

双曲平面上的イジング模型が示す臨界現象

西野友年 (Tomotoshi NISHINO)

Dept. Physics, Graduate School of Sciences, Kobe University

2次元面上の平面グラフに乗った強磁性イジング模型が起こす相転移について考えよう。

「系が一様であれば、その相転移は正方格子イジング模型と同じ『イジング普遍性』を示す」

—と書いてあれば、誰もが(?)首を縦に振ってしまう。この記述は「引っ掛け問題」の1つで、例えばベーテ格子は平面グラフの仲間だけれども、その上に乗ったイジング模型は平均場的な相転移を示すことが知られている。正方格子とベーテ格子の間の、どんな差異が普遍性の差を生んでいるのだろうか? この原因について探りを入れる目的で、次のような五角形を組み合わせた格子に注目してみよう。

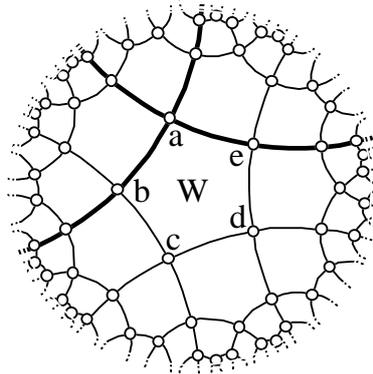


図 1: 双曲平面上的 (5, 4) 格子。太線は、格子点 a を通る 2 つの測地線。

この格子は、正 p 角形を隙間なく埋め尽くすタイリング (tessellation) [13] の一例になっていて、特に「負の曲率を持つ双曲平面上」での埋め尽くしなので hyperbolic tessellation と呼ばれる。この手のタイリングは、整数 p と配位数 q の組 (p, q) によって分類するのが通例だ。配位数は、それぞれの格子点を囲む最近接格子点の数であり、 q 枚の正 p 角形が格子点を共有する。一例として (5, 4) 格子を図 1 に示した。まず、 (p, q) に格子の特徴をまとめておこう。

- 配位数が q のベーテ格子も p が無限大である特殊な例として (p, q) 格子に含まれている。
- いわゆる「裏格子変換」を用いると、 (p, q) 格子は (q, p) 格子にマップされるので、 (q, q) 格子は自分自身にマップされる自己双対 (self-dual) な格子である。
- 配位数 q が偶数である場合、格子は 測地線 によって構成される。(可解 Vertex Model を、このような格子上で考えてみると面白いだろう。)
- (p, q) の位相次元は 2 であるが、ハウスドルフ次元 (フラクタル次元) は無限大である。
- いわゆるペンローズ・タイリングの助けを借りるまでもなく、5 回対象など平面上では実現し辛い対称性を実現できる。並進対称性は妙なことになっていて、このような格子上でブロッホの定理 を考えることは、これまた一興である。

こういう「未広がり」な格子の上では、どのような相転移が期待されるだろうか？ 一例として、イジング模型をとり上げよう。系のハミルトニアンは $\langle i, j \rangle$ で示した最近接スピン間のイジング相互作用の和で与えられる。

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (1)$$

これを指数の肩に乗せた全系のボルツマン重率 $\exp(-\beta H)$ を表すには、正 5 角形ごとの局所的なボルツマン重率 (IRF 重率) を定義しておくとかかと都合が良い。

$$W(\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c, \sigma_d, \sigma_e) = \exp \left\{ -\frac{\beta J}{2} (\sigma_a \sigma_b + \sigma_b \sigma_c + \sigma_c \sigma_d + \sigma_d \sigma_e + \sigma_e \sigma_a) \right\} \quad (2)$$

ここで、 $\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c, \sigma_d, \sigma_e$ の相対的な位置関係は図 1 の通りである。分配関数は、全系のボルツマン重率の配列和

$$Z = \sum_{\text{全スピン配列}} \exp(-\beta H) = \sum_{\text{全スピン配列}} \prod_{\text{全ての face}} W, \quad (3)$$

で与えられる。

この系の臨界現象を探ろうという意図の下、カダノフに習って実空間での繰り込み群変換を (5, 4) 格子上で試みると、変換の結果として得られる「ブロックスピン」の間の配位数は、どんどん増えて行く。この性質は (∞, q) 格子であるベータ格子と共通していて、実空間繰り込み群変換の前後で格子の形状が異なってしまうのだ。結果として、スケーリング関数の具体的な関数形を求めることは容易ではない。

実空間繰り込み群変換を行うごとに配位数が増えて行き、ブロックスピン間の相互作用が (大きなスケールでは) 平均化されて行くのであるから、相転移が「平均場的」であろうことは容易に想像できる。但し、この予想を一般的に確かめるのは容易ではない。数値計算で相転移を観察するのも一法であり、モンテカルロ・シミュレーションが既に行われ、平均場的な兆候が検出されている。[14, 15] もっとも、取り扱う系のサイズに対して格子点の数が指数的に増加して行くので、精密なスケーリング解析を行うのは困難である。そこで、バクスターの角転送行列の方法 [1, 2, 3] と、密度行列繰り込み群 (DMRG) [4, 5, 6, 7, 8] を組み合わせた角転送行列繰り込み群 (CTMRG) [9, 10, 11, 12] を導入する。

1 双曲面上での角転送行列繰り込み群

この章はテクニカルなので読み飛ばしても良い。

— 図 1 に太線で描いた 2 本の直交する測地線は系を等価な 4 つの部分に切り分け、それぞれ 1/4 の部分を Corner と呼ぶ。[3] ある Corner の構造を、より細かく眺めてみよう。図 2 に示すように、まず直交する測地線上に 1 列に並んだスピン (row-spin) を、 $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots\}$ および $\{\sigma'_1, \sigma'_2, \sigma'_3, \dots\}$ とラベル付けしておこう。但し σ_1 は σ'_1 と同じスピンである。この Corner のボルツマン重率を表す角転送行列 (CTM) を導入しよう。

$$C(\sigma'_1, \sigma'_2, \sigma'_3, \dots | \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots) = \sum_{\text{内側のスピン Corner 中}} \prod W. \quad (4)$$

ここで、スピン配列の和は「Corner の辺に乗っていないスピン変数」について取る。こうして定義された角転送行列 $C(\sigma'_1, \sigma'_2, \sigma'_3, \dots | \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots)$ の行列要素は、スピン変数 σ_1 と σ'_1 が等しくない場合はゼロであると定める。従って CTM は、ブロック対格な行列となる。Corner をよ〜く

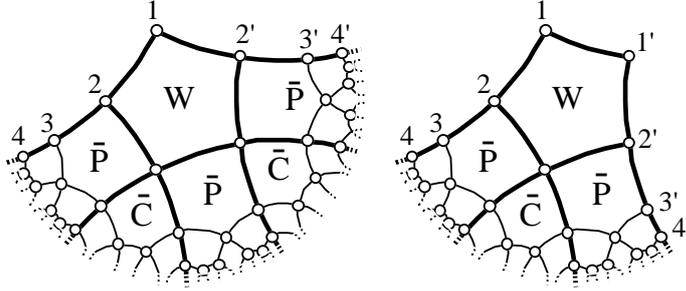


図 2: Corner C と Half-Row P の再帰的な構造.

見ると、再帰的な構造が浮かんで来る。図 2 左側に示したように、 \bar{P} とラベル付けした領域と、 \bar{C} とラベル付けした「より小さな Corner」が構成要素になっている。この関係は、次のような式で表される。 [9, 10]

$$C = W \cdot \bar{P} \bar{C} \bar{P} \bar{C} \bar{P} \quad (5)$$

図 2 左側に現れた \bar{P} も、 C に似たような副構造を持っていることは、図 2 右側を見るとわかるだろう。同様に式で表すと、

$$P = W \cdot \bar{P} \bar{C} \bar{P}. \quad (6)$$

となる。この P や \bar{P} は、平面格子の half-row に相当している。角転送行列 (CTM) を Corner C に対して定義したように、half-row P のボルツマン重率も 転送行列 の形で表しておこう。

$$P(\sigma'_1, \sigma'_2, \sigma'_3, \dots | \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots) = \sum_{\text{内側のスピン}} \prod_{\text{HRTM 中}} W \quad (7)$$

このように行列で表した half-row のボルツマン重率は、half-row transfer matrix (HRTM) と呼ばれるものだ。

CTM の 4 乗 $\rho = C^4$ のトレースは全系の分配関数を与えるので、

$$Z = \text{Tr} \rho = \text{Tr} C^4 \quad (8)$$

$\rho = C^4$ は密度行列の一種と見なすことができる。この関係に気づけば、密度行列繰り込み群で示されたように、CTM や HRTM の行列次元を落とす「ブロックスピン変換」を ρ の対角化から得ることができる。 [4, 5] 具体的には、まず ρ の縮約を取り、これを対角化する。

$$\begin{aligned} \rho'(\sigma'_2, \sigma'_3 \dots | \sigma_2, \sigma_3, \dots) &= \sum_{\sigma'_1 = \sigma_1 = \pm 1} \rho(\sigma'_1, \sigma'_2, \sigma'_3 \dots | \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots) \\ \rho'(\sigma'_2, \sigma'_3 \dots | \sigma_2, \sigma_3, \dots) &= \sum_{\xi} A(\sigma'_2, \sigma'_3 \dots | \xi) \lambda_{\xi} A(\sigma_2, \sigma_3, \dots | \xi) \end{aligned} \quad (9)$$

ここに現れる固有値 λ_{ξ} は非負で、DMRG の慣習に従って大きい順に並べておく。対角化で得られた直交行列 $A(\sigma_2, \sigma_3, \dots | \xi)$ が $\{\sigma_2, \sigma_3, \dots\}$ からブロックスピン変数 ξ — その自由度は、たかだか定数 m — への繰り込み群変換を与える。この変換は、次式のように CTM や HRTM を「より

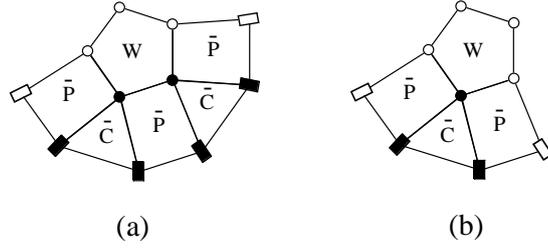


図 3: ブロックスピンを含む場合の (a) CTM の拡大プロセス (b) HRTM の拡大プロセス.

小さな次元の行列」へと圧縮する働きを持つ。 [9, 10]

$$\begin{aligned} C(\sigma'_1, \sigma'_2, \dots | \sigma_1, \sigma_2, \dots) &\rightarrow C(\sigma', \xi' | \sigma, \xi) \\ P(\sigma'_1, \sigma'_2, \dots | \sigma_1, \sigma_2, \dots) &\rightarrow P(\sigma', \xi' | \sigma, \xi), \end{aligned} \quad (10)$$

CTM や HRTM の構造を表す式 (3.2), (3.3) と、ブロックスピン変換を表す式 (3.7)-(3.9) を組み合わせることによって、段々と系のサイズを拡大しつつ、その分配関数を十分な精度で計算して行くことができる。計算アルゴリズムをまとめておこう。

- (0) ある、小さな大きさの有限系について $C(\sigma', \xi' | \sigma, \xi)$ と $P(\sigma', \xi' | \sigma, \xi)$ を持っていると仮定しよう。例えば一番簡単なものは ξ が「1 状態変数」である場合

$$C(\sigma' | \sigma) = P(\sigma' | \sigma) = \delta(\sigma' | 1) \delta(\sigma | 1) \quad (11)$$

で与えられ、これは系の境界上で全ての (イジング) スピンが 1 の値を取ることを意味する。 [16] (ただし、記号 $\delta(a|b) = \delta_{a,b}$ はクロネッカーのデルタ。) これを「ひと回り大きな」CTM や HRTM の構成要素だと考えて $\bar{C}(s', \zeta' | s, \zeta)$ や $\bar{P}(s', \zeta' | s, \zeta)$ と「バー」を付ける。

- (1) $\bar{C}(s', \zeta' | s, \zeta)$ と $\bar{P}(s', \zeta' | s, \zeta)$ を、拡大プロセスを表す式 (3.2) と式 (3.3) に代入しよう。図 3 に、この W , \bar{C} , and \bar{P} 間の関係を示しておく。結果として、拡大された CTM $C(\sigma', s', \zeta' | \sigma, s, \zeta)$ と拡大された HRTM $P(\sigma', s', \zeta' | \sigma, s, \zeta)$ を得る。
- (2) 拡大された CTM $C(\sigma', s', \zeta' | \sigma, s, \zeta)$ から、式 (3.5) を通じて密度行列 $\rho(\sigma', s', \zeta' | \sigma, s, \zeta)$ と、その縮約 $\rho'(s', \zeta' | s, \zeta)$ を求める。式 (3.7) にあるように、 ρ' の対角化を通じてブロックスピン変換行列 $A(s, \zeta | \xi)$ を造る。
- (3) $A(s, \zeta | \xi)$ を $C(\sigma', s', \zeta' | \sigma, s, \zeta)$ と $P(\sigma', s', \zeta' | \sigma, s, \zeta)$ に作用させて $C(\sigma', \xi' | \sigma, \xi)$ と $P(\sigma', \xi' | \sigma, \xi)$ を得る。
- (4) ステップ (1) に戻る。

このような計算を通じて CTM を手にすれば、系の中心でスピン偏極

$$\langle \sigma \rangle = \frac{\text{Tr } \sigma \rho}{\text{Tr } \rho} = \frac{\sum_{\sigma, s, \zeta} \sigma \rho(\sigma, s, \zeta | \sigma, s, \zeta)}{\sum_{\sigma, s, \zeta} \rho(\sigma, s, \zeta | \sigma, s, \zeta)}. \quad (12)$$

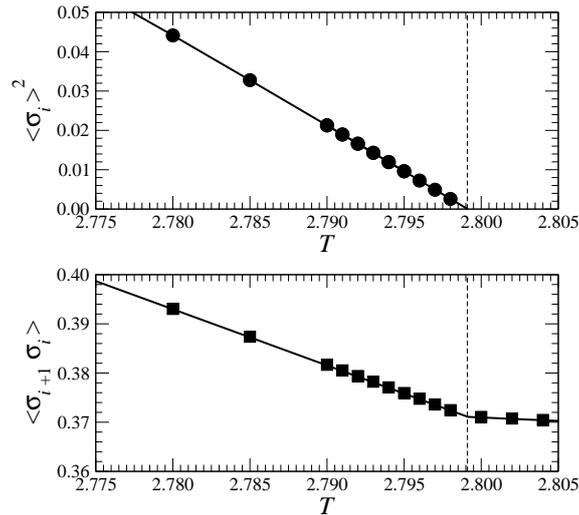


図 4: 自発磁化 $\langle \sigma \rangle^2$ と最近接スピン相関 $\langle \sigma_s \rangle$ 。

やボンドエネルギー $\langle \sigma_s \rangle$ などは、簡単な行列計算によって容易に得られる。十分な回数だけ上記の反復計算を行うと、 $\langle \sigma \rangle$ や $\langle \sigma_s \rangle$ などの 1 点関数の熱力学極限での値を求めることができる。... というゴタクはここまでにして、計算結果を示そう。

2 計算結果は平均場的だった

実際に (5, 4) 格子上的イジング模型について CTM の対角化を行ってみると、その固有値は速やかに減衰する。この理論的な理由は「まだ」よく判っていない ... この点について Okunishi らに学ぶことは多いだろう。[19, 20] とにかくも、減衰が素早いことは計算には好都合なことで、ブロックスピン変数として $m = 10$ も取っておけば十分に正確な計算が可能である。(念のために $m = 40$ まで自由度を増やして、計算結果に m 依存性がないことを確かめてある。) 自発磁化など、1 点関数のシステムサイズに対する収束は、転移温度 T_C で最も遅く、400000 回の反復を要することもあった。

自発磁化の 2 乗 $\langle \sigma \rangle^2$ を求めてみると、図 4 に示したように温度 T に線形であり、 $T_C = 2.799$ でゼロになる。最近接スピン相関 $\langle \sigma_s \rangle$ は、エネルギー期待値を与えるものだけでも、こちらも温度 T に対して線形で、転移温度 T_C で折れ曲がっている。以上のデータから、臨界指数を求めてみると $\beta = 1/2$ および $\alpha = 0$ となり、Hasegawa, Sakaniwa, and Shima による予想どおり平均場的な振る舞いが見られた。[14, 15] なお、得られた転移温度の値は、ベーテ格子である $(\infty, 4)$ 格子上的イジングモデルの転移温度 $T_C^{\text{Bethe}} = 2.885$ 。[17, 18] に近く、正方格子イジング模型の転移温度 $T_C^{\text{Square}} = 2.269$ よりも随分と大きな値となっている。

3 おまけ

角転送行列繰り込み群 (CTMRG) は、測地線からなる (p, q) 格子、つまり q が偶数の場合に適用可能である。裏格子変換は (p, q) 格子を (q, p) 格子に変換するので、 pq が偶数であれば同様に

ある。難儀なのが p も q も奇数の場合で、これをどう扱うかは思案中である。この報文で取り扱ったように face の重率 W が更にボンド対の重率の積で書かれている場合は、この性質を用いて何とか CTMRG による計算を行うこともできる。— どのみち、双曲平面上では相転移が平均場的になるのだから、そんなに無理をしなくても簡単に計算できる格子だけを取り扱えば良い、と言ってしまえばそれでオシマイだけれども、「計算できない系があるのは計算手法として不十分である」と揶揄されるのはシაკなので、 $pq = \text{odd}$ の場合も一般的な取り扱い方を開発して行きたい。

イジングモデルを離れて、clock 模型や Potts 模型に踏み込むと、フラットな正方格子や三角格子上の統計モデルで、その性質がよくわかっていないものは数知れない。フラストレーションや KT 転移が絡んでいると、相の概略が容易にはわからないのだ。こういう場合は、何でもかんでも、片端から双曲平面に乗せてみるのが良い。難儀な相転移も、恐らく平均場的な相転移に化けてしまうだろう。そして、双曲平面の曲率を「すこしづつ」減じてフラットにして行く過程で、どのような変化が見えてくるかを観察すれば、フラットな場合の臨界現象を捕捉することができるだろう。この「目論見」には、なるべく曲率が小さな双曲平面上の充填タイリングを考える必要があり、今も (ときどき) 考察を進めている。

数値計算という力技を離れて、カダノフの実空間繰り込み群が、どのように双曲平面上では自由エネルギーの特異性を与えるかも検討する必要がありそうだ。既に述べたように「ガウシアンなユニバーサリティーしか出ないだろう」とは思うけれども、何事もタイ焼きの尻尾まで噛んでアンを味わう (味わい損ねる) ごとく、確認してみるものだ。厳密解についても、真面目に考えた方が良いかもしれない。Star-Triangle 関係式や可換転送行列の概念は、双曲平面上でも「そのまま」成立する。分配関数の解析形が、1つの事例だけでも明らかになれば、双曲平面上でのスケールンク解析の良い比較対象となるであろう。(私はあまり良く知らない) 素粒子理論分野では、AdS 云々の議論が盛んであるらしいと聞いている。コメントが頂ければ有り難い。

双曲平面で「ちょっと面白い」のが、これを $1 + 1$ 次元、つまり量子 1 次元系の問題と捉える場合だ。形式的には、CTM はいわゆる Corner Hamiltonian H_C を指数の肩に乗せたものである。例えば、可解な 1 次元系 (の一部) では、 H_C は段々と強さが増して行く近接相互作用の和で表すことができる。

$$\begin{aligned} H_C &= h(\sigma_1, \sigma_2) + 2h(\sigma_2, \sigma_3) + 3h(\sigma_3, \sigma_4) + \dots \\ &= h_1 + 2h_2 + 3h_3 + 4h_4 + \dots \end{aligned} \quad (13)$$

ここで、 $h_i = h(\sigma_i, \sigma_{i+1})$ は最近接スピン間の相互作用である。これを、ヒョイト「パラメター変形」することを考えると、次の形のものが候補に上がる。

$$H_C(\Lambda) = h_1 + \frac{\sinh 2\Lambda}{\sinh \Lambda} h_2 + \frac{\sinh 3\Lambda}{\sinh \Lambda} h_3 + \dots \quad (14)$$

これは $\Lambda \rightarrow 0$ の極限で、ひとつ上の式と一致する。この「変形 Corner Hamiltonian」は、次のような再帰的構造を持っていて、

$$\begin{aligned} H_C(\Lambda) &= \cosh \Lambda \left(h_2 + \frac{\sinh 2\Lambda}{\sinh \Lambda} h_3 + \frac{\sinh 3\Lambda}{\sinh \Lambda} h_4 + \dots \right) \\ &+ h_1 + \cosh \Lambda h_2 + \cosh 2\Lambda h_3 + \dots \end{aligned} \quad (15)$$

これは、既に述べた CTM と HRTM の間の再帰的構造に相当している。 $\sinh \ell \Lambda$ は ℓ が大きな所では指数的に振舞うので、式 (15) は奥西による実空間繰り込み群の変形ハミルトニアンに漸近的に一致する。 [21, 22]

参考文献

- [1] R.J. Baxter: J. Math. Phys. **9** (1968) 650.
- [2] R.J. Baxter: J. Stat. Phys. **19** (1978) 461.
- [3] R.J. Baxter: *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, London, 1982) p. 363.
- [4] S. R. White: Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2863.
- [5] S. R. White: Phys. Rev. B **48** (1993) 10345.
- [6] *Density-Matrix Renormalization - A new numerical method in physics -*, eds. I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke and K. Hallberg, (Springer Berlin, 1999), and references there in.
- [7] U. Schollwöck: Rev. Mod. Phys. **77** (2005) 259 and references there in.
- [8] T. Nishino: J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1995) 3598.
- [9] T. Nishino: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 891.
- [10] T. Nishino: J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997) 3040.
- [11] A. Gendiar and T. Nishino: Phys. Rev. E **65** (2002) 046702.
- [12] K. Ueda, R. Otani, Y. Nishio, A. Gendiar, and T. Nishino: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) supplement p.111.
- [13] 双曲充填タイリングは、色々な所で紹介されている。google で hyperbolic tessellation をキーワードに検索をかけるのが一番良い。中でも、以下のサイトは秀逸;
<http://www2u.biglobe.ne.jp/~hsaka/mandara/index.html>;
<http://www.hadron.org/~hatch/HyperbolicTesselations/>.
- [14] H. Shima and Y. Sakaniwa: J. Phys. A. **39** (2006) 4921.
- [15] I. Hasegawa, Y. Sakaniwa, and H. Shima: e-print, cond-mat/0612509.
- [16] 厳密に言うならば、このようなクラスター・サイズの拡大方法は、系の中心から端までの距離を常に一定に保ようにはなっていない。boundary は、ギザギザしたものになってしまう。
- [17] H.A. Bethe: Proc. Roy. Soc. London A 150 (1935) 552-75.
- [18] 平均場近似は $(4, 4)$ 格子でも $(5, 4)$ 格子でも、より一般的に $(p, 4)$ 格子でも同じ結果を与える。Bethe 近似であれば $(4, 4)$ 格子は $(p \geq 5, 4)$ 格子よりも小さな転移温度を与える。
- [19] I. Peschel: J. Stat. Mech. (2004) P06004 and references there in.
- [20] K. Okunishi, Y. Hieida, Y. Akutsu: Phys. Rev. E **59** (1999) R6227.
- [21] k. Okunishi: J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 3186.
- [22] K. Okunishi: J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 063001.