性がない場合にはどの向きにスピンの揃

た強磁性相も同確率で現れ、その意味では系の対称性は維持されている。しかし、実際に実現する状態はある特定の方向を向いた状態になるので、実現した状態ではスピンの向きについての対称性が破れている。

1.4 臨界現象と相転移の普遍性

臨界点近傍での磁性体の様子を、イジング模型の計算機シミュレーションで見てみる。すると、さまざまな大きさのスピンの向きが揃ったクラスターが現れたり消えたりしている様子が見られる。クラスターは局所的なスピンの揺らぎを表している。このクラスターの平均サイズは臨界点に近づくにしたがって大きくなり、臨界点で無限大(巨視的な系の大きさ程度)に発散している。同様な揺らぎの発散は気体液体相転移の臨界点近傍でも現れる。この場合はさまざまなサイズの密度の大きな領域や小さな領域が現れて、時間空間的に密度の揺らぎが大きくなる。この密度揺らぎは実験的には臨界タンパク光 (*critical opalescence*) と呼ばれる光散乱として観察される。

この揺らぎの発散が、臨界点での感受率の発散と関係があることを、後で詳しく議論する。つまり、「臨界現象とは臨界点近傍での大きな揺らぎが関わる現象である」といってもよい。

相転移が起こる相転移点あるいは臨界点の位置は物質によって異なる。例えば、鉄とニッケルはどちらも強磁性相転移を示すが、臨界温度(キュリー温度)は異なる。すなわち、臨界点の位置は普遍的ではない。一方、以下で議論するように、揺らぎの発散に関係する、臨界点近傍でのさまざまな物理量の特異な振る舞いについては、具体的な物質や、場合によっては相転移の種類を越えた共通の性質が見出され、それが相転移の普遍性 (*universality of phase transition*) と呼ばれている。

1.5 臨界指数

臨界点 T_c 近傍での物理量の振舞の特異性は臨界指数 (*critical exponent*) と呼ばれる指数で特徴づけられている。例えば、強磁性相転移点直下での自発磁化 M の温度依存性は、臨界指数 β を用いて、

$$M \propto (-\varepsilon)^\beta; \quad \varepsilon \equiv \frac{T - T_c}{T_c} \quad (1.1)$$

流体	T_c (K)	P_c (atm)	ρ_c (g cm ⁻³)	磁性体	T_c (K)
水	647.5	218.5	0.325	Co	1388
アルコール	516.6	63.1	0.28	Fe	1043
エーテル	467.0	35.5	0.26	Ni	627
CO ₂	304.20	72.8	0.46		
Xe	289.75	57.64	1.105		

表 1.1: 流体の臨界点と磁性体のキュリー温度

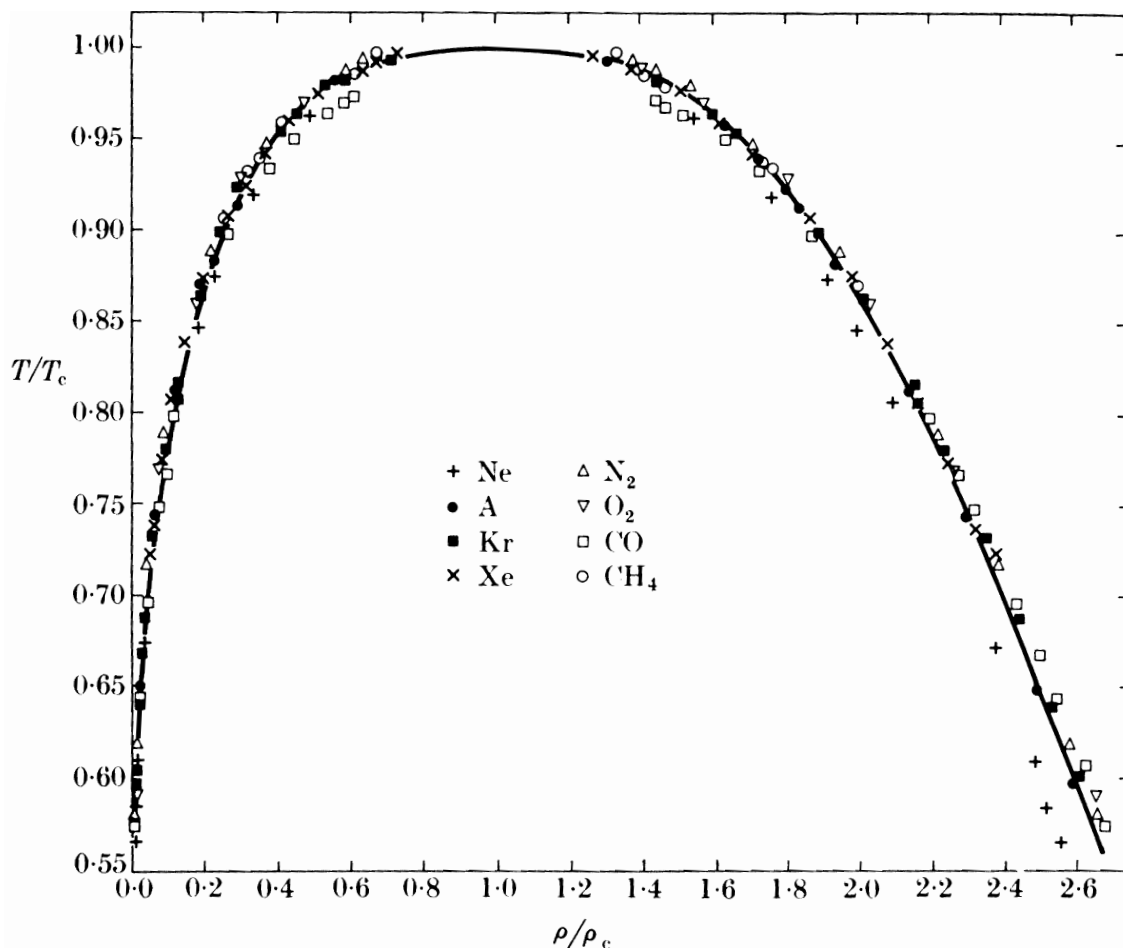


FIG. 1.8. Measurements on eight fluids of the coexistence curve (a reflection of the $P\rho T$ surface in the ρT plane analogous to Fig. 1.3). The solid curve corresponds to a fit to a cubic equation, i.e. to the choice $\beta = \frac{1}{3}$, where $\rho - \rho_c \sim (-\epsilon)^\beta$. From Guggenheim (1945).

のように表され、その値は物質によらず $\beta \approx 1/3$ であることが実験的に知られている。更に、臨界点近傍の気体液体相転移の秩序変数 $\Delta\rho \equiv \rho_\ell - \rho_g$ もほぼ同じ値の β で

$$\Delta\rho \propto (-\epsilon)^\beta \quad (1.2)$$

と表されることが実験的に示されている。

このように、臨界指数の値は、物質によらないばかりか、異なる相転移についても同じ値になる場合がある。即ち、相転移の普遍性による同じ臨界指数を持つ系の集合は異なる物質や現象を含んでおり、そのような集まりを普遍クラス (*universality class*) という。

1.5.1 さまざまな臨界指数

以下に、相転移の理論などでよく現れる臨界指数をあげておく。臨界温度近傍での物理量の温度依存性に関する臨界指数として、

$$\beta : \text{秩序変数} \quad M \sim (-\varepsilon)^\beta \quad T < T_c \quad (1.3)$$

$$\begin{aligned} \alpha : \text{比熱} \quad C_V &\sim (-\varepsilon)^{-\alpha'} \quad T < T_c \\ C_V &\sim \varepsilon^{-\alpha} \quad T > T_c \end{aligned} \quad (1.4)$$

$$\begin{aligned} \gamma : \text{感受率} \quad \chi &\sim (-\varepsilon)^{-\gamma'} \quad T < T_c \\ \chi &\sim \varepsilon^{-\gamma} \quad T > T_c \end{aligned} \quad (1.5)$$

$$\begin{aligned} \nu : \text{相関距離} \quad \xi &\sim (-\varepsilon)^{-\nu'} \quad T < T_c \\ \xi &\sim \varepsilon^{-\nu} \quad T > T_c \end{aligned} \quad (1.6)$$

転移点 $T = T_c$ での振舞を記述する臨界指数として、

$$\delta : \quad H \sim M^\delta \quad (1.7)$$

および

$$\eta : \quad G(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \quad (1.8)$$

がある。ただし、 $G(r)$ は秩序変数に対する対相関関数 (*pair correlation function*) で、後で詳しく議論する。 d は空間次元である。

1.6 相転移の理論の目標

相転移の理論の目標は、個々の系の微視的な構造の違いを超えた、相転移の普遍性という系の巨視的振舞の普遍性を理解することだ。つまり、

- (i) 臨界指数の値がなぜ普遍的なのかその仕組みを理解し
- (ii) 臨界指数の値を実際に計算する理論的枠組を構築する

ことである。

1.7 臨界指数の間に成り立つ不等式

相転移の理論の話に入る前に、臨界指数の間に成り立っている熱力学的不等式について述べておく。

Rushbrook は、熱力学的関係式

$$\chi_T(C_H - C_M) = T\alpha_H^2; \quad \alpha_H \equiv \left(\frac{\partial M}{\partial T} \right)_{H=0} \quad (1.9)$$

を用いて、臨界指数の α' , β , および γ' の間には、

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2 \quad (1.10)$$

という不等式が成り立たなければならないことを示した (Rushbrook 不等式, 1963 年)。その導出の鮮やかさに刺激されて、以下のようないくつかの不等式が証明された。

$$\text{Griffith 不等式} : \alpha' + \beta(1 + \delta) \geq 2 \quad (1.11)$$

$$\text{Widom 不等式} : \gamma' \geq \beta(\delta - 1) \quad (1.12)$$

$$\text{Fisher 不等式} : (2 - \eta)\nu \geq \gamma \quad (1.13)$$

$$\text{Josephson 不等式} : \begin{aligned} d\nu' &\geq 2 - \alpha' \\ d\nu &\geq 2 - \alpha \end{aligned} \quad (1.14)$$

最後の不等式の中の d は空間次元である。

これらの関係式は、熱力学的な関係式から導かれており、臨界指数による特異性の記述が平衡状態に対するものであれば、必ず満たされなければならない。一方、実験やモデルから得られている指数は、どういうわけか、多くの場合不等式ではなく等式を満たすかのようであった。

[Rushbrook 不等式の証明]

まず、熱力学関係式 (1.9) を示す¹。

磁場 H , 磁化 M , および温度 T は状態方程式により関係があるので、 T と H の関数としてのエントロピーは、 T と M の関数から

$$S(T, H) = S(T, M(H, T))$$

のように導かれる。これを用いると、磁場を一定に保ったエントロピーの温度微分と、磁化を一定に保ったエントロピーの温度微分の間には、

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_H = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_M + \left(\frac{\partial S}{\partial M}\right)_T \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H$$

の関係があることがわかる。一方、等温帯磁率 χ_T , および磁場一定の下での比熱 C_H , 磁化一定の下での比熱 C_M は、それぞれ

$$\chi_T \equiv \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T, \quad C_H \equiv T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_H, \quad C_M \equiv T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_M$$

なので、上の関係式を使うと、

$$\chi_T(C_H - C_M) = T \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T \left(\frac{\partial S}{\partial M}\right)_T \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H$$

¹ C_P と C_V に対しては、類似の熱力学関係式 $\kappa_T(C_P - C_V) = TV\alpha^2$ が成り立つ。但し、 $\kappa_T \equiv -(1/V)(\partial V/\partial P)_T$ は等温圧縮率、 $\alpha \equiv (1/V)(\partial V/\partial T)_P$ は膨張係数である。

をえる。偏微分の一般的関係式

$$\left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_M \left(\frac{\partial T}{\partial M}\right)_H = -1 \quad (1.15)$$

と、磁性体に対する自由エネルギーの全微分 $dF = -SdT + HdM$ より導かれる² Maxwell の関係式

$$\left(\frac{\partial S}{\partial M}\right)_T = -\left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_M$$

を用いると、これは求めるべき熱力学関係式

$$\chi_T(C_H - C_M) = T \left[\left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H \right]^2 \equiv T\alpha_H^2$$

となる。

さて、熱力学的安定性から比熱 C_M は正でなければならないので、この式から不等式

$$C_H > T \frac{\alpha_H^2}{\chi_T} = \frac{T}{\chi_T} \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H^2 \quad (1.16)$$

が成り立つことがわかる。2次の相転移点 T_c 直下では、 $H = 0$ で物理量の特異性は

$$C_H \sim (-\varepsilon)^{-\alpha'}, \quad \chi_T \sim (-\varepsilon)^{-\gamma'}, \quad \left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H \sim (-\varepsilon)^{\beta-1}$$

のように表されるので、得られた熱力学不等式が成り立つためには、特異部分については

$$(-\varepsilon)^{-\alpha'} \geq (-\varepsilon)^{2\beta-2+\gamma'}; \quad (\varepsilon \rightarrow 0) \quad (1.17)$$

がとなる必要がある³。これより、Rushbrook 不等式

$$\alpha' + 2\beta + \gamma' \geq 2$$

が得られる。

[証明終]

問題 1.1 3つの偏微分の積が満たす一般的関係式 (1.15) を証明せよ。

問題 1.2 式 (1.16) は等号を含まない不等式なのに、それから得られる不等式 (1.17) には等号が含まれているのはなぜか説明せよ。

² 磁性体の磁化が磁場中で dM 増加したとき、双極子相互作用により外場 H が系にする仕事は HdM なので、内部エネルギー E をエントロピー S と磁化 M で表すと、磁性体の可逆な微小過程に対する熱力学の第1法則は $dE = TdS + HdM$ と表される。これからヘルムホルツの自由エネルギーの定義 $F = E - ST$ より、 $dF = -SdT + HdM$ となる。

³ これは必要条件で、また等式を含むことに注意。

	α	α'	γ	γ'	ν	ν'	β	δ	η
<u>流体</u>									
CO ₂	~ 0.1	0.1	1.35	~ 1.0	—	—	0.34	4.2	—
Xe	—	< 0.2	1.3	1.2	—	0.57	0.35	4.4	—
<u>磁性体</u>									
Ni	0	(-0.3)	1.35	0.42	—	—	0.42	4.22	—
EuS	0.05	(-0.15)	—	0.33	—	—	0.33	—	—
XrBr ₃	—	—	1.215	0.368	—	—	0.368	4.3	—
<u>モデル</u>									
<u>イジング</u>									
$d = 2$	0(log)		7/4		1		1/8	15	1/4
$d = 3$	0.110		1.2405		0.630		0.325	4.82	0.032
Landau 理論	0		1		1/2		1/2	3	0

表 1.2: 臨界指数

第2章 相転移の古典論

非理想気体に対する Van der Waals の理論と、磁気相転移に対する平均場理論を解説する。これらは現代的な相転移の理論ができる前の古典的相転移の理論で、どちらも熱揺らぎを無視している。この2つの理論が与える臨界指数は、どちらも同じであることを示す。次に、揺らぎの指標として、離れた場所での物理量の揺らぎの相関を表す相関関数を導入し、それと感受率の関係を議論する。最後に、相関関数についての Ornstein-Zernike 理論を紹介する。この結果は、第4章で議論するように、Landau 理論を外場が空間変化する場合に拡張したものと一致する。

2.1 Van der Waals の非理想気体の理論

気体は分子の希薄な集合で、時折起こる分子間の衝突を通じてエネルギーや運動量をランダムにやりとりをする質点の集まりとしてモデル化される。それ以外の粒子間相互作用の効果を無視するという理想化の下では、理想気体の状態方程式

$$P = nR \frac{T}{V} \quad (2.1)$$

が成り立つことは、気体分子運動論により示される。

気体分子間の衝突以外の相互作用の効果をとり入れると、この状態方程式はどのように修正されるだろうか？ 以下の二つの効果が重要だ。一つは分子の排除体積効果で、もう一つは分子間引力による圧力の減少である。理想気体から出発して、これらの効果をどのように取り入れられるか、以下に議論する。

まず、分子は互いに重なり合えない、即ち排除体積を持つために、系の取りうる体積として最小の値 V_{\min} が存在するはずだ。それは分子のモル数 n に比例するので、比例係数を b として

$$V_{\min} = nb$$

と書ける。系の体積 V は V_{\min} より小さくならないということを、理想気体の状態方程式 (2.1) の V を $V - V_{\min}$ で置き換えることで取り入れられる。そうすれば $V \rightarrow V_{\min} + 0$ で圧力が無限大になり、それ以上圧縮できないからだ。

一方、分子間引力による圧力減少は、分子間引力による壁付近の分子の運動の変化によって引き起こされる。相互作用は分子対によるものなので、その影響の大きさは単位体積当たりの分子対の数に比例するであ

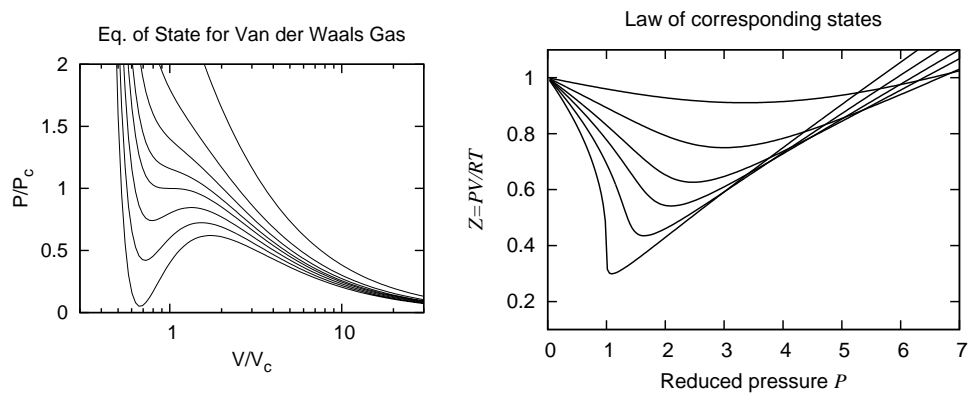


図 2.1: Van der Waals 気体の等温曲線

ろう。それはおおよそ分子数密度 n/V の 2 乗に比例するので、比例係数を a として、この効果による圧力の変化 ΔP を

$$\Delta P = -a \left(\frac{n}{V} \right)^2$$

と表す。

これらの修正を理想気体の状態方程式に加えると、*Van der Waals* の状態方程式

$$P = nR \frac{T}{V - nb} - a \left(\frac{n}{V} \right)^2 \quad (2.2)$$

を得る。

2.1.1 Maxwell 構築

Van der Waals の状態方程式の等温曲線を P - V 平面に描くと、十分高温では単調減少の曲線となり、理想気体の等温曲線で近似できる。しかし、ある温度以下では極小・極大を持つ非単調な等温曲線を与える。そのような温度では、*Van der Waals* の状態方程式は、ある範囲の圧力 P に対して 3 つの V を与え、体積が一意的に決まらない。この場合、実際には系の体積はどのように解釈するのが合理的であろうか？

まず、圧力が体積の増加関数となっている部分は、微小な密度揺らぎに対して力学的に不安定であることに注意しよう。圧力が体積の増加関数ということは圧縮率が負であることを表す。すなわち、系のある部分の密度が周囲より増すと却ってその圧力が減るのである。すると周りから押し込められるので更に密度が増し、その結果、元の一様状態は壊れてしまう¹。

安定で一様な状態に対応するのは、 P が V の減少関数になっている両側の部分である。 V が小さく高密度の部分は液体状態、 V が大きく低密度の部分は気体状態に対応すると解釈できる。

¹ 圧縮率 κ_T は自由エネルギーを用いて $\kappa_T = 1/V \cdot (\partial^2 F / \partial V^2)^{-1} = -1/V \cdot (\partial^2 G / \partial P^2)$ と表される。つまり、圧縮率が正であることは、ヘルムホルツの自由エネルギー F は体積 V の関数として下に凸、ギブスの自由エネルギー G は体積 P の関数として上に凸関数であることを意味する。

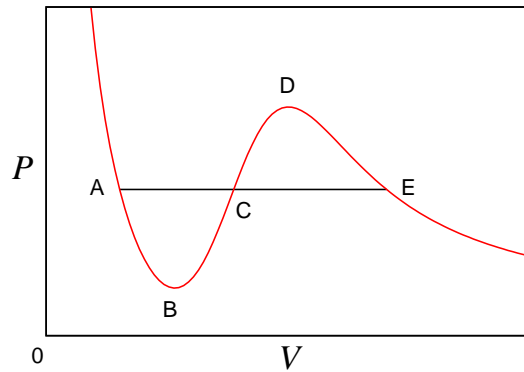


図 2.2: Maxwell 構築

液体状態から温度を一定に保ち体積を増加させてゆくと、ある圧力になったところで気体状態に移るが、どこで転移するかをどう決めれば良いかというのが問題である。それに対する解答の一つが、等面積則あるいは **Maxwell 構築** (*Maxwell construction*) と呼ばれる方法で、それは以下の考え方に基づく。

体積を増加させていった時、ある圧力で液体分枝上のある点 A から気体分枝上の点 E に乗り移ったとすると、その間の体積では液相と気相が共存している。平衡状態で共存している 2 相の化学ポテンシャルは等しいので、点 A と点 E での化学ポテンシャルすなわちギブスの自由エネルギーは等しくなければならない。

$$\mu_A = \mu_E, \quad \text{すなわち} \quad G_A = G_E$$

A と E の自由エネルギーの差は、2 点を結ぶ経路にそって自由エネルギーの変化 $dG = -SdT + VdP$ を積分してゆけば得られる。今、Van der Waals の等温線の増加関数の部分（不安定分枝）でも一様な状態が仮想的に実現し、系の状態を正しく記述しているとみなして、点 A から点 E まで等温線に沿って自由エネルギーの変化を積分してゆくことにより、自由エネルギー差 $G_E - G_A$ が求められるとする：

$$G_E - G_A = \int_{ABCDE} dG.$$

等温曲線上の積分なので、積分変数を圧力 P に変換すると、

$$0 = G_E - G_A = \int_{ABCDE} \left(\frac{\partial G}{\partial P} \right)_T dP = \int_{ABCDE} V(T, P) dP$$

となり、A と E での自由エネルギーが等しいという条件から、 P - V 平面内の等温曲線 $V(T, P)$ と直線 AE によって囲まれる 2 つの部分の面積が等しくなければならないことが導き出せる。

つまり、等温曲線が単調関数でなく不安定分枝を持つ場合、系の温度を一定に保って体積を増やしていった時、 P - V 平面の等温線と水平線が囲まれる 2 つの部分の面積が等しくなる圧力で、液相から気相に相転移をすると解釈できる。これがいわゆる Maxwell 構築あるいは等面積則と呼ばれているものである。

2.1.2 臨界点と対応状態の法則

等温曲線の不安定分枝に対応する温度と圧力では気液2相が共存していると解釈すると、臨界温度 T_c は不安定分枝が始まる温度、すなわち、等温曲線が V の単調減少関数でなくなり始める温度として与えられる。臨界点での圧力 P_c および体積 V_c は、 $T = T_c$ の等温曲線の傾きがゼロの変曲点での圧力および体積として与えられる。まとめると、臨界点 (P_c, V_c, T_c) は、

$$P_c = nR \frac{T_c}{V_c - nb} - a \left(\frac{n}{V_c} \right)^2 \quad (2.3)$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_{T=T_c} = 0 \quad (2.4)$$

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial V^2} \right)_{T=T_c} = 0 \quad (2.5)$$

を満たす点として与えられる。これを解くことによって、

$$P_c = \frac{a}{27b^2}, \quad V_c = 3b, \quad RT_c = \frac{8a}{27b} \quad (2.6)$$

を得る。ここで、 a と b は物質に依存するパラメタ (物質パラメタ) である。

(2.6) 式は2つのパラメタ (a, b) から3つの量 (P_c, V_c, T_c) を決めているので、それらには簡単な関係がある：

$$Z_c \equiv \frac{P_c V_c}{RT_c} = \frac{3}{8} = 0.375. \quad (2.7)$$

つまり、この Z_c の値は Van der Waals 気体では物質によらない値になるということである²。

さて、1モルの気体に対する Van der Waals 状態方程式 (2.2) の両辺に b^2/a をかけると、

$$\frac{b^2}{a} P = \frac{(b/a)RT}{V/b - 1} - \left(\frac{b}{V} \right)^2$$

となり、これを臨界点での物理量との比を

$$\tilde{P} = \frac{P}{P_c}, \quad \tilde{V} = \frac{V}{V_c}, \quad \tilde{T} = \frac{T}{T_c} \quad (2.8)$$

で表すと、状態方程式は

$$\left(\tilde{P} + \frac{3}{\tilde{V}^2} \right) (3\tilde{V} - 1) = 8\tilde{T} \quad (2.9)$$

と表される。これは物質パラメタによらない。このように、臨界点での物理量との比で表現すると異なる物質が同じ振舞に見えることを対応状態の法則 (*law of corresponding states*) という。

実際に、気体の臨界点付近の振舞を、

$$Z \equiv \frac{PV}{RT} = \frac{\tilde{P}\tilde{V}}{\tilde{T}} Z_c = Z_c \frac{\tilde{P}}{\tilde{T}} \tilde{V}(\tilde{P}, \tilde{T}) \quad (2.10)$$

² 理想気体は臨界点を持たず、いつも $Z \equiv PV/RT = 1$ となる。

TABLE 5.1

The van der Waals constants a and ℓ for selected fluid systems, together with the ratio $Z_c \equiv P_c V_c / \mathcal{R} T_c$. The van der Waals constants appear in the equation of state (5.4); because of the dimensions of a and ℓ used here, we should measure P in atm, V in litres, and take $\mathcal{R} \simeq 0.08206$ litre-atm/mole-degree. Note that a is a measure of the attractive force between particles, and ℓ measures the non-zero volume of the molecules. Since both a and ℓ vary with temperature, the values shown here are only approximate; they are obtained from the CRC Handbook, 45th edn. The systems are listed in order of increasing Z_c . The van der Waals theory predicts $Z_c = \frac{3}{8} = 0.375$, while in the non-interacting limit $Z = 1$.

Fluid	a (l ² atm mol ⁻²)	ℓ (l mol ⁻¹)	$Z_c = P_c V_c / \mathcal{R} T_c$
Water, H ₂ O	5.464	0.0305	0.230
Sulphur dioxide, SO ₂	6.714	0.0564	0.269
Ethylene, C ₂ H ₄	4.471	0.0571	0.270
Acetylene, C ₂ H ₂	4.390	0.0514	0.274
Carbon dioxide, CO ₂	3.592	0.0427	0.275
Ethane, C ₂ H ₆	5.489	0.0638	0.285
Xenon, Xe	4.194	0.0511	0.288
Methane, CH ₄	2.253	0.0428	0.290
Nitrogen, N ₂	1.390	0.0391	0.291
Argon, Ar	1.345	0.0322	0.291
Oxygen, O ₂	1.370	0.0318	0.292
Carbon monoxide, CO	1.485	0.0399	0.294
Hydrogen, H ₂	0.2444	0.0266	0.304
Helium, ⁴ He	0.03412	0.0237	0.308
van der Waals theory	—	—	0.375

としてプロットしてみると、多くの物質のデータが同じ等温曲線上にのり、臨界点近傍で対応状態の法則が成り立っていることが示される。しかし、これらのデータは必ずしも Van der Waals の状態方程式を満たしていないので、対応状態の法則は Van der Waals の状態方程式より広い範囲で成り立っていることがわかる。

問題 2.1 Van der Waals の状態方程式の臨界点の表式 (2.6) を導出せよ。

2.1.3 Van der Waals 気体の臨界指数

Van der Waals 気体の臨界点近傍の振舞を調べ、臨界指数を計算する。臨界点からのずれを表す変数を、

$$\varepsilon \equiv \tilde{T} - 1 = \frac{T - T_c}{T_c}, \quad p \equiv \tilde{P} - 1, \quad v \equiv \tilde{V} - 1 \quad (2.11)$$

とおき、状態方程式 (2.9) をこれらを用いて表すと、

$$\left(p + 1 + \frac{3}{(v + 1)^2} \right) (3(v + 1) - 1) = 8(\varepsilon + 1) \quad (2.12)$$

となる。

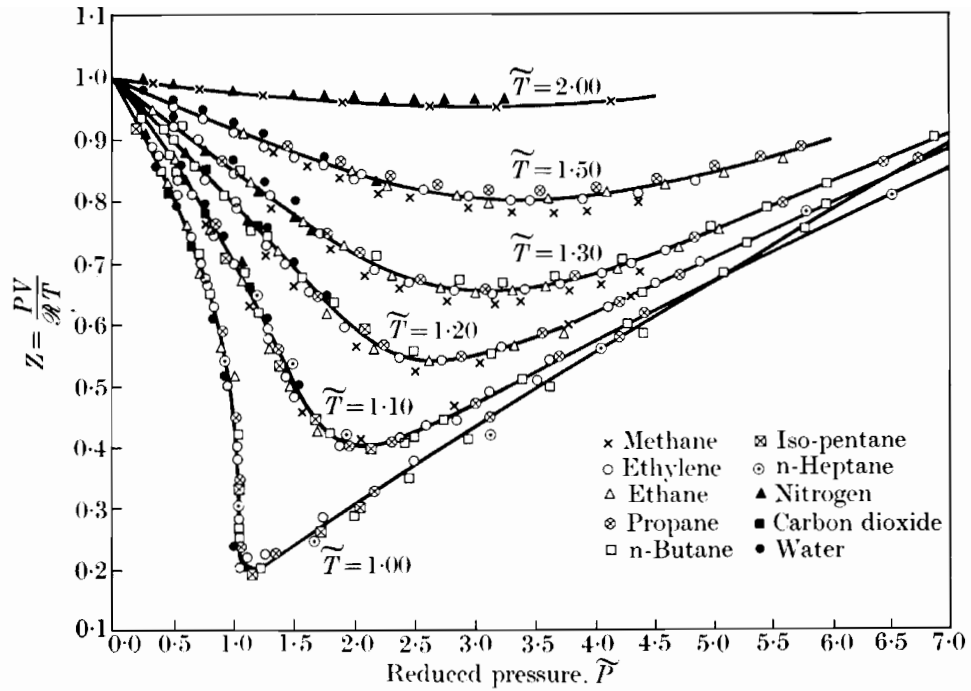


FIG. 5.3. Dependence of the compressibility ratio $Z \equiv PV/RT$ upon reduced pressure \tilde{P} for different reduced temperatures \tilde{T} . The fact that the data for a wide variety of fluids fall on identical curves supports the law of corresponding states. After Su (1946).

臨界指数 δ : 臨界温度 $T = T_c$ での外場とオーダーパラメタの関係を表す臨界指数 δ は、気体液体相転移の場合には $T = T_c$ での圧力と密度の関係

$$\frac{P - P_c}{P_c} \sim \left| \frac{\rho}{\rho_c} - 1 \right|^\delta \text{sign}(\rho - \rho_c) \quad (2.13)$$

で定義される。状態方程式 (2.12) で、 $\varepsilon = 0$ とおき、 p の表式を v で展開すると、

$$\begin{aligned} p &= \frac{8}{3v+2} - 1 - \frac{3}{(v+1)^2} \\ &= \frac{8(v+1)^2 - (3v+2)(v+1)^2 - 3(3v+2)}{(3v+2)(v+1)^2} \\ &\approx -\frac{3}{2}v^3 \left(1 - \frac{7}{2}v + \dots \right) \end{aligned} \quad (2.14)$$

となる。 $\rho = 1/V$ から、

$$\frac{\rho - \rho_c}{\rho_c} = \frac{1}{\tilde{V}} - 1 \approx -v$$

なので、

$$\delta = 3 \quad (2.15)$$

を得る。

臨界指数 γ : 指数 γ は、 $V = V_c$ すなわち $v = 0$ に保ったまま $T \rightarrow T_c + 0$ と取った際の圧縮率

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T$$

の発散から定義されるので、

$$-\frac{1}{V\kappa_T} = \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T = \frac{P_c}{V_c} \left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_T$$

を $v = 0$ で計算すれば良い。

状態方程式 (2.12) を変形して得られる式、

$$2p \left(1 + \frac{7}{2}v + 4v^2 + \frac{3}{2}v^3\right) = -3v^3 + 8\varepsilon(1 + 2v + v^2)$$

および、この両辺を v で微分した式、

$$2 \left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_T \left(1 + \frac{7}{2}v + 4v^2 + \frac{3}{2}v^3\right) + 2p \left(\frac{7}{2} + 8v + \frac{9}{2}v^2\right) = -9v^2 + 8\varepsilon(+2+2v)$$

に $v = 0$ を代入して得られる 2 つの式から

$$\left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_{T,v=0} = -6\varepsilon \quad (2.16)$$

を得る。これより、

$$\kappa_T \propto \frac{1}{\varepsilon}$$

となるので、

$$\gamma = 1 \quad (2.17)$$

を得る。

転移点以下での振舞を記述する指数 γ' も計算できて、 γ と同じ値

$$\gamma' = 1 \quad (2.18)$$

が得られる。

臨界指数 β : 臨界温度以下での液相と気相の密度の差の振舞

$$\rho_\ell - \rho_g \sim (-\varepsilon)^{-\beta}$$

より求められる。共存曲線の振舞から、

$$\beta = \frac{1}{2} \quad (2.19)$$

が得られる (導出の詳細は略)。

臨界指数 α : 比熱についての臨界指数 α は、

$$\alpha = \alpha' = 0 \quad (2.20)$$

となることが知られている。

これらの臨界指数は Rushbrook の関係式 (1.10) を等式にしたものを満たす。

問題 2.2 p の展開式 (2.14) を導出せよ。

問題 2.3 $\left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_{T,v=0}$ の表式 (2.16) を導出せよ。

2.1.4 理想 Van der Waals 気体の自由エネルギー

自由エネルギーが与えられれば状態方程式は決まるが、逆に、状態方程式からは自由エネルギーの表式は一意的には決まらない。ここでは、Van der Waals の状態方程式 (2.2) と矛盾せず、 $a = b = 0$ の場合に理想気体の自由エネルギーに一致するように、Van der Waals の自由エネルギーの表式を求めてみよう。

そのためにはまずエントロピーの表式を求めなければならない。エントロピーは、熱力学の第一法則

$$dS = \frac{1}{T}dE + \frac{P}{T}dV \quad (2.21)$$

を積分して得られる。状態方程式より

$$\frac{P}{T} = \frac{nR}{V - nb} - \frac{1}{T}a \left(\frac{n}{V}\right)^2 \quad (2.22)$$

であるが、(2.21) 式が全微分であるための条件

$$\left. \frac{\partial}{\partial V} \left(\frac{1}{T} \right) \right|_E = \left. \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{P}{T} \right) \right|_V$$

を満たすような、 $T(E, V)$ を見出さなければならない。(2.22) 式を代入するとこの条件は、

$$\frac{1}{an^2} \frac{\partial}{\partial (1/V)} \left(\frac{1}{T} \right) \Big|_E = \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{1}{T} \right) \Big|_V \quad (2.23)$$

となるが、これを満たすには、 $1/T$ が 1 変数関数 $f(x)$ を用いて、

$$\frac{1}{T} = f \left(E + a \frac{n^2}{V} \right)$$

と表されれば良い。しかし、 $a = 0$ の場合に理想気体の内部エネルギーに一致するべきなので、

$$\frac{1}{T} = \frac{ncR}{E + an^2/V}, \quad \text{即ち} \quad E = ncRT - a \frac{n^2}{V} \quad (2.24)$$

ととることにする³。ここで c は定数で、一原子気体の場合には $3/2$ となる。内部エネルギーが (2.24) で与えられる Van der Waals 気体を理想 Van der Waals 気体と呼ぶ。

(2.22) と (2.24) 式をエントロピー微分 (2.21) に代入し、基準点 (V_0, E_0) から積分することにより、エントロピーの表式

$$\begin{aligned} S(V, E) &= \int_{(V_0, E_0)}^{(V, E_0)} dS + \int_{(V, E_0)}^{(V, E)} dS \\ &= nR \ln \left[\frac{V - nb}{V_0 - nb} \left(\frac{E + an^2/V}{E_0 + an^2/V_0} \right)^c \right] \end{aligned} \quad (2.25)$$

³エネルギーの補正項 $-an^2/V$ は、状態方程式の圧力の補正項 $-a(n/V)^2$ に V をかけたものになっていることに注意。

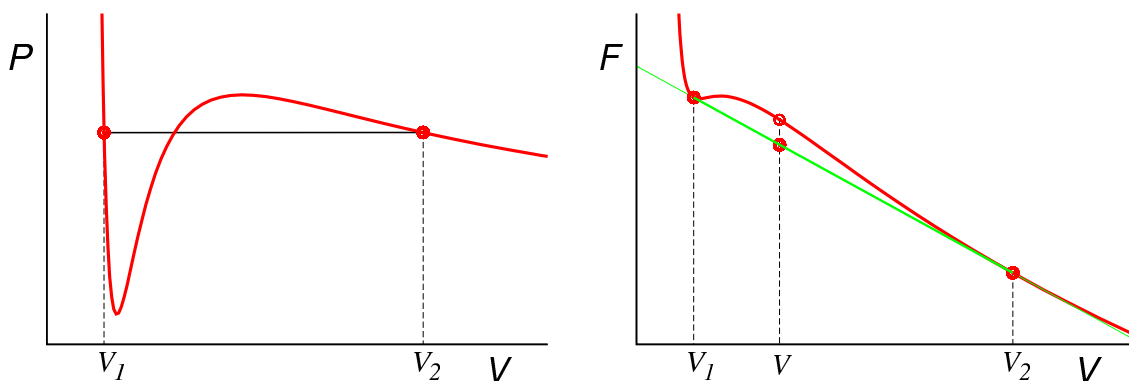


図 2.3: 理想 Van der Waals 気体の Maxwell 構築と自由エネルギー

を得る。これを用いて、自由エネルギー F は

$$\begin{aligned} F(T, V) &= E - ST \\ &= -nRT \ln \left[\frac{V - nb}{V_0 - nb} \left(\frac{T}{T_0 e} \right)^c \right] - a \frac{n^2}{V} \end{aligned} \quad (2.26)$$

となる。

圧力が正で熱力学的に安定な状態に対しては、ヘルムホルツの自由エネルギーは V の関数として単調減少でかつ下に凸でなければならないが、この自由エネルギーを $T < T_c$ に対して V の関数としてプロットすると、図 2.3 の右図の V_1 と V_2 の間の部分のように、上に凸の部分が見られる。

既に説明した Maxwell 構築は、自由エネルギーのこの部分に対しては、共通接線で置き換えることに対応することが、以下のようにして示される。

自由エネルギーの共通接線の接点を (V_1, F_1) および (V_2, F_2) とし、それぞれの接点に対応する状態を状態 1 および状態 2 とする。 $V_1 < V < V_2$ の V に対して、系が一様であったとすると、自由エネルギー F は式 (2.26) で与えられる赤い曲線上の値 $F(V)$ になる。一方、系が状態 1 と状態 2 に内分比 $V_2 - V : V - V_1$ で相分離共存したとすると、全系の自由エネルギーは V に対する緑の接線上の値

$$\frac{V_2 - V}{V_2 - V_1} F_1 + \frac{V - V_1}{V_2 - V_1} F_2 < F(V)$$

で与えられる。これは明かに系が一様であったとしたときの (2.26) 式の値より小さい。つまり、系が 2 相分離することにより全自由エネルギーを減らすことが出来るということで、即ち、 $F(V)$ が上に凸の部分は一様状態が不安定であることを表している。

状態 1 および 2 での接線の傾きは共通接線の傾きに一致し、それはそれらの点での系の圧力

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T$$

となるので、関係式

$$P = - \frac{F_2 - F_1}{V_2 - V_1}$$

をみだす。これから

$$F_1 + PV_1 = F_2 + PV_2, \quad \text{即ち} \quad G_1 = G_2$$

即ち、状態1と状態2のギブスの自由エネルギーが等しいことが導かれる。つまり、共通接線の接点で与えられる2つの状態はMaxwell構築で与えられる2つの状態(左図)に一致はずであることが分かる。

2.2 磁気相転移の平均場理論

2.2.1 磁性体の格子模型

最も簡単な磁性体のモデルは、格子点 i 上にスピン変数 \mathbf{S}_i が並んでいるものである。このスピン変数は、原子に局在している電子や原子核のスピン自由度を表す。隣接するスピンは、量子力学的な起源を持つハイゼンベルグ相互作用⁴

$$-J\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

をする。パラメタ J が正の場合には強磁性的 (*Ferromagnetic*)、負の場合には反強磁性的 (*Anti-ferromagnetic*) な相互作用と呼ばれる。このようなスピン系のハミルトニアン \mathcal{H} は

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle}^{\text{pair}} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

のように表される。

この様に、磁性は量子力学に起源を持ち、スピン変数 \mathbf{S}_i はスピン角運動量演算子を表す。スピン角運動量の大きさを S とすると、各サイトのスピンがとりうる独立な量子状態は $2S+1$ ヶに限られる⁵。一方、スピン角運動量 S が $1/2$ より十分大きな場合には古典スピンで近似できることが知られている(対応原理)。即ち、 \mathbf{S}_i は大きさが一定の古典的なベクトルのように振る舞い、近似的に球面上の任意の向きを取れるとしてよい。これを一般化して、 \mathbf{S}_i を任意の向きをとる n 次元ベクトルとしたものを古典 $O(n)$ スピンモデルと呼ぶ。

スピンの大きさ $S=1/2$ の量子モデルの場合、あるいは1成分古典スピン($n=1$)の場合には、各スピンは上向き或は下向きの2状態しか取れず、モデルは特に簡単になる⁶。

2.2.2 イジング模型の平均場理論

各スピンが $S_i = \pm 1$ の2状態しか取れない古典スピンモデルをイジング模型 (*Ising Model*) と呼ぶ。そのハミルトニアンは、磁場 H の下で

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle}^{\text{nn}} JS_i S_j - \mu \sum_i S_i H; \quad S_i = \pm 1 \quad (2.27)$$

⁴或いは交換相互作用 (exchange interaction) とも呼ばれ、そのパラメタ J は多粒子波動関数に由来する交換積分と呼ばれる相互作用ポテンシャルの積分で与えられる。

⁵電子のスピンは $1/2$ だが、一原子上の複数の電子が、スピンの向きを相対的に揃えたまま、全体として $1/2$ より大きなスピンとして振る舞うことがある(フント則)。

⁶但し、量子系の場合には、独立な状態としてはスピン毎に2つであっても、それらの重ね合わせの状態も純粋状態として可能であることに注意。

となる。ただし、相互作用は最近接格子点 (nearest neighbor, nn) 間のみとし、その強さを J とした。

磁場中の非相互作用系

まず、相互作用のない系 ($J = 0$) を考える。ハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = -\mu \sum_i S_i H \quad (2.28)$$

である。各スピンは独立なので、系の分配関数 Z は容易に計算できて、

$$Z = \left(\prod_i \sum_{S_i = \pm 1} \right) e^{-\beta \mathcal{H}} = (2 \cosh \beta \mu H)^N$$

となる。但し、 $\beta \equiv 1/k_B T$ 、 N は全スピンの数。これより、自由エネルギー G および磁化 M は

$$G = -k_B T \ln Z = -k_B T N \ln (2 \cosh \beta \mu H) \quad (2.29)$$

$$M = - \left(\frac{\partial G}{\partial H} \right)_T = N \mu \tanh (\beta \mu H) \quad (2.30)$$

である⁷。(2.30) 式は、 $S = 1/2$ の場合の **Brillouin 関数** と呼ばれている。

平均場近似による相互作用の効果

次に相互作用の効果を実験平均場近似を用いて取り入れる。相互作用があると、隣のスピンの向きが上を向くと自分も上向きになり易く、下向きだと下向きになり易い。隣のスピンの熱揺らぎを無視してその平均的な向きで置き換える近似を平均場近似 (*Mean Field Approximation*) と言う。この近似の下では、ハミルトニアンの相互作用の部分は、

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j \quad \longrightarrow \quad -J \sum_i S_i \sum_{j \in \text{nn of } i} \langle S_j \rangle \quad (2.31)$$

となる。但し、 $\langle \dots \rangle$ は熱平均を表す。すべてのスピンは同等として、その平均をスピン j によらず一定値をとる、即ち

$$\langle S_j \rangle = m$$

とすると、平均場近似のハミルトニアン

$$\mathcal{H}_{MF} = -J z m \sum_i S_i \quad (2.32)$$

が得られる。但し、 z は最近接格子点の数である。

⁷ 温度と磁場を独立変数とする磁性体の自由エネルギー G は、 $G = E - TS - HM$ で定義する。磁場中の磁性体のエネルギー変化は $dE = TdS + HdM$ と表されるので、 $dG = -SdT - MdH$ となる。

このハミルトニアンを、磁場中の相互作用していないスピンのハミルトニアン (2.28) と比べると、

$$\mu H \Leftrightarrow Jzm$$

の対応があるので、(2.30) より、スピン当りの磁化 m は

$$m = \langle S_i \rangle = \tanh(\beta Jzm) \quad (2.33)$$

で与えられることがわかる。これを満たす磁化 m の振舞いは、右辺と左辺を m の関数としてグラフを描くことによって求めることができる：

$$\begin{cases} m = 0 & \text{when } k_B T > Jz \\ m = 0, \pm m_{FM}(T) & \text{when } k_B T < Jz \end{cases}$$

但し、 $k_B T < Jz$ の時の $m = 0$ の状態は、負の帯磁率を与えることを示せるので、熱力学的に不安定な状態に対応する。

この結果から、平均場理論による強磁性相転移温度 (臨界温度) は

$$T_c = \frac{Jz}{k_B} \quad (2.34)$$

で与えられることが分かる。

この様に、平均場近似を用いて、 $T < T_c$ で自発磁化が生じ、系が本来持っている上下反転対称性が破れることを示した。この平均場理論による結果の大きな特徴は、転移温度などの相転移の性質が、相互作用の強さ J と最近接格子点の数 z にのみで決まっており、空間の次元には直接依存しないことである。その結果、相互作用がある場合には空間次元に関係なくゼロでない相転移温度を与え、いつも十分低温で強磁性相を予想してしまう。後で見るように、1次元イジング模型は絶対ゼロ度まで強磁性を示さないことを証明できるので、その意味で、1次元では平均場理論の結果は正しくない。

平均場近似の式 (2.31) による置き換えは2つのスピンの揺らぎの相関を無視することに対応している。ところが、一般に1次元や2次元系など空間次元が低い系では揺らぎの相関が重要になり、それが相転移の性質の大きな影響を与えていることが知られている。そのため、低次元系では実際には存在しない相転移を予想するなど、平均場近似は破たんする。一方、実際に相転移が存在する場合には、平均場理論は相転移の様子を全体としてかなり良く記述することが多い。

2.2.3 平均場理論の臨界指数

平均場近似で磁化を決める式 (2.33) を磁場のある場合に拡張すると

$$m = \tanh\left[\beta(Jzm + \mu H)\right] \quad (2.35)$$

が得られる。これを用いて、臨界指数を計算する。

右辺を \tanh の加法公式を用いて変形すると、

$$h \equiv \tanh\left(\frac{\mu H}{k_B T}\right) = \frac{m - \tanh(m/\tilde{T})}{1 - m \tanh(m/\tilde{T})}; \quad \tilde{T} \equiv \frac{T}{T_c}$$

となり、更に m について展開すると

$$h \approx \left(1 - \frac{1}{\tilde{T}}\right) m + \left[\frac{1}{\tilde{T}} \left(1 - \frac{1}{\tilde{T}}\right) + \frac{1}{3\tilde{T}^3}\right] m^3 + \dots \quad (2.36)$$

をうる。

臨界指数 β : $H = 0$ の下での $T < T_c$ での磁化の振舞は、(2.36) 式で $h = 0$ とおいて、 m を求めると、

$$m \approx \pm \left[3(1 - \tilde{T})\right]^{1/2} \propto |\varepsilon|^{1/2}$$

となるので、

$$\beta = \frac{1}{2}$$

を得る。

臨界指数 δ : $T = T_c$ での m と h の関係は、(2.36) 式で $\tilde{T} = 1$ を代入して得られる :

$$h \approx \frac{1}{3} m^3$$

これより

$$\delta = 3$$

を得る。

臨界指数 γ : ゼロ磁界帯磁率 χ_T は

$$\chi_T = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{T, H=0} = \left(\frac{\partial M}{\partial h}\right)_T \left(\frac{\partial h}{\partial H}\right)_T \sim \left(\frac{\partial m}{\partial h}\right)_T$$

で与えられる。(2.36) 式の両辺を h で微分して、

$$1 \approx \varepsilon \left(\frac{\partial m}{\partial h}\right)_T + \left(\varepsilon + \frac{1}{3}\right) 3m^2 \left(\frac{\partial m}{\partial h}\right)_T$$

これより、 $T > T_c$ では $m = 0$ なので、

$$\left(\frac{\partial m}{\partial h}\right)_T \approx \frac{1}{\varepsilon}$$

$T < T_c$ では $m^2 \approx -3\varepsilon$ より、

$$\left(\frac{\partial m}{\partial h}\right)_T \approx \frac{1}{2}(-\varepsilon)^{-1}$$

となり、

$$\gamma = \gamma' = 1$$

を得る。

臨界指数 α : スピン揺らぎの相関を無視した平均場近似での相互作用エネルギー $\langle \mathcal{H} \rangle_{MF}$ は

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle_{MF} &= -J \sum_{\langle ij \rangle}^{\text{pair}} \langle S_i S_j \rangle_{MF} = -J \sum_{\langle ij \rangle}^{\text{pair}} \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \\ &= -\frac{1}{2} J z N m^2 \approx \begin{cases} 0 & (T > T_c) \\ -\frac{3}{2} J z N (1 - \tilde{T}) & (T \lesssim T_c) \end{cases} \end{aligned}$$

なので、熱容量は

$$C_H = \frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle_{MF}}{\partial T} \approx \begin{cases} 0 & (T > T_c) \\ \frac{3}{2} k_B N & (T \lesssim T_c) \end{cases}$$

これより、

$$\alpha = \alpha' = 0$$

を得る。

これらの指数の値はすべて Van der Waals 気体のものと同じで、Rushbrook の“等式”(1.10) を満たす。

問題 2.4 磁場がある場合の平均場近似の式 (2.35) を導け。

問題 2.5 磁場のある場合の平均場の式 (2.35) から、(2.33) 式の $m = 0$ の解が負の帯磁率を与えることを示せ。

問題 2.6 $m = 0$ のまわりの展開式 (2.36) 式を示せ。

2.3 対相関関数と Ornstein-Zernike 理論

2つの場所の間の物理量の揺らぎの相関を表す量である、対相関関数 (*pair correlation function*) を定義する。感受率は対相関関数に比例していて、それらは2次の相転移点で特異な振舞をする。これを、気体液体相転移における圧縮率と密度密度相関関数を例にとって議論する。

2.3.1 密度密度相関関数

密度密度相関関数 $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は、位置 \mathbf{r} と \mathbf{r}' の両方に粒子がいる確率密度である⁸。まず、 $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ が大正準集団を用いてどのように定義されるか議論しよう。

大正準集団では、系の粒子数が N 個で、1番目の粒子の位置と運動量が $(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1)$ 、2番目の粒子の位置と運動量が $(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)$ 、3番目の粒子の位置と運動量が $(\mathbf{r}_3, \mathbf{p}_3)$ 、 \dots である確率密度 $P_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots; \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots)$ は、

$$P_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots; \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots) = \frac{\exp[-\beta U_N(\mathbf{r}_1, \dots; \mathbf{p}_1, \dots) + \beta \mu N]}{N! h^{3N} \Xi(V, T, \mu)}$$

⁸ より正確には、それから定数を引いたもの。

で与えられる。但し、 $\Xi(V, T, \mu)$ は大分配関数

$$\Xi(V, T, \mu) \equiv \sum_{N=0}^{\infty} \frac{e^{\beta\mu N}}{N! h^{3N}} \int d\Gamma_N e^{-\beta U_N(\mathbf{r}_1, \dots; \mathbf{p}_1, \dots)}; \quad d\Gamma_N \equiv \prod_{i=1}^N d\mathbf{r}_i d\mathbf{p}_i$$

で、 $U_N(\mathbf{r}_1, \dots; \mathbf{p}_1, \dots)$ は N 粒子系の全エネルギー、 μ は化学ポテンシャル、 h はプランク定数である⁹。

さて、位置 \mathbf{r} の粒子数密度 $n(\mathbf{r})$ は、

$$n(\mathbf{r}) \equiv \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

で表され、大正準集団による数密度の統計平均は

$$\langle n(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N! h^{3N}} \int d\Gamma_N n(\mathbf{r}) e^{-\beta(U_N - \mu N)}$$

より計算される。もちろん、空間的に一様な系であればこれは \mathbf{r} によらず一定で、平均数密度 n になる。

密度と密度の相関を、異なる場所での数密度の積の平均

$$\langle n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}') \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N! h^{3N}} \int d\Gamma_N n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}') e^{-\beta(U_N - \mu N)}$$

を用いて表す。液体や気体のように長距離秩序がない場合には、十分離れた点の間には物理量の相関はなくなり、積の平均は平均の積に等しい：

$$\langle n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}') \rangle \rightarrow \langle n(\mathbf{r}) \rangle \langle n(\mathbf{r}') \rangle = n^2; \quad (|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty).$$

この値を引いて、密度密度相関関数 $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ を

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &\equiv \left\langle \left(n(\mathbf{r}) - \langle n(\mathbf{r}) \rangle \right) \left(n(\mathbf{r}') - \langle n(\mathbf{r}') \rangle \right) \right\rangle \\ &= \langle n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}') \rangle - \langle n(\mathbf{r}) \rangle \langle n(\mathbf{r}') \rangle \end{aligned} \quad (2.37)$$

と定義する。つまり、長距離秩序がない場合には

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow 0; \quad (|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty)$$

となるようにした。特に、空間的に一様な系では $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ の関数となる。更に、一様かつ等方的な系では $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ だけの関数になる：

$$G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \langle n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}') \rangle - n^2.$$

⁹ 古典統計ではプランク定数の因子は化学ポテンシャルの値をずらすだけで意味を持たないが、量子統計との対応をとるために入れておく。

2.3.2 密度相関と等温圧縮率

感受率の一つである等温圧縮率

$$K_T \equiv -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T$$

は、密度相関関数 (2.37) を用いて表されることを示す。

まず、大正準集団を用いて、系の全粒子数 N の揺らぎを求める。粒子数分布の分散は、

$$\begin{aligned} \left\langle \left(N - \langle N \rangle \right)^2 \right\rangle &= \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 \\ &= \frac{1}{\Xi} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N! h^{3N}} \int d\Gamma_N N^2 e^{-\beta(U_N - \mu N)} \\ &\quad - \left[\frac{1}{\Xi} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N! h^{3N}} \int d\Gamma_N N e^{-\beta(U_N - \mu N)} \right]^2 \\ &= (k_B T)^2 \left(\frac{\partial^2 \ln \Xi}{\partial \mu^2} \right)_{T,V} \end{aligned} \quad (2.38)$$

で与えられる。一方、大分配関数で定義される熱力学ポテンシャル $\Phi(V, T, \mu)$ は

$$\Phi(V, T, \mu) \equiv k_B T \ln \Xi(V, T, \mu) = V P(T, \mu)$$

なので¹⁰、上の結果は、

$$\left\langle \left(N - \langle N \rangle \right)^2 \right\rangle = k_B T V \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \mu^2} \right)_T$$

と書ける。ここで、 P は T と μ のみの関数なので、偏微分の添字 V は省いた。

さて、ギブス・デュエムの関係式

$$N d\mu + S dT - V dP = 0 \quad (2.39)$$

を用いると¹¹、

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \mu} \right)_T = \frac{N}{V} \equiv \frac{1}{v(\mu, T)}$$

となる。 v は一分子当たりの体積で、示強変数である。更に、3つの示強変数 (μ, T, P) の間にはギブス・デュエムの関係式 (2.39) があるので、 P を μ と T の関数 $P(\mu, T)$ として、 $v(\mu, T)$ を

$$v(P, T) = v(P(\mu, T), T)$$

¹⁰ $(\partial\Phi/\partial V)_{T,\mu} = P(V, T, \mu)$ であるが、圧力 P は示強変数なので、これは V には依存しない: $(\partial\Phi/\partial V)_{T,\mu} = P(T, \mu)$. これから直ちに $\Phi(V, T, \mu) = V P(T, \mu)$ を得る。

¹¹ ギブス・デュエムの関係式は、ギブスの自由エネルギー $G(T, P, N) = E - ST + PV = \mu N$ の全微分 $dG = -SdT + VdP + \mu dN = d(\mu N)$ より直ちに得られる。

を用いて表わすことができるので、

$$\left(\frac{\partial v}{\partial \mu}\right)_T = \left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_T \left(\frac{\partial P}{\partial \mu}\right)_T = \frac{1}{v} \left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_T = -K_T$$

を得る。これらを用いると、

$$\langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle = -k_B T N \frac{1}{v^2} \left(\frac{\partial v}{\partial P}\right)_T = k_B T \frac{N^2}{V} K_T$$

即ち、

$$K_T = \frac{V}{k_B T} \frac{\langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle}{\langle N \rangle^2} \quad (2.40)$$

を得る。等温圧縮率は粒子数の揺らぎに比例していることが示された¹²。

一方、理想気体の等温圧縮率 K_T^0 は、その状態方程式から

$$K_T^0 = \frac{V}{N k_B T}$$

なので、それとの比をとると式 (2.40) は

$$\frac{K_T}{K_T^0} = \frac{\langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle}{\langle N \rangle}$$

となる。また、粒子数の揺らぎは密度相関をもちいて

$$\begin{aligned} \langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle &= \left\langle \int d\mathbf{r} (n(\mathbf{r}) - \langle n(\mathbf{r}) \rangle) \left\langle \int d\mathbf{r}' (n(\mathbf{r}') - \langle n(\mathbf{r}') \rangle) \right\rangle \right\rangle \\ &= \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = V \int d\mathbf{r} G(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.41)$$

と表されるので、

$$\frac{K_T}{K_T^0} = \frac{1}{n} \int d\mathbf{r} G(\mathbf{r})$$

となる。即ち、圧縮率は密度相関関数の積分に比例している。

圧縮率と粒子数揺らぎの関係 (2.40) は 揺動散逸定理 (Fluctuation-Dissipation Theorem) と呼ばれているものの一例である。

問題 2.7 式 (2.38) の最後の等号を示せ。

問題 2.8 式 (2.41) の最後の等号を示せ。

2.3.3 密度相関と光散乱

系に、波数 \mathbf{k}_0 の光が入射し、それが散乱されて波数 \mathbf{k}_s の光になったとする。 $|\mathbf{k}_0| = |\mathbf{k}_s|$ のとき入射光と散乱光のエネルギーが同じなので、弾性散乱 (elastic scattering) と呼ばれる。

¹²この関係式は Smoluchowski によって初めて示された [Annalen der Physik **25**, 205-226 (1908)]。

位置 \mathbf{r}_i にある 1 つの原子 (分子) による散乱波のうち、波数ベクトル \mathbf{k}_s の成分の振幅は、

$$\frac{e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_i}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} a(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{k}_s \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)} \propto a(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i}; \quad \mathbf{q} \equiv \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_0$$

に比例している¹³。但し、 \mathbf{q} は散乱ベクトルで、 $a(\mathbf{q})$ は形状因子 (*form factor*) と呼ばれている。系のすべての原子による散乱振幅は、それぞれの原子からの散乱波の重ね合わせ

$$a(\mathbf{q}) \sum_{i=1}^N e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i}$$

に比例し、散乱強度 (散乱波のエネルギー) はその絶対値の 2 乗

$$I(\mathbf{q}) = \left\langle \left| a(\mathbf{q}) \sum_{i=1}^N e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \right|^2 \right\rangle = |a(\mathbf{q})|^2 \left\langle \left| \sum_{i=1}^N e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \right|^2 \right\rangle \quad (2.42)$$

に比例する。

粒子が無相関に分布している場合には、

$$\left\langle \left| \sum_{i=1}^N e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \right|^2 \right\rangle = \left\langle N + \sum_{i \neq j} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \right\rangle = N; \quad (\mathbf{q} \neq 0 \text{ の場合})$$

であるから¹⁴、その時の散乱強度 $I^0(\mathbf{q})$ は、

$$I^0(\mathbf{q}) = N|a(\mathbf{q})|^2$$

で与えられる。即ち、1 粒子の散乱強度の N 倍となることが分かる。

式 (2.42) と、無相関の場合の散乱強度との比をとると

$$\frac{I(\mathbf{q})}{I^0(\mathbf{q})} = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i,j} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \right\rangle$$

となる。これに、関係式

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \sum_{i,j} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \\ &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \end{aligned}$$

を用いると、

$$\begin{aligned} \frac{I(\mathbf{q})}{I^0(\mathbf{q})} &= \frac{1}{N} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \langle n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}') \rangle e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \\ &= \frac{1}{N} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \left(G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + n^2 \right) e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \\ &= \frac{V}{N} \left[S(\mathbf{q}) + n^2 (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q}) \right] \end{aligned} \quad (2.43)$$

¹³ 光の波長程度の \mathbf{r}_i のずれで大きく変化する因子 $e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i}$ に比べて、ゆっくりと変化する因子 $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|$ を無視する。また、 $e^{i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}}$ は分子の位置 \mathbf{r}_i に拠らない共通因子としてくり出せるので省略する。

¹⁴ \mathbf{r}_i と \mathbf{r}_j が無相関なら $\langle e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \rangle = \langle e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \rangle \langle e^{+i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} \rangle$ 、さらに \mathbf{r}_i の分布が一様なら $\langle e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \rangle = 0$ である。

となり、密度相関関数 $G(\mathbf{r})$ を用いて表される。但し、 $S(\mathbf{q})$ は $G(\mathbf{r})$ のフーリエ変換

$$S(\mathbf{q}) \equiv \int d\mathbf{r} G(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

で構造因子 (*structure factor*) と呼ばれる。つまり、光散乱強度は密度相関関数のフーリエ変換すなわち構造因子で与えられる。

これらをまとめると、2次の相転移点付近での光散乱の増大（臨界タック光）、および圧縮率の増大は、いずれも密度揺らぎの増大、即ち、密度相関関数の到達距離が増大していることを示している。

問題 2.9 式 (2.43) の最後の等式を示せ。

2.3.4 Ornstein-Zernike 理論

密度相関関数は

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) \right\rangle - n^2 \\ &= \left\langle \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_i) \right\rangle \\ &\quad + \left\langle \sum_{i \neq j} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_j) \right\rangle - n^2 \\ &\equiv n\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + n^2\Gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned}$$

のように、自己相関（第1項）と粒子間相関（第2項）に分けられる。更に、粒子間相関 $\Gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ は、 \mathbf{r} と \mathbf{r}' にある2粒子間の直接相互作用による部分と、第3の粒子を経由した相関とに分けられるであろう。

粒子間の直接の相関を表す直接相関関数 (*direct correlation function*) $C(\mathbf{r})$ を、

$$\Gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + n \int C(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \Gamma(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') d\mathbf{r}''$$

で定義する。右辺第2項は、 \mathbf{r}'' にある第3の粒子を経由した相関を表す。

両辺をフーリエ変換すると、

$$\hat{C}(\mathbf{q}) = \frac{\hat{\Gamma}(\mathbf{q})}{1 + n\hat{\Gamma}(\mathbf{q})} \quad (2.44)$$

を得る。 $\hat{\Gamma}(0)$ は

$$K_T \propto \int d\mathbf{r} G(\mathbf{r}) = S(0) \sim \hat{\Gamma}(0)$$

のように圧縮率と関連しているので、相転移点近傍での圧縮率の発散は $\hat{\Gamma}(0)$ の発散を意味する。一方、(2.44) 式から分かるように、 $\hat{C}(0)$ は $T \rightarrow T_c$

で有限に留まる。すなわち、 $T = T_c$ 、 $\mathbf{q} = 0$ での相関の発散は多粒子の効果で、2粒子間の直接相関は発散しないとの解釈が可能だ。

そこで、直接相関関数 $\hat{C}(\mathbf{q})$ は $\mathbf{q} = 0$ で正則と仮定し、 $\mathbf{q} \sim 0$ で

$$\hat{C}(\mathbf{q}) \approx C_0 + C_2 q^2 + O(q^4) \quad (2.45)$$

と展開できるとする。但し、 $C(\mathbf{r})$ の反転対称性 $C(-\mathbf{r}) = C(\mathbf{r})$ より $\hat{C}(\mathbf{q})$ は q の偶関数 $\hat{C}(-\mathbf{q}) = \hat{C}(\mathbf{q})$ となることを用いた。係数は、

$$\begin{aligned} C_0 &= \hat{C}(0) \\ C_2 &= \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \hat{C}(\mathbf{q})}{\partial q^2} \right|_{q=0} = \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2}{\partial q^2} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} C(\mathbf{r}) \right|_{q=0} \\ &= -\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} (r \cos \theta)^2 C(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

で与えられる。構造因子 $S(\mathbf{q})$ は $\hat{C}(\mathbf{q})$ を用いて

$$S(\mathbf{q}) = n + n^2 \Gamma(\mathbf{q}) = n + n^2 \frac{\hat{C}(\mathbf{q})}{1 - n\hat{C}(\mathbf{q})} = \frac{n}{1 - n\hat{C}(\mathbf{q})}$$

と表され、これに $\hat{C}(\mathbf{q})$ の展開を代入すると、

$$\begin{aligned} \frac{n}{S(\mathbf{q})} &= 1 - n\hat{C}(\mathbf{q}) \approx 1 - n(C_0 + C_2 q^2 + \dots) \\ &\approx (-nC_2) \left(\frac{1 - nC_0}{-nC_2} + q^2 \right) \equiv R^2 (\kappa^2 + q^2) \end{aligned} \quad (2.46)$$

を得る。ここで、 $C_2 < 0$ であるとした。

$\mathbf{q} \neq 0$ では構造因子 $S(\mathbf{q})$ は散乱強度 $I(\mathbf{q})$ に比例するので、 $\hat{C}(\mathbf{q})$ の正則性の仮定 (2.45) は、(2.46) 式を光散乱実験のデータをと比較することにより確かめられる。臨界温度近傍での小さな散乱角の光散乱のデータはこの近似が妥当であることを示しており、 $T \rightarrow T_c$ で κ がゼロに収束していることが分かる。

この構造因子の表式

$$S(\mathbf{q}) \approx \frac{n}{R^2} \frac{1}{q^2 + \kappa^2} \quad (2.47)$$

をフーリエ逆変換することにより、密度相関関数

$$G(\mathbf{r}) \propto \frac{e^{-\kappa r}}{r}; \quad \kappa \equiv \frac{1}{\xi} \quad (2.48)$$

を得る。 ξ は相関距離 (*correlation length*) と呼ばれている。

この Ornstein-Zernike 近似の下では、等温圧縮率は

$$K_T \propto \int d\mathbf{r} G(\mathbf{r}) \propto S(0) \propto \frac{1}{\kappa^2} = \xi^2$$

と ξ^2 に比例するので、臨界指数の定義

$$K_T \sim |\varepsilon|^{-\gamma, -\gamma'}, \quad \xi \sim |\varepsilon|^{-\nu, -\nu'}$$

を用いると、臨界指数の間に

$$\nu = \frac{\gamma}{2}, \quad \nu' = \frac{\gamma'}{2} \quad (2.49)$$

の関係が導かれる。ただし、関係式 (2.49) は一般的なものではなく、Ornstein-Zernike 近似の下に成り立つに過ぎないことに注意する必要がある¹⁵。

また Ornstein-Zernike 近似の構造因子 (2.47) は臨界温度 $T = T_c$ で q^{-2} となるが、実際には僅かなずれがあり

$$S(q) \sim q^{-2+\eta}; \quad (q \rightarrow 0)$$

と、余分の指数 η が現れる。これに対応して、大きな r での相関関数の振舞は、

$$G(r) \Big|_{T=T_c} \sim r^{-(d-2+\eta)}; \quad (r \rightarrow \infty) \quad (2.50)$$

となる¹⁶。この指数 η は異常次元 (*anomalous dimension*) と呼ばれているものの一つである¹⁷。

問題 2.10 3次元のフーリエ逆変換を行い (2.48) 式を示せ。

¹⁵ 平均場近似での指数 $\gamma = 1$, $\nu = 1/2$ は、この関係を満たす。

¹⁶ これは、以下のようにフーリエ逆変換の積分変数を r でスケールすることによって得られる。

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}) &= \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} S(\mathbf{q}) \sim \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} q^{-2+\eta} \\ &\propto r^{-d+2-\eta} \int d^d \mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} p^{-2+\eta} \end{aligned}$$

但し、 \mathbf{r} を q_1 軸に並行にとり、 $\mathbf{qr} = \mathbf{p}$ と変数変換した。

¹⁷ 異常次元 η がゼロでないと、転移点近傍では $G(\mathbf{r}) \sim r^{-(d-2+\eta)} f(r/\xi)$ となり、 $K_T \propto \xi^{2-\eta}$ なので、(2.49) 式の代わりに $\nu(2-\eta) = \gamma$ を得る。

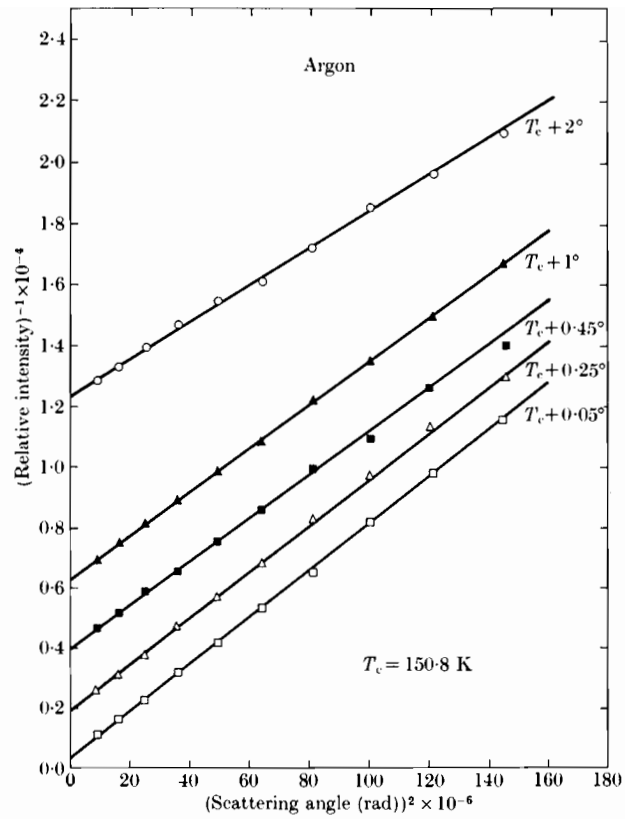


Fig. 7.6. Dependence on q^2 of the inverse scattering intensity for argon. Apparently the predictions of the Ornstein-Zernike theory are borne out by these measurements. Taken from Thomas and Schmidt (1963). Note that the slopes of the lines increase as $T \rightarrow T_c$, corresponding to an increase in the parameter B^2 defined in eqn (7.43).

第3章 厳密解の得られる系

相転移を示すモデルは数多くあるが、統計力学的に厳密な結果が得られる系は多くない。ここでは、1次元のイジング模型を例にとって、分配関数を厳密に計算し、いくつかの物理量を求める。残念なことに、1次元イジング模型は有限温度 ($T > 0$) で相転移を示さないことがわかる¹。

3.1 1次元イジング模型

N 個のスピンからなる1次元イジング模型のハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_N = - \sum_{i=1}^{N-1} J_i S_i S_{i+1}; \quad S_i = \pm 1 \quad (3.1)$$

で与えられる。但し、両端は開いた境界とした。この系の分配関数 Z_N は

$$Z_N = \sum_{\{S\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \exp \left(\sum_{i=1}^{N-1} \mathcal{J}_i S_i S_{i+1} \right); \quad \mathcal{J}_i \equiv \frac{J_i}{k_B T}$$

であるが、これに対して漸化式

$$\begin{aligned} Z_{N+1} &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \exp \left(\sum_{i=1}^{N-1} \mathcal{J}_i S_i S_{i+1} \right) \sum_{S_{N+1}=\pm 1} \exp(\mathcal{J}_N S_N S_{N+1}) \\ &= Z_N \cdot (2 \cosh \mathcal{J}_N) \end{aligned}$$

が得られる。これと、

$$Z_1 = \sum_{S_1=\pm 1} \exp(0) = 2$$

より、 N スピン系の分配関数は

$$Z_N = 2^N \left(\cosh \mathcal{J}_1 \cosh \mathcal{J}_2 \cdots \cosh \mathcal{J}_{N-1} \right) \quad (3.2)$$

と求まる。

¹ 2次元以上のイジング模型は有限温度で相転移を示すことが分かっている。2次元のイジング模型は、Onsager によって厳密解が得られているが (L Onsager, *Phys. Rev.* **65** (1944) 117-149. "Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition"), 3次元のイジング模型ははまだ厳密解は得られていない。

3.1.1 対スピン相関

k 番目と $k+r$ 番目のスピンの相関を

$$\Gamma_k(r) \equiv \langle S_k S_{k+r} \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{S\}} S_k S_{k+r} \exp \left(\sum_{i=1}^{N-1} \mathcal{J}_i S_i S_{i+1} \right) \quad (3.3)$$

と定義する。すると、例えば、隣同士のスピン相関は

$$\Gamma_k(1) = \langle S_k S_{k+1} \rangle = \frac{1}{Z_N} \frac{\partial}{\partial \mathcal{J}_k} Z_N = \tanh \mathcal{J}_k$$

と計算できる。同様に、 r 離れたスピン相関 $\Gamma_k(r)$ は

$$\begin{aligned} \Gamma_k(r) &= \langle S_k S_{k+r} \rangle \\ &= \langle S_k (S_{k+1} S_{k+1}) (S_{k+2} S_{k+2}) \cdots (S_{k+r-1} S_{k+r-1}) S_{k+r} \rangle \\ &= \langle (S_k S_{k+1}) (S_{k+1} S_{k+2}) (S_{k+2} \cdots S_{k+r-1}) (S_{k+r-1} S_{k+r}) \rangle \\ &= \frac{1}{Z_N} \frac{\partial}{\partial \mathcal{J}_k} \frac{\partial}{\partial \mathcal{J}_{k+1}} \cdots \frac{\partial}{\partial \mathcal{J}_{k+r-1}} Z_N \\ &= \prod_{i=1}^r \tanh \mathcal{J}_{k+i-1} \end{aligned} \quad (3.4)$$

と求められる。ここで、イジングスピンに対して $S_{k+1}^2 = 1$ となることを用いた。特に、一様な場合 ($\mathcal{J}_i = \mathcal{J}$) は、 k にはよらず

$$\Gamma_k(r) = \left(\tanh \mathcal{J} \right)^r \quad (3.5)$$

で与えられる。これより、スピン相関の長距離極限が²

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Gamma(r) = \begin{cases} 1 & (T = 0) \\ 0 & (T > 0) \end{cases} \quad (3.6)$$

と求まる²。長距離極限では揺らぎの相関はなくなり、

$$\Gamma(r) = \langle S_k S_{k+r} \rangle \rightarrow \langle S_k \rangle \langle S_{k+r} \rangle \quad (r \rightarrow \infty)$$

となり、スピン相関 (3.6) は $T > 0$ で自発磁化がないこと、

$$\langle S_i \rangle \equiv \langle S \rangle = 0 \quad \text{for } \forall i,$$

すなわち強磁性相が絶対ゼロ度以外で現れないことを意味する。

一方、すでに見たとおり、平均場近似では転移温度が $T_c = J_z/k_B$ であった。つまり、1次元イジングモデルでは実際には $T > 0$ で強磁性相転移しないのに、平均場理論は有限温度での強磁性相転移を与えてしまう。

² 秩序変数の相関の長距離極限を長距離秩序 (*long range order*) と言う。

3.1.2 零磁界帯磁率

零磁界帯磁率

$$\chi_T(T) \equiv \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_{H=0}$$

を求めよう。ここで、磁化 M は

$$M \equiv \mu \sum_{i=1}^N S_i \equiv \mu S_{\text{tot}}$$

である。外部磁場の下でハミルトニアンは、

$$\mathcal{H}_N = - \sum_{i=1}^{N-1} J_i S_i S_{i+1} - \mu \sum_{i=1}^N S_i H \quad (3.7)$$

で与えられるとする。磁化の統計平均は、

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} \mu S_{\text{tot}} = \frac{1}{Z} \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial H} Z$$

と表されるので、帯磁率は、

$$\begin{aligned} \chi_T &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{\partial Z / \partial H}{Z} \right) = \frac{1}{\beta} \left(\frac{(\partial^2 Z / \partial H^2)}{Z} - \frac{(\partial Z / \partial H)^2}{Z^2} \right) \\ &= \beta \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right) = \beta \mu^2 \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left(\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \right) \end{aligned} \quad (3.8)$$

のように、スピンの揺らぎで表される。

この関係式(3.8)は、ハミルトニアン(3.7)における磁場との相互作用項の形から導かれ、1次元イジング系以外でも一般的に成り立つ。また、すでに求めた圧縮率と密度揺らぎの関係(2.40)式と同様の形をしており、これらは、感受率と揺らぎの間に一般に成り立つ揺動散逸定理 (*fluctuation dissipation theorem*) の例である。

特に1次元イジング系では、 $\langle S_i \rangle = 0$ と(3.5)を用いて、 $T > 0$ での帯磁率を以下のように計算できる。

$$\begin{aligned} \chi_T &= \frac{\mu^2}{k_B T} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle S_i S_j \rangle \\ &= \frac{\mu^2}{k_B T} \left\{ N + 2 \sum_{k=1}^{N-1} (N-k) (\tanh \mathcal{J})^k \right\} \\ &= \frac{\mu^2}{k_B T} \left\{ N \left(\frac{1+v}{1-v} \right) - 2v \frac{1-v^N}{(1-v)^2} \right\}; \quad v \equiv \tanh \mathcal{J} \\ &\xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{\mu^2 N}{k_B T} \exp(2J/k_B T) \end{aligned} \quad (3.9)$$

最後の $N \rightarrow \infty$ は、熱力学極限 (*thermodynamic limit*) を意味し、システムサイズ N に比例した示量的な成分のみを残した。

この表式から、帯磁率は T の関数として $T = 0$ に真性特異点もち、その近傍で急激に増大することが分かる。

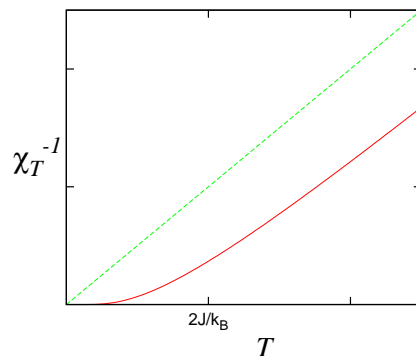


図 3.1: 一次元イジング系の帯磁率の逆数の温度依存性 (赤線)。

問題 3.1 上の帯磁率 (3.9) の導出過程の途中の計算を示せ。

問題 3.2 1次元イジング模型について、エネルギーの期待値を計算し、比熱を求めよ。

3.2 1次元系での相転移の不存在性

厳密解より1次元イジング模型では有限温度で強磁性相転移を持たないことを示したが、ランダウは、

相互作用が有限距離しか及ばない1次元系では、絶対ゼロ度以外で対称性の破れを伴う相転移は起こらない

と一般的に議論した³。具体的には、

物理的に同等で自由エネルギーが同じ状態が複数存在する時、それらが有限温度で巨視的に分離し得るかどうか

ということを、以下のように検討した。

仮に、自由エネルギーが同等な状態が、 n ヶの巨視的な領域に分離したとする。すると、全自由エネルギーは、

- (i) 各領域の内部の自由エネルギー
- (ii) 領域境界ができることによる自由エネルギー

に分けて見積もることができる。(i) は相が物理的に同等なので領域の数 n によらず、それを F_0 と書く。(ii) には、

- (ii-a) 領域境界の自由エネルギー F_B
- (ii-b) 領域境界の配置のエントロピー $-S_c T$

の2つの寄与がある。領域境界の自由エネルギーは、領域間の相互作用が無視できる場合には、一つの境界の自由エネルギーを f_B とすると、

$$F_B = n f_B$$

³ ランダウ・リフシッツ「統計物理学 第3版」(岩波書店), p.673.

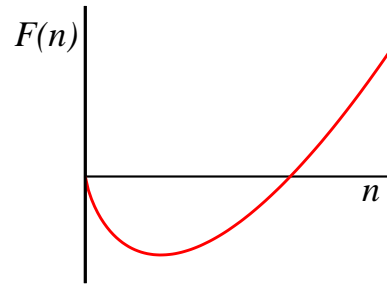


図 3.2: 一次元系の自由エネルギー F の巨視的な領域の数 n への依存性。

で与えられる。一方、領域境界の配置のエントロピーは、系の大きさ L の中に n 本の境界を置く時の配置のエントロピーなので、

$$S_c = k_B \ln \left(\frac{L^n}{n!} \right) \approx k_B n \left[\ln \left(\frac{L}{n} \right) + 1 \right]$$

となる。これらをあわせて、 n 本の領域に分かれた時の全自由エネルギーは

$$F(n) = F_0 + n f_B - k_B T n \left[\ln \left(\frac{L}{n} \right) + 1 \right]$$

となる。実際に実現する領域の数 n はこの自由エネルギーを最小にするものとする、

$$\frac{dF(n)}{dn} = f_B - k_B T \ln \left(\frac{L}{n} \right) = 0$$

より、

$$n = L \exp \left(-\frac{f_B}{k_B T} \right)$$

を得る。即ち、領域の数は系の大きさ L に比例しており、物理的に同等な状態のうちの一つが支配的になるような相が、熱力学極限で安定にならないことを示している。

2次元以上の系では相転移温度が有限になることが可能で、実際に2次元イジングモデルでは強磁性相転移を示す厳密解が得られている⁴。

3.3 転送行列の方法

格子模型の分配関数を求めるのに、転送行列 (*transfer matrix*) と呼ばれるものを用いる方法がある。これを1次元イジング模型を例に解説する。

⁴ 但し、2次元系は相転移に関してはかなり微妙な次元であることが知られている。即ち、2次元系では連続対称性を持つ秩序変数は有限温度でいつもゼロとなることが示されている (Mermin-Wagner(1966)) にもかかわらず、連続な回転対称性を持つ2次元 XY 模型は、有限温度で相転移することが示され、Mermin-Wagner の定理との関係で大きな関心を集めた。 XY 模型の秩序相では転移温度以下でも秩序変数の値はゼロに留まり、Mermin-Wagner の定理とは矛盾しないことが分かっているが、それ自体非常に奇妙なことで、他にも通常の相転移とかなり異なる点がある (BKT 転移, Berezinskii(1971, 1972), Kosterlitz-Thouless(1973))。

周期境界条件の下での1次元イジング模型のハミルトニアンを

$$\mathcal{H}_N = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} - H \sum_{i=1}^N S_i \quad (3.10)$$

とかく。但し、 $S_{N+1} = S_1$ とする。これは、

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N U(S_i, S_{i+1}); \quad U(S_i, S_{i+1}) \equiv -J S_i S_{i+1} - \frac{1}{2} H (S_i + S_{i+1})$$

のように書き直すことができる。これを用いると、分配関数は、

$$\begin{aligned} Z_N(T, H) &= \sum_{S_{1\pm 1}} \cdots \sum_{S_{N=\pm 1}} e^{-\beta \mathcal{H}} \\ &= \sum_{S_{1\pm 1}} \cdots \sum_{S_{N=\pm 1}} e^{-\beta U(S_1, S_2)} e^{-\beta U(S_2, S_3)} \cdots e^{-\beta U(S_N, S_1)} \\ &\equiv \sum_{S_{1\pm 1}} \cdots \sum_{S_{N=\pm 1}} T(S_1, S_2) T(S_2, S_3) \cdots T(S_N, S_1) \\ &= \sum_{S_{1\pm 1}} \left(T^N \right)_{S_1, S_1} = \text{Tr} \left[T^N \right] \end{aligned}$$

と表せる。ここで、 T は $T(S_1, S_2)$ を成分に持つ行列で、転送行列と呼ばれている。その成分を具体的に書くと、

$$T = \begin{pmatrix} T(1, 1) & T(1, -1) \\ T(-1, 1) & T(-1, -1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\mathcal{J}+h} & e^{-\mathcal{J}} \\ e^{-\mathcal{J}} & e^{\mathcal{J}-h} \end{pmatrix}; \quad \mathcal{J} \equiv \beta J, \quad h \equiv \beta H \quad (3.11)$$

である。今の場合、 T は対称なので直交行列で対角化可能であるが、一般には転送行列は対称とは限らない。

T^N の固有値は T の固有値の N 乗で与えられ、トレースは固有値の和で与えられるので、結局、転送行列の固有値を求めれば分配関数が得られることが分かる。

転送行列 (3.11) の固有値 λ_{\pm} は、

$$\lambda_{\pm} = e^{\mathcal{J}} \cosh h \pm \sqrt{e^{2\mathcal{J}} \sinh^2 h + e^{-2\mathcal{J}}}; \quad (|\lambda_+| > |\lambda_-|)$$

で与えられ、分配関数は、熱力学極限で

$$\begin{aligned} Z_N(T, H) &= \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right) \\ &\rightarrow \lambda_+^N \quad (N \rightarrow \infty \text{ 熱力学極限}) \end{aligned}$$

となる。磁場がゼロの時 ($H = 0$) には、

$$\lambda_{\pm} = e^{\mathcal{J}} \pm e^{-\mathcal{J}}$$

なので、

$$Z_N = 2^N \left((\cosh \mathcal{J})^N + (\sinh \mathcal{J})^N \right) \rightarrow 2^N (\cosh \mathcal{J})^N \quad (N \rightarrow \infty)$$

となる。これを以前の結果 (3.2) と比べるとベキが1だけ異なるが、これは境界条件の違いからくる。両者の自由エネルギーは熱力学極限で一致し、どちらも1スピンあたり

$$\frac{F}{N} = -k_B T \ln(2 \cosh \mathcal{J})$$

を与える。

問題 3.3 T^N の固有値は T の固有値の N 乗で与えられ、トレースは固有値の和で与えられることを説明せよ。

第4章 ランダウの古典的現象論

相転移点での熱力学量の特異性は、自由エネルギーが例えば温度 T の関数として $T = T_c$ に特異性を持つことを示している。しかしランダウは、自由エネルギーをオーダーパラメタの関数とみなすことにより解析関数として表されると仮定して、相転移の性質を一般的に議論した。このランダウ理論は、微視的法則に基づく通常の物理の理論と全く異なる理論であった。すなわち、通常の統計物理学の理論では、微視的なハミルトニアンから出発して、分配関数あるいは自由エネルギーを何らかの方法で計算し、系の熱力学的性質や相転移を議論する。それに対して、ランダウ理論では、微視的なメカニズムを離れて巨視的現象論から自由エネルギーの関数形を仮定し、相転移の性質を一般的に議論した。

4.1 ランダウの自由エネルギー

温度 T や外場 H 等の外部環境を与えると、自由エネルギー G やオーダーパラメタ Φ 等の熱力学量は決まってしまう。即ち、 G や Φ は T と H の関数である：

$$G = G(T, H), \quad \Phi = \Phi(T, H). \quad (4.1)$$

相転移がある場合には、これらの関数は特異性を持ち相転移点のまわりに解析関数として展開できない。

しかし、ランダウは、自由エネルギー G が温度 T と外場 H だけではなくオーダーパラメタ Φ にも依存する関数

$$G = G(T, H; \Phi) \quad (4.2)$$

として定義できると考えた。与えられた T と H の下での平衡状態では、オーダーパラメタはこの自由エネルギー G を最小にするものが実現するとした¹：

$$G(T, H) = \min_{\Phi} G(T, H; \Phi), \quad \Phi(T, H) = \arg \min_{\Phi} G(T, H; \Phi).$$

こうすると、自由エネルギー (4.2) の関数形をうまく仮定すれば、相転移の特異性を解析関数から導くことができることを示した。

¹ $\min_x f(x)$ は x を変数としたときの $f(x)$ の最小の値、 $\arg \min_x f(x)$ は $f(x)$ を最小にする変数 x の値を表す。

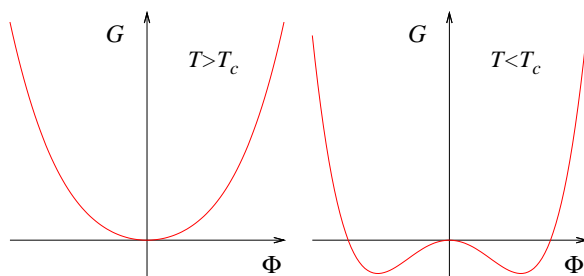


図 4.1: ランダウの自由エネルギー G の秩序変数 Φ 依存性: 外場がなく ($H = 0$)、転移点以上 (左) と以下 (右) の場合の概念図。

4.2 自由エネルギーのオーダーパラメタ展開

相転移を記述するオーダーパラメタ Φ がスカラーで、外場 H がゼロのときに系が $\Phi \leftrightarrow -\Phi$ に対して対称である場合を考える。臨界温度 T_c で2次の相転移があり、臨界温度以上で $\Phi = 0$ 、以下で $\Phi \neq 0$ となるためには、ランダウの自由エネルギーは図 4.1 のような形をしている必要がある:

1. Φ に対して偶関数で、
2. $T > T_c$ では $\Phi = 0$ にただ一つの最小点を持ち、
3. $T < T_c$ では2つの最小点を持つ。

相転移点近傍では秩序変数の値 $\Phi(T, H)$ は小さな値を取るとすると、自由エネルギー $G(T, H; \Phi)$ の $\Phi = 0$ のまわりの展開を用いて相転移が記述できるはずである。自由エネルギー (4.2) が解析関数であると仮定し

$$G(T, H; \Phi) = r(T)\Phi^2 + u(T)\Phi^4 + \dots - H\Phi. \quad (4.3)$$

と展開できるとする。 $H = 0$ の系の対称性から Φ の偶数次項のみが存在する。展開係数 $r(T)$ および $u(T)$ は温度に依存し、最後の項は外場 H との相互作用を表す。

係数 $r(T)$ および $u(T)$ の温度依存性は、 $T > T_c$ で $\Phi = 0$ 、 $T < T_c$ で $\Phi \neq 0$ を与えるもの、即ち自由エネルギーの概形が図 4.1 のようになるようなものでなければならない。そのためには、4次の係数の $u(T)$ はいつも正でなければならない、2次の係数 $r(T)$ は $T = T_c$ で符号を変えなければならないことが分かる。

これらの係数も、自由エネルギーの解析性の仮定から、2次の相転移点 $T = T_c$ のまわりで Taylor 展開できるとすると、上の条件を満たす最も単純な場合は

$$r(T) = a(T - T_c) + O\left((T - T_c)^2\right); \quad a > 0, \quad (4.4)$$

$$u(T) = u + O\left((T - T_c)^1\right); \quad u > 0 \quad (4.5)$$

である。

問題 4.1 ランダウ自由エネルギーの展開係数 $r(T)$ の温度による展開が、

$$r(T) = r_0 + a(T - T_c) + O((T - T_c)^2)$$

だと、相転移は2次ではなく、臨界温度も T_c でなくなることを示せ。

4.3 ランダウ理論による臨界指数

ランダウの自由エネルギーの展開 (4.3)~(4.5) を用いて、いくつかの熱力学量とその臨界指数を計算してみる。

秩序変数 ($H = 0$): $H = 0$ での Φ についての自由エネルギーの最小条件

$$\frac{\partial G}{\partial \Phi} = 2r(T)\Phi + 4u(T)\Phi^3 = 0$$

より、

$$\Phi = \begin{cases} 0 & (T > T_c) \\ \pm \sqrt{\frac{a}{2u}} \sqrt{T_c - T} & (T < T_c) \end{cases} \quad (4.6)$$

をえる。これより、秩序変数についての臨界指数 β は、ランダウ理論では

$$\beta = \frac{1}{2}$$

となることが分かる。

零磁界帯磁率: 零磁界帯磁率

$$\chi = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial H} \right)_{H=0}$$

は、 Φ についての自由エネルギーの最小条件式

$$\frac{\partial G}{\partial \Phi} = 2r(T)\Phi + 4u(T)\Phi^3 - H = 0 \quad (4.7)$$

の両辺を H で微分したもの

$$2r \frac{\partial \Phi}{\partial H} + 12u\Phi^2 \frac{\partial \Phi}{\partial H} - 1 = 0$$

から得られる:

$$\chi = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial H} \right)_{H=0} = \frac{1}{2r + 12u\Phi^2} \Big|_{H=0}$$

この中の Φ^2 に、上で求めた値 (4.6) を入れると

$$\chi = \begin{cases} \frac{1}{2r} = \frac{1}{2a(T - T_c)} & (T > T_c) \\ -\frac{1}{4r} = \frac{1}{4a(T_c - T)} & (T < T_c) \end{cases}$$

となり、これから臨界指数

$$\gamma = \gamma' = 1$$

を得る。

比熱: 比熱は自由エネルギーを用いて

$$C_H = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_H = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_H$$

と表される。 $H = 0$ での秩序変数の値(4.6)を自由エネルギーの表式に入れると、

$$G(T) = \begin{cases} 0 & (T > T_c) \\ -\frac{r^2}{4u} = \frac{a^2}{4u}(T_c - T)^2 & (T < T_c) \end{cases}$$

を得るので、

$$C_H = \begin{cases} 0 & (T > T_c) \\ T \frac{a^2}{2u} & (T < T_c) \end{cases}$$

となる。すなわち、比熱は転移点で不連続になるが発散はしないので、

$$\alpha = \alpha' = 0$$

である。

転移点での秩序変数の磁場依存性: (4.7)式で $T = T_c$ すなわち $r = 0$ を代入すると、

$$4u\Phi^3 = H$$

が得られ、

$$\delta = 3$$

となる。

これらの臨界指数の値はすべて平均場理論のものと同じである。このことは、これまでの平均場理論と同様に、ランダウ理論はオーダーパラメタの平均値からの揺らぎを無視していることから来る。

4.4 空間変化がある場合のランダウ理論

これまで秩序変数 Φ が空間的に変化しないとした。 Φ が \mathbf{r} の関数の時、自由エネルギーは関数 $\Phi(\mathbf{r})$ の関数、即ち汎関数 (*functional*) になる²:

$$G[T, h(\mathbf{r}); \Phi(\mathbf{r})] = \int d\mathbf{r} \left[A(\nabla\Phi(\mathbf{r}))^2 + r(T)\Phi(\mathbf{r})^2 + u\Phi(\mathbf{r})^4 + \dots - h(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r}) \right] \quad (4.8)$$

右辺の第1項は $\Phi(\mathbf{r})$ が空間変化することによる G の増加を表す。この項は、系の対称性の議論より³、空間微分を含む最低次の項は $(\nabla\Phi(\mathbf{r}))^2$ であることが分かる。

² 汎関数については付録を参照。

³ 空間の等方性を仮定すると Φ の空間微分は $\nabla\Phi(\mathbf{r})$ の関数となり、オーダーパラメタに対する対称性($\Phi \leftrightarrow -\Phi$)および空間反転対称性($\mathbf{r} \leftrightarrow -\mathbf{r}$)を仮定すると、 Φ および ∇ の偶数次となる。

問題 4.2 自由エネルギーの空間依存項として、 $\Phi(\nabla^2\Phi)$ も系の対称性を満たし、 $(\nabla\Phi)^2$ と同じ次数である。しかし、空間積分を行うと両者の違いは表面積分に帰着することを示せ。【ヒント】ガウスの定理を用いよ。

4.4.1 空間変化する磁場に対する応答

与えられた温度 T および空間変化する磁場 $h(\mathbf{r})$ の下で実際に実現する $\Phi(\mathbf{r})$ は、自由エネルギー G を最小にするものとする、 $\Phi(\mathbf{r})$ についての汎関数微分がゼロになる条件

$$\frac{\delta G[\Phi]}{\delta \Phi(\mathbf{r})} = 0$$

より

$$-2A\nabla^2\Phi(\mathbf{r}) + 2r\Phi(\mathbf{r}) + 4u\Phi(\mathbf{r})^3 - h(\mathbf{r}) = 0$$

を得る。

磁場 $h(\mathbf{r})$ として波数 \mathbf{k} で空間変化する振幅の小さな平面波

$$h(\mathbf{r}) = \delta h_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

をとり、その結果実現する秩序変数を、 $\delta h_{\mathbf{k}}$ の一次までで

$$\Phi(\mathbf{r}) = \Phi_0 + \delta\Phi_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

とする。これらを (4.4.1) 式に代入し、 $\delta h_{\mathbf{k}}$ および $\delta\Phi_{\mathbf{k}}$ の 1 次まで展開して

$$2r\Phi_0 + 4u\Phi_0^3 + \left[(2Ak^2 + 2r + 12u\Phi_0^2) \delta\Phi_{\mathbf{k}} - \delta h_{\mathbf{k}} \right] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \dots = 0$$

を得る⁴。

ゼロ次の項は、すでに求めた空間変化しない場合の秩序変数を与える。1 次の項がゼロになる条件から、波数 \mathbf{k} の感受率

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{k}} &\equiv \frac{\delta\Phi_{\mathbf{k}}}{\delta h_{\mathbf{k}}} = \frac{1}{2(Ak^2 + r + 6u\Phi_0^2)} \\ &= \begin{cases} \frac{1}{2r(1 + (A/r)k^2)} & (T > T_c) \\ \frac{1}{|r|(1 + (A/2|r|)k^2)} & (T < T_c) \end{cases} \end{aligned} \quad (4.9)$$

を得る。これは

$$\chi_{\mathbf{k}}^{\pm} = \frac{\chi^{\pm}}{1 + \xi_{\pm}^2 k^2}; \quad \xi_{\pm}^2 = \begin{cases} \frac{A}{a(T - T_c)} & (T > T_c) \\ \frac{A}{2a(T_c - T)} & (T < T_c) \end{cases} \quad (4.10)$$

のように書き換えられる。すぐ後で見ると、 ξ_{\pm} は (2.48) で定義した相関距離で、上の表式は臨界指数 ν に対して平均場理論の値

$$\nu = \nu' = \frac{1}{2}$$

を与える。

⁴ $h(\mathbf{r})$ も $\Phi(\mathbf{r})$ も実数でなければならないので、実際には、 $\delta h_{\mathbf{k}}$ の成分に対して $\delta h_{-\mathbf{k}} = \delta h_{\mathbf{k}}^*$ の成分も同時に存在しなければならない。

4.4.2 揺動散逸定理

自由エネルギー (4.8) を用いて、 T と $h(\mathbf{r})$ を与えた場合の $\Phi(\mathbf{r})$ の熱揺らぎに対する統計的重みが

$$P[\Phi(\mathbf{r})] \propto \exp\left[-\frac{G[\Phi(\mathbf{r})]}{k_B T}\right]$$

で与えられるとする。これは規格化因子も含めて

$$P[\Phi(\mathbf{r})] = \frac{1}{Z} \exp\left[-\frac{G[\Phi(\mathbf{r})]}{k_B T}\right]; \quad Z \equiv \int \mathcal{D}\Phi e^{-\beta G}$$

と書ける。但し、 $\int \mathcal{D}\Phi \dots$ は汎関数積分を表す。

空間変化する磁場 $h(\mathbf{r})$ の下での自由エネルギー汎関数 G を

$$G[\Phi(\mathbf{r})] = G_0[\Phi(\mathbf{r})] - \int d\mathbf{r} h(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r})$$

とすると、秩序変数の統計平均は

$$\langle \Phi(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\Phi e^{-\beta G} \Phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{Z} \frac{1}{\beta} \frac{\delta Z}{\delta h(\mathbf{r})} \quad (4.11)$$

によって得られる。

一方、空間変化する磁場 $h(\mathbf{r})$ によって誘起される秩序変数を、磁場の1次までで

$$\langle \Phi(\mathbf{r}) \rangle - \langle \Phi \rangle_0 \equiv \int d\mathbf{r}' \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') h(\mathbf{r}') \quad (4.12)$$

と表せるとする。すると、この両辺を $h(\mathbf{r})$ で汎関数微分することにより

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \frac{\delta \langle \Phi(\mathbf{r}) \rangle}{\delta h(\mathbf{r}')} = \frac{\delta}{\delta h(\mathbf{r}')} \left(\frac{1}{\beta} \frac{1}{Z} \frac{\delta Z}{\delta h(\mathbf{r})} \right) \\ &= \frac{1}{\beta} \left[\frac{1}{Z} \frac{\delta^2 Z}{\delta h(\mathbf{r}') \delta h(\mathbf{r})} - \frac{1}{Z^2} \frac{\delta Z}{\delta h(\mathbf{r})} \frac{\delta Z}{\delta h(\mathbf{r}')} \right] \end{aligned}$$

をえる。但し、2番目の等式では (4.11) 式を用いた。更に、(4.11) 式および

$$\frac{1}{Z} \frac{\delta^2 Z}{\delta h(\mathbf{r}) \delta h(\mathbf{r}')} = \beta^2 \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\Phi e^{-\beta G} \Phi(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}') = \beta^2 \langle \Phi(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}') \rangle$$

より、

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \beta \left(\langle \Phi(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}') \rangle - \langle \Phi(\mathbf{r}) \rangle \langle \Phi(\mathbf{r}') \rangle \right) \\ &= \beta \left\langle \left(\Phi(\mathbf{r}) - \langle \Phi(\mathbf{r}) \rangle \right) \left(\Phi(\mathbf{r}') - \langle \Phi(\mathbf{r}') \rangle \right) \right\rangle \end{aligned}$$

を得る。この式は、局所帯磁率 $\chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ と秩序変数 Φ の相関関数が比例する

$$G_\Phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = k_B T \chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (4.13)$$

ということを表しており、揺動散逸定理にほかならない。

$\chi(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ の定義式 (4.12) の両辺をフーリエ変換すると、これは既に (4.9) 式で定義した波数 \mathbf{k} の感受率 $\chi_{\mathbf{k}}$ と同じものであることが分かる。(4.10) 式と揺動散逸定理 (4.13) より

$$G_{\Phi}(\mathbf{r}) \sim k_B T \frac{e^{-r/\xi_{\pm}}}{r}$$

となる。(2.50) 式と比較すると、ランダウ理論では異常次元 η がゼロになり、Ornstein-Zernike 型の相関関数を与えることが分かる。

4.5 ランダウの現象論の問題点

ランダウの現象論は、臨界点のごく近傍以外では相転移の様相を良く記述することが知られている。しかし臨界点近傍の特異性を表す臨界指数は平均場と同じ値

$$\alpha = \alpha' = 0, \quad \beta = 1/2, \quad \gamma = \gamma' = 1, \quad \nu = \nu' = 1/2, \quad \delta = 3, \quad \eta = 0$$

を与え、実験や数値シミュレーションで得られていた臨界指数

$$\beta \sim 1/3, \quad \gamma \sim 4/3, \quad \nu \sim 2/3, \quad \delta \sim 4.5$$

と一致しない。その理由は、秩序変数 Φ が自由エネルギー G を最小にする値を取るとして、そのまわりの揺らぎを無視しているところにある。

4.5.1 Ginzburg 判定基準

どのような場合に揺らぎを無視したランダウ理論が良い近似となっているかを判定してみよう。ランダウ理論が正しいためには、平均値に比べて揺らぎが無視できなければならない:

$$\left\langle \left(\Phi - \langle \Phi \rangle \right)^2 \right\rangle_{\xi} \ll \langle \Phi \rangle^2 \quad (4.14)$$

但し、左辺の平均 $\langle \dots \rangle_{\xi}$ は相関距離程度の大きさの体積 $\xi^d \equiv V_{\xi}$ に対して取るとする⁵。但し、 d は空間次元である。即ち、この式の左辺を

$$\begin{aligned} \left\langle \left(\Phi - \langle \Phi \rangle \right)^2 \right\rangle_{\xi} &\approx \frac{1}{V_{\xi}^2} \int_{V_{\xi}} d\mathbf{r} \int_{V_{\xi}} d\mathbf{r}' \left\langle \left(\Phi(\mathbf{r}) - \langle \Phi(\mathbf{r}) \rangle \right) \left(\Phi(\mathbf{r}') - \langle \Phi(\mathbf{r}') \rangle \right) \right\rangle \\ &\approx \frac{1}{V_{\xi}} \int_{V_{\xi}} d\mathbf{r} G(\mathbf{r}) \approx \frac{k_B T \chi_0}{V_{\xi}} \end{aligned}$$

のように見積もる。すると、揺らぎが無視できる条件 (4.14) 式は、

$$\frac{k_B T \chi_0}{\xi^d} \ll \langle \Phi \rangle^2$$

⁵ 右辺の $\langle \Phi \rangle$ は平均をとる体積に大きく依存しない。

となる。この式に、ランダウ理論の結果

$$\xi \sim \sqrt{\frac{A}{a|T_c - T|}}, \quad \chi_0 \sim \frac{1}{a|T_c - T|}, \quad \langle \Phi \rangle \sim \sqrt{\frac{a}{2u}} \sqrt{T_c - T}$$

を代入すると、揺らぎが無視できる条件として

$$k_B T_c \frac{2u}{A^{d/2}} [a|T_c - T|]^{d/2-2} \ll 1 \quad (4.15)$$

を得る。これを *Ginzburg 判定基準* (*Ginzburg Criterion*) という。

この基準を見ると、空間次元 d が 4 より大きい場合と小さい場合で、際だった違いがあることが分かる。 $d > 4$ の場合には $d/2 - 2 > 0$ なので、温度 T が十分臨界温度 T_c に近いと、必ずこの基準が満たされる。すなわち、 T_c 近傍でランダウ理論が正しい領域が必ず存在する。一方、 $d < 4$ の場合には $d/2 - 2 < 0$ なので、臨界点に近づくと逆にこの基準が満たされなくなる。すなわち、臨界点近傍に、揺らぎが重要になりランダウ理論が成り立たない領域、つまり *臨界領域* (*critical region*) が必ず存在する。

表式 (4.15) より、空間次元が小さいほど臨界点近傍で揺らぎが重要になることが分かる。相転移に対する熱揺らぎの影響に応じて空間次元に 3 つの領域があり、その境界を示す 2 つの空間次元が重要である。即ち、*上部臨界次元* (*upper critical dimension*) と *下部臨界次元* (*lower critical dimension*) である。上部臨界次元とは、それより高次元では相転移点近傍で揺らぎが無視でき、臨界指数など相転移点近傍での系の振舞がランダウ理論で正しく記述される次元である。一方、下部臨界次元とは、それ以下では揺らぎの影響が大きくなり過ぎて相転移自体が無くなってしまいう次元である。上部臨界次元と下部臨界次元の間では、相転移は存在するが、相転移点近傍に揺らぎの影響が大きくなる臨界領域が存在し、ランダウ理論では臨界指数などが正しく求められない。

これらの次元は系の対称性や秩序変数の型によって異なるが、ここで紹介したイジング型の相転移では、上部臨界次元は 4 で、下部臨界次元は 1 である。

相転移点の近傍の臨界領域の大きさは、相転移の型だけでなく具体的な物質系にも依存する。通常の強磁性相転移や超流動相転移の場合は 1 度程度で、臨界揺らぎが実験的に観測されるが、ランダウがこの理論を考えた典型的な (低温) 超伝導相転移では臨界領域の大きさは 10^{-16} 度と非常に小さく、臨界揺らぎは実験的には観測されない⁶。

⁶転移温度が絶対温度で数十度のいわゆる高温超伝導体では、臨界領域はそれよりずっと大きいことが知られている。

第5章 スケール理論

これまでは、相転移のいわゆる古典論を議論してきたが、いよいよ、現代的な相転移の理論に入ってゆく。まず、2次の相転移点近傍では、いろいろな物理量の外部パラメタに対する振舞が、相転移点までの距離に対して「スケールされる」ということを実験事実として示し、その後、その物理的な背景を議論する。そして次の章では、それを理論的枠組として取り入れた「繰り込み理論」を概説する。

5.1 一般化同次式

具体的な相転移の話をする前に、一般化同次式の定義を述べる。まず、2変数関数 $f(x, y)$ が

$$f(x, y) = ax^p + bx^{p-1}y + cx^{p-2}y^2 + \dots$$

のように多項式で表されたとする。その各項の x と y の次数の合計が全ての項で同じになる時、同次式 (*homogeneous expression*) であるという。このような関数は、

$$f(x, y) = y^p F(x/y)$$

のように、指数 p のベキ関数と1変数関数 $F(s)$ の積で表される。

これを一般化して、2変数関数 $f(x, y)$ が一般化同次式であるとは、

$$f(x, y) = y^p F(x/y^q) \quad (5.1)$$

のように、この関数が、2つの指数 p および q を用いて、 x (または y) のベキ関数と1変数関数の積で表されることをいう。

ある2つの指数 a および b に対して、2変数関数 $f(x, y)$ が任意の正の数 λ に対して

$$f(\lambda^a x, \lambda^b y) = \lambda f(x, y) \quad (5.2)$$

を満たす場合には、この関数は (5.1) 式のように書け、またその逆、すなわち、(5.1) 式を満たす関数 $f(x, y)$ は (5.2) 式を満たすことも容易に示すことができる。

問題 5.1 (5.1) 式の p と q を、(5.2) 式の a と b を用いて表せ。

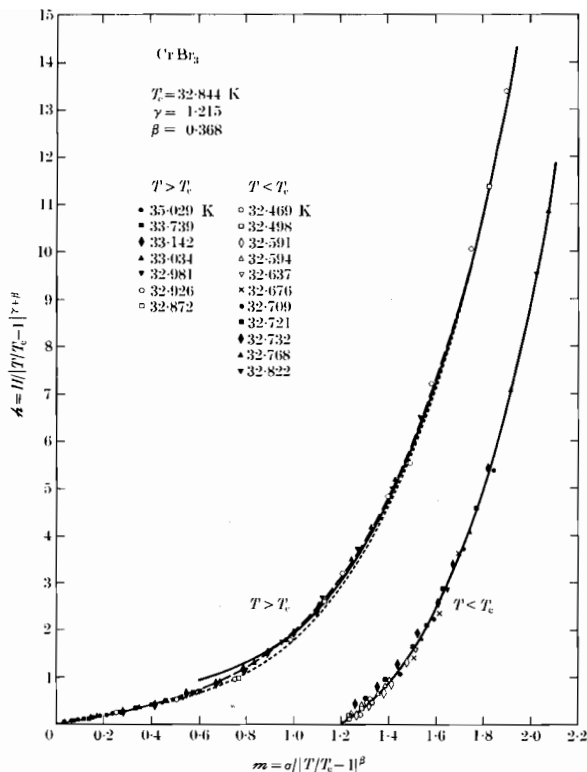


FIG. 11.4. Scaled magnetic field A is plotted against scaled magnetization m for the insulating ferromagnet CrBr_3 , using data from seven supercritical ($T > T_c$) and from eleven subcritical ($T < T_c$) isotherms. Here $\sigma \equiv M/M_0$. After Ho and Litster (1969).

5.2 臨界点近傍での磁化の振舞

さて、磁化 M のような物理量は、温度 T と磁場 H のような複数の外部パラメタの関数として表されるが、実験事実として、臨界点近傍ではそれが一般化同次式になっていることを以下に見てゆく。

既に見てきたように、臨界点 ($T = T_c$) での磁化 M の磁場 H 依存性は、

$$M \propto H^{1/\delta}; \quad (T = T_c) \quad (5.3)$$

と表される。また、臨界点近傍で磁場がない場合 $H = 0$ には、

$$M \propto \begin{cases} 0 & (T > T_c) \\ \pm \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^\beta & (T < T_c) \end{cases} \quad (5.4)$$

のように振る舞う。いずれの場合でも臨界指数を用いてべき関数で表される。

一方、さまざまな温度で磁場 H の関数として磁化曲線を書いてみると、臨界点近傍では、それぞれの温度に対して磁場 H と磁化 M のスケール（目盛の幅）を適当に変えてプロットすることにより、データが、臨界点の上と下でそれぞれ別の1つの曲線の上に重ね合わすことができることが、実験的に示された。更に、このスケールは、磁場および磁化に対してそれぞれ t^Δ および t^β のように、2つの指数 Δ と β を用いて臨界点からのずれ $t \equiv (T - T_c)/T_c$ のべきで表されることが示された。

これはすなわち、温度 T と磁場 H の2変数関数 $M(T, H)$ である磁化

が、1変数関数 $F_M^\pm(s)$ を用いて

$$M(t, H) = \begin{cases} t^\beta F_M^+(H/t^\Delta) & (t > 0) \\ (-t)^\beta F_M^-(H/(-t)^\Delta) & (t < 0) \end{cases} \quad (5.5)$$

のように表されることを意味する。つまり、磁化 M は、臨界点の上と下で関数形は異なるが指数は同じ、温度 t と磁場 H の一般化同次式となっている。

この表式と、上の (5.3) 式や (5.4) 式の振舞と比較する。まず、(5.5) 式が $H = 0$ の時 (5.4) のように振舞わなければならないことから、

$$F_M^+(0) = 0, \quad F_M^-(0) = \text{定数}$$

でなければならない。また、臨界点 $t = 0$ で (5.3) となるためには、 $t \rightarrow 0$ で (5.5) 式の因子 t^β を打ち消さなければならないので、

$$F_M^\pm(s) \sim s^{\beta/\Delta}; \quad (s \rightarrow \infty)$$

でなければならない。その場合、 $t \rightarrow 0$ の極限で

$$M(0, H) \sim H^{\beta/\Delta}$$

となるので、これと (5.3) を比較することにより、指数の関係式

$$\delta = \frac{\Delta}{\beta} \quad (5.6)$$

を得る。更に、(5.5) 式を用いてゼロ磁界帯磁率を計算すると、

$$\chi_T(H = 0) = \left(\frac{\partial M}{\partial H} \right)_{H=0} = |t|^{\beta-\Delta} F_M^{\pm'}(0)$$

となるので、帯磁率の臨界指数 γ は

$$\gamma = -\beta + \Delta = \beta(\delta - 1)$$

となる。但し、2番目の等式では (5.6) を用いた。これは、熱力学から導かれる Widom の不等式 (1.12) を等式にしたものである。

5.3 スケーリング仮説

前節では、(i) 臨界点近傍で特異性を示す物理量が外部変数の一般化同次式になっているらしいこと、(ii) これを仮定すると、臨界指数の間の関係式を導き出すことができ、それが臨界指数に対する熱力学不等式を等式にしたものになっていることを見た。熱力学量の特異性は自由エネルギーの特異部分として表されるので、自由エネルギーの特異部分もやはり一般化同次式になっているはずである。このように、相転移の特異性は一般

化同次式で表されるとする仮定をスケーリング仮設 (*scaling hypothesis*) という。

実際、自由エネルギーの特異部分 $G(t, H)$ がスケーリング仮設を満たすとする、すなわち、任意の数 λ に対し

$$G(\lambda^a t, \lambda^b H) = \lambda G(t, H) \quad (5.7)$$

を満たすとする、磁化は $M = -\partial G / \partial H$ で与えられるので、この両辺を H で微分し

$$\lambda^b \frac{\partial G(\lambda^a t, \lambda^b H)}{\partial(\lambda^b H)} = \lambda \frac{\partial G(t, H)}{\partial H}$$

より、

$$\lambda^b M(\lambda^a t, \lambda^b H) = \lambda M(t, H)$$

すなわち、磁化が一般化同次式で表されることが示せる。

この式で $\lambda^a = 1/|t|$ と置くと、

$$M(t, H) = |t|^{(1-b)/a} M\left(\pm 1, \frac{H}{|t|^{b/a}}\right) \equiv |t|^\beta F_M^\pm\left(\frac{H}{|t|^\Delta}\right)$$

となるので、指数 a および b は臨界指数を用いて

$$a = \frac{1}{\beta + \Delta}, \quad b = \frac{\Delta}{\beta + \Delta}$$

のように表せる。これを用いると、自由エネルギーも同様に、

$$G(t, H) = |t|^{\beta+\Delta} F_G^\pm\left(H/|t|^\Delta\right) \quad (5.8)$$

と表される。

比熱は自由エネルギーを温度で2階微分して得られるので、(5.7)式より

$$\lambda^{2a} C(\lambda^a t, \lambda^b H) = \lambda C(t, H)$$

をえる。 $H = 0$ として、

$$C(t, 0) = \lambda^{2a-1} C(\lambda^a t, 0) = |t|^{-(2a-1)/a} C(\pm 1, 0)$$

となる。但し、 $\lambda^a = 1/|t|$ と置いた。これより、比熱の特異性を表す臨界指数 α は

$$\alpha = 1 - \frac{1}{a} = 2 - (\beta + \Delta) = 2 - \beta(1 + \delta)$$

と表され、(1.11)式を等式にした、Griffith等式

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

をえる。これに Widom 等式を用いると、Rushbrook 等式

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$$

が得られる。

第6章 繰り込み群の方法

前章で、臨界点近傍での物理量の特異部分は、どういうわけかスケールリング仮設を満たし、それを用いると、臨界指数の間に成り立っている関係式(等式)を導き出せることを示した。では、どうしてスケールリング仮設が成り立っているのでしょうか？また、臨界指数が具体的な物質などによらないという相転移の普遍性はどこから来るのでしょうか？

これらの疑問に対して答を出したのが繰り込み群の理論 (*renormalization group theory*) である。Kadanoff は、「相関距離 ξ より小さなブロック内の状態を粗視化しても系の巨視的な振る舞いは記述できるはず」という物理的な考察に基づき、“ブロックスピン”を用いた直観的な議論によってスケールリング仮設が導き出されることを見出した。更に、Wilson は、素粒子物理学の場の理論で発展してきた繰り込み群の理論を臨界現象に応用することによって、具体的に臨界指数などを計算できる理論を構築した。講義では、まず Kadanoff によるブロックスピンの議論を紹介した後、繰り込み群の理論を概説する。

6.1 Kadanoff 構築：ブロックスピンの方法

ハミルトニアンが

$$\beta H_{\Omega} = -K \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum s_i; \quad s_i = \pm 1 \quad (6.1)$$

で表される N スピンからなるイジングスピン系を考える。スピンは d 次元立方格子にならんでおり、格子定数を a とする。

今、臨界温度近傍 $T \approx T_c$ で、相関距離 $\xi(T)$ は格子定数 a よりずっと長いとする。すると、

$$a < \ell a \ll \xi(T)$$

を満たすように整数 ℓ を選ぶことができる。その ℓ を用いて元の系を一辺 ℓa のブロックに分ける。すると、各ブロック内には ℓ^d 個のスピンが含まれるが、ブロックの大きさは相関距離よりもずっと小さいので、ブロック内のスピンは大体そろっている。すると系全体の状態は、各ブロックをそれぞれ一つのスピン (ブロックスピン) で代表させて、おおざっぱには記述できるであろう。

I 番目のブロックスピンを

$$S_I \equiv \frac{1}{\bar{m}_{\ell}} \frac{1}{\ell^d} \sum_{i \in I} s_i; \quad \bar{m}_{\ell} \equiv \frac{1}{\ell^d} \left\langle \left| \sum_{i \in I} s_i \right| \right\rangle \quad (6.2)$$

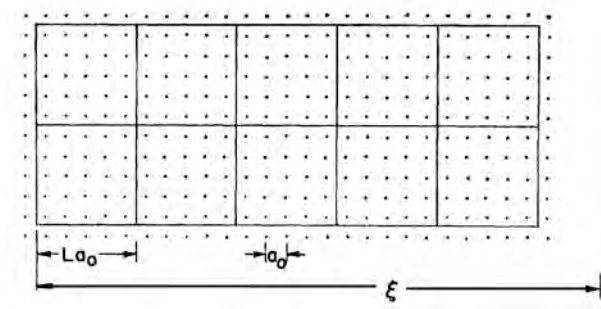


図 6.1: ブロックスピン

と定義すると、各ブロックでの S_I の値はおよそ ± 1 と規格化される。
ここで、以下の2つの仮定をする。

仮定 1: 相転移点の特異性で記述される臨界点近傍の系の巨視的な性質は、ブロック内部の自由度は無視して、ブロックスピン S_I のみで記述できる。

仮定 2: ブロックスピンの振舞は、元のスピン s_i を記述するハミルトニアンと同じ形をした、ブロックスピンに対する実効ハミルトニアン

$$-\beta H_\ell = K_\ell \sum_{\langle I, J \rangle} S_I S_J + h_\ell \sum_{I=1}^{N/\ell^d} S_I \quad (6.3)$$

で記述できる。

ここで、ハミルトニアンに含まれるパラメタの値は元のものとは異なる：

$$K_\ell \neq K = K_1, \quad h_\ell \neq h = h_1.$$

この“実効パラメタ”について、以下のような考察をする。

実効温度 ブロックスピン系ではスピン間の距離が ℓ 倍になっているので、ブロックスピン系が元のスピン系を正しく記述しているのであれば、ブロックスピン間距離 $l a$ を単位として測ったブロックスピンの相関距離 ξ_ℓ と、 a を単位として測った元の系の相関距離 $\xi = \xi_1$ との間には、

$$\xi_\ell = \frac{\xi_1}{\ell} \quad (6.4)$$

の関係が成り立っているはずである。即ち、ブロックスピンを単位とした有効ハミルトニアン (6.3) で記述される系では、元の系より相関距離が $1/\ell$ に短くなっている。このことから、「ブロックスピン系の実効的な温度は元の温度よりも臨界点から離れている」と解釈できる。

実効磁場 ハミルトニアン (6.1) の磁場との相互作用を表す項は、(6.2) 式で定義されたブロックスピンで表すと

$$h \sum_i s_i \approx h \bar{m}_\ell \ell^d \sum_I S_I \equiv h_\ell \sum_I S_I$$

となるから、

$$h_\ell = h \bar{m}_\ell \ell^d \quad (6.5)$$

である。つまり、ブロック内のスピンの大体揃っていれば $h_\ell > h$ となり、実効磁場は元の磁場より大きくなる。

さて、仮定 1 で臨界点近傍の巨視的性質がブロックスピンで記述できるとしたので、相転移を記述する自由エネルギーの特異部分は元のスピン系でもブロックスピン系でも同じでなければならない。元の系はハミルトニアン (6.1) で記述され、ブロックスピン系は (6.3) で記述される。このことから、スピン当たりの自由エネルギーの相転移の特異性に関わる部分を $f_s(t, h)$ とすると、それは

$$N f_s(t, h) = \frac{N}{\ell^d} f_s(t_\ell, h_\ell) \quad (6.6)$$

という関係式を満たすであろう。

最後に、以下の仮定を導入する。

仮定 3: 実効ハミルトニアン H_ℓ のパラメタ、 t_ℓ と h_ℓ は、指数 y_t および y_h を用いて、

$$t_\ell = t \ell^{y_t}, \quad h_\ell = h \ell^{y_h} \quad (6.7)$$

と表される。

すると、(6.6) 式は

$$f_s(t, h) = \ell^{-d} f_s(t \ell^{y_t}, h \ell^{y_h}) \quad (6.8)$$

となる。これは即ち自由エネルギーの特異部分が一般化同次式であるとするスケーリング仮設そのものである。

まとめると、

相転移の特異性がブロックスピンを用いて元の系と同様の実効ハミルトニアンで記述でき、その温度と磁場が元のものと (6.7) の関係があるとする、スケーリング仮設が導き出せる

ということが分かった。

指数 y_t および y_h と臨界指数との関係

(6.8) 式で $\ell^{y_t} |t| = 1$ となるように ℓ をとると、

$$f_s(t, h) = |t|^{d/y_t} f_s(\pm 1, h |t|^{-y_h/y_t}) \equiv |t|^{d/y_t} F_\pm(h |t|^{-y_h/y_t})$$

を得る。これを (5.8) と比較すると、臨界指数との関係

$$\Delta = y_h/y_t, \quad \beta + \Delta = d/y_t$$

が導かれる。

相関関数

元のスピン系でのスピン相関関数を

$$G(r; t, h) \equiv \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle; \quad |i - j| = r$$

ブロックスピン系でのスピン相関関数を

$$G(r_\ell; t_\ell, h_\ell) \equiv \langle S_I S_J \rangle - \langle S_I \rangle \langle S_J \rangle; \quad |I - J| = r_\ell$$

と定義する。ブロックスピン系では長さを測る単位が ℓ 倍なので、

$$r_\ell = r/\ell$$

の関係がある。

式(6.5)と(6.7)から得られる関係式

$$\bar{m}_\ell = \ell^{y_h - d} \quad (6.9)$$

と式(6.2)を用いて、 $G(r_\ell; t_\ell, h_\ell)$ を元のスピン変数で表すと、

$$\begin{aligned} G(r_\ell; t_\ell, h_\ell) &= \frac{1}{\bar{m}_\ell^2 \ell^{2d}} \sum_{i \in I} \sum_{j \in J} [\langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle] \\ &\approx \ell^{-2(y_h - d)} [\langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle] = \ell^{-2(y_h - d)} G(r; t, h) \end{aligned}$$

となる。但し、ブロック内でのスピンの揺らぎは無視した。これより、

$$G\left(\frac{r}{\ell}; t \ell^{y_t}, h \ell^{y_h}\right) = \ell^{2(d - y_h)} G(r; t, h) \quad (6.10)$$

を得る。 $h = 0$ として、更に $|t| \ell^{y_t} = 1$ を満たすように ℓ を取ると、

$$\begin{aligned} G(r; t, 0) &= |t|^{2(d - y_h)/y_t} G\left(r |t|^{1/y_t}; \pm 1, 0\right) \\ &\equiv \frac{1}{r^{2(d - y_h)}} F_G^\pm\left(r/\xi(t)\right) \end{aligned} \quad (6.11)$$

と書ける。ただし、 $\xi(t) \propto |t|^{-1/y_t}$ とした。臨界指数の定義(1.6)および(1.8)式から

$$\nu = 1/y_t, \quad 2(d - y_h) = d - 2 + \eta \quad (6.12)$$

を得る。

これらの議論から分かるように、(6.8)式からすべての臨界指数がただ2つの指数 y_t および y_h から導かれ、それから臨界指数の間の等式すなわちスケーリング関係式が得られる。

Kadanoffのアイデアをまとめると、以下のようになる。即ち、臨界点近傍では相関距離が非常に長くなるので、系を粗視化してブロックスピンを定義でき、それを用いて元の系と同じ形のブロックスピンに対する実効ハミルトニアンを使って系の状態を記述できるのであろう。すると、ス

ケーリング仮説は、実効ハミルトニアンのパラメタが(6.7)式のように変換されるといふ仮定と同等になり、これからスケーリング関係式も得られる。

Kadanoffのブロックスピンの議論は、相関距離が発散することが2次の相転移点で物理量が特異性を持つことの本質であるということを示した。しかし、この議論だけでは指数 y_t や y_h が実際にどんな値を持つか計算できない。また、臨界指数の値が個々の物質によらないという、相転移の普遍性も理解できない。

Kadanoffの議論で一つ注意しなければならないのは、上で述べた、

「系を粗視化しても同じ枠組で記述できる」

ということは、

「粗視化しても系は同じように見える」

ということとは違ふということである。以下で見るように、後者は必ずしも正しくない。一方、これと似ているが微妙に異なる事実、即ち、

「微視的には異なる二つの系が、粗視化することによって巨視的には同じように見える」

場合があることが示され、それが相転移の普遍性の物理的な説明になっている。

次の節で、繰り込み群の理論を概説する。

問題 6.1 式(6.11)の最後の等式を示せ。

6.2 繰り込み群の理論の基本的アイデア

相転移の普遍性を説明し、具体的に臨界指数を計算する手順を与えたのが、この節で概説する繰り込み群 (RG , *Renormalization Group*) の理論である。講義では、基本的なアイデアを説明し、簡単な計算例を示すにとどめる。実際に繰り込み群を用いて研究をするためには、各自で適当なテキストを読んで勉強することが必要である。

繰り込み群の理論は2つのステップからなる：即ち、(i)粗視化（繰り込み変換）の手続きと、(ii)繰り込み変換の解釈である。最初の「粗視化の手続き」にはさまざまな方法があり、技術的にも複雑で分かりにくいことも多い。前節で解説したブロックスピンの方法もその一つであるが、実際の理論ではフーリエ空間での積分表現を用いる方法が数多く工夫されている。

一方、「繰り込み変換の解釈」は、粗視化によって定義されたハミルトニアンの変換を用いて、臨界点や臨界指数、普遍クラスなどが、理論的にどのように表現されるか示すものである。この解釈の部分は、ほとんどすべての繰り込み群の理論で共通である。

6.2.1 繰り込み変換

イジングスピンのブロックスピン変換を例に、粗視化を通じて繰り込み変換がどのように定義されるかを見てゆく。考える系は、ハミルトニアン

$$\begin{aligned}\mathcal{H} \equiv -\beta H_{\Omega} &= K_0 + \sum_i K_1 s_i + \sum_{i,j} K_2 s_i s_j + \sum_{i,j,k} K_3 s_i s_j s_k + \cdots \\ &\equiv \sum_n K_n \Theta_n\{s\}\end{aligned}\quad (6.13)$$

で定義され、スピン変数は $s_i = \pm 1$ の値をとるイジングスピン系である。

粗視化 (*coarse graining*) とはミクロな自由度を消去することである。ここでは、系を一辺の長さ ℓ のブロックに分割し、ブロック内部の自由度を消去して、系の状態を各ブロックごとに定義したブロックスピンで表す事に対応する。粗視化された系の統計分布がブロックスピン S_I の実効的なハミルトニアン \mathcal{H}'

$$\mathcal{H}' = \sum_n K'_n \Theta_n\{S\}\quad (6.14)$$

で記述される時、この粗視化はハミルトニアンのパラメタの変換

$$R_{\ell} : K_n \rightarrow K'_n$$

とみなせる。これを繰り込み変換 (*RGT, Renormalization Group Transformation*) と呼び、

$$[K'] = R_{\ell}[K]; \quad \ell \geq 1\quad (6.15)$$

と書くことにする。

全ての ℓ に対する繰り込み変換 R_{ℓ} の集合は、以下で定義される演算に対して半群をなす¹。即ち、

$$[K'] = R_{\ell_1}[K], \quad [K''] = R_{\ell_2}[K']$$

の時、2つの変換 R_{ℓ_1} と R_{ℓ_2} に対する演算 (積) $R_{\ell_2} \cdot R_{\ell_1}$ を

$$[K''] = R_{\ell_2} [R_{\ell_1}[K]] \equiv R_{\ell_2} \cdot R_{\ell_1}[K]$$

で定義すると、繰り込み変換の集合とこの演算は半群の条件を満たす。

繰り込み変換 R_{ℓ} は、長さスケール ℓ までの自由度の消去を表すので、 $R_{\ell_2} \cdot R_{\ell_1}$ はスケール $\ell_2 \ell_1$ までの自由度を消去したことに対応する:

$$[K''] = R_{\ell_1 \ell_2}[K]$$

これから

$$R_{\ell_1 \ell_2} = R_{\ell_2} \cdot R_{\ell_1}\quad (6.16)$$

を得る。即ち、演算結果 $R_{\ell_1 \ell_2}$ も繰り込み変換である。結合則はこの積の定義から直ちに導かれる。

¹集合の任意の2つの元に対し、その結果も集合内の元である2項演算 (i.e. 積または和) が定義され、その演算が、(i) 結合則、(ii) 単位元の存在、(iii) 任意の元に対する逆元の存在、の3条件を満たす時、その集合は群をなすという。更に、演算が可換であれば可換群 (アーベル群) という。(iii) が成り立たない場合には半群という。

問題 6.2 2項演算 (6.16) が結合則を満たすことを示せ。

$\ell = 1$ の場合、ブロックスピンは元のスピンと同じなので任意の $[K]$ に対して

$$[K] = R_1[K]$$

が成り立ち、

$$R_\ell \cdot R_1 = R_1 \cdot R_\ell = R_\ell \quad (6.17)$$

となる。即ち、 R_1 は単位元である。

一方、 $\ell > 1$ のとき R_ℓ は自由度の消去を表すので、その逆変換 R_ℓ^{-1} は定義できない。消去してしまった自由度は元には戻せないのである。繰り込み変換には逆元が定義できないので、繰り込み群は数学的には半群である。

さて、粗視化されても元々は同じ系なので、粗視化される前と系の自由エネルギー（の特異部分）は同じはずである。そこで、元のスピンハミルトニアン (6.13) から得られる自由エネルギーも、ブロックスピンのハミルトニアン (6.14) から得られる自由エネルギーも同じになるように、ブロックスピンハミルトニアンを定義しよう。

自由度（即ちスピンの数）当たりの自由エネルギーを

$$g[K] \equiv -\frac{k_B T}{N} \ln Z_N[K]; \quad Z_N[K] \equiv \sum_{\{s\}} e^{\mathcal{H}} \quad (6.18)$$

と書くことにする。 $\sum_{\{s\}} \dots$ はすべてのスピン状態についての和を表す。

ブロックスピン S_I は、ブロック I に属するスピン s_i^I の状態から得られる:

$$(s_1^I, s_2^I, \dots, s_{\ell d}^I) \rightarrow S_I$$

今、“多数決原理”でブロックスピンの向きを決めるとすると、

$$S_I = \text{sign} \left(\sum_{i \in I} s_i \right) = \pm 1$$

と表される。この変換に対して自由エネルギーすなわち分配関数が不変となるように、以下のような手続きでハミルトニアンの変換を定義する。

変数空間 $\{s_i\}$ から $\{S_I\}$ への粗視化演算子 P を

$$P(\{s_i\}, \{S_I\}) \equiv \prod_I \delta \left(S_I - \text{sign} \left(\sum_{i \in I} s_i \right) \right)$$

のように定義する。ここで、 $\delta(s)$ の引数 s は整数でクロネッカーのデルタを表す:

$$\delta(s) = \begin{cases} 1 & (s = 0) \\ 0 & (s \neq 0) \end{cases}$$

粗視化演算子 P は、恒等式

$$\sum_{\{S_I\}} P(\{s_i\}, \{S_I\}) = 1 \quad (6.19)$$

を満たす。

この性質を用いると、分配関数 (6.18) をブロックスピン状態の和として表すことができる。即ち、

$$\begin{aligned}
 Z_N[K] &= \sum_{\{s\}} e^{\mathcal{H}[K,s]} \\
 &= \sum_{\{s\}} \left(\sum_{\{S\}} P(\{s\}, \{S\}) \right) e^{\mathcal{H}[K,s]} \\
 &= \sum_{\{S\}} \left(\sum_{\{s\}} P(\{s\}, \{S\}) e^{\mathcal{H}[K,s]} \right) \\
 &\equiv \sum_{\{S\}} e^{\mathcal{H}[K',S]} = Z_{N'}[K']. \tag{6.20}
 \end{aligned}$$

この変形は、恒等式 (6.19) を用いた形式的に厳密なものであるが、ここで定義したブロックスピンのハミルトニアン $\mathcal{H}[K', S]$ が元のハミルトニアン $\mathcal{H}[K, s]$ と同じような形をしている保証はないことを注意しておく。

(6.20) 式の関係を用いると、スピン当たりの自由エネルギー g の関数形について

$$\begin{aligned}
 g[K] &= -\frac{k_B T}{N} \ln Z_N[K] = -\frac{k_B T}{N} \ln Z'_N[K'] \\
 &= -\frac{k_B T}{\ell^d N'} \ln Z'_N[K'] = \ell^{-d} g[K'] \tag{6.21}
 \end{aligned}$$

の関係が得られる。これは (6.6) 式と同じもので、もし、 K と K' の関係が (6.7) 式のようなもので与えられるとすると、(6.21) の関係式はスケールリング仮設 (6.8) あるいは (5.7) を裏付けるものとなる。

K と K' の関係は (6.20) の計算を実際に実行することで得られるが、その変換を厳密に計算するのは一般には難しい。逆に、この手続きを厳密にできたとすると、それは分配関数が計算できたということなので、既に統計力学として問題が解けているということを意味する。わざわざ K の変換規則を求めるメリットはないと思うかも知れない。

繰り込み変換の定式化が実際に意味を持つのは、これが相転移の特異性についての理論であるからである。つまり、それまでの統計力学の理論では、与えられたハミルトニアン (つまり K) に対し、相転移点での物理量の特異性の性質を平均場近似を越えて求めるためには精密な計算が必要であった。それに対して、繰り込み群の理論によれば、以下に見るように、 K から K' への繰り込み変換を近似的にでも計算すれば、相転移の特異性を示す臨界指数が、近似の程度に応じて計算できる。更に、ハミルトニアンのパラメタ K に対する繰り込み変換自体が、相転移点付近での系の振舞を直観的に理解するのに役立つ。

問題 6.3 粗視化演算子 P が恒等式 (6.19) を満たすことを示せ。

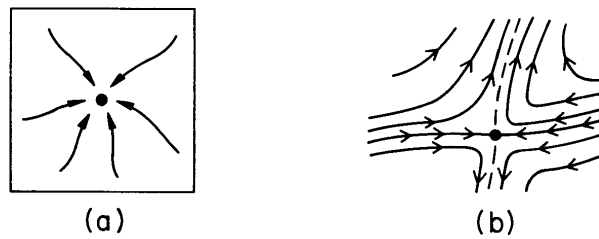


Figure 9.2 Renormalisation group flows near a critical fixed point: (a) View of flows on the critical manifold. (b) View of flows off the critical manifold.

6.2.2 繰り込み変換の解釈

ここでは、繰り込み変換 (6.15) の一般的振舞について考察し、繰り込み変換が相転移の性質にどのように関係しているかを議論する。

固定点: 繰り込み変換で不変な点 K^* を固定点 (*fixed point*) という:

$$[K^*] = R_\ell[K^*]$$

既に見たように、繰り込み変換 R_ℓ は長さスケール ℓ だけ粗視化するので、相関距離は

$$[K'] = R_\ell[K] \quad \text{のとき} \quad \xi[K'] = \frac{\xi[K]}{\ell}$$

のように変換されなければならない。固定点では、この式は

$$\xi[K^*] = \frac{\xi[K^*]}{\ell}$$

となるので、

$$\xi[K^*] = 0, \quad \text{または} \quad \infty$$

である。 $\xi[K^*] = 0$ を与える固定点を自明な固定点 (*trivial fixed point*)、 $\xi[K^*] = \infty$ を与える固定点を臨界固定点 (*critical fixed point*) という。

流れ図: 繰り込み変換 R_ℓ の全体的な様子を理解するために、パラメタ空間中の各点 K が R_ℓ によってどのように移されてゆくか、 ℓ を実数に拡張して流れ図を描くのが便利である。これを見ると、固定点に、吸い込み、湧き出し、鞍点などがあることが直感的に理解できる。

臨界多様体: 臨界固定点を終点とする流線あるいはパラメタ空間内の部分空間を臨界多様体 (*critical manifold*) という。

6.2.3 固定点付近での繰り込み変換の振舞

固定点付近の繰り込み変換の振舞は、臨界指数との関連で特に重要である。固定点付近のパラメタを

$$\vec{K} = \vec{K}^* + \delta\vec{K} \quad \text{あるいは} \quad K_n = K_n^* + \delta K_n; \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

と表し、

$$\begin{aligned} K'_n &= \left(R_\ell[K] \right)_n = \left(R_\ell[K^* + \delta K] \right)_n \\ &\approx \left(R_\ell[K^*] \right)_n + \frac{\partial (R_\ell)_n}{\partial K_m} \Big|_{K=K^*} \delta K_m = K_n^* + \delta K'_n \end{aligned}$$

のように、固定点近傍で繰り込み変換を線形化できるとする。ただし、アインシュタインのルールを用いて m については和を取る。最後の等式の第2項を、行列 $M^{(\ell)}$ を定義して

$$\delta K'_n = M_{n,m}^{(\ell)} \delta K_m; \quad M_{n,m}^{(\ell)} \equiv \frac{\partial (R_\ell)_n}{\partial K_m} \Big|_{K=K^*} \quad (6.22)$$

と書く。一般に、行列 $M^{(\ell)}$ は対称行列ではない。

繰り込み変換の演算公式 (6.16) より、行列 $M^{(\ell)}$ の積に対して

$$M^{(\ell_1 \ell_2)} = M^{(\ell_1)} \cdot M^{(\ell_2)} \quad (6.23)$$

が成り立つことは、容易に示せる。行列 $M^{(\ell)}$ の固有値 $\Lambda_\sigma^{(\ell)}$ 、固有ベクトル \vec{e}_σ を

$$M^{(\ell)} \vec{e}_\sigma = \Lambda_\sigma^{(\ell)} \vec{e}_\sigma; \quad \sigma = 0, 1, 2, \dots \quad (6.24)$$

とする。固有値は ℓ に依存するが、固有ベクトルは ℓ によらないことに注意²。(6.23) および (6.24) より、

$$\Lambda_\sigma^{(\ell \ell')} = \Lambda_\sigma^{(\ell)} \Lambda_\sigma^{(\ell')} \quad (6.25)$$

が得られる。この両辺を ℓ' で微分した後 $\ell' = 1$ と置くと

$$\ell \frac{d}{d\ell} \Lambda_\sigma^{(\ell)} = \frac{d\Lambda_\sigma^{(\ell')}}{d\ell'} \Big|_{\ell'=1} \Lambda_\sigma^{(\ell)} \quad (6.26)$$

を得る。但し、 $\Lambda_\sigma^{(1)} = 1$ を用いた。右辺の係数は ℓ によらない定数なので、

$$y_\sigma \equiv \frac{d\Lambda_\sigma^{(\ell')}}{d\ell'} \Big|_{\ell'=1}$$

と置くと、(6.26) の解は

$$\Lambda_\sigma^{(\ell)} = \ell^{y_\sigma} \quad (6.27)$$

と求まる。つまり、線形化行列 $M^{(\ell)}$ の固有値は ℓ のべきとなる。

固定点からのずれ $\delta \vec{K}$ を固有ベクトル \vec{e}_σ で展開すると、

$$\delta \vec{K}' = M^{(\ell)} \delta \vec{K} = M^{(\ell)} \sum_\sigma a_\sigma \vec{e}_\sigma = \sum_\sigma a_\sigma \Lambda_\sigma^{(\ell)} \vec{e}_\sigma \equiv \sum_\sigma a'_\sigma \vec{e}_\sigma$$

となり、ハミルトニアンのパラメタの固定点からのずれの成分についての繰り込み変換

$$a'_\sigma = a_\sigma \ell^{y_\sigma} \quad (6.28)$$

² $M^{(\ell)}$ の固有ベクトルは、粗視化によって $\delta \vec{K}$ の向きが変わらない方向なので、粗視化の程度 ℓ には依らない。

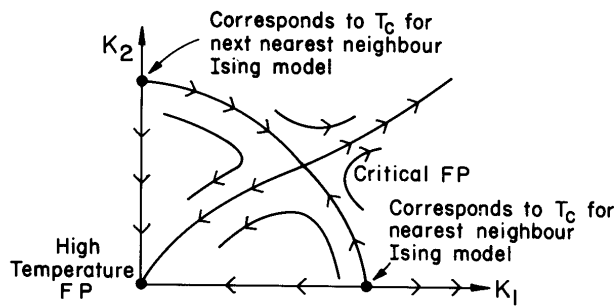


Figure 9.3 Flow diagram for an Ising model with nearest and next nearest neighbour interactions.

が得られた。これはまさに、(6.7) 式の形をしている。

さて、(6.28) 式の物理的意味を考えてみよう。固有値の指数 y_σ が負の値に対応するハミルトニアンのパラメタの成分は、粗視化にしたがって見掛け上だんだん小さくなってゆく。即ち、系の振舞を粗視化すると、ハミルトニアンとその項の影響が実効的に無視できる。そのようなパラメタをイレレバント (*irrelevant*) という。逆に、固有値の指数 y_σ が正の値に対応するハミルトニアンのパラメタの成分は、粗視化にしたがってだんだん大きくなってゆく、即ち、粗視化した系の振舞に大きな影響を与える。そのようなパラメタをレレバント (*relevant*) という。指数 $y_\sigma = 0$ に対応するパラメタはちょうどそれらの境目なので、マージナル (*marginal*) という。

6.2.4 大域的な繰り込み変換の振舞:

大域的な繰り込み変換の振舞と相転移との関係を、強磁性相互作用が次近接格子点まであるイジングスピン系を例にとって議論する。元のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = K_1 \sum_{(i,j) \in \text{n.n.}} s_i s_j + K_2 \sum_{(i,j) \in \text{n.n.n.}} s_i s_j$$

とする。ここで $K_1, K_2 > 0$ である。粗視化されたハミルトニアンも、パラメタ K_1 と K_2 の値は異なるが、同じ形をしているとする。

臨界固定点はパラメタ空間の第1象限にあり、原点は常磁性相に対応する自明な固定点、無限遠は強磁性相に対応する自明な固定点である。

臨界固定点の周りの線形化行列の固有値は正と負の指数で表されるものが一つずつある。臨界固定点につながる安定多様体は K_1 軸および K_2 軸と交っており、不安定多様体は常磁性固定点および強磁性固定点に達している。

最近接相互作用のみがある系は、 $K_2 = 0$ で、 K_1 軸のある点で代表される。無限の高温から温度を下げてゆくと、系はパラメタ空間内で K_1 軸上を原点から正の方向に向かって移動してゆき、転移温度 T_c に対応する点 K_{1c} で、系は常磁性相から強磁性相に転移する。

粗視化した時、実効ハミルトニアンのパラメタは、 K_1 軸から繰り込み変換の流れ図にしたがって移動してゆくが、臨界固定点の安定多様体と

K_1 軸との交点より左ではいずれ常磁性固定点に至り、右ではいずれ強磁性固定点に至る。これは、粗視化した時の系の振舞が、それぞれ常磁性的および強磁性的になることを意味しており、相転移温度に対応する K_{1c} が安定な臨界多様体と K_1 軸との交点で与えられることを示している。

臨界点近傍でのパラメタは、繰り込み変換によって一旦臨界固定点に近付いてから、常磁性固定点あるいは強磁性固定点に向かう。臨界指数は固定点近傍での線形化変換行列の固有値によって決まっている。

一方、次近接相互作用のみがある系は、 K_2 軸上の一点で記述され、温度を下げてゆくにしたがって、 K_2 軸を上へ移動してゆく³。最近接相互作用系の場合と同様に、臨界固定点の安定多様体と K_2 軸との交点が、この系の臨界温度 K_{2c} に対応する。この付近のパラメタは、粗視化に伴い、一旦臨界固定点付近に達した後、常磁性あるいは強磁性固定点に向かう。この場合の臨界指数も、同じ固定点の近傍での線形化変換行列の固有値で与えられることが分かる。

ここで大事なことは、最近接相互作用系と次近接相互作用系では、温度を下げていった時、元の系はパラメタ空間内でそれぞれ別の軸の上を移動する。しかし、粗視化した系の実効ハミルトニアンのパラメタは、臨界点付近でどちらの場合も一旦同じ臨界固定点付近に達する。即ち、臨界温度付近の系の振舞は、粗視化すると、最近接系および次近接系のどちらの系も、同じ臨界固定点の近傍でのパラメタで記述されるということである。

これは、ミクロなレベルでは異なる振舞をするものでも、臨界点近傍の振舞を粗視化すると、同じように振舞っているように見えることを表している。どちらの系も、臨界点近傍の振舞は同じ臨界固定点近傍での繰り込み変換の性質で支配されているのである。

このようにして、繰り込み群の理論によって、相転移の普遍性が説明された。

6.2.5 臨界指数

固有値の指数 y_σ と臨界指数の関係を議論する。

レレバントなパラメタが1つの場合

レレバントなパラメタが1つの場合を考える。温度を変化させた時の相転移を考える場合は、それは温度（の逆数）とみなして良い。

1変数の変換なので、繰り込み変換は

$$T' = R_\ell[T],$$

とかけ、固定点 T^* の周りで線形化すると、

$$t' \approx \Lambda^{(\ell)} t; \quad t \equiv \frac{T - T^*}{T^*}, \quad \Lambda^{(\ell)} \equiv \ell^{y_t}$$

³ 正方格子のように次近接格子点のみの格子が元の格子の副格子をなすような場合は、ここでの例は適切でない。その場合は、最近接相互作用を少し入れて、 K_2 軸ではなく原点を通り少し傾いた軸上を移動してゆく場合を考えることとする。

と書けるので、

$$t' = \ell^{y_t} t$$

となる。

一方、相関距離は繰り込み変換に対して

$$\xi(t) = \ell \xi(t') = \ell \xi(\ell^{y_t} t)$$

となるので、 $\ell = t^{-1/y_t}$ と取ると

$$\xi(t) = t^{-1/y_t} \xi(1)$$

である。これから、臨界指数 ν は

$$\nu = \frac{1}{y_t} \quad (6.29)$$

で与えられる。

自由エネルギー密度 f は

$$f(t) = \ell^{-d} f(t') = \ell^{-d} f(t \ell^{y_t}) = t^{d/y_t} f(1)$$

なので、これを2回温度で微分して比熱の臨界指数 α と比べると

$$2 - \alpha = \frac{d}{y_t} = \nu d \quad (6.30)$$

を得る。これは Josephson の等式 (1.14) である。

レバントなパラメタが2つの場合

外部磁場がかかっている場合はレバントなパラメタが温度 T と磁場 H の2つになる。繰り込み変換を

$$T' = R_\ell^T(T, H), \quad H' = R_\ell^H(T, H)$$

とし、固定点 (T^*, H^*)

$$T^* = R_\ell^T(T^*, H^*), \quad H^* = R_\ell^H(T^*, H^*)$$

とする。固定点のまわりの1次の展開で繰り込み変換は

$$\begin{pmatrix} t' \\ h' \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} t \\ h \end{pmatrix}; \quad M \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial R_\ell^T}{\partial T}, & \frac{\partial R_\ell^T}{\partial H} \\ \frac{\partial R_\ell^H}{\partial T}, & \frac{\partial R_\ell^H}{\partial H} \end{pmatrix} \Bigg|_{\substack{T=T^* \\ H=H^*}}$$

のように行列を用いて表される。ただし、 $t = T - T^*$, $h = H - H^*$ とした。

一般に行列 M は非対称行列であるが、対角化されたものが

$$\begin{pmatrix} t' \\ h' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Gamma_\ell^t & 0 \\ 0 & \Gamma_\ell^h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ h \end{pmatrix}$$

となったとする。すると、指数 y_t, y_h は

$$\Gamma_\ell^t = \ell^{y_t}, \quad \Gamma_\ell^h = \ell^{y_h}$$

で与えられる。繰り込まれた（粗視化された）系のスピンあたりの自由エネルギー $f(t, h')$ 、相関距離 $\xi(t, h')$ と元の系との関係は、

$$f(t, h) = \ell^{-d} f(t', h') = \ell^{-d} f(\ell^{y_t} t, \ell^{y_h} h), \quad \xi(t, h) = \ell \xi(\ell^{y_t} t, \ell^{y_h} h)$$

なので、 $\ell = |t|^{1/y_t}$ と置くことにより

$$f(t, h) = |t|^{d/y_t} f(\pm 1, h/t^{y_h/y_t}), \quad \xi(t, h) = |t|^{1/y_t} \xi(\pm 1, h/t^{y_h/y_t})$$

となり、

$$2 - \alpha = 1/y_t, \quad \Delta = y_h/y_t, \quad \nu = 1/y_t$$

が得られる。

6.3 具体例：三角格子上的イジング模型

繰り込み変換の計算の具体的な例として、2次元三角格子上的イジング模型を取り上げる。ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -\beta H = K \sum s_i s_j + h \sum s_i$$

で与えられる。この系は、Onsager による厳密解が知られていて、

$$K_c \approx 0.27, \quad \nu = 1, \quad \eta = \frac{1}{4} \quad (6.31)$$

が得られている。これから温度と磁場に対する2つの指数 y_t および y_h は式(6.12)

$$y_t = \frac{1}{\nu}, \quad 2(d - y_h) = d - 2 + \eta$$

より

$$y_t = 1, \quad y_h = \frac{15}{8}$$

であることが分かる。以下で、具体的な近似計算によりこの値にどの程度近い値が得られるか確かめる。

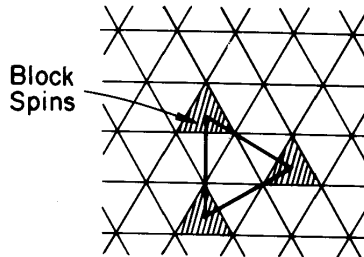


Figure 9.4 Block spin construction for the Ising model on a triangular lattice.

繰り込み変換を、元のスピン3つを一つのブロックスピンで置き換える操作

$$\sigma_I \equiv (s_1^I, s_2^I, s_3^I) \rightarrow S_I$$

で定義する。すると、元の格子と粗視化したブロックスピンの格子との辺の長さの比 l は

$$l = \sqrt{3}$$

となる。ブロックスピン S_I は、多数決原理

$$S_I = \text{sign}(s_1^I + s_2^I + s_3^I)$$

で決める。即ち、 σ_I に属する3つのスピンの8つの状態に対して、 S_I の2つの状態 ± 1 を

$$\begin{aligned} S_I = 1 &\leftrightarrow \sigma_I = \{(1, 1, 1), (-1, 1, 1), (1, -1, 1), (1, 1, -1)\} \\ S_I = -1 &\leftrightarrow \sigma_I = \{(1, -1, -1), (-1, 1, -1), (-1, -1, 1), (-1, -1, -1)\} \end{aligned}$$

のように対応させる。

(6.20)式に従い、ブロックスピン系を記述する有効ハミルトニアン $\mathcal{H}'\{S\}$ を

$$e^{\mathcal{H}'\{S\}} \equiv \sum_{\{s_i\}} P(\{s_i\}, \{S_I\}) e^{\mathcal{H}\{s\}} = \sum_{\{\sigma_I\} \in \{S_I\}} e^{\mathcal{H}\{s\}} \quad (6.32)$$

で定義する。右辺の和はブロックスピンの状態 $\{S_I\}$ を与えるすべてのスピン配置について行なう。

$h = 0$ の場合

まず、磁場がゼロの場合を考える。ハミルトニアンをブロック内の相互作用 \mathcal{H}_0 とブロック間の相互作用 \mathcal{V} に分ける:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}$$

$$\begin{cases} \mathcal{H}_0 = K \sum_I \sum_{i,j \in I} s_i s_j \\ \mathcal{V} = K \sum_{I \neq J} \sum_{i \in I, j \in J} s_i s_j \end{cases}$$

さて、物理量 $A(s_i)$ に対して、ブロックスピン配置 $\{S_I\}$ の下でのブロック内相互作用 \mathcal{H}_0 による粗視化平均 $\langle A(S_I) \rangle_0$ を次のように定義しよう:

$$\langle A(S_I) \rangle_0 \equiv \frac{\sum_{\{\sigma_I\} \in \{S_I\}} e^{\mathcal{H}_0\{s_i\}} A(s_i)}{\sum_{\{\sigma_I\} \in \{S_I\}} e^{\mathcal{H}_0\{s_i\}}}. \quad (6.33)$$

ここで、 $\{\sigma_I\} \in \{S_I\}$ は、スピン配位 $\{\sigma_I\}$ がブロックスピン配置 $\{S_I\}$ を与えるものであることを表す。

これを用いると、(6.32) で定義される有効ハミルトニアン \mathcal{H}' は

$$\begin{aligned} e^{\mathcal{H}'\{S\}} &\equiv \frac{\sum_{\{\sigma_I\} \in \{S_I\}} e^{\mathcal{H}_0 + \mathcal{V}}}{\sum_{\{\sigma_I\} \in \{S_I\}} e^{\mathcal{H}_0}} \sum_{\{\sigma_I\} \in \{S_I\}} e^{\mathcal{H}_0} \\ &= \langle e^{\mathcal{V}(S_I)} \rangle_0 \cdot \sum_{\{\sigma_I\} \in \{S_I\}} e^{\mathcal{H}_0} \end{aligned} \quad (6.34)$$

と表される。

まず、 \mathcal{H}_0 の項の計算をする。 \mathcal{H}_0 はブロック間の相互作用を含まないので、ブロック毎に独立に計算できる：

$$\sum_{\{\sigma_I\} \in \{S_I\}} e^{\mathcal{H}_0} = \prod_I \left(\sum_{(s_1^I, s_2^I, s_3^I) \in S_I} \exp [K(s_1^I s_2^I + s_2^I s_3^I + s_3^I s_1^I)] \right) \equiv Z_0(K)^M$$

但し、 M は系に含まれるブロックの数で、 $Z_0(K)$ は与えられたブロックスピンの下での一つのブロックの状態和であるが、ブロックスピンの向き S_I によらず

$$Z_0(K) = 3e^{-K} + e^{3K}$$

となる。即ち、ブロックスピンのハミルトニアンは

$$e^{\mathcal{H}'\{S\}} = \langle e^{\mathcal{V}} \rangle_0 Z_0(K)^M$$

で与えられる。

次に $\langle e^{\mathcal{V}} \rangle_0$ を \mathcal{V} についての摂動展開で求める。指数関数の平均の展開

$$\langle e^{\mathcal{V}} \rangle_0 = \left\langle 1 + \mathcal{V} + \frac{1}{2} \mathcal{V}^2 + \dots \right\rangle_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \langle \mathcal{V}^n \rangle_0$$

の係数 $\langle \mathcal{V}^n \rangle_0$ は n 次のモーメント (*moment*) と呼ばれている。この両辺の対数を \mathcal{V} の次数で整理したものをキウムラント展開と呼び、 n 次の項を n 次のキウムラント (*cumulant*) という。2次までのキウムラント展開は

$$\begin{aligned} \ln \langle e^{\mathcal{V}} \rangle_0 &= \langle \mathcal{V} \rangle_0 + \frac{1}{2} \left(\langle \mathcal{V}^2 \rangle_0 - \langle \mathcal{V} \rangle_0^2 \right) + 0(\mathcal{V}^3) \\ \langle e^{\mathcal{V}} \rangle_0 &= \exp \left[\langle \mathcal{V} \rangle_0 + \frac{1}{2} \left(\langle \mathcal{V}^2 \rangle_0 - \langle \mathcal{V} \rangle_0^2 \right) + 0(\mathcal{V}^3) \right] \end{aligned}$$

となる⁴。結局、(6.34) 式で定義される有効ハミルトニアン \mathcal{H}' は

$$\mathcal{H}'\{S_I\} = M \log Z_0(K) + \langle \mathcal{V} \rangle_0 + \frac{1}{2} \left(\langle \mathcal{V}^2 \rangle_0 - \langle \mathcal{V} \rangle_0^2 \right) + 0(\mathcal{V}^3) \quad (6.36)$$

と展開された。

⁴ 一般の次数のキウムラント μ_n は、展開パラメタ t を導入して、

$$\ln \langle e^{t\mathcal{V}} \rangle_0 \equiv \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \mu_n t^n \quad (6.35)$$

のように定義される。これから、 $\mu_1 = \langle \mathcal{V} \rangle_0$ 、 $\mu_2 = \langle \mathcal{V}^2 \rangle_0 - \langle \mathcal{V} \rangle_0^2$ 等が計算できる。

$\langle \mathcal{V} \rangle_0$ の項: ブロック間相互作用 \mathcal{V} を

$$\mathcal{V} = K \sum_{I \neq J} \sum_{i \in I, j \in J} s_i s_j \equiv K \sum_{I \neq J} V_{IJ};$$

と書くと、 V_{IJ} は具体的に

$$V_{IJ} = K s_3^J (s_1^I + s_2^I)$$

のように与えられる。(6.33) 式で定義される \mathcal{H}_0 平均は各ブロックで独立なので、

$$\langle V_{IJ} \rangle_0 = 2K \langle s_3^J s_1^I \rangle_0 = 2K \langle s_3^J \rangle_0 \langle s_1^I \rangle_0$$

となる。各ブロックでのスピンの平均は、

$$\begin{aligned} \langle s_3^J \rangle_0 &= \frac{1}{Z_0(K)} \sum_{\sigma_J \in S_J} s_3^J e^{K(s_1^I s_2^J + s_2^I s_3^J + s_3^I s_1^J)} \\ &= S_J \frac{e^{3K} + e^{-K}}{e^{3K} + 3e^{-K}} \equiv S_J \Phi(K) \end{aligned}$$

$$\langle s_1^I \rangle_0 = S_I \Phi(K)$$

となり、結局、

$$\langle \mathcal{V} \rangle_0 = 2K \Phi(K)^2 \sum_{\langle I, J \rangle} S_I S_J$$

を得る。

これまでの結果をまとめると、 \mathcal{V} の 1 次の近似でブロックスピンのハミルトニアン (6.36) は

$$\mathcal{H}'\{S_I\} = M \log Z_0(K) + K' \sum_{\langle I, J \rangle} S_I S_J + O(\mathcal{V}^2); \quad (6.37)$$

と書け、繰り込まれた相互作用パラメタ (温度の逆数) K' は、

$$K' \equiv 2K \Phi(K)^2 \quad (6.38)$$

で与えられる。

(6.38) で与えられる繰り込み変換の固定点 K^* は、

$$K^* \equiv 2K^* \Phi(K^*)^2 \Rightarrow K^* = 0, \infty, K_c$$

の 3 つで、その中の臨界固定点 K_c は

$$\Phi(K_c) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow K_c \approx 0.34$$

である。

一方、繰り込み変換を臨界固定点で線形化すると、

$$\Lambda_t = \left. \frac{\partial K'}{\partial K} \right|_{K=K_c} \approx 1.62 > 1$$

となるので、パラメタ K はレレバントで、指数 y_t として

$$\Lambda_t = \ell^{y_t} \Rightarrow y_t = \frac{\ln \Lambda_t}{\ln \ell} \approx 0.88 \quad (6.39)$$

を得る。但し、 $\ell = \sqrt{3}$ を用いた。

$h \neq 0$ の場合

磁場がゼロでない場合には、ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V} + \mathcal{H}_h; \quad \mathcal{H}_h \equiv h \sum_i s_i = h \sum_I \sum_{i \in I} s_i$$

となる。粗視化されたブロックスピンハミルトニアンは(6.34)式と同様に、

$$e^{\mathcal{H}'\{S\}} \equiv \sum_{\{\sigma_I\} \in \{S_I\}} e^{\mathcal{H}_0 + \mathcal{V} + \mathcal{H}_h} = \langle e^{\mathcal{V}(S_I)} e^{\mathcal{H}_h(S_I)} \rangle_0 Z_0(K)^M$$

で与えられる。

これを \mathcal{V} と \mathcal{H}_h で展開すると、一次までで

$$\langle e^{\mathcal{V}(S_I)} e^{\mathcal{H}_h(S_I)} \rangle_0 = 1 + \langle \mathcal{V} \rangle_0 + \langle \mathcal{H}_h \rangle_0 + \dots$$

となり、粗視化されたハミルトニアンの磁場との相互作用の部分 \mathcal{H}'_h は、1次の近似で

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'_h &\approx \langle \mathcal{H}_h \rangle_0 = \left\langle h \sum_I \sum_{i \in I} s_i \right\rangle_0 = h \sum_I \langle s_1^I + s_2^I + s_3^I \rangle_0 \\ &= h \sum_I 3\Phi(K)S_I \equiv h' \sum_I S_I \end{aligned}$$

で与えられる。つまり、磁場の繰り込み変換は

$$h' = 3\Phi(K)h \tag{6.40}$$

となる。

結局、 K と h の繰り込み変換は(6.38)および(6.40)で与えられる。臨界固定点は

$$K^* = K_c, \quad h^* = 0$$

で、固定点の周りで線形化した繰り込み変換の指数は、既に与えた y_t (6.39) と、

$$\Lambda_h = \left. \frac{\partial h'}{\partial h} \right|_{h=0} = 3\Phi(K_c) = \frac{3}{\sqrt{2}}$$

より得られる

$$y_h = \frac{\ln \Lambda_h}{\ln \ell} \approx 1.37 \tag{6.41}$$

となる。

これらの結果(6.39)および(6.41)は、厳密解からの結果(6.31)と比較できる。

問題 6.4 2次、および3次のキュムラントを、式(6.35)から求めよ。

問題 6.5 定義式(6.22)に従い、 $h \neq 0$ の場合の臨界固定点まわりの線形化された繰り込み変換行列 $M_{i,j}^{(\ell)}$ を求め、その固有値固有ベクトルを求めよ。

付録A 汎関数

例えば、関数 $\phi(x)$ を含む積分

$$F[\phi] = \int (\phi(x)^2 + \phi'(x)^2) dx \equiv \int f(\phi(x), \phi'(x)) dx \quad (\text{A.1})$$

を考えよう。ただし、 $f(\phi, \phi') = \phi^2 + \phi'^2$ とした。この $F[\phi]$ は、関数 $\phi(x)$ が与えられるとそれに対して F の値が一つ決まるので、いわば関数 $\phi(x)$ の関数とみなせる。この様な、関数の関数を汎関数 (*functional*) と呼ぶ。

実数 x の関数 $\phi(x)$ を、

$$\phi(x) \leftrightarrow (\phi(x_1), \phi(x_2), \phi(x_3), \dots) \quad (\text{A.2})$$

のように $x_i (i=1, 2, 3, \dots)$ を無限に細かな間隔でとった極限と考えると、関数 $\phi(x)$ を無限次元のベクトルとみなせる。同様に、汎関数 $F[\phi]$ は、

$$F[\phi] \leftrightarrow F(\phi_1, \phi_2, \phi_3, \dots); \quad \phi_i \equiv \phi(x_i) \quad (\text{A.3})$$

のように考えると、無限個の変数 $\phi_i (i=1, 2, 3, \dots)$ の関数とみなせる。

A.1 汎関数微分

関数 $\phi(x)$ を微小に変化させた時、汎関数 $F[\phi]$ の値がどのように変化するかを考える。関数 $\phi(x)$ が

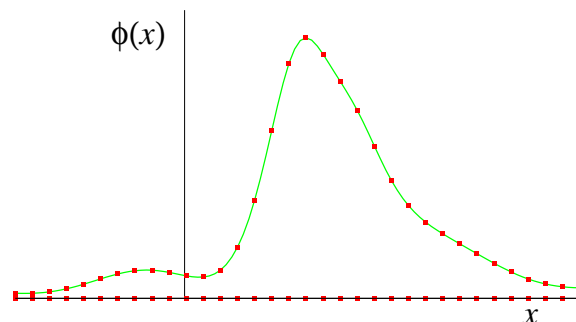
$$\phi(x) \rightarrow \phi(x) + \delta\phi(x) \quad (\text{A.4})$$

と変化した時、汎関数 $F[\phi]$ が

$$F[\phi] \rightarrow F[\phi + \delta\phi] = F[\phi] + \delta F[\phi] \quad (\text{A.5})$$

と変化したとする。任意の $\delta\phi(x)$ に対して $\delta F[\phi]$ がある関数 $h(x)$ を用いて

$$\delta F[\phi] = \int h(x) \delta\phi(x) dx + o(\delta\phi)$$



のように表される場合、 $h(x)$ を $F[\phi]$ の汎関数微分 (functional derivative) といい、 $\frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(x)}$ と表す。即ち、

$$\delta F[\phi] = \int \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(x)} \delta \phi(x) dx + o(\delta \phi). \quad (\text{A.6})$$

ここで例として、(A.1) 式のように、 $F[\phi]$ が $\phi(x)$ と $\phi'(x)$ の関数の積分で表されている場合を考えよう。

$$\begin{aligned} F[\phi + \delta \phi] &= \int f(\phi + \delta \phi, \phi' + \delta \phi') dx \\ &= \int \left[f(\phi, \phi') + \frac{\partial f}{\partial \phi} \delta \phi + \frac{\partial f}{\partial \phi'} \delta \phi' + \dots \right] dx \\ &= F[\phi] + \int \left[\frac{\partial f}{\partial \phi} \delta \phi - \left(\frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \phi'} \right) \delta \phi + \dots \right] dx \quad (\text{A.7}) \end{aligned}$$

ただし、最後の等号では第 3 項に部分積分を行い、更に $\delta \phi$ は積分の両端でゼロであるとした。これより、

$$\delta F[\phi] = \int \left[\frac{\partial f}{\partial \phi} - \left(\frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial \phi'} \right) \right] \delta \phi(x) dx + o(\delta \phi) \quad (\text{A.8})$$

となるので、(A.6) 式より、

$$\frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(x)} = \frac{\partial f(\phi(x), \phi'(x))}{\partial \phi(x)} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f(\phi(x), \phi'(x))}{\partial \phi'(x)} \quad (\text{A.9})$$

を得る。これは解析力学で習った Euler-Lagrange 方程式と同じものである。

関数 $\phi(x)$ を

$$\phi(x) = \int \phi(x') \delta(x' - x) dx' \quad (\text{A.10})$$

のよう表し、無理に汎関数とみなして汎関数微分をとると、(A.9) 式より

$$\frac{\delta \phi(x)}{\delta \phi(y)} = \delta(x - y) \quad (\text{A.11})$$

となる。

問題 A.1 (A.1) 式で f が ϕ の 2 回微分の関数でもある場合、即ち、 $f(\phi, \phi', \phi'')$ の時、(A.9) 式に相当する式を導出せよ。

問題 A.2

$$\frac{\delta \phi^2(x)}{\delta \phi(y)} = 2\phi(x)\delta(x - y)$$

を示せ。

A.2 汎関数積分

汎関数 $F[\phi]$ に対して、“全ての関数” $\phi(x)$ について和をとる操作を

$$\int \mathcal{D}\phi F[\phi] \quad (\text{A.12})$$

と書き、汎関数積分 (*functional integral*) という。汎関数を (A.3) 式のように無限個の変数の関数とみなすと、汎関数積分は

$$\int \mathcal{D}\phi F[\phi] \sim \int d\phi_1 d\phi_2 d\phi_3 \cdots F(\phi_1, \phi_2, \phi_3, \cdots) \quad (\text{A.13})$$

のような無限重積分の極限と考えることもできる。

汎関数積分は Feynman によって量子力学の定式化のために導入され、*径路積分* (*path integral*) とも呼ばれている。