イジング模型の確率幾何的表現による 相転移・臨界現象の解析

北海道大学 大学院 理学院 数学専攻 半田 悟(Satoshi HANDA)

1 導入

1.1 背景

水は0℃で凍りはじめて氷へと状態を変え、100℃で沸騰しはじめて水蒸気へと状態を変える.このように私たちの身の回りには,ある温度を境にして,性質の異なった状態(相)に移り変わる,いわゆる「相転移現象」といわれる物理現象が多くみられる.その境となる温度は「臨界点」といわれる.別の相転移現象としては,鉄は常温において,一度磁場をかけた後,磁場を切ると,その磁場の影響を保つ(自発磁化が存在する)が,770℃という温度を超えると,磁場の影響を保つことができなくなる,という現象が有名である.これは,強磁性相から常磁性相に移り変わるという相転移現象であり,その臨界点はキュリー温度として良く知られている.また,臨界点の周辺では,諸々の物理量が特異的な振る舞いをするという「臨界現象」がみられる.これら臨界点の存在や諸々の臨界現象は,実験的に観測されている.この実験的事実を理論的に説明しようと,統計力学に基づいた数理模型が,それぞれの相転移現象に応じて,考案されてきた.特に,強磁性体の統計力学模型が,1920年にドイツの物理学者ヴィルヘルム・レンツによって考案された.その模型は,レンツの学生であるエルンスト・イジングがその研究を行ったことから,「イジング模型」といわれ,現在にいたるまで,多くの物理学者・数学者が研究を続けている.

1.2 目的

イジング模型に関する未解決問題のひとつに、1-arm 指数 ρ と言われる臨界指数の決定の問題がある。定義等の詳細は後で述べることとする。この 1-arm 指数 ρ は、イジング模型においては 1 であるという予想がされているが、1 という上限評価も下限評価も示されていない。今回は、その上限評価について研究することを目的とした。結果としては、1 という上限評価を厳密に得ることはできていない現状であるが、従来のハイパースケーリング不等式から得られる上限評価を少しだけ改良することができた。証明には、ランダムカレント表現とよばれる確率幾何的な表現を用いる。以下では、イジング模型をスピン系の言葉で定義し、その後、確率幾何的表現であるランダムカレント表現を紹介し、最後に、1-arm 指数の定義や上限評価についてまとめる。

2 イジング模型の定義とランダムカレント表現

2.1 イジング模型の定義と基本的な事実

 Λ 上の各格子点 x に,スピン変数と言われる確率変数 $\sigma_x \in \{+1,-1\}$ を定義する.+1 は格子点 x 上のスピンが上向きの状態にあることを表現し,-1 は下向きの状態にあることを表現している(図 1 参照).格子点上のスピンの組を $\sigma = \{\sigma_x\}_{x \in \Lambda}$ で表し,スピン配位と呼ぶ.またスピン配位全体の集合を S_{Λ} と書くことにする.また, \mathbb{B}_{Λ} は, Λ の二点の組み合わせ全体を表し,その組み合わせをボンドという.このスピン変数たちに確率測度を与えるが,ここでは統計力学で良く用いられるカノニカル分布(ギブス分布ともいわれる)を用いる.その確率測度を用いて,スピン変数たちの積 $\sigma^A = \prod_{x \in A} \sigma_x$ の期待値を以下の様に定義する.

$$\langle \sigma^A \rangle^{BC}_{\Lambda;\beta,h} = \sum_{\sigma \in S_{\Lambda}} \sigma^A e^{-\beta H_h(\sigma)} \ / \ Z(\beta,h).$$

ここで $\beta \in \mathbb{R}^+$ は、逆温度を表すパラメータである。規格化定数に相当する分母を $Z(\beta,h)$ と書き、分配関数 と呼ぶ。指数部分にある $H_h(\sigma)$ は、スピン配位 σ の状態におけるエネルギーを表すハミルトニアンといわれる量であり、

$$H_h(\sigma) = -\sum_{\{x,y\} \in \mathbb{B}_{\Lambda}} J_{x,y} \sigma_x \sigma_y - h \sum_{x \in \Lambda} \sigma_x$$

と定義される。ここで、 $h \in \mathbb{R}$ は、考えている系にかけている外部磁場の大きさを表すパラメータである。 $J_{x,y}$ は相互作用定数といわれる、 2 つのスピンの間の相互作用の大きさを表す定数である。 平行移動不変性 (並進対称性) $(J_{x,y} = J_{o,y-x})$ と強磁性 $(J_{x,y} \ge 0)$ を仮定しておく。また、外部磁場がかかっていないときの ハミルトニアン $H_0(\sigma)$ を単に、 $H(\sigma)$ と表すことにする。

次に、境界条件について述べる。 ハミルトニアン $H_h(\sigma)$ を用いて定義されたイジング模型は、自由境界条件をもつといわれる。 さらに、 Λ の外部境界が +1 のスピンで囲まれている状況を考えたハミルトニアン $H_h^+(\sigma)$ 、つまり、

$$H_h^+(\sigma) = H_h(\sigma) - \sum_{x \in \Lambda, y \notin \Lambda} J_{x,y} \sigma_x$$

を用いたときを、プラス境界条件という.

と定義する。BC というのは、境界条件を表し、free、+ でそれぞれ表すことにする。

自発磁化 $m_s(\beta)$ を,

$$m_s(\beta) = \lim_{h \downarrow 0} \lim_{\Lambda \to \mathbb{Z}^d} \left\langle \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{x \in \Lambda} \sigma_x \right\rangle_{\Lambda;\beta,h}^{BC} = \dots = \left\langle \sigma_o \right\rangle_{\mathbb{Z}^d;\beta}^+$$

と定める。 $m_s(\beta)$ は、磁場を無くしたあとに磁性がどうなるかを表している。実際には、高温相(逆温度 β が小さいとき)では、この値は 0 であり、低温相(逆温度 β が大きいとき)では、正にもちあがる(図 2 参照)。これは熱揺らぎとスピンの協力現象のバランスによるものと解釈できる。この境目に相当するのが臨界点である。背景でも述べたように、一般に温度などのパラメターを変化させたときに、ある値を境に物質の性質が定積に変化する現象を相転移という。イジング模型において、その性質を表す物理量のひとつが、上記で定義した自発磁化である。イジング模型において臨界点は、その自発磁化を用いて次のように定義される。

$$\beta_c = \inf\{\beta \ge 0 \mid m_s(\beta) > 0\}.$$

 $\beta<\beta_c$ を高温相といい, $\beta>\beta_c$ を低温相という.定義から高温相では自発磁化は 0 であり,低温相では正にもちあがる.特に最近接格子模型においては, $d\geq 2$ で β_c が 0 でも $+\infty$ でもない有限な値になることが知られており,相転移の存在が結論づけられる.また臨界点の直上や近傍では,それらの物理量が冪的な特異性を示す.このような振る舞いを一般的に臨界現象と呼ぶ.その冪指数たちを臨界指数と呼ぶ.臨界点は考えている物理系の細かい定義によって変わるが,臨界指数はそういった詳細に依らず,次元や対称性だけで決まるものと信じられている.そのため,物理系は臨界指数によって分類できるとされており,イジング模型においても,その臨界指数を求めることは重要であり,大きな目的となっている.次の節で 1-arm 指数と呼ばれる臨界指数を与える.

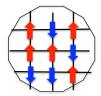


図1 各格子点上のスピン変数の向き

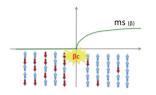


図 2 イジング模型の臨界現象

2.2 ランダムカレント表現と源泉の移し替え補題の帰結

Proposition 2.1 (ランダムカレント表現 [3]).

$$\langle \sigma^A \rangle_{\Lambda}^+ = \sum_{\substack{m{n} \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{B}_{\Lambda \cup \{g\}}} \\ \partial m{n} \cap \Lambda = A}} rac{w(m{n})}{ ilde{Z}(m{eta})}.$$

まず、この命題に出てくる記号等を説明する。非負整数の組 $n=\{n_b\}_{b\in\mathbb{B}_\Lambda}\in\mathbb{Z}_+^{\mathbb{B}_\Lambda}$ を「カレント配位」といい、 n_b をボンド b 上の「カレント」という。 ∂n は格子点の集合で、「源泉」と呼ばれ、以下のように定義される。

$$\partial {\pmb n} = \{\; z \in \Lambda \; | \; \sum_{b \ni z} n_b \text{ は奇数 } \}.$$

ここで $w(\mathbf{n}) = \prod_{b \in \mathbb{B}_{\Lambda}} \frac{(\beta J_b)^{n_b}}{n_b!}$ を重みと呼ぶ。 $g \notin \mathbb{Z}^d$ は,ゴーストサイトと言われる点で,ある意味 Λ の外部境界を一点とみた点であり,内部境界の点は g との間にもボンドがあり,そこにもカレントがふられている.上記の命題における右辺の式の表現を「ランダムカレント表現」という.特に,次節で定義する 1-arm 指数を定義する際に用いられる $\langle \sigma_o \rangle_r^+$ という,「半径 r の d 次元球上の臨界点直上におけるプラス境界条件のもとでの一点関数の期待値」をランダムカレント表現すると次のようになり,また下図 3 のようになる.

$$\langle \sigma_o \rangle_{\beta_c, r}^+ = \sum_{\substack{m{n} \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{B}_{B_r} \cup \{g\}} \ \partial m{n} \cap B_r = \{o\}}} rac{w(m{n})}{\tilde{Z}(eta)}.$$

赤い線は奇数の線で、青い線は0でない偶数の線を表している。源泉が B_r の中ではoだけなので、赤い線でoと境界に対応するgがつながらなければならない。このランダムカレント表現の導出は、カノニカル分布における確率の重みに相当する、指数関数の部分をテイラー展開することによる。

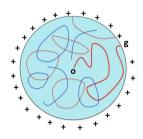


図 3 $\langle \sigma_o \rangle_{\beta_c,r}^+$ に対するランダムカレント表現

最後に、ランダムカレント表現において重要な等式を紹介しておく。これは、全体のグラフを部分グラフへと 分ける場合の数、という組み合わせ論的な等式として、証明される。

Proposition 2.2 (源泉の移し替え補題の帰結 [3]).

$$\sum_{\substack{\boldsymbol{m} \in \mathbb{Z}_{+}^{\mathbb{B}_{\Lambda \cup \{g\}}} \\ \partial \boldsymbol{m} = A}} \sum_{\substack{\boldsymbol{n} \in \mathbb{Z}_{+}^{\mathbb{B}_{\Lambda \cup \{g\}}} |_{B} \\ \partial \boldsymbol{n} = \{x,y\}}} w(\boldsymbol{m}) w(\boldsymbol{n}) = \sum_{\substack{\boldsymbol{m} \in \mathbb{Z}_{+}^{\mathbb{B}_{\Lambda \cup \{g\}}} \\ \partial \boldsymbol{m} = A \triangle \{x,y\}}} \sum_{\substack{\boldsymbol{n} \in \mathbb{Z}_{+}^{\mathbb{B}_{\Lambda \cup \{g\}}} |_{B} \\ \partial \boldsymbol{n} = \emptyset}} w(\boldsymbol{m}) w(\boldsymbol{n}) \mathbf{1} \{x \underset{\boldsymbol{m} + \boldsymbol{n}}{\longleftrightarrow} y \text{ in B} \}.$$

ここで、 $\mathbb{Z}_{+}^{\mathbb{B}_{\Lambda \cup \{g\}}}|_{B}$ は B 内のボンド上でのみ 0 でない値をとるカレント全体の集合とする。 \triangle は集合の対称差である。事象 $\{x \underset{m+n}{\longleftrightarrow} y \text{ in } B\}$ は,格子点 x,y が B 内のボンドで,m+n のカレント和が 0 でないものを使ってつながるという事象を表している。二つのスピン変数たちの期待値の積を考えるときに,それらをカレント表現で書くと二つのカレントが表れ,それを式変形する際に役立つ等式である。例えば,以下のようなものがある。

$$(\langle \sigma_o \rangle_r^+)^2 = \sum_{\substack{\boldsymbol{m} \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{B}_{B_r} \cup \{g\}} \\ \partial \boldsymbol{m} \cap B_r = \{o\}}} \sum_{\substack{\boldsymbol{n} \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{B}_{B_r} \cup \{g\}} \\ \partial \boldsymbol{n} \cap B_r = \{o\}}} \frac{w(\boldsymbol{m})w(\boldsymbol{n})}{\tilde{Z}(\beta)^2} = \sum_{\substack{\boldsymbol{m} \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{B}_{B_r} \cup \{g\}} \\ \partial \boldsymbol{m} \cap B_r = \emptyset}} \sum_{\substack{\boldsymbol{n} \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{B}_{B_r} \cup \{g\}} \\ \partial \boldsymbol{n} \cap B_r = \emptyset}} \frac{w(\boldsymbol{m})w(\boldsymbol{n})}{\tilde{Z}(\beta)^2} \mathbf{1}\{o \underset{\boldsymbol{m} + \boldsymbol{n}}{\longleftrightarrow} g\}.$$

3-1-arm 指数 ho の上限評価

3.1 臨界指数の定義

まず、臨界指数 $\rho > 0$ は次のように定義される.

$$\langle \sigma_o \rangle_{\beta_c, r}^+ \simeq r^{-\rho}.$$

ここで,臨界点直上であることに注意する.自発磁化の式をみると, $r\to\infty$ に相当するものであることが分る.臨界点直上の自発磁化の値は 0 であり,臨界点で連続であることが知られている.つまり,この臨界指数は,r が大きくなっていくとき,半径 r の d 次元球上の β_c 直上での自発磁化は r のどのくらいの冪で 0 に減衰するかを表す指数である.

3.2 主定理と予想

Theorem 3.1.

d>4 におけるイジング模型に対して,1-arm 指数 ρ の存在と $\langle \sigma_o \sigma_x \rangle_{\mathbb{Z}^d}^{\text{free}} symp (|x| \lor 1)^{2-d}$ を仮定する.このとき, $\rho \leq \frac{d-3}{2}$ である.特に,d=5 においては, $\rho \leq 1$ である.

Conjecture 3.2.

d>4 におけるイジング模型に対して,1-arm 指数 ρ の存在と $\langle \sigma_o \sigma_x \rangle_{\mathbb{Z}^d}^{\text{free}} \asymp (|x| \lor 1)^{2-d}$ を仮定する.このとき, $\rho \le 1$ である.

パーコレーションという別の模型での 1-arm 指数 ρ_{pc} が,d>6 において 2 であることが厳密に示されており [1],イジング模型でも,対応する 1-arm 指数を決定しようということが最大の目標となっている.イジング模型では d>4 において 1 であることが信じられているので,まずは,上からの評価だけでも導出しようという試みである.ハイパースケーリング不等式(最後に載せておく)という不等式から,d>4 では $\rho \leq \frac{d-2}{2}$ であるということが知られている.ここに,d として $d+\epsilon$ ($\epsilon>0$) をいれてみると, $\rho \leq 1+\frac{\epsilon}{2}$ であることが示されるのだが, $\epsilon>0$ であるから,1 よりも真に大きい可能性が排除できない.従って,その可能性を排除でき,1以下であるということ示すだけでも大きな進歩なのである.これまでに得られた結果としては,d>4 においては $\rho \leq \frac{d-3}{2}$ であるという, $\rho \leq 1$ に比べると非常に弱いものになっているが,上述のハイパースケーリング不等式から得られる結果よりも, $\frac{1}{2}$ だけ精度が良くなっている.一般の d>4 の場合は,示すことができなかったので,Conjecture としている.下からの評価 $\rho \geq 1$ についても,将来的な課題であり,これが解決されると,臨界指数 ρ が d>4 で1 であることが完全解決されるのである.証明に関しては,あるスピン変数らの期待値の積を考え,それらをランダムカレント表現し,源泉の移し替え補題の帰結等を用いて,不等式評価をし,再びスピン系の表現に戻すことでなされる.

Theorem 3.3 (ハイパースケーリング不等式 [2]). *d* 次元の有限レンジのイジング模型は次の不等式を満たす.

$$d-2+\eta \geq 2\rho$$
.

d>4 において $\eta=0$ であるという事実を用いると, $\rho \leq \frac{d-2}{2}$ が得られる.

参考文献

- [1] G. Kozma and A. Nachmias. Arm exponents in high dimensional percolation. *J. Amer. Math. Soc.* **24** (2011): 375–409.
- [2] H. Tasaki. Hyperscaling Inequalities for Percolation. Commun. Math. Phys. 113 (1987): 49–65.
- [3] 田崎 晴明,原 隆. 相転移と臨界現象の数理. 共立出版株式会社 (2015)