Kobe University Repository : Kernel

PDF issue: 2026-11-21

密度行列繰込み群による古典スピン系の臨界現象の解析

上田，幸治

(Degree)
博士（理学）

(Date of Degree)
2008-03-25

(Date of Publication)
2008-05-08

(Resource Type)
doctoral thesis

(Report Number)
甲4164

(URL)
https://hdl.handle.net/20.500.14094/D1004164

※ 当コンテンツは神戸大学の学術成果です。無断複製・不正使用等を禁じます。著作権法で認められている範囲内で、適切にご利用ください。

博士論文

密度行列繰込み群による
古典スピン系の臨界現象の解析

平成 20 年 1 月

神戸大学大学院自然科学研究科

上田　幸治

要旨

物質は温度や磁場, 圧力など外界の状況に応じて様々な「相」(状態) をとる. 適当な条件の下で温度を変化させると, ある相から別の相へと移り変わる「相転移現象」が見られる. 系が相境界になる外部条件は「相転移点」と呼ばれる. 相転移現象は磁化などの「秩序パラメータ」によって定量的に表現でき, 秩序パラメータの連続性によって分類される. 例えば, 水の気液相転移では秩序パラメータである密度が不連続な「一次相転移」, 強磁性体の磁気相転移は磁化が連続で「二次相転移」である.

二次相転移では, 温度や磁場, 圧力に対する熱力学量の依存性にベキ的な特異性を示す「臨界現象」が観測される. 臨界現象が起きる相転移点は特に「臨界点」と呼ばれる. 熱力学量が示すベキ指数は臨界現象を定量的に特徴づける量で「臨界指数」と呼ばれる. 様々な系に対して臨界指数が調べられた結果, 由来の異なる 2 つの物理系で同じ臨界指数の値をもつことが稀ではないことが判明してきた. 系の詳細によらない臨界指数の値の一致は臨界現象に普遍的な背景があることを示している. この「普遍性」をもとに, 臨界現象を「普遍性クラス」と呼ばれる同じ臨界指数の値をもつグループに分類できる.

相転移現象を説明する理論にはランダウ理論があり, 臨界現象にも定性的な説明を与える. ただし, 臨界指数については単一の普遍性クラス (ガウス普遍性クラス) しか導くことができない. より一般的に普遍性を説明し得る理論がその後提案された. ウィドムは「スケーリング理論」において, 臨界点近傍の自由エネルギーの特異性を議論し, 臨界指数間で成り立つ関係式である「スケーリング則」を導いた. カダノフは, 物理系に対して「粗視化」と呼ばれる操作を導入し, ウィドムの理論に微視的な解釈を与えた. ウィルソンはカダノフの粗視化を発展させた「繰込み群」を提案し, 臨界現象に統一的な概念を構築した. 繰込み群では, 系のハミルトニアンに繰込み群変換を繰り返して施し, 有効ハミルトニアンの流れを眺める. 系のハミルトニアンから臨界現象に重要な情報のみを残す繰込み群変換によって普遍性が説明できるのである. グリフィスは, 臨界現象に対する理論的解析を考察し, 「臨界指数の値が, 系の詳細に依存せず, 次元 · 秩序パラメータの対称性 · 相互作用の到達距離などに依存する」とする「普遍性仮設」を提唱した.

古典スピン系は相転移現象や臨界現象の理論的な解析に有用である. 磁気相転移を記述するイジング模型を例にして普遍性を確かめてみよう. 簡単のために, 規則格子上で相互作用の到達距離が短い場合を想定すると, 空間次元 d が普遍性クラスの決定に重要であることがわかる.

- $d = 2$: 格子の形状に依らず「イジング普遍性クラス」が現れる.
- $d = 3$: 数値解析により臨界指数の値が求められているが, 普遍性クラスは明確には特定されていない.
- $d \geq 4$:「ガウス普遍性クラス」が現れる.

2 次元古典スピン系においては, 厳密解や共形場理論が適用でき, 臨界現象の分類が比較的進んでいる. 例えば内部自由度が Z_2 対称性をもつイジング模型や Z_q 対称性をもつ q

状態ポッツ模型についてハミルトニアンと普遍性クラスの関係が明らかになっている．6 バーテックス模型や 8 バーテックス模型を始めとする可解系についても普遍性クラスが明らかになっている．ただし, あらゆる模型に対して普遍性クラスの特定が完了しているわけではない．(第 3 章)

このような背景の下で, 本研究では 2 次元古典スピン系の臨界現象に関して, 2 つの課題に取り組んだ．一つは, 双曲平面上における強磁性イジング模型の臨界現象の解析である．系が負の一定のガウス曲率をもつ双曲平面上に置かれたときに, 臨界現象にどのような影響が現れるかを調べることが目的である．この系は, 空間次元が 2 のイジング模型であることから, イジング普遍性クラスに属する臨界現象を示すと予想できる．ところが, 最近の報告では, イジング普遍性クラスから外れる現象が示され, ガウス普遍性クラスが実現すると推測されている．本研究で, 双曲平面上の五角格子イジング模型の振る舞いを精密に調べた．結果, 臨界現象がガウス普遍性クラスに属することが判明した．また, 臨界温度がベーテ格子で実現する値に近いことも明らかになった．(第 4 章)

もう一つの課題は, 未解析なバーテックス模型についての普遍性クラスの決定である．バーテックス模型は, 非常に広大なパラメータ空間を持ち, 厳密解が得られる一部のパラメータの領域を除き解析が進んでいない．本研究では, 一例として, 対称 10 バーテックス模型を選び数値解析を行った．新たな臨界点が見つかり, イジング普遍性クラスに属することを明らかにした．(第 5 章)

本研究の解析は数値的手段によって行った．ホワイトにより提唱された 1 次元量子系に対する数値繰込み群手法である「密度行列繰込み群」は, 2 次元古典スピン系へも適用可能である．これより派生した手法に「角転送行列繰込み群」があり, 本研究では主に同手法を用いた．これに加えて, 様々な数値手法の開発も研究の一環として行った．列挙すると, ①角転送行列繰込み群の枠組みの中でスピン配置のスナップショットを生成する方法の開発, ②双曲平面に適用できる形式への角転送行列繰込み群の改良, ③ 積波動関数繰込み群の変分的な視点からの解明などがある．(第 6 章)

双曲平面上の統計模型に対する今後の展望には, 繰込み群による理論的な解明と q 状態ポッツ模型や q 状態クロック模型などに対する数値解析を挙げておく．バーテックス模型については, より広いパラメータ領域へと解析を進めることを展望に挙げておく．このような拡張されたバーテックス模型は高分子模型への応用も期待できる．(第 7 章)

目 次

第 1 章　研究の背景 **5**
1.1　相転移と臨界現象 6
1.2　古典スピン系で眺める普遍性 7
1.3　目的と課題 11
1.4　数値解析手法 11

第 2 章　臨界現象に関する理論 **13**
2.1　ランダウ理論 14
2.2　スケーリング理論とスケーリング則 15
2.3　実空間繰込み群と普遍性 19

第 3 章　古典スピン系の臨界現象 **23**
3.1　古典スピン系 24
3.2　厳密に解ける模型 25
3.3　2 次元古典スピン系の臨界現象の分類 26

第 4 章　双曲平面上のイジング模型における普遍性 **29**
4.1　双曲平面上のイジング模型 30
4.2　五角形張り合わせ格子上のイジング模型 33
4.3　数値解析により得られた結果 34
4.4　結論と議論 34

第 5 章　対称 10 バーテックス模型の臨界点 **37**
5.1　16 バーテックス模型 38
5.2　対称 10 バーテックス模型 43
5.3　数値解析により得られた結果 45
5.4　結論 48

第 6 章　数値解析手法の紹介および開発 **49**
6.1　古典スピン系に対する数値計算手法 50
6.2　角転送行列繰込み群 50
6.2.1　アルゴリズム 50
6.2.2　熱力学量の解析 59

6.3 角転送行列繰込み群によるスナップショット生成アルゴリズム 61
6.4 双曲平面上への角転送行列繰込み群の変形 68

第 7 章 まとめと展望 **75**

付 録 A 平均場相互作用をもつ 1 次元イジング模型 **79**

第１章　研究の背景

身近な物質の一つである水 (H_2O) が温度および圧力の大きさに応じて気相 · 液相 · 固相を示すことはよく知られている. 常圧下での温度変化から, 気液相転移および液固相転移が観察できる. 相転移現象の例をもう一つ挙げるなら, 強磁性体の磁気相転移が代表的である. 外場なしで温度を変化させると, ある温度 (=相転移点) を境にして, スピン磁気モーメントの平均値である磁化の値が 0 から有限 (または有限から 0) へと連続的に変化する. 磁化の値が 0 の時を非磁性状態 (無秩序相), 有限の時を強磁性状態 (秩序相) と呼ぶ. 磁化のように相の秩序を特徴づける量は「秩序パラメータ」と呼ばれる. 相転移点での秩序パラメータの値が連続である相転移は「二次相転移」と呼ばれ, 相転移点近傍で「臨界現象」が起きる. このときの相転移点は特に「臨界点」と呼ばれる.

臨界現象では熱力学量の温度および磁場依存性にベキ的な特異性を伴う. 熱力学量のベキの強さは「臨界指数」とよばれ, 臨界現象を定量的に記述する. 臨界指数に関して 2 つのことが明らかになっており, [1] 一つは臨界指数の間に成り立つ関係式「スケーリング則」である.[6] もう一つは, 臨界指数の値が, 系の詳細に一々依存せず, 系の次元や対称性など基本的な要素にのみ依存性を示す「普遍性」である. 普遍性から, 臨界指数の値ごとに「普遍性クラス」と呼ばれるグループへの臨界現象の分類を示唆する.

臨界現象を理論的に解析する系の一つが古典スピン系である. 2 次元古典スピン系では, 起こり得る普遍性クラスに対して共形場理論により分類が行われ, [38][39][46][47] 厳密解 [37] や 数値解析 [87] によって系が属する普遍性クラスの特定が進められている. このような背景から, 本研究では 2 次元古典スピン系における 2 つの課題に取り組む. ①双曲平面上へ置いた強磁性イジング模型を用いて, 負の曲率が臨界現象へ及ぼす影響を研究する (第 4 章). ②未解析なバーテックス模型の普遍性クラスの特定を進める (第 5 章).

1.1　相転移と臨界現象

物質は, 磁場や温度, 圧力などの外的な要因に応じて, 様々な「相」(状態) をとる. 外的な要因を連続的に変化させたとき, ある相から別の相へと移り変わる「相転移」と呼ばれる現象が観測されることがある. 相転移が起きるときの外部条件を「相転移点」と呼ぶ. 各相の区別には秩序を定量化した「秩序パラメータ」を用いると便利である. 相転移点での秩序パラメータの連続性から相転移現象の種類分けができ, 不連続なときを「一次相転移」, 連続なときを「二次相転移」と呼ぶ.

相転移現象が観測される身近な物質は水 (H_2O) である. 外部圧力や温度に応じて気相 (水蒸気)・液相 (水)・固相 (氷) の 3 相が現れる. 常圧のもとで温度を連続的に変化させると, 沸点と融点において潜熱を伴う一次相転移が起きる. 気液相転移が起きる沸点では, 秩序パラメータである密度が不連続に変化する. いまひとつの相転移の例に, 強磁性体の磁気相転移を挙げる. 強磁性体には, 磁気モーメントに相当するスピンが平均的にそろった強磁性相 (秩序相) とバラバラに向いた非磁性相 (無秩序相) がある. これらの相を区別する秩序パラメータは磁化である. 外場なしでの磁化の温度依存性を図 1.1 に示す. 強磁性体では, 相転移点で磁化の値が連続に変化する 「二次相転移」が起きる.

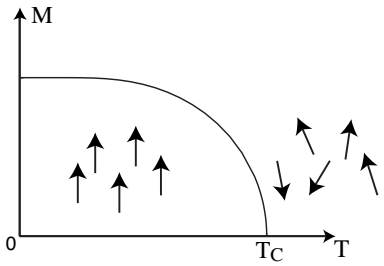


図 1.1: 強磁性体における磁化 M の温度 T 依存の模式図. (ただし外部磁場なし.) 高温側から温度を下げると, 磁化 M の値は臨界温度 $T = T_C$ を境界に 0(無秩序相) から有限 (秩序相) へ連続的に変化する二次相転移を示す.

二次相転移を伴う相転移点近傍では, 熱力学量が示す温度や磁場などの変数依存性にベキ的な特異性が現れる. このような現象は「臨界現象」と呼ばれ, 臨界現象の起きる相転移点は「臨界点」と呼ばれる. 熱力学量に現れるベキの指数は「臨界指数」と呼ばれ, 臨界現象を定量的に記述する. ただし, 各熱力学量は異なる強さのベキを示すので, 各ベキごとに臨界指数が定義される. 例えば, 磁性体では, 比熱 C, 磁化 M, 帯磁率 χ が温度 T, 磁

場 h に対して以下の特異性を示す.:

$$C \sim \begin{cases} \left(\frac{T-T_C}{T_C}\right)^{-\alpha}, & (T > T_C, h = 0) \\ \left(\frac{T_C-T}{T_C}\right)^{-\alpha'}, & (T < T_C, h = 0) \end{cases} \tag{1.1}$$

$$M \sim \left(\frac{T_C - T}{T_C}\right)^{\beta}, \qquad (T < T_C, h = 0) \tag{1.2}$$

$$\chi \sim \begin{cases} \left(\frac{T-T_C}{T_C}\right)^{-\gamma}, & (T > T_C, h = 0) \\ \left(\frac{T_C-T}{T_C}\right)^{-\gamma'}, & (T < T_C, h = 0) \end{cases} \tag{1.3}$$

$$M \sim h^{1/\delta}. \qquad (T = T_C) \tag{1.4}$$

ここで, $T = T_C$ が臨界温度である. 指数 α, α', β, γ, γ', δ が臨界指数である. 様々な系で臨界指数が求められた結果,[1] 臨界指数の間に次のような関係式が見つかっている.

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \tag{1.5}$$

$$\beta(\delta - 1) = \gamma, \tag{1.6}$$

$$\alpha = \alpha', \ \gamma = \gamma'. \tag{1.7}$$

他にも臨界指数の間で成り立つ関係式が見つかり, まとめて「スケーリング則」[6] と呼ばれている. スケーリング則は独立な指数が 2 つであることを意味している.

臨界現象には, 由来の異なる系の臨界指数が同じ値になることが稀でなく, 系の詳細に一々影響を受けない「普遍性」が存在することが明らかになってきた. この普遍性により, 臨界現象を臨界指数の値ごとに「普遍性クラス」というグループに分類できる. グリフィスは, 普遍性に対して「臨界指数の値が, 系の詳細に依存せず, 系の次元 · 秩序パラメータの対称性 · 相互作用の到達距離に依存する」とする「普遍性仮設」を提唱した. [14]

1.2 古典スピン系で眺める普遍性

統計模型で見つかっている臨界現象を例にして普遍性について見ていこう.[1] 代表的な例としてイジング模型を取り上げる.[19] 強磁性イジング模型のハミルトニアンは

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i, \tag{1.8}$$

である. ここで, $\sigma = \pm 1$ はイジングスピンを, $J > 0$ は強磁性的スピン相互作用を, h は磁場を示す.

正方格子イジング模型はオンサガーによって厳密な分配関数が求められ, 臨界指数の値も判明している. [21][37][24][25][26] 臨界点近傍の比熱の振る舞いが対数発散する.:

$$C \sim -\log(|T - T_C|). \tag{1.9}$$

表式 (1.1) との比較から臨界指数は $\alpha' = \alpha = 0$ となる. 他の熱力学量に関する臨界指数も厳密に求められた.

正方格子以外の場合も含めた臨界指数の値を表 1.1 に示す. ランダウ理論の臨界指数の値は「4 次元以上」または「無限レンジ相互作用」[3][4] のイジング模型における値に対応する. 三角格子および蜂の巣格子を図 1.2 に示す. 表 1.1 からスケーリング則について確認できる.

表 1.1: 強磁性イジングスピン系の臨界指数と普遍性クラス

	ランダウ理論	正方 [21][22]	三角 [23][37]	蜂の巣 [23][37]	単純立方 [27]
α	0	0(対数)	0(対数)	0(対数)	0.110±.002
α'	0	0(対数)	0(対数)	0(対数)	0.110±.002
β	1/2	1/8	1/8	1/8	0.3267±.0010
γ	1	7/4	7/4	7/4	1.237±.002
γ'	1	7/4	7/4	7/4	1.237±.002
δ	3	15	15	15	4.786±.014
普遍性クラス	ガウス	イジング			-

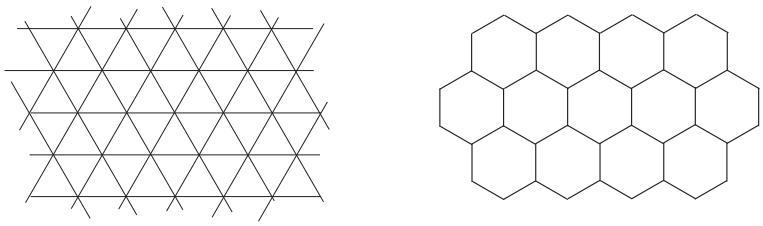


図 1.2: 三角格子 (左) と蜂の巣格子 (右).

表 1.1 には強磁性イジング模型が属する普遍性クラスも挙げた. 「イジング普遍性クラス」は 2 次元平面上のイジング模型が属する普遍性クラスである. 格子の形状や付加的な短距離強磁性相互作用は普遍性に影響しない. イジング普遍性クラスと異なる「ガウス普遍性クラス」[1]も知られていて, 臨界指数はランダウ理論の値を示す. このクラスには, 無限レンジ模型 [3][4] などの長距離相互作用系や次元数が 4 以上の系が含まれる. 3 次元系の臨界現象は普遍性クラスは特定されていないが, イジング普遍性クラスおよびガウス普遍性クラスには属さない.

普遍性仮設に述べられている臨界指数に影響を及ぼす系の基本的な要素のうち, 系の次

[1] ϕ^4 模型 (Landau-Ginzburg-Wilson 模型) で起きる臨界現象は 4 次元以上の場合には「ガウス模型」[31] に帰着する. [11] 4 次元以上のガウス模型の臨界現象はランダウ理論で厳密に記述でき, 繰込み群の固定点は「ガウス固定点」と呼ばれる.

元および相互作用の到達距離に関してはイジング模型の臨界現象から確認できる. 秩序パラメータの対称性に関しては, 2 次元強磁性 q 状態ポッツ模型の臨界現象で確認しておこう. ハミルトニアンは

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(\sigma_i^{potts}, \sigma_j^{potts}), \tag{1.10}$$

である. ここで, σ^{potts} はイジングスピン変数を 2 状態から q 状態まで拡張したスピン変数である. 強磁性ポッツ模型は「秩序パラメータの対称性が Z_q」である. 2 次元系では q に応じて相転移の次数が異なり, $2 \leq q \leq 4$ の場合には二次相転移が, $q > 4$ の場合には一次相転移が起きる. 臨界指数を表 1.2 に示す. q の値に応じて, すなわち秩序パラメータの対称性に応じて臨界指数の値が変わることが表から読み取れる.

表 1.2: 2 次元強磁性 q 状態ポッツ模型の臨界指数 [29]

	$q=2$	3[29][39]	4[29][44]
α	0(対数)	1/3	2/3
β	1/8	1/9	1/12

このように古典スピン系の臨界現象を通して, スケーリング則や普遍性といった臨界現象の性質が確認できる. 古典スピン系に対する理論的な解析を含めた「臨界現象の理論的解明の概略」を表 1.3 にまとめた. 表中から, 2 次元古典スピン系に関しては, いくつかの模型に対して分配関数の厳密解が求られてきたこと [37] や起こりうる普遍性クラスが「共形場理論」により分類されてきたことが読み取れる. 共形場理論は中心電荷 c を用いて普遍性クラスを分類し, [38][45][47][48] 例えば, $0 < c < 1$ の場合は, c は離散的な値になり, 各値が普遍性クラスに対応する. ただし, 模型のハミルトニアンが与えられても, 直ちにどのような普遍性クラスに属するかは容易にはわからない. [5] このように, 2 次元古典スピン系の臨界現象の解析は比較的進められてきている. 現在も 2 次元古典スピン系に対して研究が行われていて, 例えば, 普遍性クラスの特定が済んでいない系に対する解析や, 既知の系を土台にして新たな変形を加えたときの臨界現象への影響の解析などが進められている.

表 1.3: 臨界現象の理論的研究の概略

西暦	理論	古典スピン系の厳密解	解析手法	備考
1907	ワイス理論 [15]			強磁性体に対する平均場理論
1937	ランダウ理論 [16]			臨界現象の定性的な説明
1941			クラマースワニエ法 [32]	古典スピン系の変分的解法
1944		正方格子イジング模型 [21]		ランダウ理論と厳密に異なる臨界指数
1937,49			級数展開 [17][18]	臨界指数の近似計算
1951			菊池の近似法 [33]	クラスター変分法
1952		球形模型 [31]		3 次元系の厳密解, ガウス模型の提案
1953			メトロポリス法 [88]	モンテカルロ法
1965	スケーリング理論 [7]			スケーリング則の導出
1966	カダノフの粗視化 [8]			スケール変換の微視的考察
1967		6 バーテックス模型 [70][72]		
1970	普遍性仮設 [14]			臨界指数が依存するパラメータ
1971	繰込み群 [10]			臨界現象の統一的説明, 普遍性の説明
1971		8 バーテックス模型 [76]		弱い普遍性 [77] ヤンバクスター方程式 [37]
1973	実空間繰込み群 [12]			
1979			モンテカルロ繰込み [89]	実空間繰込み群 + モンテカルロ法
1981			ビンダーパラメータ [90]	有限サイズスケーリングの改良
1984	共形場理論 [38]			普遍性クラスの分類 (2 次元古典スピン系)
1987			SW 法 [92]	遅い臨界緩和の解消
1989			ウルフ法 [93]	遅い臨界緩和の解消
1992, 95			DMRG[96][99]	

1.3 目的と課題

以上のような背景から本研究では 2 次元古典スピン系の臨界現象に関する 2 つの課題に取り組む. 一つ目は, 「負の一定のガウス曲率を持つ双曲平面上に系をのせたときの臨界現象に現れる影響」の研究である. 強磁性相互作用イジング模型を双曲平面上の格子にの

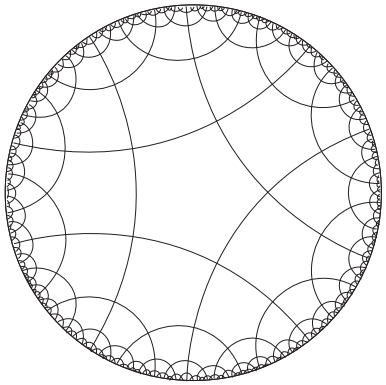


図 1.3: 双曲平面上の五角格子 (配位数 4)

せても系は空間次元が 2 のままである. だからといって, 臨界現象がイジング普遍性クラスに属すると直観的に考えてはいけない. 最近の研究 [52][53] から, イジング普遍性クラスからの逸脱が報告され, ガウス普遍性クラスに属すると推測されている. 本研究では, 図 1.3 の格子上のイジング模型について熱力学関数を求め, 普遍性クラスの特定を行う.

もう一つの課題は, 「16 バーテックス模型に含まれる未解析な模型の解析並びに臨界指数の同定」である. 16 バーテックス模型 [37][61] は広大なパラメータ空間を有する.[61] 一部の部分空間である 6 バーテックス模型や 8 バーテックス模型などには, 厳密解 [61][37] または数値解析 [62] による解析が行われてきたが, 未解析なパラメータ領域もある.

1.4 数値解析手法

分配関数を厳密に求めることが困難な系には解析的な近似法や数値解析が有用である. 代表的な数値解析手法の一つに, モンテカルロ法 [87] があり, 統計模型の解析には最もよく使われる. 最近, 遅い臨界緩和の問題が徐々に克服され, 古典スピン系の多くの模型を扱えるようになっている.

本研究では密度行列繰込み群およびその変形を用いる. 密度行列繰込み群 [96] はもともと 1 次元量子スピン系の解析手法として提案されたが, 2 次元古典スピン系にも適用できる. [99] 密度行列繰込み群の利点の一つは, 反復的な計算により徐々に系のサイズを拡大する点であり, 臨界現象を調べる外挿法 (有限サイズスケーリング) を容易に適用できる. 本研究の解析には, 密度行列繰込み群の変形である「角転送行列繰込み群」を主に用いた.

本研究では数値解析手法の開発も行った. 一つは, 角転送行列繰込み群の枠組みで得られるスナップショット生成アルゴリズムである.[106] いま一つは, 双曲平面上の格子統計模型に対する角転送行列繰込み群の変形である.[50] また, 本稿では述べないが, 積波動関数繰込み群 [115] を拡張し, 高速化および基礎解明も行った. [120]

第2章　臨界現象に関する理論

相転移現象の理論で代表的な一つがランダウ理論である. 臨界点近傍での自由エネルギーに秩序パラメータによる展開形を仮定して, 臨界現象を定性的に説明する. ただし, 普遍性に対してはあらゆる臨界現象がガウス普遍性クラスに属すると結論づけられる. ウィドムのスケーリング理論 [7] は, 自由エネルギーの特異性が温度および磁場に対するスケール変換に対して同次関数になると仮定し, スケーリング則を導いた. カダノフは, 臨界点近傍でのイジング模型に「粗視化」を行い, ウィドムが議論したスケール変換に対する微視的な解釈を与えた. [8] また, 熱力学量に関する臨界指数とスピン対相関関数に関する臨界指数を結ぶ関係式を導出した. ウィドムとカダノフの理論をまとめて「スケーリング理論」と呼ぶこともある. スケーリング理論における注目すべき点は, 熱力学量および相関関数に関する 9 つの臨界指数が独立な 2 つの指数のみで記述できることである.

ウィルソンは, カダノフの粗視化を発展させ, 「繰込み群」を提案した.[10][13] 系のハミルトニアンへ「繰込み群変換」を反復的に作用し, 有効ハミルトニアンの流れを記述する. 流れを眺めると系のハミルトニアンに含まれる不必要な情報が徐々に消え, 固定点は数個の情報のみで支配されることを確認できる. このことが繰込み群による普遍性の説明である.

グリフィスは, 古典スピン系の臨界現象に関する理論的解析への考察を通して, 臨界指数に関して「普遍性仮設」を提唱した.[14] : 「臨界指数の値は, 系の詳細によらず, 系の次元, 秩序パラメータの対称性, 相互作用の到達距離に依存する.」

2.1　ランダウ理論

臨界現象に関する理論的な研究は古くからあり, 代表的な研究には, ファンデルワールスの気液相転移, ワイス [15] やランジュバンによる磁気相転移の考察がある.[1] 両者の理論は平均場的に相転移・臨界現象を記述した点で共通している. 体系的に平均場近似によって相転移・臨界現象を扱った理論が以下に述べるランダウ理論 [16] である.

外部磁場のない場合の強磁性体の 2 次相転移を例にして考えていく. ランダウ理論では, 臨界点近傍の自由エネルギーを秩序パラメータの磁化 M で偶数ベキで展開する:

$$F = aM^2 + bM^4, \tag{2.1}$$

ここで, a と b は適当な温度に依存する係数である. 自由エネルギー (2.1) は「ランダウ自由エネルギー」とも呼ばれる.

係数 a, b を決定しよう. 係数 b は正にとる必要がある. なぜならば, b を負とすると, いくらでも大きな M の値が自由エネルギーを最小にするからである. 従って, $b > 0$ とおき, a の値を考察する. 強磁性体では, 臨界温度 T_C よりも高温 $(T > T_C)$ のときは磁化 $M = 0$ になり, $T_C < T$ のときは磁化が有限な値になる. このことから, 係数 a の温度依存性は, $a > 0 (T > T_C)$, $a < 0 (T < T_C)$ とする必要がある. 係数 $a(T)$ を $T - T_C$ に関して展開し,

$$a = a_0(T - T_C), \tag{2.2}$$

とする. ここで, a_0 は温度に依存しない係数である.

ランダウ自由エネルギー (2.1) から臨界点近傍の熱力学量の振る舞いを導こう. 熱平衡状態では自由エネルギーが最小になることから, 自由エネルギーの M に関する微分係数が 0 になる. 従って, 磁化 M が

$$M = 0, \ \pm\sqrt{a_0(T_C - T)/2b}, \tag{2.3}$$

となる. $T > T_C$ のとき磁化 $M = 0$ であり, $T \leq T_C$ では磁化は $\pm\sqrt{a_0(T_C - T)/2b}$ である. 表式 (2.1) から他の熱力学量も求めることができる. ただし, 磁場依存性を考慮する場合には, ランダウ自由エネルギー (2.1) に外部磁場との相互作用項および磁化の奇数次の項を含めた表式を扱うことになる.

ランダウ理論の臨界指数は, 平均場理論と同じ値,

$$\alpha = 0, \ \beta = 1/2, \ \gamma = 1, \tag{2.4}$$

を示す. ランダウ理論で記述される臨界現象は「ガウス普遍性クラス」に属する. また, 臨界指数の値はスケーリング則を満たす.

2.2 スケーリング理論とスケーリング則

ウィドムの静的スケール仮設

熱力学量は熱力学ポテンシャルの微分量である．このことから, 臨界点近傍の熱力学量に現れる特異性は熱力学ポテンシャルに内在すると考えられる．ウィドムは「臨界点近傍における熱力学ポテンシャルの特異部が変数のスケール変換に対する同次関数になる」ことを仮定しスケーリング則を導いた．ウィドムの仮定は「静的スケール仮設」と呼ばれる．[7]

静的スケール仮設から, 自由エネルギーの特異部 $f(t,h)$ が任意のパラメータ λ によるスケール変換に対して

$$f(\lambda^{a_t}t, \lambda^{a_h}h) = \lambda f(t,h), \tag{2.5}$$

となる．ここで, 簡単のために無次元化された温度

$$t = (T_C - T)/T, \tag{2.6}$$

を用いた．h は磁場である．a_t, a_h はパラメータである．

熱力学量の特異性を式 (2.5) の t や h についての微分から求める．磁化の特異部 $M(t,h)$ は, h の微分から,

$$\lambda^{a_h} M(\lambda^{a_t}t, \lambda^{a_h}h) = \lambda M(t,h), \tag{2.7}$$

である．ここで, $\lambda = t^{-1/a_t}$, $h = 0$ とすると

$$M(t,0) = t^{(1-a_h)/a_t} M(1,0) \sim t^{(1-a_h)/a_t}, \tag{2.8}$$

となる．臨界指数 β の定義式を思い出せば, β は

$$\beta = (1-a_h)/a_t, \tag{2.9}$$

である．この表式から, 臨界指数が 2 つのパラメータ a_t, a_h で表されることがわかる．また, 磁化に関するもう 1 つの臨界指数 δ は, 式 (2.7) で $\lambda = h^{-1/a_h}$, $t = 0$ にすると,

$$M(0,h) = h^{(1-a_h)/a_h} M(0,1), \tag{2.10}$$

なので,

$$\delta = a_h/(1-a_h), \tag{2.11}$$

である．パラメータ a_t, a_h について式 (2.9) と (2.11) を解くと,

$$a_t = \frac{1}{\beta(\delta+1)}, \tag{2.12}$$

$$a_h = \frac{\delta}{(\delta+1)}, \tag{2.13}$$

を得る.

他の熱力学量についても考える. 帯磁率 $\chi(t,h)$ の関係式は, 式 (2.5) の h についての 2 階微分から,

$$\lambda^{2a_h}\chi(\lambda^{a_t}t,\lambda^{a_h}h)=\lambda\chi(t,h), \tag{2.14}$$

を得る. ここで, $h=0$, $\lambda=t^{-1/a_t}$ とすれば,

$$\chi(t,0)=t^{-(2a_h-1)/a_t}\chi(1,0), \tag{2.15}$$

となる. $t\to 0_+$ では, $\chi(t,0)\sim t^{-\gamma'}$ であるから,

$$\gamma'=(2a_h-1)/a_t, \tag{2.16}$$

を得る. この表式に, 式 (2.12) と (2.13) を代入すると,

$$\gamma'=\beta(\delta-1), \tag{2.17}$$

を得る. もし $\gamma=\gamma'$ が成り立つならば, 上の式はスケーリング則 (1.6) に他ならない. 関係式 $\gamma=\gamma'$ は以下のように導ける. 式 (2.14) で, $h=0$, $\lambda=(-t)^{-1/a_t}$ とおけば,

$$\gamma=(2a_h-1)/a_t, \tag{2.18}$$

を得る. 従って,

$$\gamma=\gamma', \tag{2.19}$$

を得る. ウィドムの仮設から, 他の臨界指数についてもプライムありとプライムなしが等しくなる.

比熱 $C(t,h)$ は, 式 (2.5) の t についての 2 階微分から求まる.

$$\lambda^{2a_t}C(\lambda^{a_t}t,\lambda^{a_h}h)=\lambda C(t,h). \tag{2.20}$$

$h=0$ とおき, $\lambda=t^{-1/a_t}$ を代入すると

$$C(t,0)=\lambda^{-(2a_t-1)/a_t}C(1,0), \tag{2.21}$$

を得る. 臨界点近傍での比熱の振る舞い $C\sim t^{-\alpha}$ と比べると, 指数 α を得る.

$$\alpha=2-1/a_t. \tag{2.22}$$

a_t は他の指数 β と γ によって表現されるので, スケーリング則

$$\alpha+2\beta+\gamma=2, \tag{2.23}$$

が得られる.

カダノフの粗視化

カダノフは物理系への「粗視化」を用いて, ウィドムの静的スケール仮設に対する微視的な解釈を与えた.[8][9][11]

d 次元立方格子のイジング模型を考えよう. この系を一辺の長さ La のブロックに分割する. ここで a は格子定数であり, L は 1 より大きいとする. 簡便のために, 今後 $a = 1$ とする. 各ブロックにはスピンが L^d 個含まれている. 図 2.1 に 2 次元正方格子の場合を示す. 臨界点近傍では, 相関長 ξ がブロックの一辺の長さより十分大きくなり ($1 \ll L \ll \xi$), ブ

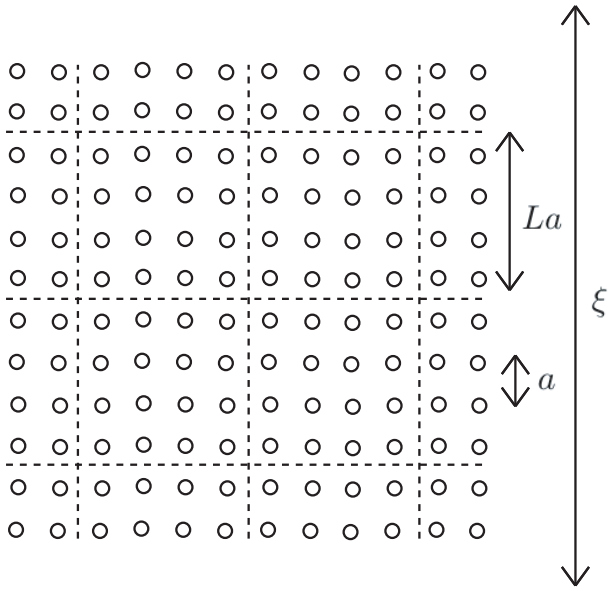


図 2.1: イジング模型の一辺 La のブロックへの分割 ($L = 4$).

ロック内のスピンはほとんど全てが同じ方向を向くと考えられる. そこでカダノフは, 各ブロックに含まれる L^d 個のスピンを新たに一つの 2 状態イジングスピン変数「ブロックスピン変数」に置き換えられると仮定した. (「ブロックスピン変換」または「粗視化」)

ブロック化後の系の格子構造は同じであり, ブロック化した系の自由エネルギーは, 元の系の自由エネルギーを用いて表すことができる. ただし, パラメータ t と h は, ブロック化した系において t_L と h_L に変わる.

パラメータ h_L と t_L の依存性を考えよう. $h \to 0$ ならば, h_L も同様になくなるので $h_L \sim h$ である. 同様に, 元の系が臨界 ($t \to 0$) になるなら, t_L も臨界点に近づくので, $t_L \sim t$ になる. カダノフは, それぞれのパラメータ同士の比例係数がブロックサイズに依存するとした. そうして

$$t_L = L^y t, \tag{2.24}$$

$$h_L = L^x h. \tag{2.25}$$

とする. ここで, x と y は適当な指数である.

ブロック化後の系と元の系とのサイトあたりの自由エネルギーには次の関係式が成り立つ.

$$f(t_L, h_L) = f(L^y t, L^x h) = L^d f(t, h). \tag{2.26}$$

この式はウィドムの自由エネルギーが満たす関係式 (2.5) である. $\lambda = L^d$ とすれば, カダノフのパラメータ x, y とウィドムのパラメータ a_t, a_h との一対一の関係を得る. :

$$a_t = y/d, \tag{2.27}$$

$$a_h = x/d. \tag{2.28}$$

カダノフは 2 スピン相関関数についても考察した. 2 スピン相関関数は,

$$\Gamma(r, t) = \langle(\sigma_i - \langle\sigma\rangle)(\sigma_j - \langle\sigma\rangle)\rangle. \tag{2.29}$$

で定義される. ここで, $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ は格子点間の距離である. ブロック化によって, 2 スピン相関関数の特異部は次のスケーリング形式になる.

$$\Gamma(L^{-1}r, L^y t, L^x h) = L^{2(d-x)}\Gamma(r, t, h). \tag{2.30}$$

2 スピン相関関数 Γ と相関長 ξ に関する臨界指数 ν, η は

$$\Gamma(r, h = 0) \sim r^{-(d-2+\eta)}, \tag{2.31}$$

$$\xi(t, h = 0) \sim t^{-\nu}, \tag{2.32}$$

で定義されている.

臨界点 $(t = 0, h = 0)$ で, ブロック長 $L = r$ とおくと, 式 (2.30) は,

$$\Gamma(1, 0, 0) = L^{2(d-x)}\Gamma(r, 0, 0), \tag{2.33}$$

になる. 指数 x と臨界指数 η の関係式が導ける.

$$x = \frac{d + 2\eta}{2}. \tag{2.34}$$

また, $h = 0$ のとき, $L = t^{-1/y}$ と置くと, 式 (2.30) は,

$$\Gamma(t^{1/y}r, 1, t^{-x/y}h) = t^{-2(d-x)/y}\Gamma(r, t, 0), \tag{2.35}$$

になる. 2 スピン相関関数の距離 r/ξ 依存性から, $r/\xi \sim rt^{1/y}$ である. 指数 y と ν の関係式が導ける.

$$y = \frac{1}{\nu}. \tag{2.36}$$

式 (2.34) と (2.36) から, 指数 η, ν と熱力学量に関する臨界指数 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ との関係式が導ける. :

$$\begin{aligned} \alpha &= 2 - d\nu, \\ \beta &= \frac{\nu(d-2+\eta)}{2}, \end{aligned}$$

カダノフの粗視化の意味を考えておく. ブロックスピン変換によって系の格子点間距離は L 倍になる. 系の相関長は, 新しい系の格子間距離を単位に測ると ξ から ξ/L へと縮む. すなわち, ブロックスピン変換は臨界点近傍にある系をさらに少しだけ臨界点から遠ざける.

2.3 実空間繰込み群と普遍性

ウィルソンは, カダノフによる粗視化の手法を発展させ, 系の微視的なハミルトニアンを巨視的な性質の臨界指数に結びつける新しい方法を提案した. それは「繰込み群」とよばれる方法である.[10][11][13] 以下ではイジング模型を例に「実空間繰込み群」について話す. [12][13][4][3]

温度 $k_BT = 1/\beta$ まで含めたハミルトニアンを, 一般的な N スピン相互作用まで含む形で与えておく.

$$\beta H(\sigma) = K_1 \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + K_2 \sum_{\langle ij \rangle_2} \sigma_i \sigma_j + K_4 \sum_{\langle ijkl \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l + \cdots . \tag{2.37}$$

ここで $\langle ij \rangle$ は最隣接格子点, $\langle ij \rangle_2$ は次近接格子点, $\langle ijkl \rangle$ は近接 4 格子点を表している. この系をブロック長 L でブロック化しよう. スピン変数 $\{\sigma\}$ が, L^d 個のスピンから構成される新たなスピン変数 $\{\sigma'\}$ に移り, 温度が β' に移る. そうして新たなハミルトニアンが

$$\beta' H'(\sigma') = K_1' \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i' \sigma_j' + K_2' \sum_{\langle ij \rangle_2} \sigma_i' \sigma_j' + K_4' \sum_{\langle ijkl \rangle} \sigma_i' \sigma_j' \sigma_k' \sigma_l' + \cdots , \tag{2.38}$$

と, 展開式で記述できたと仮定しよう. (ただし格子定数を $1/L$ 倍する.) つまり, ハミルトニアンの変化は, パラメータの変化で記述できると考えるのだ. :

$$\begin{aligned} K_1 &\to K_1', \\ K_2 &\to K_2', \\ K_4 &\to K_4'. \end{aligned} \tag{2.39}$$

相互作用定数をまとめたベクトル $\mathbf{K} = (K_1, K_2, K_4, \cdots)$ を用いて,

$$\mathbf{K}' = R\{\mathbf{K}\}, \tag{2.40}$$

と「繰込み群変換」を書く. ここで R は一般には非線形な変換である. 系が臨界点から外れているときは相関長が有限であり, 変換後の相関長は短くなる. 従って, 繰込み群変換を

繰り返すと臨界点から遠ざかる. 一方, もし元の系が臨界点にあったならば, 相関長が無限大にのびているので, 変換後の相関長は縮まない. 臨界点で繰込み群変換を繰り返すと, ハミルトニアンが変化しない固定点 $\mathbf{K}^*$ に到達する. 固定点 $\mathbf{K}^*$ は次の式で定義される.

$$\mathbf{K}^* = R\{\mathbf{K}^*\}. \tag{2.41}$$

繰込み群変換が 2 つの相互作用定数 K_1, K_2 で閉じている系があったとして, 固定点から少しずれた状態について繰込み群変換の振る舞いを考察してみよう. 固定点 $\mathbf{K}^* = (K_1^*, K_2^*)$ からのズレを $\mathbf{K} - \mathbf{K}^* = (\Delta K_1, \Delta K_2)$ とおき, 固定点の周りでズレの変化の一次で考えると

$$\begin{pmatrix} \Delta K_1' \\ \Delta K_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta K_1 \\ \Delta K_2 \end{pmatrix}, \tag{2.42}$$

と表される. ここで行列 $A = \{A_{ij}\}$ はブロック化の方法を与えると決定される. 変換 A の固有値と固有ベクトルが臨界現象を特徴づける.

式 (2.42) において固有値, 固有ベクトルを考えると,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta K_1^{(1)} \\ \Delta K_2^{(1)} \end{pmatrix} &= \lambda_1 \begin{pmatrix} \Delta K_1^{(1)} \\ \Delta K_2^{(1)} \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta K_1^{(2)} \\ \Delta K_2^{(2)} \end{pmatrix} &= \lambda_2 \begin{pmatrix} \Delta K_1^{(2)} \\ \Delta K_2^{(2)} \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{2.43}$$

となる.

いま, 固有値の大きさが $\lambda_1 > 1$, $\lambda_2 < 1$ としよう. 1 より大きな固有値 λ_1 に対応する変数の組 $(K_1^{(1)}, K_2^{(1)})$ は, 繰込み群変換を繰り返しても残り続け, 臨界現象を引き起こす重要なパラメータであり, 「レレバントな変数 (有意な変数)」と呼ばれる. 一方, 1 より小さな固有値 λ_2 に対応する変数の組 $(K_1^{(2)}, K_2^{(2)})$ は繰込み群変換の繰り返しとともに消え, 「イレレバントな変数 (有意でない変数)」と呼ばれる. このように, 「臨界現象が数個のレレバントな変数によって支配される」ことが繰込み群から得られた「普遍性」の説明である.

繰込み群による臨界指数の値の計算を付け加えておく. いま, 繰込み群変換による温度 t_L は λ_1 によって特徴づけられる.

$$t_L = \lambda_1 t. \tag{2.44}$$

相関長 $\xi \sim t^{-\nu}$ は, 繰込み群変換から ξ/L になるので,

$$t_L \sim \left(\frac{\xi}{L}\right)^{-1/\nu} \sim \left(\frac{t^{-\nu}}{L}\right)^{-1/\nu} = L^{1/\nu} t, \tag{2.45}$$

である. よって, 臨界指数 ν は

$$\nu = \ln L / \ln \lambda_1, \tag{2.46}$$

で与えられることがわかる.

ウィルソン以前に, グリフィスは普遍性について次のことを提唱した.
「臨界指数の値は, 系の詳細によらないが, 系の次元, 秩序パラメータの対称性, 相互作用の到達距離などの基本要素には依存する.」
これは「普遍性仮設」[14] と呼ばれ, 多くの系で確認されている.

第3章　古典スピン系の臨界現象

古典スピン系は熱ゆらぎによる相転移や臨界現象を記述する模型である. 現実の物理系と同じ臨界指数の値が見いだされることも稀ではなく, [27][28] 臨界現象を理解するための有用な系である. 本章では, 主に 2 次元古典スピン系の臨界現象についての知識をまとめる.

古典スピン系には様々な模型がある. 例えば, イジング模型 (容易軸に対称： Z_2), 古典 XY 模型 (容易面内の回転に対称: S_1), 古典ハイゼンベルク模型 (スピン空間での回転に対称性： S_2) などである. これらの模型では, スピン空間の対称性および系の空間次元の数によって相転移の種類が異なる. スピン変数の自由度が低く, 系の次元が高いほど相転移が起こりやすいと言われている.

2 次元古典スピン系の臨界現象に対しては, 数値解析や近似法以外に, 共形場理論および厳密解により解析が進められてきた. 共形場理論は, 起こりうる普遍性クラスの分類を与える. [47][46][45] 分類に用いるパラメータの一つが中心電荷 c であり, 例えば, $0 < c < 1$ の場合には, c は離散的な値をとり, c の値と普遍性クラスとが一対一で対応する.

3.1　古典スピン系

古典スピン系には多種多様な模型がある. [37][4][25][3] 比較的単純でよく知られた模型には, 例えば, イジング模型や (古典) ハイゼンベルグ模型 (ベクトルスピン模型), (古典)XY 模型 (平面ベクトル模型), q 状態ポッツ模型が挙げられる. これらのハミルトニアンは,

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j, \quad \text{(強磁性イジング模型)} \tag{3.1}$$

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle}(s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + s_i^z s_j^z), \quad \text{(強磁性ハイゼンベルグ模型)} \tag{3.2}$$

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle}(s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y), \quad \text{(強磁性 } XY \text{ 模型)} \tag{3.3}$$

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\delta(\sigma_i^{potts}, \sigma_j^{potts}), \quad \text{(強磁性ポッツ模型)} \tag{3.4}$$

で表される. ここで, i, j は格子点の番号であり, 相互作用 J は正である. また, 和は最近接スピン対について取る. $\sigma = \pm 1$ であり, s^x, s^y, s^z は大きさ S のベクトル成分である. δ はクロネッカー・デルタであり, σ^{potts} はイジングスピンを q 個の状態数まで拡張したスピン変数である.

有限温度で各模型で起きる相転移を表 3.1 に示す. 表中の「KT」はコスタリッツ-サウレス転移 (または KT 転移)[35] と呼ばれる準長距離秩序を伴う相転移であり, 長距離秩序を伴う一次・二次相転移と区別される. 長距離秩序を伴う相転移現象の存在証明は, イジング模型についてはパイエルスの議論 [20] から, XY 模型およびハイゼンベルグ模型についてはマーミン・ワグナーの定理 [36] によって示されている.[3]

表 3.1: 古典スピン系 (3.1)−(3.4) の相転移の次数. [34][4][29]

模型	スピンの対称性	2 次元	3 次元
イジング	Z_2	二次	二次
ハイゼンベルグ	S_2 (スピン空間の回転)	−	二次
XY	S_1(容易面内の回転)	(KT)	二次
3 状態ポッツ	Z_3	二次	一次
4 状態ポッツ	Z_4	二次	一次
q 状態ポッツ ($q > 4$)	Z_q	一次	一次

表 3.2 に, 表 3.1 の二次相転移を起こす模型の臨界指数をあげておく. 臨界指数の値が, 普遍性仮設で述べられたように空間次元やスピンの自由度の数 (秩序パラメータの対称性) に依存することを確かめられる.

表 3.2: 表 3.1 の二次相転移を示す系の臨界指数.

模型	次元	α	β
イジング	2	0	1/8
3 状態ポッツ [29][39][40]	2	1/3	1/9
4 状態ポッツ [29] [30]	2	2/3	1/12
イジング [27]	3	0.110	0.3267
ハイゼンベルグ [34]	3	0.116	0.365
XY[34]	3	-0.008	0.346

3.2 厳密に解ける模型

古典スピン系のいくつかの模型に対しては厳密解が知られている. 古典スピン系で議論される厳密解とは, スピン配置についての和を厳密に実行した分配関数の表式である. 厳密解がわかっている代表的な模型をこの節で紹介する.

分配関数のスピン配置の和の計算が 直接実行可能 な模型を挙げよう. 例えば, 以下の模型である.

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{i,j}\sigma_i\sigma_j, \quad \text{(無限レンジ模型, 伏見テンパリー模型)} \tag{3.5}$$

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle} S_i^n S_j^n, \quad \text{(但し } \sum_i (S_i^n)^2 = N\text{)} \quad \text{(球形模型)} \tag{3.6}$$

$$H = -J\sum_i \sigma_i\sigma_{i+1} - h\sum_i \sigma_i - \frac{\tilde{J}}{2N}\sum_{i,j}\sigma_i\sigma_j, \quad \text{(平均場相互作用模型)} \tag{3.7}$$

ここで, 球形模型のスピン変数 S^n は $n \to \infty$ 個の状態数を持つ. 平均場相互作用模型は臨界現象が起きる模型として本稿で提案する. 付録 A に解法を示した. 各模型の臨界指数を表 3.3 にあげる.

表 3.3: 臨界指数.

模型	次元	α	β
無限レンジ模型 [3][4]	all	0	1/2
球形模型 [31][3]	3	-1 $(T > T_C)$	1/2
	4 以上	0	1/2
平均場相互作用模型	1	0	1/2

分配関数のスピン配置の和を直接的に計算することが困難な場合にも, 巧妙な手法を用いることでいくつかの模型において厳密解が求められている. 「可解系」と呼ばれている.

代表的な模型と臨界指数を表 3.4 にあげる. 厳密解を求める十分条件は, 対象となる模型に対してヤンバクスター方程式 (または星-三角関係式) と呼ばれる関係式が成り立つことである.[37] ただし,「ヤンバクスター方程式は 2 次元古典スピン系に特化した解法」である.

表 3.4: 可解系の臨界指数.

模型	次元	α	β	備考
正方格子イジング	2	0	1/8	
6 バーテックス	2	$-\infty$	-	無限次相転移
8 バーテックス	2	$2-\pi/\mu$	$\pi/16\mu$	弱い普遍性 [77] μ は局所的相互作用に依存

3.3　2 次元古典スピン系の臨界現象の分類

2 次元古典スピン系では, 起こりうる普遍性クラスに対して,「共形場理論」による分類が与えられている. [38][46][48][5][47][49] 臨界点では系に「スケール不変」,「並進不変」,「回転不変」が現れる. さらに, 短距離相互作用をもつなら「共形不変性」が実現する. 共形不変性をもつ場の理論が共形場理論である. すなわち, 共形場理論は臨界点での場の理論となる. 2 次元系の共形変換に対する代数であるビラソロ代数の表現論から 2 次元系の臨界現象の普遍性クラスの分類が行われる. また, 臨界点直上の相関関数と相関関数に関する臨界指数が決まる. この節では, 2 次元古典スピン系の普遍性クラスに対する分類のみを述べる.

無限小の共形変換の生成子 L_n は, 次の交換関係を満たす.

$$[L_m, L_n] = (m-n)L_{m+n} + \frac{c}{12}(m^3 - m)\delta_{m+n,0}. \tag{3.8}$$

ここで, c は中心電荷パラメータであり, c の値に依って普遍性クラスが分類される. フライデンら [39] は, $0 < c < 1$ の範囲に対して, 取り得る中心電荷の値を以下のように制限した.

$$c = 1 - \frac{6}{p(p+1)}. \tag{3.9}$$

ここで p は 3 以上の整数である. この系列はユニタリ離散系列と呼ばれる. 特定の p については対応する普遍性クラスとその代表的な模型がわかっている. 一例を表 3.5 に示す.[1] 中心電荷 $0 < c < 1$ の範囲にある系はスピンが離散的な自由度を持つ.

一方, $c \geq 1$ の場合には, c の値と普遍性クラスに一対一の対応がない. 例えば, $c = 1$ には様々な普遍性クラスが含まれ, XY 模型や 4 状態ポッツ模型 [43] などが属する. 後述する

[1] 共形場理論は, 中心電荷 $0 < c < 1$ の場合, (線形化された) 繰込み群変換のレレバントな変数に対応する固有値の指数 $(\log(\lambda_i)/L)$ を与える.

表 3.5: 中心電荷 c の値と対応する模型 [39][47]

p	c	α	β	模型
3	1/2	0	1/8	イジング
4	7/10	8/9	1/24	三重臨界イジング [41]
5	4/5	1/3	1/9	3 状態ポッツ [29][39][40]
6	6/7	5/6	1/18	三重臨界 3 状態ポッツ [39][42]

6 バーテックス模型や 8 バーテックス模型 [37] も $c = 1$ の例である. $c = 1$ に属する系は, スピン自由度が連続対称性を持つことが許される.

第4章　双曲平面上のイジング模型における普遍性

2 次元古典スピン系を考える場合, 通常は曲率 0 の平面 (=平坦な平面) 上での格子を対象にする. 本章では, 負の一定のガウス曲率を持つ面上に系を置いた時に, 臨界現象にどのような影響が現れるかを調べる.

ごく最近, 長谷川と坂庭と島は, 双曲平面 (=負の定曲率面) 上に置いた強磁性イジング模型で起きる臨界現象がイジング普遍性クラスから逸脱することを報告した.[52][53] 彼らは, カダノフのスケーリング理論を用いて曲率の影響を考察してイジング普遍性クラスからの逸脱を示し, モンテカルロ法による数値解析からガウス普遍性クラスになると推測している. 本研究では, 双曲平面上のイジング模型の臨界現象をより精密に解析し, 普遍性クラスを特定する.

五角形の張り合わせで得られる規則格子を考えた. (4.2 節). 解析には, 密度行列繰込み群 (DMRG) [96][97][98][99] をバクスターの角転送行列 (CTM) [100][103][104] に応用した角転送行列繰込み群 (CTMRG)[105][51][106] を用いた.

最隣接スピン相関関数と自発磁化を計算し, 臨界指数を求めた. その結果, 双曲平面上のイジング模型がガウス普遍性クラスに属することを確認した. 臨界温度 $T_C = 2.799$ は, 正方格子上での値 $T_C^{Square} = 2.269$ や平均場理論の値 $T_C^{MF} = 4$ より, むしろベーテ格子上での値 $T_C^{Bethe} = 2.885$ に近い. (4.3 節)

4.1　双曲平面上のイジング模型

ガウス曲率 0 の面上での 2 次元古典スピン系の臨界現象は広く調べられているが, 曲率が 0 から外れる系に対する解析は多くない. ガウス曲率が一定の正の値の面では, 系がコンパクト空間になるので臨界現象は現れない.[1] 一方, 負の一定値のガウス曲率をとる双曲平面では, 系のサイズを無限大することが可能である. この章では, 双曲平面を用いて負曲率が及ぼす臨界現象の影響を調べる.

双曲平面

双曲平面とは平行線の公理をなくした双曲幾何が成り立つ空間である. 双曲平面の一つには擬球面がある.(図 4.1 参照.) 擬球面は牽引線と呼ばれる線を, その漸近線を中心にし

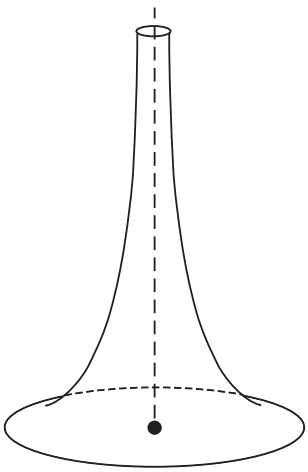


図 4.1: 擬球面. 牽引線を漸近線 (破線) を軸にした回転体から得られる面である. ガウス曲率は負の一定値である.

た回転体によって得られる. 擬球面についてガウス曲率を考えてみよう. ガウス曲率は, 面上の 1 点における面内の曲率の最小値と最大値との積で定義される. 擬球面では牽引線に沿って正の (最大) 曲率を持ち, 回転体の切り口の円周に沿っては負の (最小) 曲率を持つ. 従って, 擬球面のガウス曲率は負の一定値なる. 一般に「双曲平面は負の一定のガウス曲率」を取る. (他の双曲平面は文献 [56] に挙げられている.)

双曲平面上の規則格子をのせてみよう. [54] 規則格子を表す指標 (p, q) を導入する. p は最隣接格子点数, q は q 角形を表す. 双曲平面上の (p, q) 格子は次の関係式を満たす.

$$(p-2)(q-2) > 4. \tag{4.1}$$

この関係式をみたす p, q の組は無限個存在する. 規則格子の例を図 4.2 に示す. 図中で,

[1] 臨界点では相関長が無限大になるため, 系が熱力学的極限にならない場合には臨界現象が現れない.

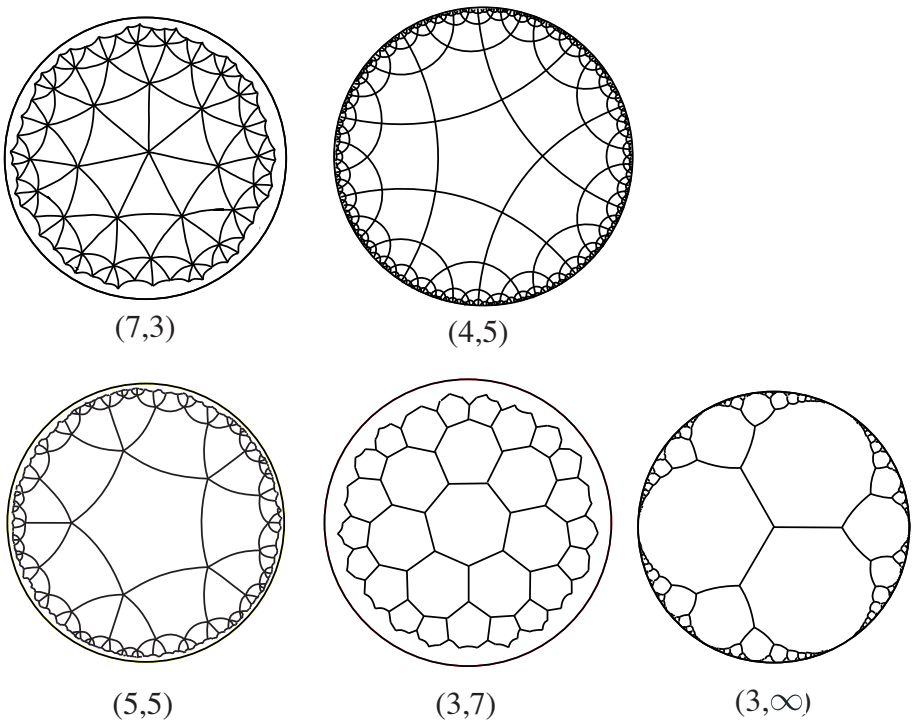


図 4.2: 双曲平面上の (p, q) 規則格子. $(3, \infty)$ 格子はベーテ格子 (配位数 3) である.

$(3,\infty)$ 格子は配位数 3 のベーテ格子[2]に対応する. 平坦な面 (=曲率 0 の面) の (p,q) 格子は $(p-2)(q-2)=4$ のみが許され, この関係式を満たす p,q の組には $(p,q)=(3,6),(4,4),(6,3)$ があり, 蜂の巣格子, 正方格子, 三角格子である.

双曲平面とハウスドルフ次元

次元には, 系の座標軸の数に対応する「空間次元 (または位相次元)」以外に, 系の差渡しに対する体積 (やサイト数) の増加から定義される「ハウスドルフ次元」もある.

ハウスドルフ次元は, カダノフの粗視化や実空間繰込み群で用いられるブロックスピン変換に現れる. ブロックの差渡し L とブロック内のサイト数 N から, ハウスドルフ次元 d_H は

$$d_H = \log(N)/L, \tag{4.2}$$

である. 従って, 空間次元とハウスドルフ次元のどちらが臨界現象に影響するのか, 普遍性仮設で述べられた「系の次元」はどちらの次元を指すのかが問題となる.

曲率 0 の空間では, 空間次元とハウスドルフ次元は同じ値になる. 一方, 双曲平面上にのった規則格子においては, 系の差渡しともに (差渡しの長い場合) サイト数は指数関数的に増加する. 言い換えれば, 双曲平面においては, 空間次元が 2 でありながら, ハウスドルフ次元が無限大になるのである.

双曲平面上のイジング模型の臨界現象の解明を通して「臨界現象と次元」について考察する. もし空間次元が有効ならばイジング普遍性クラスに属し, もしハウスドルフ次元が有効ならば次元数が 4 次元以上になので, ガウス普遍性クラスに属する臨界現象が現れる.

双曲平面上の統計模型

最近, 双曲平面上の古典スピン系の熱力学的な振る舞いに関する研究が行われ, 強磁性イジング模型に関してガウス普遍性クラスに属すると推測されてきている. [57][58][52][53][59] リートマンらは, 双曲平面上のイジング模型に対して級数展開を用いた解析をした. 彼らが求めた臨界指数を表 4.1 に示す. 表中に, イジング普遍性クラスとガウス普遍性クラスの厳密な臨界指数の値も併記した. リートマンらは臨界指数の値の比較から, ガウス普遍性クラス ($\gamma=1,\beta=1/2$) になると予測した.[57]

表 4.1: リートマンらによる級数展開法での臨界指数 [57]

	(3,7) 格子	(5,5) 格子	イジング普遍性クラス	ガウス普遍性クラス
β	≈ 0.51	≈ 0.58	1/8	1/2
γ	1.00	1.00	7/4	1

[2]ベーテ格子の物理系には, 例えば高分子のデンドリマーがある.

ごく最近, 島と坂庭は, カダノフのスケーリング理論を用いて, 自由エネルギーの特異性のスケール変換に対する曲率の効果を考察し, 双曲平面上での臨界指数の値が曲率 0 で見いだされる普遍性クラスから逸脱することを示した.[52] また, 島と坂庭および長谷川と坂庭, 島は, (3, 7) 格子と (7, 3) 格子のイジング模型に対して, モンテカルロ法を用いて数値解析を行った. 但し, 彼らの解析では計算量の都合で扱える系の差渡しが短いために, 臨界指数に関する精度よい解析結果は報告されなかった. 臨界指数の値がイジング普遍性クラスから逸脱することを示唆する結果が示された. [52][53]

島らのグループによる数値解析では「境界の影響」が論じられている. 物理量の平均値を求めるためのスピン配置の領域を, 系の中心の場合と系の全体の場合とで比較し, 両者で臨界指数の値が異なることを示した. 系の中心で得られた物理量の平均値[3]がガウス普遍性クラスに属する臨界現象の振る舞いに近い.

ベークらは古典 XY 模型に関してモンテカルロ法による解析を行った.[59] 有限温度において長距離秩序は見いだされず, 曲率 0 面上で見つかっていた KT 転移も起きないことが報告されている. ただし, 彼らの報告は, 双曲平面上の統計模型がガウス普遍性クラスの臨界現象を示すという予測と矛盾しない. なぜなら, 彼らの解析は境界まで含めたスピン配置を使って物理量の平均値を求めているので, 報告された解析結果は系の中心付近における熱力学的な振る舞いには言及していないからである.

以上, 最近の研究では, 双曲平面上のイジング模型については臨界現象がガウス普遍性クラス属することが推測されている. ただし, 級数展開法やモンテカルロ法からの解析では, 臨界指数の精度が幾分か悪い. 本稿では, 双曲面上のイジング模型の系の中心付近で見いだされる臨界現象をより良い精度で解析し, 普遍性クラスを特定する.

4.2 五角形張り合わせ格子上のイジング模型

負の曲率を持つ 2 次元面である双曲平面を考える. 図 4.3 は双曲平面上の規則格子の一部を示す. この図の格子は五角形の張り合わせにより構成した.[54]

この格子での強磁性イジング模型を調べる. 系のハミルトニアンは最隣接イジング相互作用の和で定義して,

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \tag{4.3}$$

となる. ここで, $\langle i, j \rangle$ は隣接サイト対を示し, $\sigma = \pm 1$ は格子点上のイジングスピンである. 本章を通して外場がないことを仮定する.

系の熱力学的極限に興味がある. 注意すべきことは, 系のサイト数が差渡しの増加とともに指数関数的に膨らむため, モンテカルロ法の使用では有限サイズスケーリングに必要なデータを十分に解析することが困難なことである. 強力な数値的な道具として, CTMRG を採用した. (6.4 節に詳述) 系の差渡し r に対する CTMRG とモンテカルロ法の計算量の比較を表 4.2 に示した. 表中で m はブロックスピン変数の状態数であり, 計算精度の調整

[3] ベーテ格子においても熱力学的振る舞いが 境界 を考慮するか否かで異なる.

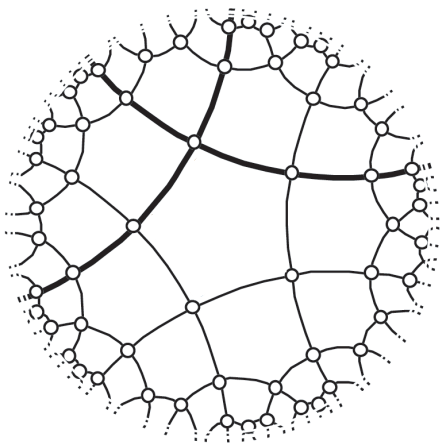


図 4.3: 双曲平面上の (4, 5) 規則格子.

表 4.2: 双曲平面上の格子系での CTMRG とモンテカルロ法の計算量の比較.

CTMRG	モンテカルロ法
$O(rm^2)$	$O(e^r)$

パラメータになる. 計算において $m < 80$ は一定に固定される. CTMRG では差渡し r に対して計算量が線形に増加する.

4.3　数値解析により得られた結果

自発磁化 $\langle\sigma_i\rangle$ と最隣接スピン相関関数 $\langle\sigma_i\sigma_{i+1}\rangle$ を求めると, 図 4.4 のようになった. イジング相互作用の強さ J をエネルギー単位と見なし, ボルツマン定数 k_B が 1 に等しい温度を使用する.

自発磁化の二乗 $\langle\sigma_i\rangle^2$ は臨界温度 T_C の近傍で温度に線形である. 臨界温度は $T_C = 2.799$ と見積もれる. 最隣接スピン相関関数 $\langle\sigma_i\sigma_{i+1}\rangle$ は T_C で折れ曲がり, その周辺で T に線形である. 臨界指数は $\beta = 1/2, \alpha = 0$ であると結論づけられる.[4] この系がガウス普遍性クラスに属することがわかった. こうして, 長谷川, 坂庭, 島による予測を確かめた.[52][53]

4.4　結論と議論

双曲平面上の五角形格子のイジング模型の自発磁化と最隣接スピン相関関数を計算し, この系が, 臨界温度を $T_C = 2.799$ と求めた. ガウス普遍性クラスに属することを確認した.

[4] 比熱は最隣接スピン相関関数 $\langle\sigma_i\sigma_{i+1}\rangle$ の温度に関する微分量に比例する. T_C 近傍の $\langle\sigma_i\sigma_{i+1}\rangle$ の温度依存性が線形であることから, 比熱の温度依存に関する臨界指数 α が 0 となる.

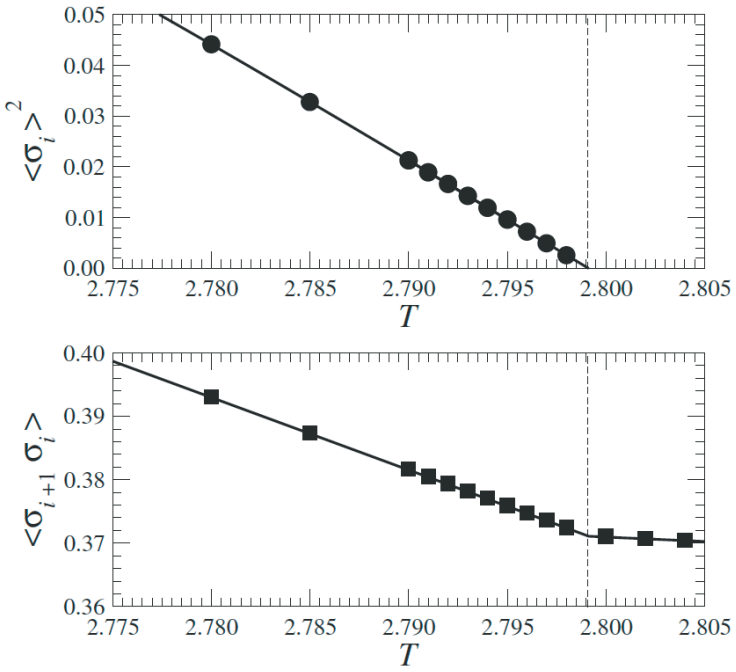


図 4.4: 自発磁化の二乗 $\langle\sigma_i\rangle^2$ と最隣接スピン相関関数 $\langle\sigma_i\sigma_{i+1}\rangle$ の温度変化.

4 次元以上のイジング模型に対応するガウス普遍性クラスが観測されたという事実は,「双曲平面上の統計模型においては,「ハウスドルフ次元」が「次元」として臨界現象に影響する」ことが推測できる.

臨界温度 T_C を正方格子, ベーテ格子, 平均場理論の値との比較を表 4.3 に示す. この比

表 4.3: 臨界温度 T_C の比較.(配位数 4)

(4,5) 格子	正方格子 ($(4,4)$ 格子)	ベーテ格子 ($(4,\infty)$ 格子)	平均場理論
2.799	2.269	2.885	4

較から, $(4,5)$ 格子の臨界温度は正方格子の場合よりむしろベーテ格子の場合に近い.[5][55] この結果は,「系の格子構造が, ベーテ格子に近い」ことに起因すると推測する.

[5]格子の配位数が $z=4$ であるので, 考慮中の五角格子上のイジング模型に適用した平均場近似は正方格子イジング模型に適用した近似と同じ相転移温度を与える. そのような等価性はベーテ近似まで有効である.

第5章　対称10バーテックス模型の臨界点

未解析なバーテックス模型の普遍性クラスの特定を進める．「16 バーテックス模型」[61] とは, 正方格子の辺に 2 状態スピン変数をのせて, 4 つのスピン変数に囲まれた頂点 (バーテックス) が持つ 2^4 個のスピン配置に対して局所的なボルツマン重率を課した模型である．局所的なボルツマン重率をパラメータ化するので, 16 バーテックス模型は「広いパラメータ空間」をもつ．ボルツマン重率に適当な制限を課した可解な模型 (6 バーテックス模型や 8 バーテックス模型など) は, その熱力学的性質がよく知られている．[61][37] 一方, 可解な範囲の外では, 十分な解析が行われていない．(第 5.1 節)

本研究では, 一例として, 16 個のバーテックス状態から 10 個の対称的な配置 (90 度回転対称性) に制限し, 重率を独立な 2 つのパラメータにした「対称 10 バーテックス模型」を解析する．角転送行列繰込み群 (CTMRG)[105] によって数値的解析を行う．(第 5.2 節)

熱力学極限の下で系の中心でのスピン期待値を計算した．その結果, 重率の変化に対して一次および二次相転移を示すことが確認された．新たに見つかった臨界点およびその近傍での臨界現象は, イジング普遍性クラスに属することが判明した．この相転移は, スナップショットによる観察から, 吸着系で見られる凝集 · 非凝集状態に対応する．(第 5.3 節)

5.1　16 バーテックス模型

16 バーテックス模型

古典スピン模型には大別して, 「IRF(interaction-round-face) 模型」と「バーテックス模型」がある. IRF 模型は格子点上にスピン変数を置き, バーテックス模型はボンド上にスピン変数を置く. (図 5.1 参照.) ここでは正方格子上のバーテックス模型について説明する.

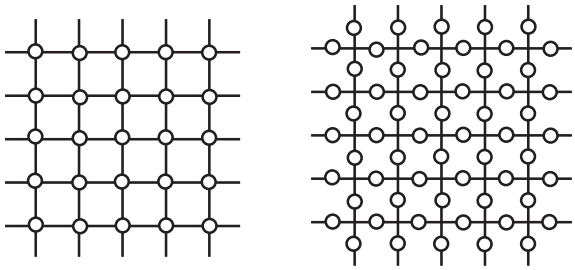


図 5.1: 正方格子での IRF 模型 (左) とバーテックス模型 (右). 丸印はスピン変数を示す.

2 次元正方格子では, 4 つのスピン変数で囲まれた 1 つの格子点が系の最小単位をとなり, 「バーテックス (頂点)」と呼ばれる. スピン変数の状態数が 2 とするとバーテックスの状態数は 16 個ある. バーテックスの各状態 $i(i = 1, 2, \cdots, 16)$ に対して適当な局所的なボルツマン重率 w_i を与える. (図 5.2 参照) この模型を一般的に「16(状態) バーテックス模型」と呼ぶ. [61][81][27]

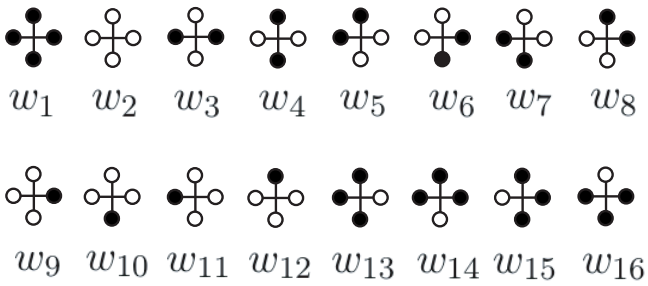


図 5.2: 16 バーテックス模型に含むバーテックスの全状態と対応する重率. 丸印の白黒はスピン変数の状態を示し, 白丸は 0(または -1) を黒丸は $+1$ を示す.

バーテックス模型の分配関数 Z は,

$$Z = \sum_{\text{全スピンの状態}} \prod_{\text{全バーテックス}} w, \tag{5.1}$$

から求まる.

厳密解

16 バーテックス模型ではバーテックスのボルツマン重率 w_i をパラメータ化して取り扱う. パラメータ空間は広大であり, あらゆる重率 w_i の組み合わせについて適用可能な厳密解は知られていない.[61] 非常に制限された重率の組み合わせについては, 厳密解が報告されている.

6 バーテックス模型は, 最初に提案されたバーテックス模型である. この模型は水素結合誘電体を記述する. 例えばアイス模型 [66][67][68] や 強誘電体 KDP 模型 [69][70], 反強誘電体 F 模型 [71][72][73] が有名である. バーテックスの状態数をポーリングのアイスルール [65] に従って 6 つに制限する. バーテックスの重率に対しては次式の制限を課す. (図 5.3 参照) それぞれのバーテックス重率が

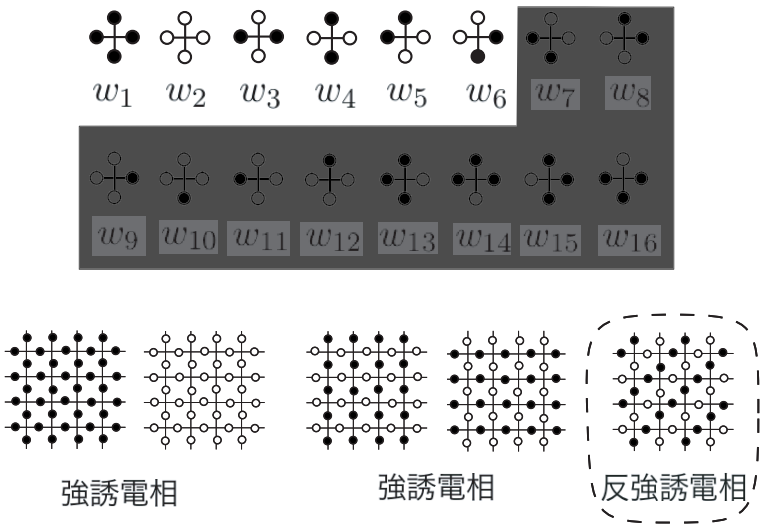


図 5.3: 6 バーテックス模型と秩序相. 影で覆われたバーテックス状態は不使用. 破線で囲まれた相から無秩序相への相転移にて臨界現象が現れる.

$$w_1 = w_2, w_3 = w_4, w_5 = w_6, . \tag{5.2}$$

を満たすときは厳密解が求まり, この厳密解から相図 (図 5.4) が求められている. [37] 図中の太線は一次相転移である. 反強誘電相から無秩序相への転移は無限次相転移[1]であり, 臨界指数が $\alpha = -\infty$ である.

続いて, 6 バーテックス模型に 2 つの新たなバーテックスを付け加えた 8 バーテックス模型 [74][75] を紹介しよう. 水素結合誘電体の有限温度の拡張として導入された. バーテックスの重率が

$$w_1 = w_2, w_3 = w_4, w_5 = w_6, w_7 = w_8, \tag{5.3}$$

[1] n 次相転移は, 相転移点での自由エネルギーの n 階微分量の連続性から定義できる.

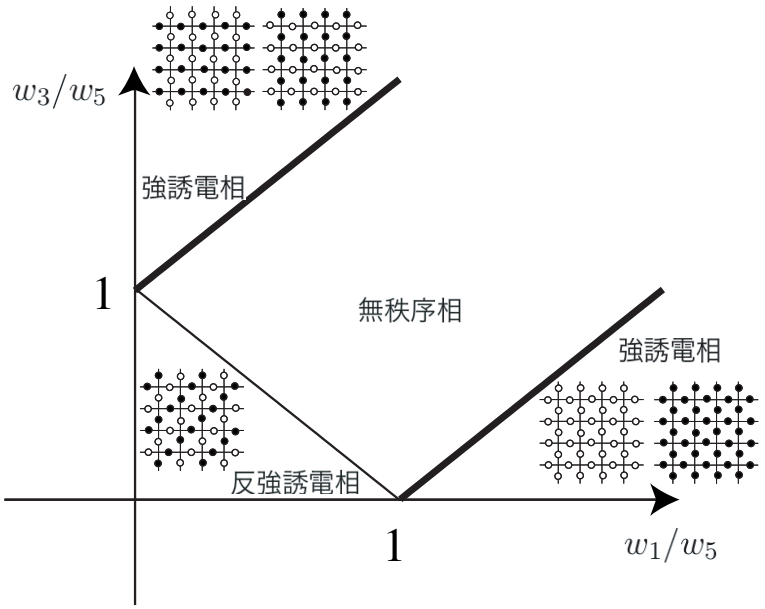


図 5.4: 6 バーテックス模型の相図. 各秩序相の模式的なスピン配置も示す.[37] 破線で囲まれた相から無秩序相への相転移にて臨界現象が現れる.

を満たす「対称 8 バーテックス模型」についてバクスターが厳密解を示した.[76][37] (図 5.5 参照) 次の 5 つの相を持つ.:

$$
\begin{aligned}
&w_1 > w_3 + w_5 + w_7 \ : \ (\text{強誘電相 } 1),\\
&w_3 > w_1 + w_5 + w_7 \ : \ (\text{強誘電相 } 2),\\
&w_1, w_3, w_5, w_7 < \frac{1}{2}(w_1 + w_3 + w_5 + w_7) \ : \ (\text{無秩序相}),\\
&w_5 > w_1 + w_3 + w_7 \ : \ (\underline{\text{反強誘電相 } 1}),\\
&w_7 > w_1 + w_3 + w_5 \ : \ (\text{反強誘電相 } 2),
\end{aligned}
$$

反強誘電相 1 から無秩序相への相転移において臨界現象が見つかっている. 臨界指数の値は,

$$\alpha = 2 - \pi/\mu, \ \beta = \pi/16\mu, \tag{5.4}$$

である. ここで, μ は $\tan(\mu) = (w_5 w_7 / w_1 w_2)^{\frac{1}{2}}$ を満たす定数である. 臨界指数の値は, 重率の比に伴って連続的に変化する. 一見すると, 系の詳細である重率に依存することから, 普遍性が破れているように見える. しかし, 臨界指数を相関長に対する関数と解釈し直せば, 重率の比に依存しない臨界指数を導けることが後に判明した. 「弱い普遍性」と呼ばれている.[77]

6 バーテックス模型で, バーテックスの状態を 5 つに制限した 5 バーテックス模型も知られている. (図 5.6 参照) ウーは以下の場合について, [78]

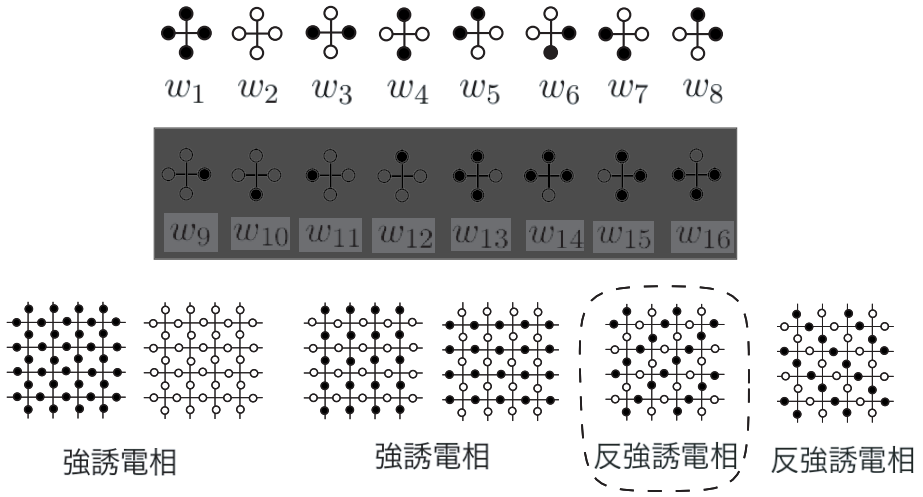


図 5.5: 8 バーテックス模型と秩序相. 影で覆われたバーテックス状態は使用しない. 破線で囲まれた相から無秩序相への相転移にて臨界現象が現れる.

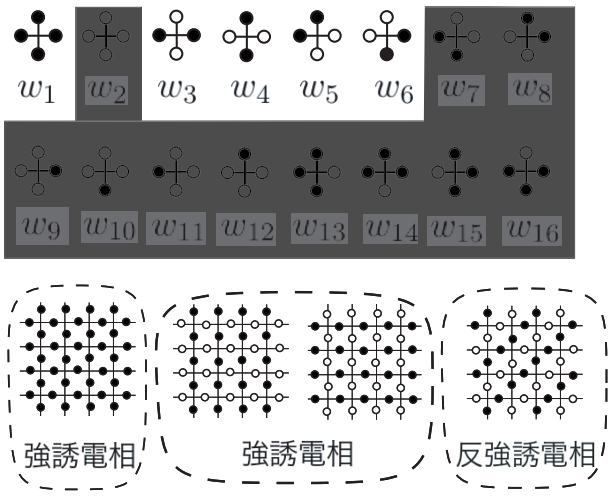


図 5.6: 5 バーテックス模型と秩序相. 影で覆われたバーテックス状態は考慮しない. Gulácsi らの模型で実現する秩序相を示す. 破線で囲まれた各相から無秩序相への相転移にて臨界現象が現れる.

$$w_1,\ w_2 = 0,\ w_3 w_4 = w_5 w_6, \tag{5.5}$$

厳密解を示し, 臨界指数 $\alpha = 1/2, \gamma = 1/2$ を得ている. 以下の重率を取るタイプの 5 バーテックス模型が Gulácsi らによって解析された. [79][80]:

$$w_1, w_2 = 0, w_3 = w_4, w_5 = w_6. \tag{5.6}$$

図 5.7 にあげた相図が示された. 図中に示した全ての相境界で臨界現象が現れ, 臨界指数 $\alpha = 1/2, \gamma = 1/2$ を得ている.

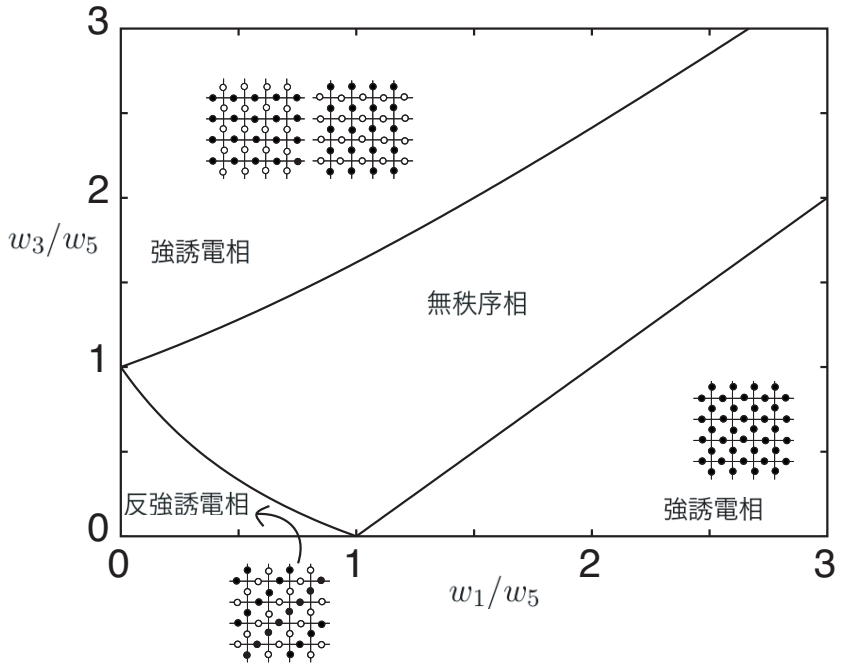


図 5.7: Gulácsi らの 5 バーテックス模型の相図. 各秩序相の模式的なスピン配置も示す.[79]

数値的解析

バーテックスに対する制限をある程度緩くした模型や, 対称性の低い模型に厳密解を与えることは困難である. このような一般的な場合には数値計算が有用である. ところが, 数値解析に有効な手法であるモンテカルロ法をバーテックス模型に適用した例はあまり多くない. 原因に一つに, メトロポリス法を用いた解析では平衡状態を実現するまでに計算時間が長くかかることが挙げられる. この問題は, クラスターアルゴリズム [84][85] が開発されて解消されてはいるが, 今もって 16 バーテックス模型やその部分空間に対する解析例は少ない.[86]

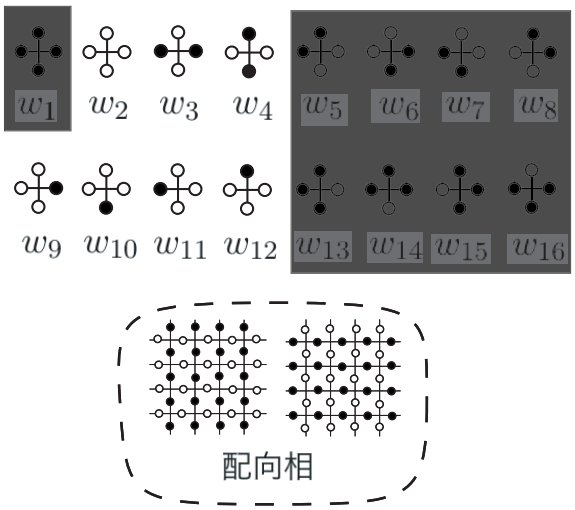


図 5.8: 7 バーテックス模型と秩序相. 影で覆われたバーテックス状態は出現確率 0 である.

角転送行列繰込み群 (CTMRG) はバーテックス模型の解析には比較的簡便な手法である. 高崎らは 7 バーテックス模型の解析にこの手法を用いた. [62](図 5.8 参照)

$$w_2 = 1,\ w_3 = w_4 = x^2,\ w_9 = w_{10} = w_{11} = w_{12} = bx. \tag{5.7}$$

解析を通じて, この模型で起きる臨界現象はイジング普遍性クラスに属することが示されている.

以上の 16 バーテックス模型に対する代表的な解析例を眺めると, パラメータ空間の中で 8 バーテックス模型タイプの部分空間 ($w_1, w_2, \ldots, w_8$ で張られる空間) には比較的手がつけられているが, 一方, $w_9, w_{10}, \ldots w_{16}$ を許す部分空間に対する解析はあまり手がつけられていないことが見て取れる. 本研究では, 図 5.9 に示した w_9, w_{10}, w_{11}, w_{12} を含む 10 個のバーテックス状態を選び解析を行う.

5.2 対称 10 バーテックス模型

図 5.9 に示した 10 個のバーテックス状態に以下の重率を課す.:

$$w_1 = W_4,\ w_2 = W_0,\ w_5 = w_6 = w_7 = w_8 = W_2,\ w_9 = w_{10} = w_{11} = w_{12} = W_1, \tag{5.8}$$

ここで W_0, W_1, W_2, W_4 は以下に示すように, 独立な 2 つのパラメータ a, x で与える. :

$$W_0 = 1,\ W_1 = x,\ W_2 = ax^2,\ W_4 = x^4. \tag{5.9}$$

バーテックスが 90 度の回転対称性を持つので, この模型を「対称 10 バーテックス模型」と呼ぶことにする. バーテックスの状態と重率を図 5.10 に示す.

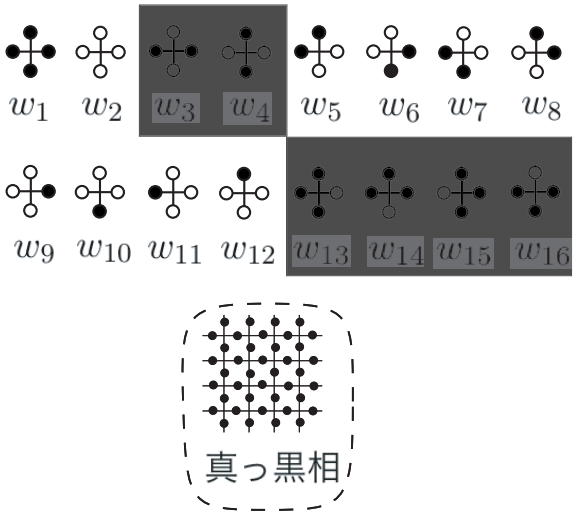


図 5.9: 10 バーテックス模型と秩序相. 影で覆われたバーテックス状態は使用しない.

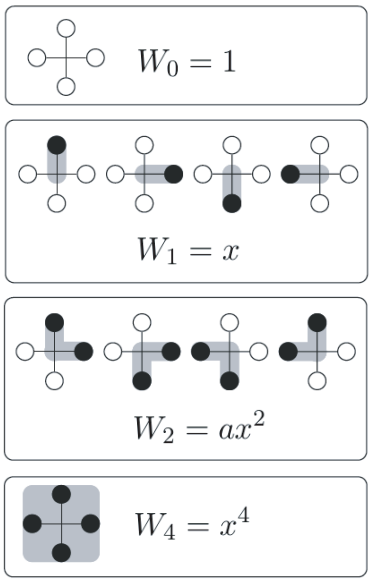


図 5.10: 10 バーテックス模型のボルツマン重率と秩序相. 白丸と黒丸は, それぞれ, スピン状態の 0 と 1 を表す. 影付きの領域は, 図 5.11 と図 5.16 でのスピン配置のスナップショットを示す.

2 状態スピン変数 σ は 0 と 1 を取るとする. スピンの期待値は,

$$\rho(x,a) \equiv \langle\sigma\rangle = (P_1 + 2P_2 + 4P_4)/4, \tag{5.10}$$

である. ここで P_l はスピン状態 1 を l 個もつバーテックスを観測する確率であり, x の増加関数である.

5.3 数値解析により得られた結果

角転送行列繰込み群の解析による数値結果[2]を得た. [105]

パラメータ a が 0 の場合, 6 つのバーテックスの配置のみが許される. この制限のもとでは, 図 5.11 で示すように, すべてのスピンが $\sigma = 1$ をとる長方形領域が $\sigma = 0$ の"海"の中に分かれて現れる.[3] 期待値 $\rho(x, a = 0)$ は x とともに徐々に増加し, $x = 1.23$ において

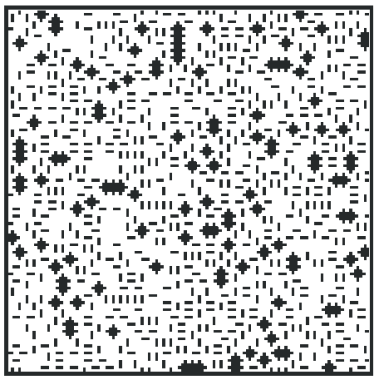


図 5.11: $(x, a) = (1.23, 0)$ でのスピン配置のスナップショット.

$\rho = 1$ へと一次相転移する. (図 5.12 を見よ.)

一方, $a = 0.6$ の場合, $\rho(x, a = 0.6)$ は x に対して不連続性も特異性も示さない. 従って, ある特定の a と x の値が臨界点であると期待できる. x と a で張られるパラメータ空間 (図 5.13) において一次相転移をたどって行くと, おおよそ $a_C = 0.36$ が臨界点であることが読み取れる. 一次相転移を示す線上で ρ のとびを求めてみると, $(a - a_C)^{1/8}$ に比例する事実が観測された. (図 5.14 参照.) これより a_C をより精密に求め直すと, $a_C = 0.3599$ となる.

臨界点の位置 x_C と臨界点での $\rho(x_C, a_C)$ を決めるために, 以下のスケーリング形式を仮定する.

$$\rho(x,a) - \rho(x_C, a_C) \propto |x_C - x|^{\mu}. \tag{5.11}$$

[2]ブロックスピン変数には多くて 80 個の状態数を残して計算を行った.

[3]図 5.11 と図 5.16 を得るための計算には, ブロックスピンの状態数を $m = 20$ に保ち, この状態数は 50×50 のサイズの系のスナップショットを描くためには十分である.

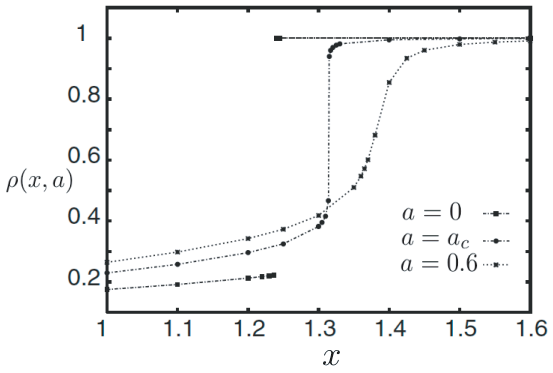


図 5.12: $a = 0$, 0.3599 と 0.6 での期待値 $\rho(x, a)$.

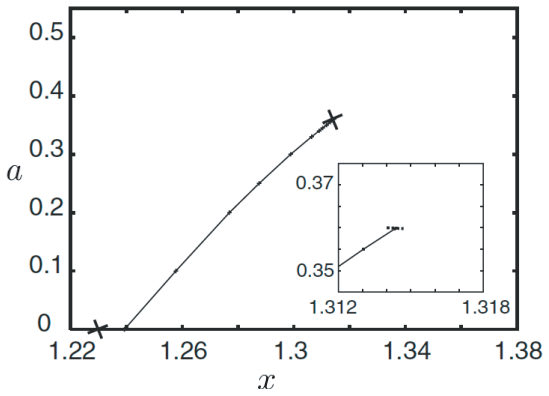


図 5.13:　10 バーテック模型の相図.　一次相転移を示す線は臨界点 $(x_C, a_C) = (1.31438, 0.3599)$ までのびている. バツ印は図 5.11 と図 5.16 のスナップショットに使った点を示す. 挿入図: 図 5.15 のスケーリング解析で使ったパラメータの線.

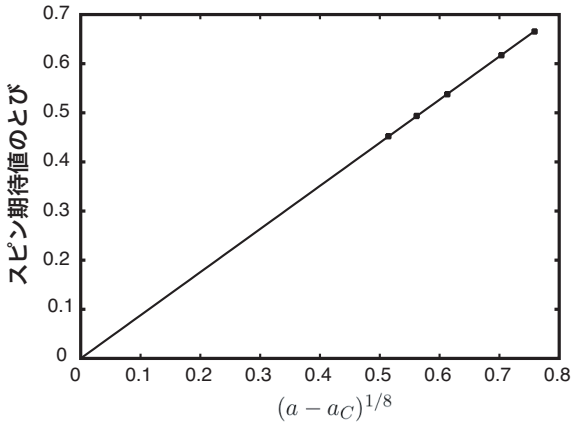


図 5.14: 相境界におけるスピン期待値のとびのパラメータ a 依存性.

μ を求めるため, $\rho(x,a)$ を $|x_C-x|$ の様々なベキに関して, 以下のラインに沿ってプロットする.

$$a = k(x-x_C)+a_C. \tag{5.12}$$

このラインは 2 つの調整可能なパラメータ k, x_C を含む. 指数 μ の見積もりは幾分簡単である. なぜなら, x_C の大雑把な見積もりに対してさえ, $\rho(x,a)$ がはっきりと $|x_C-x|^{1/15}$ の依存性を示すからである. この結果を基にして, パラメータ x_C の決定にも $\mu = 1/15$ を仮定する. $|x_C-x|^{1/15}$ に対する $\rho(x,a)$ の最小二乗フィッティングから, $k=-0.27248$ と $x_C = 1.31438$ を得た. 最初に仮定した $\mu = 1/15$ の確認のために, 図 5.15 に臨界点周りのスピン期待値を示す. 図中で 2 つのフィッティング直線は以下の式で表される.:

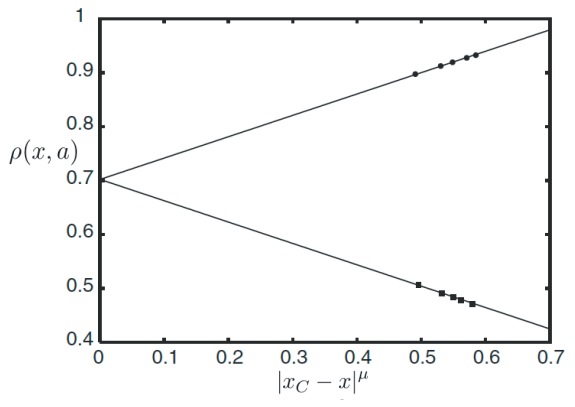


図 5.15: 臨界点 (x_C, a_C) まわりでの ρ の振る舞い.

$$0.396(x - x_C)^{1/15} + 0.702 \quad (x > x_C), \tag{5.13}$$
$$-0.396(x_C - x)^{1/15} + 0.702 \quad (x < x_C). \tag{5.14}$$

従って, 臨界点でのスピン期待値の値 $\rho(x_C, a_C)$ は 0.702 であることがわかる. 臨界点でのスナップショットを図 5.16 に示す.

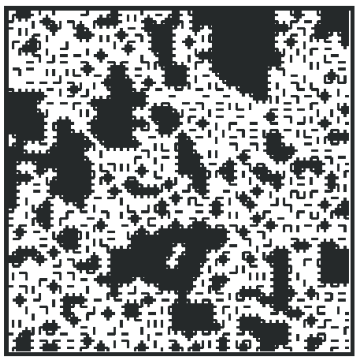


図 5.16: 臨界点でのスナップショット.

5.4　結論

10 個の局所的な配置をとるバーテックス模型の相転移を調べ, 新たな臨界点 $(x_C, a_C) = (1.31438, 0.3599)$ を得た. 臨界点周りのスピン期待値の振る舞いから, 臨界指数 1/8 および 15 を見つけ, イジング普遍性クラスに属することがわかった.

第6章　数値解析手法の紹介および開発

古典スピン系には, 分配関数を厳密に求められる可解系が存在する. 一方, 可解系から外れる系に対しては, 近似法や数値計算による解析が有用である. 数値解析手法の一つに, ホワイトの「密度行列繰込み群 (DMRG : density matrix renormalization group)」[96][97][98][99] がある. DMRG は, 1 次元量子スピン系に対して提案されたが, 2 次元古典スピン系にも適用されている. 転送行列 (=スピン列間のボルツマン重率) に対して「幅の拡大」と「ブロックスピン変換によるスピンの状態数の圧縮」を行い, 古典スピン系の分配関数を精度よく求める. DMRG から派生した手法に, バクスターの角転送行列法 (CTM: corner transfer matrix)[100][103][104] に DMRG 的な繰込み群変換を用いた「角転送行列繰込み群 (CTMRG : corner transfer matrix renormalization group)」[105][51][106] がある. 本研究の解析には CTMRG を用いた.

本研究では, 数値手法の開発も並行して行った. 一つは, CTMRG での「スナップショット生成の方法」の開発である. 系のある瞬間のスピン配置を可視化する. [106] モンテカルロ法では計算過程でいつもスナップショットが保持されている. CTMRG などの DMRG-like な手法においては初めての試みである.

手法開発の二つ目は, 双曲平面上の統計模型に適用するための CTMRG の変形を提案する.[50] 双曲平面上の格子がもつ繰り返し構造に着目して, 角転送行列の自然な変形を与えた. 十分大きな差渡しの系の中心における 1 点相関関数の計算が可能となった. 臨界現象の解析も精度よく実行できる.

他に手法開発には, DMRG-like な計算手法の一つである積波動関数繰込み群 (PWFRG : product wave function renoemalization group)[115] の拡張がある. PWFRG の基礎部分を行列積変分 [119] の立場から解明した. PWFRG の再構成と高速化を行った. [120]

6.1　古典スピン系に対する数値計算手法

数値計算手法は, 古典スピン系の熱力学的な振る舞いを記述する分配関数や熱力学量を厳密に求めることが困難な系に対して, 有用な解析手法である. 代表的な数値計算手法の一つにはモンテカルロ法が挙げられる. [87]

比較的よく用いられるメトロポリス法は, [88] 系に含まれるスピンをひとつずつ, ボルツマン重率に従って確率的にフリップさせて (シングルスピンフリップ), 平衡状態での系のスピン配置をサンプルする方法である. ただし, 臨界点近傍では, スピン配置のサンプル同士に強い相関が残る「遅い臨界緩和」問題がある. 解決には, 複数のスピンをまとめてフリップさせる改良が試みられた. [92][93] メトロポリス法は一次相転移を持つ系でも準安定状態から最安定状態へ移るのに長い時間を要する問題がある. 解決は, アニーリング法 [91] や交換モンテカルロ法 [95] などが提案されている.[94] このように, 現在では多くの古典スピン系の解析に対してモンテカルロ法が適用可能となっている.

２次元古典スピン系に対する数値計算手法には, 数値厳密対角化や, 密度行列繰込み群 [96][99][97][98] などもある. 転送行列 (スピン列間のボルツマン重率) の最大固有値から分配関数および自由エネルギーを求める手法である. 「密度行列繰込み群 (DMRG)」は, 1992 年にホワイトにより一次元量子スピン系の数値繰込み群手法として提案された. 西野は, 1 次元量子スピン系のハミルトニアンと転送行列のアナロジーから 2 次元古典スピン系に DMRG を適用した. [99] 続いて, 1996 年に西野と奥西はバクスターの角転送行列 [101][102][103][104][100] と密度行列繰込み群による処方を組み合わせた「角転送行列繰込み群 (CTMRG)」を提案した.[105] 主に 2 次元古典スピン系に対する DMRG 手法の開発の概略を図 6.1 に示す. DMRG や DMRG-like な手法を用いた 2 次元古典スピン系の解析例には, ANNNI 模型 [107], 19 バーテックス模型 [108][109][110], 表面吸着模型 [111][112] がある. [98].

本研究の解析で主に用いた「角転送行列繰込み群」のアルゴリズムを次節で述べる. 本研究では, 数値解析手法の開発も行った. その中から, 6.3 節では「CTMRG でのスナップショット生成アルゴリズム」を述べ, 6.4 節では「双曲平面上への CTMRG の変形」を述べる. 本稿では詳述を避けるが, 「積波動関数繰込み群 (PWFRG)[115] の高速化と変分的視点 [119] での手法の基礎部分の解明」も行った.[120]

6.2　角転送行列繰込み群

6.2.1　アルゴリズム

2 次元格子古典スピン系の熱力学極限での分配関数を求めることを考える. バクスターの角転送行列 (CTM) に従えば, はじめに有限なクラスターの分配関数を考えて, 続いて反復操作によって徐々に扱う系のサイズを拡大していくことができる. ただし, 系の拡大とともに扱う計算量が爆発的に増大する問題が発生する. この問題に対して, 密度行列繰込み群 (DMRG) に従ったブロックスピン変換を導入し, 分配関数の精度を保ったまま計算量

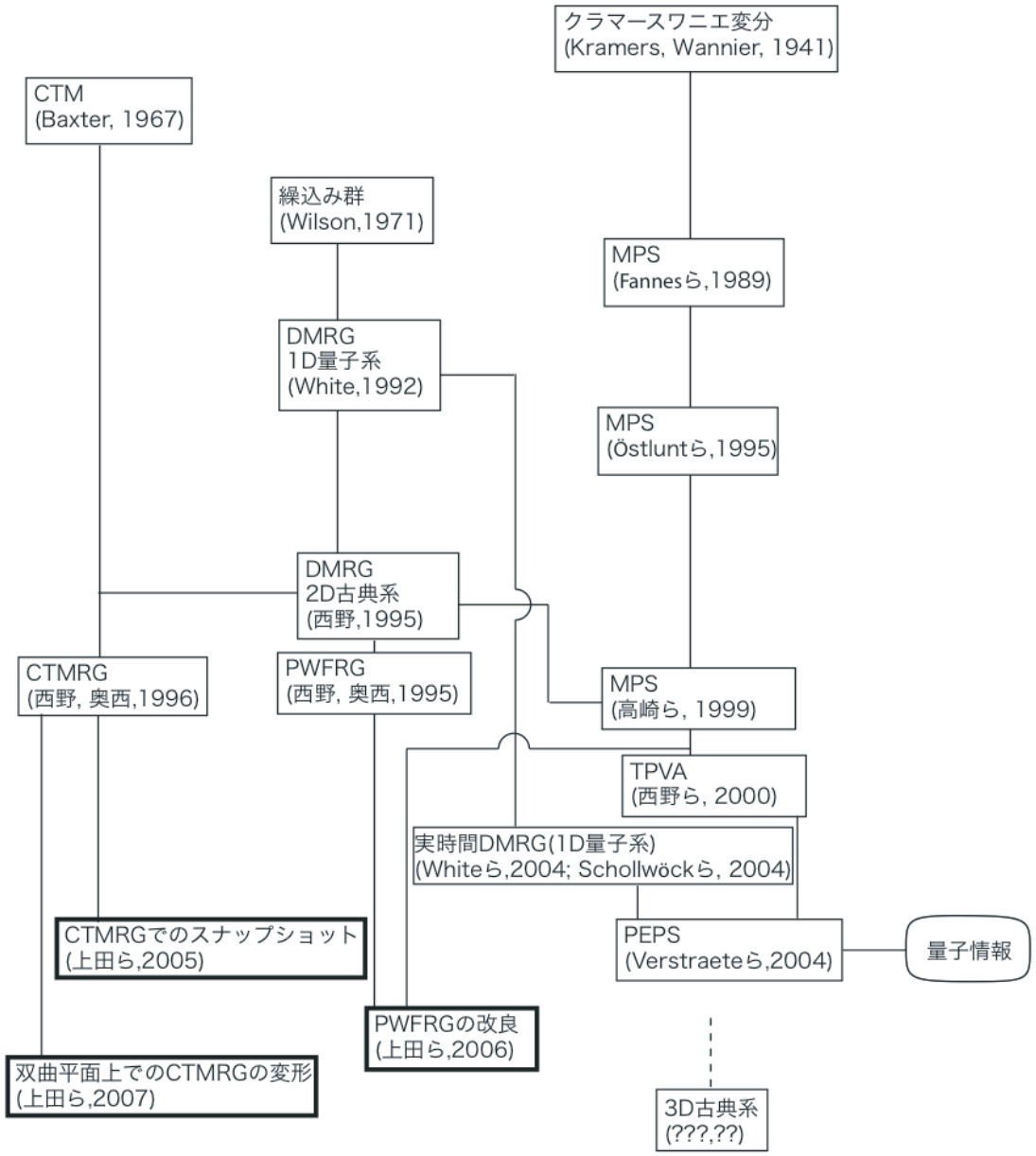


図 6.1: 古典スピン系での DMRG 手法の開発の概略. 太枠は著者らが行った仕事である. 文献を挙げておく: クラマースワニエ変分 [32]. MPS[116][117][118][119]. 実時間 DMRG[121][122]. TPVA[124], PEPS[123].

の制限 (切り捨て) を行う. 以下では, バーテックス模型の場合の角転送行列繰込み群のアルゴリズムを説明する.

角転送行列の定義

$(2N) \times (2N)$ サイト (=格子点数) の有限なクラスターでのバーテックス模型を考える. (図 6.2 参照) ボンド上にスピン変数がのっている. 4 つのスピン変数 σ_a, σ'_a, σ_b, σ'_b に囲ま

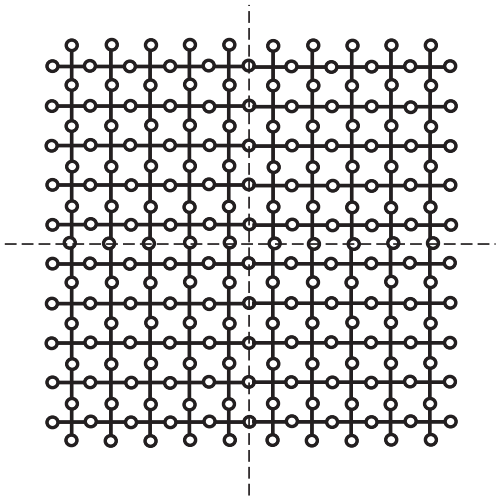


図 6.2: バーテックス模型のクラスター ($(2N) \times (2N)$). ($N = 5$). マル印はスピン変数を表す. 角転送行列は, 破線に沿って四分割したうちの一つの象限でのボルツマン重率である.

れたバーテックスには, スピン変数の値に応じたボルツマン重率 $W(\sigma'_a, \sigma_a | \sigma_b, \sigma'_b)$ が割りあてられる. (図 6.3 を見よ) 系には, 90 度の回転対称性があるのもと仮定し, ボルツマン

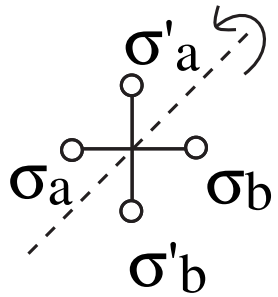


図 6.3: バーテックスに対する局所的なボルツマン重率 $W(\sigma'_a, \sigma_a | \sigma_b, \sigma'_b)$. 破線はスピン状態 (σ_b, σ'_b) から (σ'_a, σ_a) への「転送」のイメージを示した.

重率が以下の関係を満たすとしよう.

$$W(\sigma'_a,\sigma_a|\sigma_b,\sigma'_b)=W(\sigma_a,\sigma'_b|\sigma'_a,\sigma_b)=W(\sigma'_b,\sigma_b|\sigma_a,\sigma'_a)=W(\sigma_b,\sigma'_a|\sigma'_b,\sigma_a). \tag{6.1}$$

$(2N)\times(2N)$ のクラスターの分配関数は

$$Z=\sum_{\text{全スピン}}\prod_{\text{全バーテックス}}W, \tag{6.2}$$

である. ここで和は全スピンの可能な配置をとり, 積は隣接するバーテックス同士のボルツマン重率の積である.

$(2N)\times(2N)$ のクラスターに対する角転送行列を導こう. クラスターを (スピン変数を境にして) 十文字に四分割する. (図 6.2 参照) 角転送行列 C は一つの象限でのボルツマン重率で定義される. となりの象限と接するスピン変数を除く残りのスピン変数について和をとる. すなわち,

$$C(\sigma_1,\sigma_2,\ldots,\sigma_N|\sigma'_1,\sigma'_2,\ldots,\sigma'_N)=\sum_{\text{象限内のスピン}}\prod_{\text{象限内のバーテックス}}W, \tag{6.3}$$

である. 角転送行列は, 列から行 (または列から行) へのスピンの状態を転送する. (図 6.4 を見よ.)

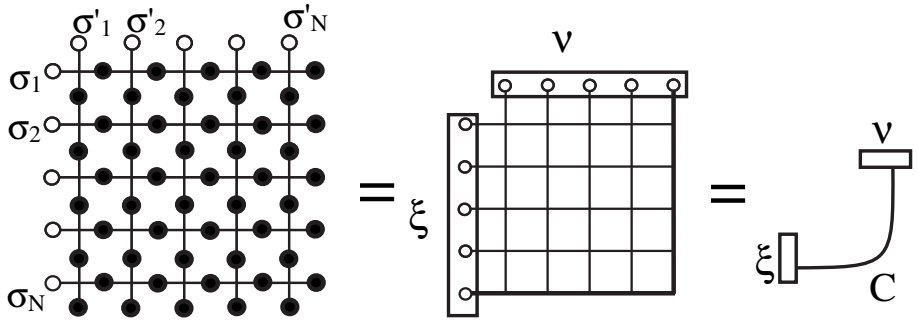


図 6.4: 角転送行列 C. 系を 4 分した 1 象限のボルツマン重率の内側のスピン変数の状態の和をとったものに対応する. 複数のスピンを一つのブロックスピン変数にまとめ ξ,ν とした. マル印はスピン変数を表す. 黒塗りマルは, スピン変数のトレースアウトを表している. 四角はブロックスピン変数を表す.

クラスター ($(2N)\times(2N)$) の分配関数 Z は, 角転送行列 C から以下の表式によって与えられる. :

$$Z=\mathrm{Tr}C\cdot C\cdot C\cdot C=\sum_{\xi,\nu,\eta,\mu}C(\xi|\nu)C(\nu|\eta)C(\eta|\mu)C(\mu|\xi), \tag{6.4}$$

になる. ここでギリシャ文字 ξ,ν,η,μ は複数のスピンをまとめた「ブロックスピン変数」を表す. 今後, 計算アルゴリズムの説明で用いるギリシャ文字は σ を除いてブロックスピン変数を表す.

拡大プロセス

任意のサイズのクラスターに対する分配関数を求めるために, 角転送行列の拡大プロセスを考えて行く.

クラスター $((2N)\times(2N))$ から $((2N+2)\times(2N+2))$ への拡大を考えよう. クラスター $((2N+2)\times(2N+2))$ の角転送行列は

$$C_{N+1}(\sigma_1,\sigma_2,\ldots,\sigma_N,\sigma_{(N+1)}|\sigma'_1,\sigma'_2,\ldots,\sigma'_N,\sigma'_{(N+1)}) = \sum_{\text{象限内のスピン}} \prod_{\text{象限内のバーテックス}} W, \tag{6.5}$$

である. 角転送行列の下付き添え字はサイズを表す.

適当な数のボルツマン重率 W を C_N に付け加えると角転送行列 C_{N+1} を得る. (図 6.5) このような「角転送行列の拡大」を考えてみよう. 形式的に話を進めるために, 新たな行

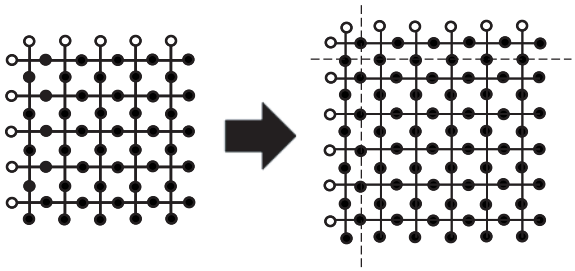


図 6.5: 角転送行列の拡大 $C_N \to C_{N+1}$ $(N=5)$.

列「half-row 転送行列 (HRTM)」を導入する. N 個のバーテックスを一列につないだボルツマン重率が HRTM である.(図 6.6 を見よ.)

$$P_N(\sigma'_1,\sigma_1,\sigma_2,\ldots,\sigma_N|\sigma'_1,\sigma''_1,\sigma''_2,\ldots,\sigma''_N) = \sum_{half-row\ \text{内のスピン}} \prod_{half-row\ \text{内のバーテックス}} W. \tag{6.6}$$

C_N から C_{N+1} を導く表式は, P_N や W を用いて,

$$C_{N+1} = W\cdot P_N C_N P_N, \tag{6.7}$$

と書ける. 行列要素では

$$C_{N+1}(\sigma_1\xi|\sigma'_1\nu) = \sum_{\xi',\nu'\sigma_b,\sigma'_b} W(\sigma'_1,\sigma_1|\sigma_b,\sigma'_b)P_N(\sigma'_b\xi'|\sigma'_b\xi)C_N(\xi'|\nu')P_N(\sigma_b\nu'|\sigma_b\nu). \tag{6.8}$$

ここで, N 個のスピン列をブロックスピン変数 ξ,ν,ξ',ν' で表した. (図 6.7 を見よ.)

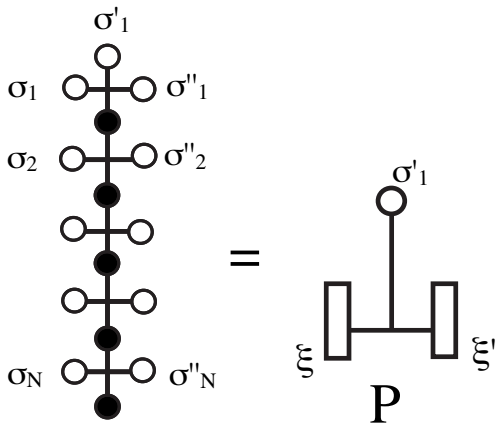


図 6.6: HRTM(half-row 転送行列) P_N. ($N = 5$.) マル印はスピン変数を表す. 黒塗りはスピン変数のトレースアウトを示す. ブロックスピン変数を四角で表す.

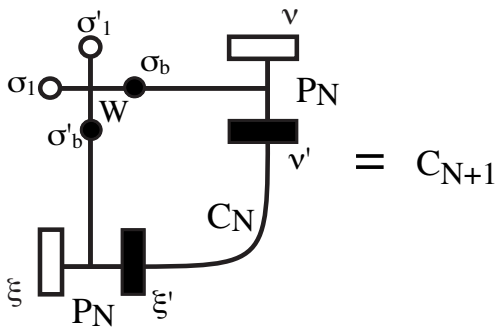


図 6.7: 角転送行列の拡大 (式 (6.7)).

我々は, 式 (6.7) の N に $N+1$ を代入することで C_{N+2} を形式的に求めることができる. ただし, HRTM P_{N+1} は与えられていない. HRTM P_N から P_{N+1} への拡大を考えよう. HRTM の拡大は以下の表式で求められる.

$$P_{N+1} = W \cdot P_N. \tag{6.9}$$

行列要素で書けば,

$$P_{N+1}(\sigma_1'\sigma_1\xi|\sigma_1'\sigma_1''\xi') = \sum_{\sigma_b'} W(\sigma_1'\sigma_1|\sigma_1''\sigma_b')P_N(\sigma_b'\xi|\sigma_b'\xi'). \tag{6.10}$$

ここで N 個のスピン列をブロックスピン変数 ξ, ξ' で表した (図 6.8 を見よ.)

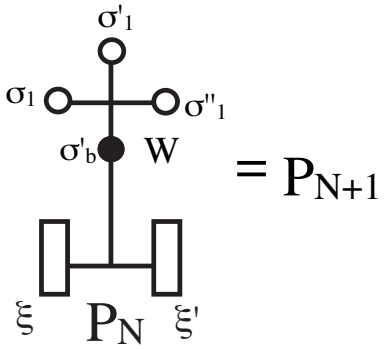


図 6.8: HRTM の拡大. 式 (6.9) で示すように, HRTM に 1 つのバーテックスのボルツマン重率を掛け合わせる.

以上から, 式 (6.7) と式 (6.9) を組み合わせて, 任意のクラスターのサイズの角転送行列, HRTM, 分配関数を求めることが (原理的に) 可能となった. ただし, 数値計算では, このような拡大プロセスから得られるクラスターにはサイズに限界がある. 例えば 2 状態スピン変数の場合, 拡大するごとに角転送行列や HRTM の計算次元が 4 倍ずつ増えていき, 必要な計算量が急増する. この問題は, 密度行列繰込み群のブロックスピン変換を導入で解決できる.

繰込み処方

C_{N+1} と P_{N+1} に対するブロックスピン変換を述べて行く.
まず, クラスター $(2(N+1) \times 2(N+1))$ の分配関数を思い出そう. :

$$Z = \mathrm{Tr} C_{N+1} \cdot C_{N+1} \cdot C_{N+1} \cdot C_{N+1}.$$

ここで, 新たな行列「副密度行列 ρ」を導入する. :

$$\rho = C_{N+1} \cdot C_{N+1} \cdot C_{N+1} \cdot C_{N+1}, \tag{6.11}$$

副密度行列を行列要素で書き直すと,

$$\begin{aligned}\rho(\sigma\xi|\sigma'\xi') &= \sum_{\sigma_a,\sigma_b,\sigma_c,\nu,\eta,\mu} C_{N+1}(\sigma\xi|\sigma_a\nu)C_{N+1}(\sigma_a\nu|\sigma_b\eta) \\ &\times\ C_{N+1}(\sigma_b\eta|\sigma_c\mu)C_{N+1}(\sigma_c\mu|\sigma'\xi'). \end{aligned} \tag{6.12}$$

(図 6.9 を見よ.) 分配関数は副密度行列のトレースから得られる. ($Z = \mathrm{Tr}\rho$).

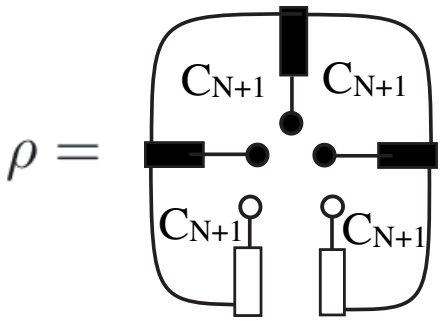


図 6.9: 副密度行列 ρ

角転送行列や HRTM に現れるブロックスピン変数の状態数を切り捨てる変換である「ブロックスピン変換」について考えよう. クラスターの分配関数を計算することが目的の場合, 有用なブロックスピン変換とは「変換前後で分配関数をできる限り保て」ばよい. 言い換えると, 変換前後で副密度行列の固有値列から大きな値をもつ m 個のみを保つことである. 従って, ブロックスピン空間を副密度行列の大きな固有値 m 個に対応する固有ベクトル空間 (m 次元) に移す変換 R を考えよう.

ブロックスピン変換 R は以下のように構成できる. 副密度行列の固有値問題から

$$\sum_{\sigma'\xi'} \rho(\sigma\xi, |\sigma'\xi')v_i(\sigma'\xi') = \omega_i v_i(\sigma\xi). \tag{6.13}$$

となる. ここで, 密度行列の i 番目の固有値が ω_i で, 対応する固有ベクトルが v_i である. ($i = 1, 2, \ldots, 2^{N+1}$). 固有値 ω_i は降順に並んでいるとする. ブロックスピン変数 ξ へのブロックスピン変換 R は,

$$R(\sigma\xi|\xi^{new}) = (v_1(\sigma\xi), v_2(\sigma\xi), \ldots, v_m(\sigma\xi)), \tag{6.14}$$

で構成される. $\xi^{new} = 1, 2, \ldots, m$ である.

変換行列 R を角転送行列や HRTM へ作用させて, 繰込まれた角転送行列 $\tilde{C}$, 繰込まれた HRTM $\tilde{P}$ を得る.

$$\tilde{C}_{N+1} = {}^tRC_{N+1}R, \tag{6.15}$$

$$\tilde{P}_{N+1} = {}^tRP_{N+1}R, \tag{6.16}$$

行列要素で書くと,

$$\tilde{C}_{N+1}(\xi^{new}|\nu^{new}) = \sum_{\sigma,\sigma',\xi,\nu} R(\sigma\xi|\xi^{new}) C_{N+1}(\sigma\xi|\sigma'\nu) R(\sigma'\nu|\nu^{new}), \quad (6.17)$$

$$\tilde{P}_{N+1}(\sigma'\xi'^{new}|\sigma'\xi^{new}) = \sum_{\sigma,\sigma'',\xi',\xi} R(\sigma''\xi'|\xi'^{new}) P_{N+1}(\sigma'\sigma''\xi'|\sigma'\sigma\xi) \times R(\sigma\xi|\xi^{new}), \quad (6.18)$$

である. (図 6.10 を見よ.)

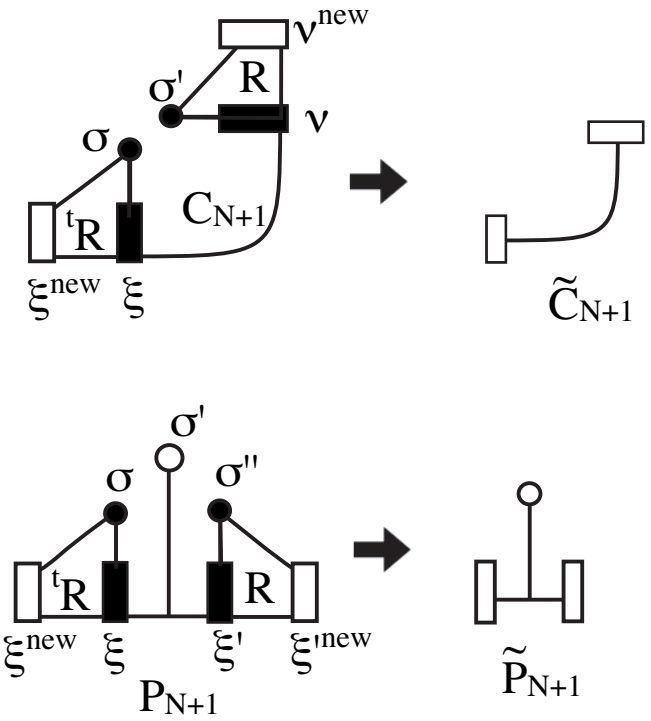


図 6.10: ブロックスピン変換.$C_{N+1} \to \tilde{C}_{N+1}$, $P_{N+1} \to \tilde{P}_{N+1}$. (式 (6.15) と式 (6.16)).

以上が「角転送行列繰込み群 (CTMRG)」のアルゴリズムである. 計算手順をまとめる.:

1. 初期状態 ($N = 1$) : C_1, P_1. (式 (6.3), 式 (6.6))
2. 拡大 : $C_N \to C_{N+1}$ および $P_N \to P_{N+1}$. (式 (6.7), 式 (6.9))
3. 副密度行列 ρ . (式 (6.11))
4. 副密度行列の対角化およびブロックスピン変換 R. (式 (6.13), 式 (6.14))

5. ブロックスピン変換: $C_{N+1} \to \tilde{C}_{N+1}$ および $P_{N+1} \to \tilde{P}_{N+1}$. (式 (6.15), 式 (6.16))
6. ラベルの付け替え: $\tilde{C}_{N+1}, \tilde{P}_{N+1} \ \to \ C_N, P_N$
7. ステップ 2 へ.

角転送行列繰込み群の適用限界

現時点における古典スピン系に対する CTMRG の適用限界について述べておく.

- 3 次元系. CTMRG や DMRG では計算が困難. テンソル積変分法 (TPVA)[124] や PEPS[123] などが有望視されている.
- 90 度回転対称性がない系. 例 : 6 バーテックス模型. 一部の系については積波動関数繰込み群 (PWFRG)[115][120] での取り扱いが可能. CTMRG における副密度行列の明確な構成方法が知られていない. 文献 [125] や文献 [126][96] を参照.
- 180 度回転対称性がない系. CTMRG および PWFRG が破綻. PEPS が有望視されている.

6.2.2 熱力学量の解析

物理量の計算

クラスターの中心付近における一点スピン関数の物理量に対する計算を述べる. スピン期待値 $\langle\sigma\rangle$ を求める. まず, 式 (6.7) と式 (6.9) から, $2(N+1) \times 2(N+1)$ のクラスターの角転送行列 C_{N+1} を計算する. 物理量 $\langle\sigma\rangle$ は,

$$\langle\sigma\rangle = \frac{\mathrm{Tr}[\sigma C \cdot C \cdot C \cdot C]}{\mathrm{Tr}[C \cdot C \cdot C \cdot C]}, \tag{6.19}$$

である. この式の分子の行列要素は,

$$\sum_{\sigma,\sigma',\sigma'',\sigma'''\xi,\nu,\eta,\mu} \sigma C(\sigma\xi|\sigma'\nu) C(\sigma'\nu|\sigma''\eta) C(\sigma''\eta|\sigma'''\mu) C(\sigma'''\mu|\sigma\xi) \tag{6.20}$$

である.

CTMRG の規格化と自由エネルギー

CTMRG ではクラスターの拡大に伴い, CTM や HRTM の各行列要素の値が急激に増加する. そのために, 適当な数で規格化する必要がある. ただし, CTM の規格化は自由エネルギーと分配関数に影響を及ぼす. 分配関数には $(\mathrm{CTM})^4$ ではだけなく, 規格化因子まで考慮する必要がある.

クラスター $((2N)\times(2N))$ の CTM や HRTM を以下のように規格化する. :

$$C_N \leftarrow \frac{C_N}{N_C(N)}, \tag{6.21}$$

$$P_N \leftarrow \frac{P_N}{N_P(N)}. \tag{6.22}$$

ここで, $N_C(i)$, $N_P(i)$ は CTM や HRTM の各サイズに対する規格化因子である. 規格化因子には, 例えば, 各行列の要素の最大値や, 全要素の二乗平均などが挙げられる. 各サイズの CTM や HRTM も規格化しているので, CTM の表式 (6.3) や HRTM の表式 (6.6) は

$$C_N = \left\{ N_C(N) \prod_{i=1}^{N-1} N_C(i) \left[N_P(i)\right]^{2(N-i)} \right\}^{-1} (W)^{N\times N}, \tag{6.23}$$

$$P_N = \left\{ \prod_{i=1}^{N} N_P(i) \right\}^{-1} (W)^{N}, \tag{6.24}$$

となる.

分配関数 Z から自由エネルギー $(-k_BT\log Z)$ が計算できる. 規格化した CTM を用いた $\log Z$ の表式を書き下すと,

$$\begin{aligned} \log Z &= \log\left[\mathrm{Tr}(C_N)^4\right] \\ &+ 4\left[\sum_{i=1}^{N}\log\left[N_C(i)\right] + 2\sum_{j=1}^{N-1}(N-j)\log\left[N_P(j)\right]\right], \end{aligned} \tag{6.25}$$

となる. 各熱力学量は $\log(Z)$ に対する数値微分[1]によって求めることもできる.

有限サイズスケーリング

角転送行列繰込み群などの数値解析では, 扱える系のサイズが有限に制限される. 一方, 臨界点近傍では相関長が無限大にのびることから, 熱力学量の特異性は熱力学極限において現れる. 従って, 臨界指数の評価など臨界現象の解析には, 系のサイズが無限大における熱力学量や相関関数の振る舞いを知る必要がある. そこで, 数値解析では有限サイズの系で得たデータに対して, スケーリング理論に基づく臨界点近傍での外挿法「有限サイズスケーリング」を用いる.

[1]関数 $f(x)$ を x に関して数値微分する際には,

$$f'(x) = \lim_{\Delta\to 0}\frac{f(x+\Delta/2)-f(x-\Delta/2)}{\Delta},$$

$$f''(x) = \lim_{\Delta\to 0}\frac{f(x+\Delta)-2f(x)+f(x-\Delta)}{\Delta^2},$$

を用いる.

一辺の格子点数が N 個の系を考える. カダノフの議論の自由エネルギー (2.25) に新たな引数 N^{-1} を加えて,

$$f(L^y t, L^x h, L/N) = L^d f(t, h, 1/N), \tag{6.26}$$

とする. ここで L はブロック長である. この式を温度 t と磁化 h でそれぞれで微分して, エネルギー E と磁化 M の表式

$$L^y E(L^y t, L^x h, L/N) = L^d E(t, h, 1/N), \tag{6.27}$$
$$L^x M(L^y t, L^x h, L/N) = L^d M(t, h, 1/N), \tag{6.28}$$

を得る. ただし, エネルギーの原点は臨界点での値 $E(0,0,0)$ にしてある. ここで, $t = 0(T = T_C)$, $h = 0$ とすると,

$$E(0, 0, 1/N) = L^{y-d} E(0, 0, L/N), \tag{6.29}$$
$$M(0, 0, 1/N) = L^{x-d} M(0, 0, L/N), \tag{6.30}$$

を得る.

臨界点では, 相関長は十分に長く, 系のサイズ N と同程度にのびている. 従って, 系を一つ程度のブロックと見なしてブロックの大きさ L を $L \sim N$ とする. そうして,

$$E(0, 0, 1/N) \sim N^{y-d}, \tag{6.31}$$
$$M(0, 0, 1/N) \sim N^{x-d}, \tag{6.32}$$

を得る. 上式に式 (2.34) と (2.36) とを代入すると, 熱力学量のサイズ依存性と臨界指数との関係式が導ける.:

$$E(0, 0, 1/N) \sim N^{\frac{1}{\nu}-d}, \tag{6.33}$$
$$M(0, 0, 1/N) \sim N^{-(d-2+\eta)/2}. \tag{6.34}$$

臨界点近傍での有限サイズの系のデータを用いて, 表式 (6.33)(6.34) に従って外挿を行えば, 臨界指数や臨界点上の熱力学量の値を求めることができる.[2]

6.3 角転送行列繰込み群によるスナップショット生成アルゴリズム

本研究で行った数値解析手法の開発の中から「CTMRG でのスナップショット生成アルゴリズム」について詳述する.[106]

「スナップショット (=ある瞬間のスピン配置)」は, 以下の手順で得ることができる. :

1. あるスピンに注目して, スピン状態に対する確率分布を求める.

[2]但し, ブロックスピン変数 m を絞る効果も考慮する必要がある. [113][114]m を絞ると相関長が縮む.

2. 確率分布に従ってサイコロを転がして (乱数を振って) 注目したスピンの状態を決定する.

3. 他のスピンも同様に確率的に状態を固定する.

角転送行列繰込み群の枠組みで, 十分大きなクラスターの中心付近の小さな領域に対するスピン配置を確率的に決定する方法を述べていく.

正方格子上のバーテックス模型を考える. 角転送行列繰込み群によって, 十分大きなクラスターの角転送行列と HRTM を用意しておく. 4 つの角転送行列と 4 本の HRTM について以下のようにラベル付けをする.

$$C \to C, C', C'', C'''$$
$$P \to P, P', P'', P'''$$

ラベルの位置関係は図 6.11 に示した.

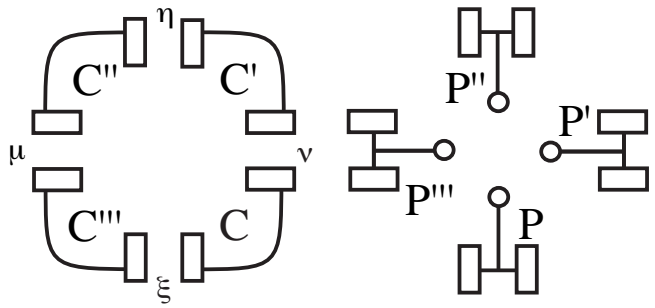


図 6.11: 角転送行列と HRTM のラベル付け.

バーテックスのスピン状態の固定

系の中心付近の一つのバーテックスの状態 (スピン配置) を確率的に決めよう. 系を「左・真ん中・右」に 3 分割し, それぞれの領域のボルツマン重率 U, T, V を定義する.

$$U(\eta'\sigma'''\xi') = \sum_{\mu,\mu'} C''(\eta'|\mu')P'''(\sigma'''\mu'|\sigma'''\mu)C'''(\mu|\xi'), \tag{6.35}$$

$$V(\xi\sigma'\eta) = \sum_{\nu,\nu'} C(\xi|\nu)P'(\sigma'\nu|\sigma'\nu')C'(\nu'|\eta), \tag{6.36}$$

T は,

$$T(\eta'\sigma'''\xi'\sigma''\sigma\xi\sigma'\eta) = P(\sigma\xi'|\sigma\xi)W(\sigma''\sigma'''|\sigma'\sigma)P''(\sigma''\eta|\sigma''\eta'), \tag{6.37}$$

であり, 転送行列に似た形をしている. (図 6.12 を見よ.)

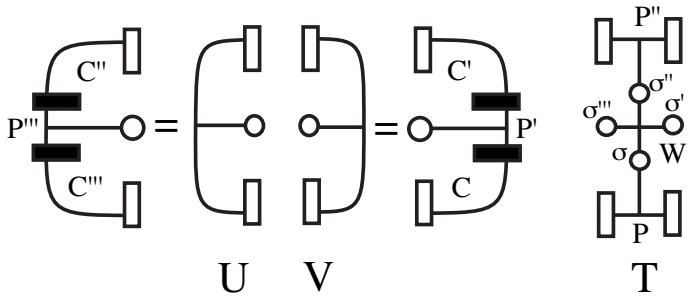


図 6.12: 系の左側と右側のボルツマン重率 U と V と縦のバーテックス列のボルツマン重率 T.

注目しているバーテックスの各スピン配置に対するボルツマン重率 Pr を求める. U, V, T を用いて,

$$Pr(\sigma, \sigma', \sigma'', \sigma''') = \sum_{\xi\xi'\eta\eta'} U(\eta'\sigma'''\xi')T(\eta'\sigma'''\xi'\sigma''\sigma\xi\sigma'\eta)V(\xi\sigma'\eta), \tag{6.38}$$

である. (図 6.13 を見よ.) スピン変数 σ に対する確率分布 p は,

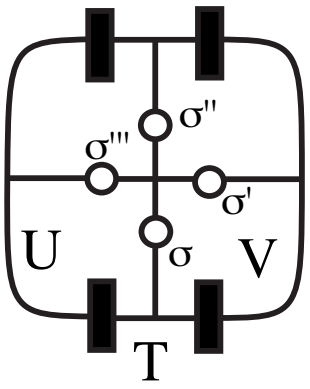


図 6.13: 注目しているバーテックスの各スピン配置に対するボルツマン重率 Pr.

$$p(\sigma) = \frac{\sum_{\sigma',\sigma'',\sigma'''} Pr(\sigma, \sigma', \sigma'', \sigma''')}{\sum_{\sigma,\sigma',\sigma'',\sigma'''} Pr(\sigma, \sigma', \sigma'', \sigma''')}, \tag{6.39}$$

から得ることができる.

確率分布 p に従って, スピン変数 σ を確率的に決定する. 便宜上, スピン変数は $\sigma = 0, 1$ を取るとする. 確率 p は $0 \leq p(\sigma = 0) \leq 1$ を満たす. 一様乱数 $x = [0, 1)$ と確率 $p(\sigma = 0)$ を比較して,

$$p(\sigma = 0) < x, \tag{6.40}$$

であれば, σ は $\sigma = 0$ を実現するとする. こうして, スピン σ を確率的に固定できる. 固定されたことを明示的に示すために, スピン変数 σ にバーを付けて $\bar{\sigma}$ とする.

スピン変数 σ' の確率的な状態を求めよう. 確率分布 $p(\sigma')$ は,

$$p(\sigma') = \frac{\sum_{\sigma'',\sigma'''} Pr(\bar{\sigma}, \sigma', \sigma'', \sigma''')}{\sum_{\sigma',\sigma'',\sigma'''} Pr(\bar{\sigma}, \sigma', \sigma'', \sigma''')}, \tag{6.41}$$

である. ここで確率分布には, 固定されたスピン状態 $\bar{\sigma}$ を反映している. 確率分布 $p(\sigma')$ に従って,σ の場合と同様に, σ' を確率的に決める. 残りの σ'' と σ''' も同様に確率的に状態を固定することができる. このようにして, 系の中心の一つのバーテックスのスピン配置を確率的に決定できる.

バーテックス列のスピン状態の固定

いま注目していたバーテックスから, 右方向へ n 個のバーテックスを含む領域 (バーテックス列) に対して, スピン配置を確率的に決めよう. ただし, n はクラスターの差渡しより十分短いとする. さて, バーテックス列のスピン配置の決定は以下の手続きで進める.

1. 領域内の左端のバーテックスの状態は既に固定.
2. 一つ右のバーテックスへシフト.
3. 注目したバーテックスの 4 スピンに対する確率分布を計算.
4. 注目したバーテックスのスピン状態を確率的に決定. (式 (6.39), (6.40))
5. ステップ 2 へ.

ステップ 3 の確率分布の計算方法を述べていく.

いま考えているバーテックス列を含んだ系のボルツマン重率を求めよう. U, V の間に T を n 本挟んで構成する. (図 6.14 を見よ.) 考えているバーテックス列に含まれるバーテックスに, 左から 1 から n まで番号づけをする. i 番目のバーテックスに対して「左側」と「右側」のボルツマン重率をそれぞれ U_i, V_i とする. 前述の U, V は, U_1 と V_N に対応する.:

$$\begin{aligned} U_1(\eta_1\sigma_1'''\xi_1) &= U(\eta_1\sigma_1'''\xi_1), \\ V_N(\xi_{N+1}\sigma_N'\eta_{N+1}) &= V(\xi_{N+1}\sigma_N'\eta_{N+1}), \end{aligned} \tag{6.42}$$

である. ここでブロックスピン変数もバーテックスの番号に対応して ξ_i, ξ_{i+1} などと番号付けした.

V_i は反復的に T を掛けて「左へ」のばして行く. :

$$V_i(\xi_{i+1}\sigma_i'\eta_{i+1}) = \sum T(\eta_{i+1}\sigma'''\xi_{i+1}\sigma_{i+1}''\sigma_{i+1}\xi_{i+2}\sigma_{i+1}'\eta_{i+2}) V_{i+1}(\xi_{i+2}\sigma_{i+1}'\eta_{i+2}), \tag{6.43}$$

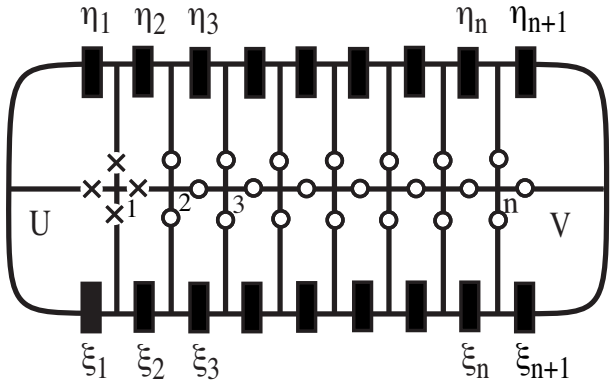


図 6.14: n 個のバーテックス並び (バーテックス列) のスピン配置に対するボルツマン重率. バツ印はスピン状態が固定されていることを示す.

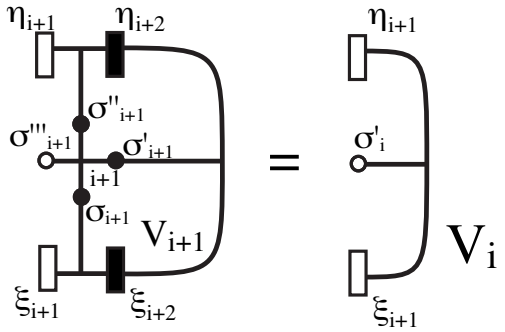


図 6.15: ボルツマン重率 V_i の反復式.

ここで, $\sigma'''_{i+1} = \sigma'_i$ を使った. (図 6.15 を見よ.)

一方, U_i は, 反復的に T を掛けて「右へ」のばす. ただし, 右へ伸ばす際にバーテックスのスピン状態の固定を反映しておく必要がある. 従って, 形式的には以下の表式になる.

$$U_i(\eta_i \bar{\sigma}'''_i \xi_i) = \sum_{\xi_{i-1},\eta_{i-1}} U_{i-1}(\eta_{i-1}\bar{\sigma}'''_{i-1}\xi_{i-1}) T(\eta_{i-1}\bar{\sigma}'''_{i-1}\xi_{i-1}\bar{\sigma}''_{i-1}\bar{\sigma}_{i-1}\xi_i\bar{\sigma}'_{i-1}\eta_i). \quad (6.44)$$

ここで, $\sigma'_{i-1} = \sigma'''_1$ の関係から, σ'''_i を $\bar{\sigma}'''_i$ に固定した. 上式は $i = 2$ から始めることに注意しなくてはならない. 図 6.16 に U_2 の計算を描いた.

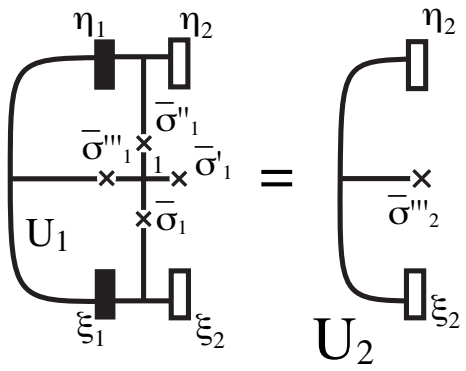


図 6.16: ボルツマン重率 U_2. バツ印はスピン変数が固定されたことを表した.

$i = 2$ 番目のバーテックスのスピン状態の固定を見ておこう. U_2 および V_2 からスピン配置に対するボルツマン重率 Pr は,

$$Pr(\sigma_2, \sigma'_2, \sigma''_2, \bar{\sigma}'''_2) = \sum_{\xi_2,\xi_3,\eta_2,\eta_3} U_2(\eta_2\bar{\sigma}'''_2\xi_2) T(\eta_2\bar{\sigma}'''_2\xi_2\sigma''_2\sigma_2\xi_3\sigma'_2\eta_3) V_2(\xi_3\sigma'_2\eta_3), \quad (6.45)$$

である. Pr から, $i = 2$ 番目のバーテックスのスピン状態を固定できる. 残りの $(n-2)$ 個のバーテックスに対してもスピン状態の確率的な決定が同様に実行できる.

バーテックス列 (2 本) のスピン状態の固定

クラスターの中心付近の $2 \times n$ 個のバーテックス (2 本のバーテックス列) の領域に対するスピン配置の確率的な決定を考えよう. 以下の手続きで進める.

1. 考えている領域の下側のバーテックス列のスピン状態は既に固定されている.
2. 上側のバーテックス列の左端のバーテックスに注目.
3. 注目したバーテックスのスピン状態の確率分布を計算.

4. 得られた確率分布から注目したバーテックスのスピン状態を確率的に決定.

5. 一つ右のバーテックスにシフト.

6. ステップ 3 へ.

系の中心付近にある $2 \times n$ 個のバーテックスを含む領域のボルツマン重率を求めて行こう. (図 6.17 を参照.) 2 本のバーテックス列の内, 上側に含まれるバーテックスに対して左

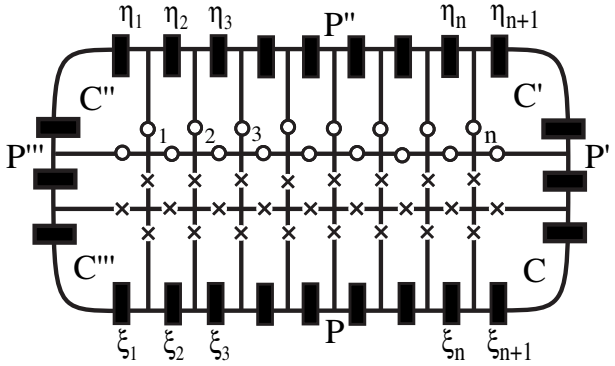


図 6.17: 横に n 個の並んだバーテックス列の 2 列から作られる状態に対するボルツマン重率. バツ印は固定したスピン状態を表している.

から $i = 1, 2, \ldots, n$ と番号付けしておく.

角転送行列の拡大の処方をまねて, C''' と C , P を拡大させる. いま考えているバーテックス列の下の列のスピン状態が固定されていることを考慮して, C''' と C の拡大および i 番目の P の拡大は

$$\sum_{\mu'} P'''(\bar{\sigma}_1'''\mu|\bar{\sigma}_1'''\mu')C'''(\mu'|\xi) \quad \Rightarrow \quad C'''(\mu|\xi), \tag{6.46}$$

$$\sum_{\nu'} C(\xi|\nu)P'(\bar{\sigma}_N'\nu'|\bar{\sigma}_N'\nu) \quad \Rightarrow \quad C(\xi|\nu), \tag{6.47}$$

$$W(\bar{\sigma}_i''\bar{\sigma}_i'''|\bar{\sigma}_i'\bar{\sigma}_i)P(\bar{\sigma}_i\xi_i|\bar{\sigma}_i\xi_{i+1}) \quad \Rightarrow \quad P_i(\xi_i|\xi_{i+1}), \tag{6.48}$$

である. ここで, P の場所依存性を現あらわすために P_i とラベル付けした. (図 6.18 を見よ.) また, P_i の引数の表示が, $P_i(\xi_i, \sigma_i, \xi_{i+1})$ から $P_i(\xi_i, \xi_{i+1})$ に変わったことに注意が必要である. 煩雑さを避けるために, 拡大された C''', C, P_i には, 既に決まったスピン状態はあらわに書かないことにした.

考えている上側のバーテックス列に対するスピン配置の確率的な決定を考えて行こう. Pr の計算に必要となる U_i, V_i, T_i を求めよう. T には固定されたスピン状態から場所依存するので T_i とラベル付けした. T_i は,

$$T_i(\eta_i\sigma_i'''\xi_i\sigma_i''\bar{\sigma}_i\xi_{i+1}\sigma_i'\eta_{i+1}) = P''(\sigma_i''\eta_{i+1}|\sigma_i''\eta_i)W(\sigma_i''\sigma_i'''|\sigma_i'\bar{\sigma}_i)P_i(\xi_i|\xi_{i+1}), \tag{6.49}$$

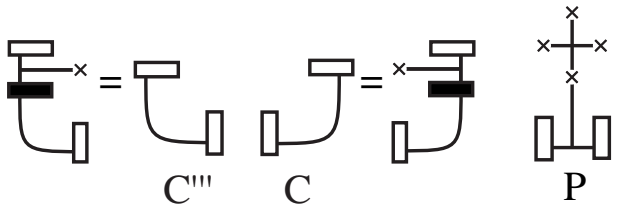


図 6.18: C''' と C と P の拡大.

となる. (図 6.19 を見よ.) .



図 6.19: T_i の拡大.

一方, U_1, V_N は, 式 (6.35) および式 (6.36) からそれぞれ計算できる. ただし, C''' と C はそれぞれ式 (6.46) および式 (6.47) で求めていられていることに注意する. このように, 形式的には前述の表式にほとんど変更が現れない. 同様に, U_i, V_i も, 前述の表式を再利用できる.

前述の表式が変更なく使えるので, 考えている領域の上側のバーテックス列のスピン状態は, 一本のバーテックス列に対する議論がほぼそのまま使える. また, バーテックス列の本数を増やすことも容易であり, こうして, 十分大きなクラスターの中心付近での小さな領域に対するバーテックスのある瞬間のスピン配置「スナップショット」が得られる.

6.4　双曲平面上への角転送行列繰込み群の変形

本研究で行った数値解析手法の開発の一つ「双曲平面上への CTMRG の変形」について詳述する.[50]

図 6.20 の格子での強磁性イジング模型を例に考える. 系のハミルトニアンは最隣接イジ

ング相互作用の和で定義して,

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \tag{6.50}$$

となる. ここで, $\langle i,j \rangle$ は隣接サイト対を示し, $\sigma = \pm 1$ は格子点上のイジングスピンである.

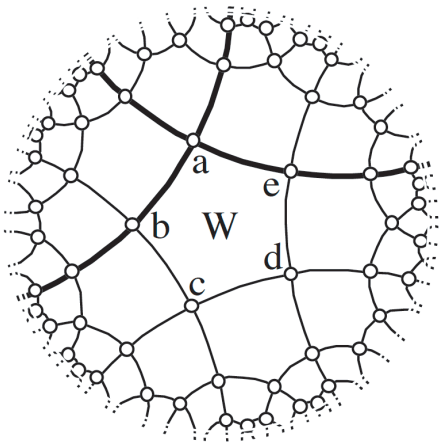


図 6.20: 双曲面の規則格子上のイジング模型. 白丸が格子点上のイジングスピンを示し, $W(\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c, \sigma_d, \sigma_e)$ は式 (6.51) で定義された局所的なボルツマン重率を示す. 太い弧で描かれた 2 本の測地線が系を 4 つの象限に分けて, この象限は角と呼ばれる.

後の簡便さのために, " IRF (面のまわりで相互作用をもつ: interaction round a face)" 模型で系を表す. 五角形の各面での局所的なボルツマン重率 –IRF 重率 – は以下で与えられる.

$$W(\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c, \sigma_d, \sigma_e) = \exp\left[-\frac{\beta J}{2}(\sigma_a\sigma_b + \sigma_b\sigma_c + \sigma_c\sigma_d + \sigma_d\sigma_e + \sigma_e\sigma_a)\right]. \tag{6.51}$$

ここで, $\beta = 1/k_B T$ は温度の逆数であり, $\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c, \sigma_d, \sigma_e$ は図 4.3 で示すように, 一つの面の周りのスピン変数である.

(十分大きな直径をもつ) 有限な大きさの系の分配関数は形式的に全系のボルツマン重率をスピン配列について和をとることによって書かれ,

$$Z = \sum_{\text{全スピン}} \prod_{\text{すべての面}} W, \tag{6.52}$$

である.

図 6.20 で, 太線の弧によって示した 2 本の測地線は系を 4 つの部分に分ける. 各部分を" 角" と呼ぶ.[104] 図 6.21 は角の構造を示す. $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots\}$ と切り口のスピンをラベル付

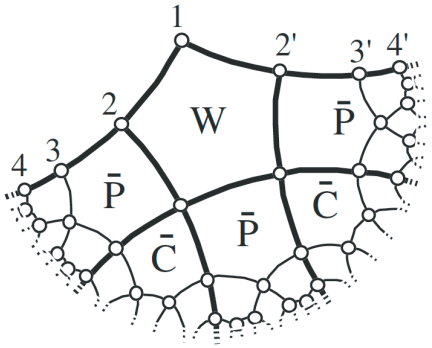


図 6.21: 角 C の反復的構造.

けし, もう一方の切り口については $\{\sigma_1', \sigma_2', \sigma_3', \dots\}$ とする. ここで σ_1 と σ_1' は等価である. 角転送行列は角についてのボルツマン重率であり, これは角における IRF 重率 (6.51) の積の部分和で計算し,

$$C(\sigma_1', \sigma_2', \sigma_3', \dots | \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots) = \sum_{\text{四分領域内のスピン}} \prod_{\text{四分領域の面}} W, \tag{6.53}$$

である. 配列の和は角の”中”のスピンについてとり, 切り口のスピンについては和をとらない. 慣習的に行列 C は σ_1 と σ_1' に関して対角的であり, $\sigma_1 \neq \sigma_1'$ の場合での行列要素 $C(\sigma_1', \sigma_2', \sigma_3', \dots | \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots)$ はゼロである. そのように定義した CTM は考慮中の五角格子の場合に対称的である.

図 6.21 に示されたように, 角は $\overline{P}$ でラベル付けされた 3 つの部分と $\overline{C}$ でラベル付けされた 2 つの部分が W の面に結合された構造である. ”統合”関係 は以下の形式的な式で表すことができる.[105]

$$C = W \cdot \overline{PCPCP}. \tag{6.54}$$

注意すべきことは $\overline{C}$ が一回り小さいサイズの角である.

便宜上, 図 6.22 で示した系の部分の構造を観測しよう. この図で 2 つの $\overline{P}$ と $\overline{C}$ が W に接続されている. 図示した部分を P とラベル付けして, 同様なやり方で形式的な結合関係を以下のように書ける.

$$P = W \cdot \overline{PCP}. \tag{6.55}$$

P は双曲平面の”段 (row)”ではないが, 慣習的な理由から, ”half-row”と呼ぶこととする. $\overline{P}$ が一回り小さいサイズの half-row であることは容易に理解できる. こうして角 C と half-row P の繰り返し構造を得た.

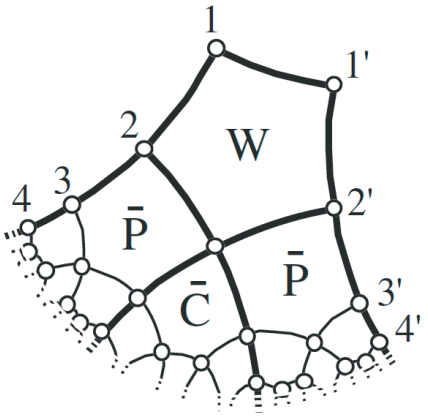


図 6.22: ”half-row” P の反復的構造.

角に対して CTM を定義したときのように, half-row についてもボルツマン重率で表現しよう. 行列形式では,

$$P(\sigma_1', \sigma_2', \sigma_3', \dots | \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots) = \sum_{half-row \text{ の中のスピン}} \prod_{half-row \text{ の面}} W, \tag{6.56}$$

である. ここでスピン $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots\}$ と $\{\sigma_1', \sigma_2', \sigma_3', \dots\}$ の位置は図 6.22 で示される. 行列形式での重率を half-row 転送行列 (HRTM : half-row transfer matrix) と呼ぶ.

CTM の 4 乗

$$\rho = C^4, \tag{6.57}$$

は密度行列の一種である. なぜなら, その対角和 (Tr) は 4 つの角からなる有限のクラスターの分配関数を与える.

$$Z = \mathrm{Tr}\rho = \mathrm{Tr}C^4. \tag{6.58}$$

CTM と HRTM の行列次元は系のサイズとともに指数関数的に増加する. 十分な大きなサイズまで系の分配関数 Z を数値的に得るために, 密度行列 ρ の対角化から作られるブロックスピン変換を導入する.[96]

式 (6.57) の ρ を直接的に対角化する代わりに, まず以下の縮約形をつくる.

$$\rho'(\sigma_2', \sigma_3', \dots | \sigma_2, \sigma_3, \dots) = \sum_{\sigma_1' = \sigma_1 = \pm 1} \rho(\sigma_1', \sigma_2', \sigma_3', \dots | \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots). \tag{6.59}$$

そして以下のように対角化する.

$$\rho'(\sigma_2', \sigma_3', \dots | \sigma_2, \sigma_3, \dots) = \sum_{\xi} A(\sigma_2', \sigma_3', \dots | \xi) \lambda_\xi A(\sigma_2, \sigma_3, \dots | \xi). \tag{6.60}$$

ここで固有値 λ_ξ は非負値である．DMRG の慣習に従って, λ_ξ は降順であると仮定する．直交行列 $A(\sigma_2, \sigma_3, \dots|\xi)$ は”段スピン (row-spin)”$\{\sigma_2, \sigma_3, \dots\}$ から有効スピン変数 ξ へのブロックスピン変換を示す．ブロックスピン変数 ξ の状態数を m 個に保つ．この m 個は大きい方の固有値に対応する．行列 A を CTM や HRTM に適用して, 以下のような $2m$ 次元の”繰込まれた行列”を得る．

$$\begin{aligned} C(\sigma_1', \sigma_2', \dots|\sigma_1, \sigma_2, \dots) &\to C(\sigma', \xi'|\sigma, \xi), \\ P(\sigma_1', \sigma_2', \dots|\sigma_1, \sigma_2, \dots) &\to P(\sigma', \xi'|\sigma, \xi). \end{aligned} \tag{6.61}$$

ここで σ_1 と σ_1' の下付き添字を落とした.[105]

式 (6.54) と式 (6.55) の繰り返し構造と式 (6.59) から式 (6.61) の繰込みの枠組みとを組み合わせると, 系の連続的な拡大の方法によって任意の系のサイズに対する繰込まれた形式の CTM や HRTM を得る．

有限サイズのクラスターに対する $C(\sigma', \xi'|\sigma, \xi)$ と $P(\sigma', \xi'|\sigma, \xi)$ を想定する．拡大プロセスの説明のために, これらの行列を $\overline{C}(s', \zeta'|s, \zeta)$ と $\overline{P}(s', \zeta'|s, \zeta)$ と書き直す．

(1) 式 (6.54) と式 (6.55) の結合プロセスに $\overline{C}(s', \zeta'|s, \zeta)$ と $\overline{P}(s', \zeta'|s, \zeta)$ を代入する．図 6.23 は $W, \overline{C}, \overline{P}$ 間での結合プロセスを示している．この図で長方形はブロックスピン変数に対応する．スピン変数の和を取ったものを黒マークによって示した．結果, 拡大した CTM $C(\sigma', s', \zeta'|\sigma, s, \zeta)$ と拡大した HRTM $P(\sigma', s', \zeta'|\sigma, s, \zeta)$ を得る．

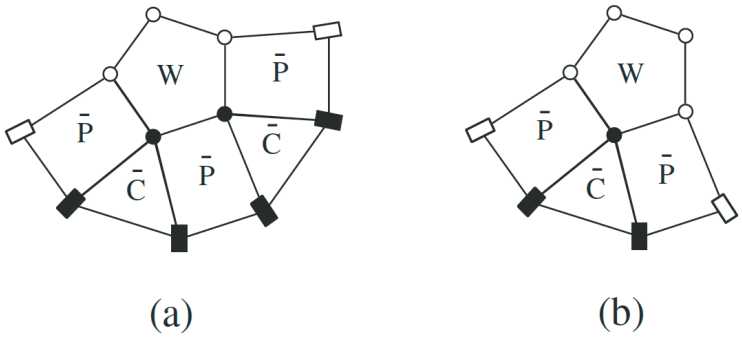


図 6.23: 繰込まれた表現での (a)CTM と (b)HRTM の結合プロセス

(2) 拡大された CTM $C(\sigma', s', \zeta'|\sigma, s, \zeta)$ から式 (6.57) によって密度行列 $\rho(\sigma', s', \zeta'|\sigma, s, \zeta)$ を得る．中心のスピン変数の和をとることで, 式 (6.59) のように $\rho'(s', \zeta'|s, \zeta)$ を得る．さらに式 (6.60) からブロックスピン変換行列 $A(s, \zeta|\xi)$ を得るために ρ' を対角化する．

(3) $A(s, \zeta|\xi)$ を $C(\sigma', s', \zeta'|\sigma, s, \zeta)$ と $P(\sigma', s', \zeta'|\sigma, s, \zeta)$ の両方に適用して, 最初の形をした拡大した CTM $C(\sigma', \xi'|\sigma, \xi)$ を得, また HRTM も同じく $P(\sigma', \xi'|\sigma, \xi)$ を得る．

(4) 最初のステップへ戻る.

系の最も長い測地線の長さでは, 系のサイズは反復毎に 2 づつ増える.[3] 上の拡大プロセスをスタートするために, 初期条件を以下のように置く.

$$\overline{C}(\sigma'|\sigma) = \overline{P}(\sigma'|\sigma) = \delta(\sigma'|1)\delta(\sigma|1). \tag{6.62}$$

これは強磁性的境界条件を表す. この式で $\delta(a|b) = \delta_{a,b}$ はクロネッカーのデルタである.

反復の間に, 系の中心での 1 点関数を得ることができる. 例えば, 自発磁化は以下のように計算できる.

$$\langle\sigma\rangle = \frac{\mathrm{Tr}\sigma\rho}{\mathrm{Tr}\rho} = \frac{\sum_{\sigma,s,\zeta}\sigma\rho(\sigma,s,\zeta|\sigma,s,\zeta)}{\sum_{\sigma,s,\zeta}\rho(\sigma,s,\zeta|\sigma,s,\zeta)}. \tag{6.63}$$

同じ方法で, 最隣接スピン相関関数 $\langle\sigma s\rangle$ も得る. 注意するべきことは, 双曲平面では境界近傍の領域が無視でない重みをもつことから, このように計算した中心での 1 点関数が熱力学的極限においてさえも全系の平均化された性質をいつも示さないことである.

この節で開発した変形 CTMRG は, 双曲平面の測地線からなる規則格子に適用できる. 測地線を含まない格子に対しては, 非対称な密度行列を扱うか, または双対性変換や星-三角関係式を使って測地線を描くことをする. 変形 CTMRG のバーテックス模型への一般化はそのまま可能である. 双曲平面上のさまざまな規則格子に対する 8 バーテックス模型の秩序状態をクラス分けすることは興味がある.

[3]厳密に言えば, このような系の拡張は, 境界の全スピンが中心からの距離が等しくなるクラスターの形状を保証しない.

第7章　まとめと展望

臨界現象の性質を解明する一環として, 2次元古典スピン系の臨界現象に関する2つの課題に取り組んだ. 一つ目の課題は, 双曲平面上のイジング模型の臨界現象の精査である. 負曲率が臨界現象へ及ぼす影響を調べることが目的である. 五角形を張り合わせた格子上での強磁性イジング模型を解析した. 最隣接スピン相関関数および自発磁化から臨界指数 α, β を求め, 「ガウス普遍性クラス ($\alpha = 0, \beta = 1/2$) に属する」ことを確かめた. 「双曲平面上の統計模型で起きる臨界現象には ハウスドルフ次元 が影響する」と推測される. 臨界温度が $T_C = 2.799$ は, 配位数4のベーテ格子での値 $T_C^{Bethe} = 2.885$ に近い. 負曲率面の格子構造がベーテ格子に近いことが原因と推測される.

双曲平面上の格子統計模型の展望を述べる. 一つ目は, ハウスドルフ次元が臨界現象に影響を及ぼすという推測に対して「繰込み群」によって理論的に説明を与えることがあげられる.[1] 熱力学ポテンシャルのスケーリング関数を得ることを期待する. 手始めに, 図7.1に示した $(3, \infty)$ 格子に対する実空間繰込み群を検討中である.

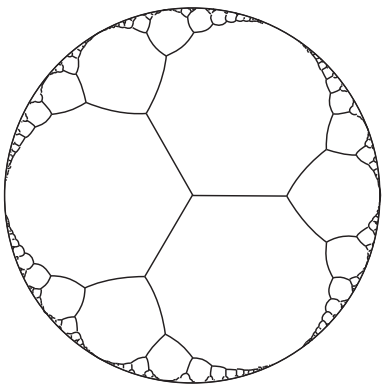


図 7.1: $(3, \infty)$ 格子. 配位数3のベーテ格子に等しい.

二つ目の展望には, 双曲平面上の統計模型に対する精度よい解析手法を手にしているので, イジング模型以外の統計模型の熱力学的な振る舞いを調べていくことをあげておく. ごく最近我々のグループは, 双曲平面上の有限角形格子から無限角形格子 (ベーテ格子) へのイジング模型の熱力学的振る舞いの移り変わりの解析 [131] や, 双曲平面上の q 状態クロック模型 [127][128][129][59] の解析 [130] を行っている. 現在, 解析を進めている模型は, 双曲

[1] 格子構造を保つ実空間繰込み群を双曲平面上で実行すると, 変換後のハミルトニアンには (無視できない) 有効な長距離相互作用が現れるだろう.

平面上の q 状態ポッツ模型である. $2 \leq q \leq 4$ の場合には平坦面 (曲率 0 の面) では 2 次相転移を示すが, ベーテ近似では $q \geq 3$ において一次相転移を示す. 双曲平面上のポッツ模型では, $q = 3$ で既に一次相転移であることを示唆する結果を得ている. 表 7.1 にまとめる. 一次相転移でのギャップを q について定量的に評価することも興味がある. 他の統計模型

表 7.1: 双曲平面上の q 状態ポッツ模型の相転移の次数

	$q=2$	$q=3$	$q=4$	$q=5$
$(4,\infty)$ 格子 (ベーテ格子)	二次	一次	一次	一次
$(4,5)$ 格子	二次	一次	-	-
$(4,4)$ 格子 (正方格子)	二次	二次	二次	一次

として反強磁性体模型を解析してみるのも興味深い. 例えば, (7, 3) 格子上の反強磁性イジング模型はフラストレーションが起こると期待される. (図 7.2)

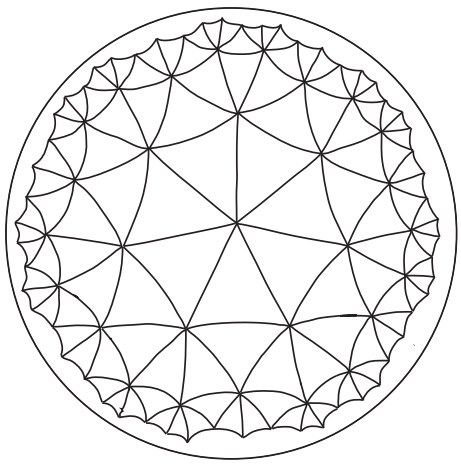


図 7.2: 双曲平面上の (7, 3) 格子の一部の領域.

臨界現象にハウスドルフ次元 d_H が及ぼす影響を調べるためのもう一つの可能性として, $2 < d_H < \infty$ をもつ面上での統計模型の振る舞いを解析することは興味深い. この系の格子は, 双曲平面でみた均一な多角形タイリングではなく, 「不均一な多角形タイリング」で構成される.

本研究のもう一つの課題は, 16 バーテックス模型のパラメータ空間の未解析領域に対する解析である. 2 次元古典スピン系の未解析模型の普遍性クラスの特定を進めることが目的である. 一例として, 未解析な対称 10 バーテックス模型を選び, 解析を行った. 新たな臨界点が見つかり, イジング普遍性クラスに属することがわかった.

16 バーテックス模型の展望には未解析な模型の普遍性クラスの特定を進めることをあげておく. 手始めに, 既知の模型を含むパラメータ部分空間を解析する. 例えば, 高崎らの

模型 [62] のパラメータ空間をもとにして, イジング普遍性クラスと異なる臨界現象を見いだすために最低限必要なパラメータの拡張を考えるのは興味深い. イジング普遍性クラスと異なる臨界現象が見つかっている 6, 8 バーテックス模型と高崎らの模型の明確な違いの一つは「秩序相の数」である. この観点から現在は図 7.3 に示す模型を解析中である. この模型では秩序相に「配向相」と「真っ黒相」が現れる. 図 7.4 に (大雑把な) 相図を示す. 図中で破線は一次相転移, 実線と点線は二次相転移を示す. 実線ではイジング普遍性クラスに属することを示唆する結果を得ている. 点線では, イジング普遍性クラスと異なる臨界現象が現れ, 臨界指数の値については, 8 バーテックス模型のように重率の比によって連続的に変化することを示唆する結果を得ている. 図 7.3 の模型は高分子模型への応用の可

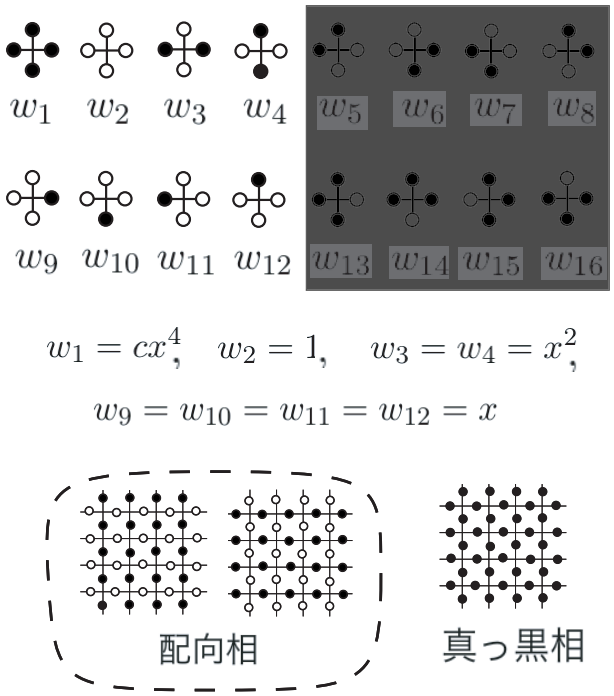


図 7.3: 解析中のバーテックス模型. 影を付けたバーテックスは使用しない. 配向相から無秩序相に移る相転移で臨界現象が起きる.

能性ももつ. [63][64]

本研究の解析は主に角転送行列繰込み群を用いて数値的に行った. また, 数値解析手法の開発にも取り組んだ. 手法開発の一つは, 角転送行列繰込み群の枠組みから得られるスナップショットの生成アルゴリズムである. ある瞬間に見いだされる系の中心付近のスピン配置を可視化した. もう一つの手法開発は, 角転送行列繰込み群を双曲平面上の統計模型を扱えるように変形した. 十分大きな差渡しの有限系で中心での 1 点関数を計算でき, 双曲平面上の統計模型の臨界現象を精度よく解析することを可能にした. これ以外にも, 積波動関数繰込み群の行列積変分の観点からの精査 [120] や, 一次元量子スピン系の実時間

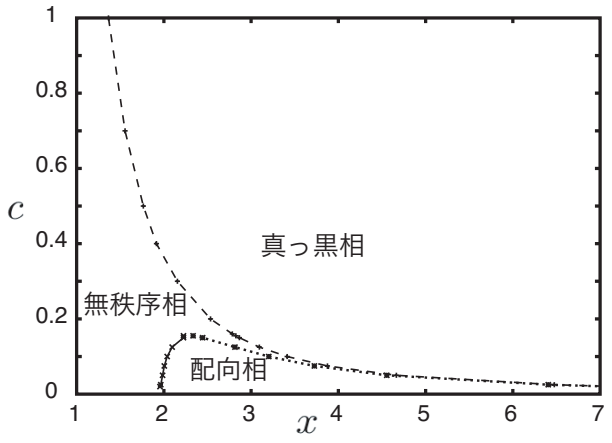


図 7.4: 図 7.3 で示したバーテックス模型の相図. 破線では一次相転移を示す. 実線ではイジング普遍性クラスに属する臨界現象が見つかる. 点線では臨界指数が連続的に変化する臨界指数が見つかっている.

発展アルゴリズムの最適化 [132] も提案した.

手法開発の展望を述べよう. 角転送行列繰込み群は, 系に 90 度の回転対称性がない場合には解析が困難である. この問題はバーテックス模型の解析を進めていく際に現れる. 対処法はいくつか提案されているが決定版はない.[125][126] この問題を解消するには行列積変分の立場から議論する必要があると考えられる. [119][123] 行列積変分を元にした手法開発は, DMRG-like な手法の 3 次元古典スピン系への拡張, すなわち高次元化も期待できる.

付 録A　平均場相互作用をもつ1次元イジング模型

1次元イジング模型に平均場相互作用を加えた模型を考える.

$$H = -J\sum_i \sigma_i\sigma_{i+1} - h\sum_i \sigma_i - \frac{\tilde{J}}{2N}\sum_{i,j}\sigma_i\sigma_j, \tag{A.1}$$

ここで, 周期的境界条件 $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ を課す.

ハミルトニアンを, 簡便のために

$$H = -J\sum_i \sigma_i\sigma_{i+1} - h\sum_i \sigma_i - \frac{\tilde{J}}{2}\left\{\frac{1}{N}\left(\sum_i \sigma_i\right)^2 - 1\right\}, \tag{A.2}$$

と書き直す. 分配関数 Z は

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left[\beta J\sum_i \sigma_i\sigma_{i+1} + \beta h\sum_i \sigma_i + \beta\frac{\tilde{J}}{2}\left\{\frac{1}{N}\left(\sum_i \sigma_i\right)^2 - 1\right\}\right], \tag{A.3}$$

である. この式の右辺第3項目に等式

$$\exp(a^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left(-\frac{1}{2}y^2 + \sqrt{2a}y\right), \tag{A.4}$$

を用いると,

$$\begin{aligned} Z &= \exp(-\beta\tilde{J}/2)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2/2} \\ &\times \sum_{\{\sigma\}} \exp\left[\beta J\sum_i \sigma_i\sigma_{i+1} + \beta h\sum_i \sigma_i + \sqrt{\beta\tilde{J}/N}\sum_i \sigma_i y\right], \end{aligned} \tag{A.5}$$

になる.

ここで, 行列 T を定義する.:

$$T(\sigma|\sigma') = \exp\left[\beta J\sigma\sigma' + \frac{1}{2}\left(\beta h + \sqrt{\beta\tilde{J}/N}y\right)(\sigma + \sigma')\right]. \tag{A.6}$$

行列 T を用いて表式 (A.5) は,

$$Z = \exp\left(-\beta\tilde{J}/2\right)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2/2}\mathrm{Tr}T^N, \tag{A.7}$$

と整理できる. もし N が十分大きければ, $\mathrm{Tr}T^N$ は行列 T の最大固有値 λ の N 乗になる. ここで, λ は,

$$\lambda = e^{\beta J}\left[\cosh\left(\beta h + \sqrt{\beta\tilde{J}/N}y\right) + \sqrt{\sinh^2\left(\beta h + \sqrt{\beta\tilde{J}/N}y\right) + e^{-4\beta J}}\right]. \tag{A.8}$$

分配関数は,

$$\begin{aligned} Z &= \exp\left(-\beta\tilde{J}/2\right)\exp(N\beta J)\sqrt{\frac{N}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx \\ &\times \left[e^{-x^2/2}\left\{\cosh\left(\beta h + \sqrt{\beta\tilde{J}}x\right) + \sqrt{\sinh^2\left(\beta h + \sqrt{\beta\tilde{J}}x\right) + e^{-4\beta J}}\right\}\right]^N \end{aligned} \tag{A.9}$$

である. ここで $x = y/\sqrt{N}$ である. いま N は十分大きいことから, 上式の積分は最速降下法により実行できる.

$$\begin{aligned} \log Z &= N\log\left[\cosh\left(\beta h + \sqrt{\beta\tilde{J}}x\right) + \sqrt{\sinh^2\left(\beta h + \sqrt{\beta\tilde{J}}x\right) + e^{-4\beta J}}\right] \\ &+ N\beta J - \frac{N}{2}x^2 + O(\log N), \end{aligned} \tag{A.10}$$

ここで, x は以下の表式を解いて決定する.

$$\frac{x}{\sqrt{\beta\tilde{J}}} = \frac{\sinh\left(\beta h + \sqrt{\beta\tilde{J}}x\right)}{\sqrt{\cosh^2\left(\beta h + \sqrt{\beta\tilde{J}}x\right) - (1 - e^{-4\beta J})}}, \tag{A.11}$$

サイトあたりの磁化 m を求めよう. 分配関数を磁場で微分して,

$$m = -\frac{1}{N}\frac{\partial \log Z}{\partial h} = \frac{x}{\sqrt{\beta\tilde{J}}}, \tag{A.12}$$

である. 従って,

$$m = \frac{\sinh\left(\beta h + \beta\tilde{J}m\right)}{\sqrt{\cosh^2\left(\beta h + \beta\tilde{J}m\right) - (1 - e^{-4\beta J})}}. \tag{A.13}$$

臨界点 T_C および, 臨界点近傍の磁化 m の振る舞いを調べる. $T \to T_C$ かつ $h = 0$ の時, $m \to 0$ となるので, 表式 (A.13) を m 関して展開して,

$$m^2 \left[(\beta\tilde{J})^2 - e^{-4\beta J} + m^2 \left\{ -(\beta\tilde{J})^2 + 2/3!(\beta\tilde{J})^4 \right\} + O(m^4) \right] = 0. \tag{A.14}$$

$m = 0$ から, 臨界点 $k_B T_C/J = 1/\beta_C$ は

$$\beta_c \tilde{J} = \exp(-2\beta_c J), \tag{A.15}$$

である. また, 臨界点近傍の磁化の振る舞いを書き直して,

$$m^2 = 2(1 - 2J\beta_c)/(1 - \frac{2}{3!}e^{-4J\beta_c})(T_c - T)/T_c, \tag{A.16}$$

となる. すなわち, $m \sim (T_C - T)^{1/2}$ を得, 臨界指数 $\beta = 1/2$ を得る.

参考文献

[1] H. E. Stanley: *"Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena"* (Claredon Press Oxford, 1971). ; 相転移と臨界現象 (松野孝一郎訳) (東京図書, 1974)

[2] W. ゲプハルト, U. クライ : 相転移と臨界現象 (好村滋洋 改訂協力および訳)(吉岡書店, 1992)

[3] 西森秀稔 : 相転移 · 臨界現象の統計物理学 (培風館, 2005)

[4] 宮下精二 : 熱 · 統計力学 (培風館, 1993)

[5] 鈴木増雄 : 統計力学 (岩波書店, 1994)

[6] G. S. Rushbrooke : J. Chem. Phys. 39 (1963) 842. ; R. B. Griffiths : J. Chem .Phys. 43 (1965) 1958.

[7] B. Widom : J. Chem. Phys. 43 (1965) 3898.

[8] L. P. Kadanoff : Physics. 2 (1966) 263.

[9] L. P. Kadanoff, et. al. : Rev. Mod. Phys. 39 (1967) 395.

[10] K. Wilson : Phys. Rev. B 4 (1971) 3174, 3184.

[11] K. Wilson and J . Kogut : Phys. Rep. C 12 (1974) 75.

[12] T. Niemeijer and J. M. J. Leeuwen : Phys. Rev. Lett. 31 (1973) 1411.

[13] T. W. Burkhardt and J. M. J. van Leeuwen : *"Real-Space Renormalization"* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1982)

[14] R. B. Griffiths : Phys. Rev. Lett. 24 (1970) 1479.

[15] P. Weiss : J. Phys. Radium 6 (1907)661.

[16] L. D. Landau : Phys. Zurn. Sowjetunion 11 (1937) 26, 545.

[17] W. Opechowski : Physica 4 (1937)181.

[18] C. Domb : Proc. Roy. Soc. A 196 (1949) 36.; 199 (1949) 199.

[19] E. Ising : Z. Phys. 31 (1925) 253.

[20] R. Peirels: Proc. Cambridge. Phil. Soc. 32 (1936) 477.

[21] L. Onsager : Phys.Rev. 65 (1944) 117.

[22] C. N. Yang : Phys. Rev. 85 (1952) 808.

[23] R. M. F. Houtappel : Physica. 16 (1950) 425.

[24] D. C. Mattis : *"The Theory of Magnetism II"* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1985)

[25] 小口武彦 : 磁性体の統計理論 (裳華房, 1970)

[26] 小林謙二 : 熱統計物理学 (朝倉書店, 1983)

[27] H. W. J. Blöte, E. Luijten and J. R. Heringa : J. Phys. A 28 (1995) 6289.

[28] J. Als-Nielsen and O. W. Dietrich : Phys. Rev. 153 (1967) 711, 717.

[29] F. Y. Wu : Rev. Mod. Phys. 54 (1982) 235. in reference.

[30] R. J. Creswick and S. Y. Kim : J. Phys. A : Mah. Gem. 30 (1997) 8785.

[31] T. H. Berlin and M. Kac : Phys. Rev. 86 (1952) 821.

[32] H. A. Kramers and G. H. Wannier : Phys. Rev. 60 (1941)263, 252.

[33] R. Kikuchi : Phys. Rev. 81 (1951) 988. ; T. Morita : Prog. Theo. Phys. Suppl. 115 (1994) 27.

[34] H. Kawamura : J. Phys. Soc. Jpn. 61 (1992) 1299.

[35] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless : J. Phys. C : Solid. Stat. Phys. 6 (1973) 1181.

[36] N. D. Mermin and H. Wagner : Phys. Rev. Lett. 17 (1966) 1133.

[37] R. J. Baxter : *"Exactly Solved Models in Statistical Mechanics"* (Academic Press, London, 1980)

[38] A. A. Belavin : A. M. Polyakov and A. B. Zamolodchikov : Nucl. Phys. B241 (1984) 333.

[39] D. Friedan : Z. Qiu and S. Shenker : Phys. Rev. Lett. 52 (1984) 1575.

[40] V. S. Dotsenko : Nucl. Phys. B 235 (1984) 54.

[41] C. Vanderzande : Phys. Rev. B 38 (1988) 2865.

[42] S. Balaska and K. Demmouche : Mod. Phys. Lett. A 19 (2004) 2135.

[43] A. B. Zamolodchikov and V. A. Fateev : Sov. Phys. JETP 62 (1985) 215.

[44] R. J. Crewick and S. Y. Kim : J. Phys. A: Math. Gen. 30 (1997) 8785.

[45] P. Christe, M. Henkel : *"Introduction to Conformal Invariance and Its Applications to Critical Phenomena"* (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg,1993)

[46] M. Henkel : *"Conformal Invariance and Critical Phenomena"* (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg,1999)

[47] 川上則雄, 梁成吉 : 共形場理論と 1 次元量子系 (岩波書店, 1997)

[48] 江口徹, 梁成吉 : 日本物理学会誌, 44 (1989) 894.

[49] P. Dita and V. Georgescu : *"Conformal Invariance and String Theory"* (Academic Press, Inc. 1989)

[50] K. Ueda, R. Krcmar, A. Gendiar, T. Nishino : J. Phys. Soc. Jpn. 76 (2007) 084004.

[51] A. Gendiar and T. Nishino: Phys. Rev. E 65 (2002) 046702.

[52] H. Shima and Y. Sakaniwa : J. Phys. A: Math. Gen. 39 (2006) 4921.

[53] I. Hasegawa, Y. Sakaniwa and H. Shima : cond-mat/0612509.

[54] 双曲平面の規則格子のいくつかの例が以下の URL にリストされている.
http://www2u.biglobe.ne.jp/∼hsaka/mandara/index.html
http://www.hadron.org/∼hatch/HyperbolicTesselations/

[55] H. A. Bethe : Proc. R. Soc. London, Ser. A 150 (1935) 552.

[56] W. P. Thurston and J. R. Weeks : Sci. Am. 251 (1984) 108.

[57] R. Rietman, B. Nienhuis and J. Oitmaa : J. Phys. A: Math. Gen. 25 (1992) 6577.

[58] B. Doyon and P. Fonseca : J. Phys. Mech. (2004) P07002.

[59] S. K. Baek, P. Minnhagen and B. J. Kim, arXiv:0706.0044v1.

[60] K. Ueda, R. Otani, Y. Nishio, A. Gendiar, T. Nishino : J. Phys. Soc. Jpn. 74 (2005) 1871.

[61] E. M. Lieb and F.Y. Wu : in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, ed. C. Domb and M. S. Green (Academic Press, London, 1972) Vol. 1, p. 331.

[62] H. Takasaki, T. Nishino and Y. Hieida : J. Phys. Soc. Jpn. 70 (2001) 1429.

[63] H. Saleur : J. Phys. A 19 (1986)2409.

[64] G. I. Menon and R. Pandit : Phys. Rev. E 59 (1999) 787.

[65] L. Pauling : J. Am. Chem. Soc. 57 (1935) 2680.

[66] E. A. DiMarzio and F. H. Stillinger, Jr : J. Chem. Phys. 40 (1964) 1577.

[67] J. F. Nagle : J. Math. Phys. 7 (1966) 1484, 1492.

[68] E. H. Lieb : Phys. Rev. Lett. 18 (1967) 692; Phys. Rev. 162 (1967) 162.

[69] J. G. Slater : J. Chem. Phys. 9 (1941) 16.

[70] E. H. Lieb : Phys. Rev. Lett. 19(1967) 108.

[71] F. Rys : Helv. Phys. Acta. 36 (1963) 537.

[72] E. L. Lieb : Phys. Rev. Lett. 18(1967) 1046.

[73] R. J. Baxter : Rhys. Rev. B 1 (1970) 2199.

[74] C. Fan and F. Y. Wu : Phys. Rev. B 2 (1970) 723.

[75] B. Sutheland : J. Math. Phys. 11 (1970) 3183.

[76] R. J. Baxter : Phys. Rev. Lett. 26 (1971) 832. ; Anna. Phys. 70 (1972) 193.

[77] M. Suzuki : Prog. Theor. Phys. 51 (1974) 1992.

[78] F. Y. Wu : Phys. Rev. 168 (1968) 539.

[79] M. Gulácsi, H. V. Beijeren and A. C. Levi : Phys. Rev. E 47 (1993) 2473.

[80] M. Gulácsi, A. C. Levi and E. Tosatti : Phys. Rev. E 49 (1994) 3843.

[81] F. Y. Wu : Phys. Rev. Lett. 22 (1969) 1174. : Solid State Comm. 10 (1972) 115.

[82] N. Akutsu, Y. Akutsu and T. Yamamoto : Phys. Rev. E 59 (1999) 787.

[83] Y. Honda, et. al.: Phys. Rev. E 56 (1997) 3920.

[84] H. G. Evertz, G. Lana and M. Marcu : Phys. Rev. Lett. 70 (1993) 875.

[85] G. T. Barkema, M. E. J. Newman : Phys. Rev. E.57 (1998) 1155.

[86] A. Milchev, D. P. Landau : Phys. Rev. E 52 (1995) 6431.

[87] K. Binder and D. W. Heermann : *"Monte Carlo Simulation in Statistical Physics An Introduction"* Forth Edition (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg,2002)

[88] N. Metropolis, et. al. : J. Chem. Phys. 21 (1953) 1087, 1091.

[89] R. H. Swendsen : Phys. Rev. Lett. 42 (1979) 859.

[90] K. Binder : Z. Phys. B 43 (1981)119.

[91] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, Jr. , M. P. Vecchi : Science. 220 (1983) 671.

[92] R. H. Swendsen and J. -S. Wang : Phys. Rev. Lett. 12(1987) 86.

[93] U. Wolff : Phys. Rev. Lett. 62 (1989) 361. ; Nucl. Phys. B 322 (1989) 759.

[94] B. A. Berg and T. Neuhaus : Phys. Lett. B 267 (1991) 249. ; Phys. Rev. Lett. 68 (1992) 9.

[95] K. Hukushima and K. Nemoto : J. Phys. Soc. Jpn. 65 (1996) 1604.

[96] S. R. White : Phys. Rev. Lett. 69 (1992) 2863 ; Phys. Rev. B 48 (1993) 10345.

[97] *Density - Matrix Renormalization - A New Numerical Method in Physics*, ed. I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke and K. Hallberg (Springer, Berlin, 1999), and references therein.

[98] U. Schollwöck : Rev. Mod. Phys. 77 (2005) 259, and references therein.

[99] T. Nishino : J. Phys. Soc. Jpn. 64 (1995) 3598.

[100] R. J. Baxter : J. Math. Phys. 9 (1968) 650.

[101] R. J. Baxter : J. Stat. Phys. 15 (1976)485.

[102] R. J. Baxter : J. Stat. Phys. 17 (1977)1.

[103] R. J. Baxter : J. Stat. Phys. 19 (1978)461.

[104] R. J. Baxter : *"Exactly Solved Models in Statistical Mechanics"* (Academic Press, London, 1980) p. 363.

[105] T. Nishino and K. Okunishi : J. Phys. Soc. Jpn. 65 (1996) 891 ; J. Phys. Soc. Jpn. 66(1997) 3040.

[106] K. Ueda, R. Otani, Y. Nishio, A. Gendiar and T. Nishino : J. Phys. Soc. Jpn. 74 (2005) supple. p.111.

[107] A. Gendiar and A. Ŝurda : J. Phys. A : Math. Gen. 33 (2000) 8365. ; R. Derian, A. Gendiar, T. Nishino : J. Phys. Soc. Jpn. 75 (2006) 114001.

[108] D. P. Foster and C. Pinettes : Phys. Rev. E 67 (2003) 045105.

[109] D. P. Foster and C. Pinettes : J. Phys. A 36 (2003) 10279.

[110] D. P. Foster and C. Pinettes : arXiv:0710.5298.

[111] N. Akutsu and Y. Akutsu : Phys. Rev. B 57 (1998) R4233.

[112] N. Akutsu , Y. Akutsu and T. Yamamoto : Phys. Rev. B 64 (2001) 085415.

[113] T. Nishino, K. Okunishi and M. Kikuchi:Physics Letters A 213 (1996) 69.

[114] L. Tagliacozzo, Thiago. R. de Oliveira , S. Iblisdir and J. I. Latorre : arXiv: 0712.1976.

[115] T.Nishino and K.Okunishi : J. Phys. Soc. Jpn. 64 (1995) 4084.

[116] M. Fannes, B. Nachtergale and R. F. Werner : Europhys. Lett. 10 (1989) 633 ; Commun. Math. Phys. 144 (1992) 443; Commun. Math. Phys. 174 (1995) 477.

[117] S.Östlund and S. Rommer: Phys. Rev. Lett 75 (1995) 3537. ; S. Rommer and S. Östlund: Phys. Rev. B 55 (1997) 2164.

[118] H. Takasaki, T. Hikihara, and T. Nishino: J. Phys. Soc. Jpn. 68 (1999) 1537.

[119] T. Nishino , T. Hikihara, K. Okunishi and Y. Hieida : Int. J. Mod. Phys. B13 (1999) 1.

[120] K. Ueda, T.Nishino, K. Okunishi, Y. Hieida, R. Deriana and A. Gendiar : J. Phys. Soc. Jpn. 75 (2006) 014003 1-8.

[121] S. R. White and A. E. Feiguin : Phys. Rev. Lett. 93 (2004) 076401.

[122] A. J. Daley, C. Kollath, V. Schollwöck, and G. Vidal : J. Stat. Mech.: Theory Exp. (2004) P04005.

[123] F. Verstraete, J. J. Garcia-Ripoll and J. I. Cirac : Phys. Rev. Lett. 93 (2004) 207204. ; F. Verstraete, D. Porras, and J.I. Cirac: Phys. Rev. Lett. 93 (2004) 227205. ; V. Murg, F. Verstraete, and J.I. Cirac: cond-mat/0501493.

[124] T. Nishino, K. Okunishi, Y. Hieida, N. Maeshima and Y. Akutsu : Nucl. Phys. B 575 (2000) 504-512.

[125] N. Shibata : J. Phys. A: Math. Gen. 36 (2003) R381.

[126] T. Nishino and N. Shibata : J. Phys. Soc. Jpn. 68 (1999) 3501.

[127] J. V. José, et. al. : Phys. Rev. B 16 (1977) 1217. ; 17 (1978) 1477.

[128] J. Tobochnik : Phys. Rev. B 26 (1982) 6201. ; 27 6972

[129] M. S. S. Challa and D. P. Landau : Phys. Rev. B 33 (1986) 437.

[130] A. Gendiar, R. Krcmar, K. Ueda and T. Nishino : arXiv:0801.0836.

[131] R. Krcmar, A. Gendiar, K. Ueda and T. Nishino : arXiv:0712.0461.

[132] K. Ueda, C. Jin, N. Shibata, Y. Hieida and T. Nishino : cond-mat/0612480.

謝辞

本研究に際してご指導くださり, 本論文の原稿をご閲読くださった西野友年先生に深く感謝いたします. また, 有益な助言を与えてくださった播磨尚朝先生, 樋口保成先生, 鏑木誠先生, 林青司先生にお礼申し上げます. 研究中 様々な形でご援助くださった西尾幸暢氏, Andrej Gendiar 氏, 瀧本哲也氏, 鈴木通人氏, 金承龍氏はじめ物性理論研究室の方々に感謝いたします.

最後に, 学生生活を支えていただいた家族ならび友人には心から深く感謝いたします.

出版論文

1. Kouji Ueda, Roman Krcmar, Andrej Gendiar and Tomotoshi Nishino : "Corner Transfer Matrix Renormalization Group Method Applied to the Ising Model on the Hyperbolic Plane" Journal of the Physical Society of Japan, 76, 084004 1-4 (2007).

2. Kouji Ueda, Ryota Otani, Yukinobu Nishio, Andrej Gendiar and Tomotoshi Nishino : "Critical Point of a Symmetric Vertex Model. " Journal of the Physical Society of Japan, 74, 1871-1872 (2005).

3. K. Ueda, R. Otani, Y. Nishio, A. Gendiar and T. Nishino : "Snapshot Observation for 2D Classical Lattice Models by CTMRG" Journal of the Physical Society of Japan, 74 supplement, 111-114 (2005).

4. K. Ueda, T.Nishino, K. Okunishi, Y. Hieida, R. Deriana and A. Gendiar : "Product Wave Function Renormalization Group: construction from the matrix product point of view. " Journal of the Physical Society of Japan. 75 014003 1-8(2006).