

2次元 p 状態クロック模型における Berezinskii-Kosterlitz-Thouless 転移

熊野 裕太

東京大学大学院 理学系研究科 物理学専攻

概要

本研究は、2次元 p 状態クロック模型における相転移、特に Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 転移が生じる場合を研究したものである。この模型は過去の研究により、その離散性にも関わらず $p \geq 5$ で BKT 転移が生じると考えられてきた。しかし近年、helicity modulus の数値計算結果が BKT 転移での振る舞いと異なることから、 $p = 6$ 周りで BKT 相が現れないという主張がされており、これまでの通説が疑問視されている。

そこで本研究では、これまで広く用いられている無限小捻りに対する helicity modulus を高温展開を用いて計算し、 p 状態クロック模型ではそれが有限値を持つことを示した。これにより、上述の状況では helicity modulus のユニバーサルジャンプは BKT 転移の指標とはならないことを示し、さらに p 状態クロック模型のような離散状態スピン系では、無限小捻りに対する helicity modulus は相の特徴を正確に反映した応答ではない可能性を提示した。

また、 p 状態クロック模型における BKT 転移の有無を有限サイズスケーリングの手法により判別するために、 Z_p 異方性がある場合にも有効な BKT 転移における有限サイズスケーリングの手法を開発した。これを用いることで、2次元 p 状態クロック模型において $p \geq 5$ で BKT 転移が生じることを支持する結果を得た。

目次

第 1 章	序論	5
1.1	はじめに	5
1.2	相転移と臨界現象	8
1.3	スケーリングとくりこみ群	8
1.3.1	くりこみ群	8
1.3.2	スケーリング則	11
1.3.3	有限サイズスケーリング	13
1.4	双対性	14
1.5	本研究の目的	15
1.6	本論文の構成	16
第 2 章	Berezinskii-Kosterlitz-Thouless 転移	18
2.1	Mermin-Wagner の定理	18
2.2	XY 模型における高温展開と低温展開	19
2.3	渦の効果と BKT 転移	20
2.4	Villain 模型	22
2.4.1	2 次元 Coulomb ガス描像	23
2.5	くりこみ群による BKT 転移の解析	26
2.5.1	BKT 方程式の導出	27
2.5.2	くりこみの流れ	29
2.5.3	BKT 転移の性質	29
2.6	BKT 転移における有限サイズスケーリング	31
第 3 章	2 次元 p 状態クロック模型の相転移	34
3.1	2 次元 p 状態クロック模型における双対性	34
3.2	くりこみ群による p 状態クロック模型の解析	37
3.3	2 次元 p 状態クロック模型の相図	38

3.3.1	$p \leq 4$ の場合	39
3.3.2	$p \geq 5$ の場合	41
3.4	最近の数値計算結果と問題点	42
第 4 章	helicity modulus	45
4.1	helicity modulus の定義式と計算式	45
4.2	p 状態クロック模型における helicity modulus の高温展開	47
4.3	数値計算結果との比較	49
第 5 章	BKT 転移と Z_p 異方性の効果	51
5.1	2 次元 XY 模型に対する Z_p 異方性の効果	51
5.2	BKT 転移における有限サイズスケーリングと Z_q 異方性の効果	52
5.2.1	Υ_p の摂動計算	53
5.2.2	補正項のサイズ依存性	55
5.2.3	$\Upsilon_p^{(2)}$ のサイズ依存性	56
5.2.4	有限サイズスケーリングにおける補正項	57
第 6 章	2 次元 p 状態クロック模型における BKT 転移	58
6.1	数値計算法	58
6.2	相関関数の比を用いた転移温度の決定	59
6.3	p 状態クロック模型における BKT 転移の有限サイズスケーリング	62
6.3.1	$p \geq 6$	62
6.3.2	$p = 5$	63
6.3.3	Z_5 異方性の摂動的扱いの妥当性	65
6.4	Z_5 異方性中の 2 次元 XY 模型における BKT 転移	66
第 7 章	結論	71
付録 A	XY 模型の高温展開	73
付録 B	多重 Gauss 積分と格子 Green 関数	77
B.1	多重 Gauss 積分	77
B.1.1	1 変数の場合	77
B.1.2	多変数の場合	77
B.1.3	連続変数の場合	79
B.2	格子 Green 関数	79
B.3	(2.19) の導出	81

4	目次
B.4	スピン波領域の相関関数の計算 81
付録 C	Villain 模型の双対変換 83
付録 D	渦の相関関数 86
付録 E	ユニバーサルジャンプ 89
E.1	helicity modulus と超流動密度 89
E.2	ユニバーサルジャンプ 90
付録 F	BKT 転移温度の決定法 92
F.1	2 次転移における転移温度の決定法 92
F.2	BKT 転移における転移温度の決定法 93
F.2.1	スケーリングの誤差の評価 94
参考文献	97
謝辞	100

第 1 章

序論

1.1 はじめに

多様な自然現象を理解するために物理学は発展してきたが、その中でも我々にとって身近であり、かつ多岐に渡る現象として、相転移がある。水を熱すると気化し、水蒸気になる現象、磁石を冷やすと磁化を持つようになる現象、いずれも相転移の一例である。これらの身近な現象に着目し、そのメカニズムを解明することは、それ自身を理解できるようになるだけでなく、一見何の関係もないような現象の理解に役立つことがある。例えば、磁石が温度を下げていくと磁化を持つようになる相転移は自発的対称性の破れ [1][2] を伴うが、この概念は素粒子が質量を持つことに本質的な役割を果たしている、と考えられている [3][4][5]。このように、我々の身の周りの現象の理解が、目に見えないほど小さな素粒子の理解に繋がるのである。さらに、そのアクセスのし易さから実験と理論とが切磋琢磨することが可能となり、自然に対してより確かな理解に到達することができるのである。このように、相転移研究は自然の理解に対して有効であるため、物理学の中でも非常に重要な分野の 1 つである。

相転移を理解するための強力な道具として、理論物理における 20 世紀最大の発見の内の 1 つである、くりこみ群の手法がある。この手法の前身として、場の理論において朝永 [6]、Schwinger[7]、Feynman[8] らによって考案されたくりこみの手法があるが、当初は発散の問題を回避するための技巧的解決に過ぎないものだった。しかし、Kadanoff[9] や Wilson [10][11] らによる仕事を経てその重要性が明らかとなり、くりこみ群の手法として今や現代物理学の基本的な視点の 1 つにまで昇格した。「くりこみ群」が意味する所を正確に説明することは簡単ではないが、要約すれば、自由度の粗視化とスケール変換を繰り返し、短波長 (高エネルギー) の自由度を徐々に間引きし、最終的に長波長 (低エネルギー) の有効理論を導くものである。すなわちそれは、瑣末な要素を取り除き本質のみを抽出する方法論であり、自然が持つ普遍性をあぶり出す。

これまでの膨大な研究により、自然にはどういうわけか普遍的な性質が存在するようだ、と

いうことを物理学は探り当ててきたわけだが、20 世紀に入り人類はくりこみという新たな視点を得ることで、自然が持つ普遍性の存在理由をより明確に理解することができるようになったのである。

この普遍性の存在は相転移についても例外ではない。相転移には不連続相転移と連続相転移があるが、くりこみの手法は臨界現象を伴う連続相転移に対して特に有効である。くりこみの視点に立つと、連続相転移の本質はその臨界現象にのみ現れることを見ることができる。すなわち、一見全く異なる系で起きる相転移であっても、その臨界的性質が等しければ、本質的に同じ相転移が起きていると言えるのである。くりこみの登場以来、相転移の研究はその臨界現象の種類を分別する学問へと焼き直され、究極的にはその完全な分類が相転移研究の目指す所であると言っても過言ではない。

それでは相転移における本質的な要素は何か、という問いが自然と浮かび上がってくるが、これまでの研究によれば、それらは空間次元、ハミルトニアンの特称性、相互作用の到達距離の 3 要素であると考えられている (例えば、[12] を参照)。この考え方に則れば、離散特称性と連続特称性の違いは本質的に異なる相転移現象をもたらすと考えられる。

連続特称性と相転移の関係を述べる非常に重要な定理として、Mermin-Wagner の定理 [14] がある。これによると、1 次元及び 2 次元の連続特称性を持つ系では、特称性が自発的に破れた秩序状態は有限温度では存在できない。これは、1 次元及び 2 次元の連続特称性を持つ系では秩序化を伴う相転移が禁止されていることを意味する。一見すると、Mermin-Wagner の定理から 1 次元及び 2 次元の連続特称性を持つ系ではあらゆる相転移が禁止されるように思えるが、連続特称性の中で最も基本的な $U(1)$ 特称性を持つ空間 2 次元の系では、自発的特称性の破れを伴わない相転移が生じる。

この相転移は、1970 年代初頭、Berezinskii[15]、Kosterlitz、Thouless[16] らの古典 2 次元 XY 模型の研究により初めて指摘された。彼らは、古典 2 次元 XY 模型が低温極限ではスピン波として近似でき、スピン波中の渦励起が相転移を引き起こすことを明らかにした。この相転移は自発的特称性の破れを伴わず、渦を量子数としたトポロジーが変化することにより生じるものである。自発的特称性の破れを伴う通常の相転移とは明らかに異なる機構を持つこの相転移は、発見者の名前に因み Berezinskii-Kosterlitz-Thouless(BKT) 転移と呼ばれている。具体的にこの BKT 転移は、2 次元 XY 模型の相転移だけでなく、ヘリウム薄膜の超流動転移を記述し、BKT 転移とは異なるがその知見を生かすことにより、4 次元 $U(1)$ ゲージ理論の閉じ込め相転移を解釈することができる。

BKT 転移は通常の相転移とは異なる機構により生じているために、その性質も通常の相転移とは異なる。1 つは、通常の 2 次転移では秩序化を反映して低温相で長距離での相関関数が一定値へ漸近するのに対し、BKT 転移では低温相で相関関数がべき的に減衰するという特徴がある。これは転移点以下の低温側で臨界点の性質を持ち、秩序化寸前の状態がずっと続いていることを示唆している。2 つ目に、通常の 2 次転移では転移点近傍で相関長がべき的に発散

するのに対し、BKT 転移では指数関数的に発散するという特徴がある [17]。相関長はあらゆる物理量の臨界的性質を決めることを考えると、BKT 転移では 2 次転移のように比熱等の物理量の臨界指数を単純に決めることができないことが分かる。また、相関長の急速の発散に加えて対数補正が出てくることから、BKT 転移では有限サイズ効果が顕著に効いてくるという特徴がある。

BKT 転移は、空間 2 次元と $U(1)$ 対称性による揺らぎの絶妙なバランスにより実現されている。実際、 $U(1)$ 対称性より高い対称性である $SO(3)$ 対称性を持つ 2 次元 Heisenberg 模型や $O(N)$ 対称性を持つ $O(N)$ 模型では、相転移が存在しないことが知られている [18][19]。一方、 $U(1)$ 対称性から対称性を落とした Z_2 対称性を持つ 2 次元 Ising 模型では、秩序化を伴う 2 次相転移が生じる。このように、BKT 転移は次元と揺らぎが特殊な関係にあることにより実現されているのである。

一方、離散対称性を持つ系では、連続対称性を持つ場合に比べ揺らぎが小さいので、低温側で秩序相が存在する。よって、この系では自発的対称性の破れを伴う相転移が生じると考えられる。離散対称性を持つ系の一例として、 $U(1)$ 対称性の場合と同じ 2 次元の内部空間を持つ、 Z_p 対称性を持つ空間 2 次元の系がある。このような系として Z_p 異方性の摂動を受けた 2 次元 XY 模型があるが、この模型は 1970 年代後半に Jose、Kadanoff らによってくりこみ群を用いて研究された [20]。彼らの結果は、離散対称性を持つ系であるにも関わらず、 $p \geq 5$ の場合には BKT 転移が生じるというものであった。BKT 転移は本来、 $U(1)$ 対称性を持つ系に特徴的な相転移であることを考えると、離散対称性を持つ系で BKT 転移が生じることは非自明である。

Jose らの発見以降、この非自明な現象は解析的及び数値計算的な方面から精力的に研究されてきた。解析的な方面からは、Elitzur による Z_p スピン系の研究 [21] や、 Z_p 異方性を双対空間の $\sin$ 項として考慮した Dual-sine-Gordon 模型の研究 [43] 等があり、多くは Jose らの主張と同様の結果を得ている。

一方、BKT 転移の数値計算的な困難もあり、数値計算の方面からの理解は遅れていた。しかし近年、新たな数値計算手法の開発や計算機の発展に伴い、数値計算からのアプローチが可能になってきた。そのうちの 1 つに、Baek らによる 2 次元 p 状態クロック模型の研究 [48] がある。この模型は 2 次元 XY 模型においてスピンが $2\pi n/p$ ($n = 1, 2, \dots, p$) の方向のみを向ける場合に対応しており、 Z_p の離散対称性を持つ基本的な模型である。Baek らはこの模型において helicity modulus を数値計算し、その振る舞いを議論することで、 $p=5$ において BKT 相が現れないことを主張している。また、Jose らの主張と異なる Baek ら同様の数値計算結果は他の研究グループからも提示されている [49][50]。このように、空間 2 次元の Z_p 対称性を持つ系において、 $p \geq 5$ の場合には BKT 転移が生じるというこれまでの通説が疑問視されているのである。

本研究では、2 次元 p 状態クロック模型における上述の問題点を解決し、BKT 転移が生じ

る p の範囲を明らかにすることを目指す。さらに一般的に、空間 2 次元の Z_p 対称性を持つ系の相転移として、統一的な理解を目指す。

1.2 相転移と臨界現象

温度、磁場、圧力等のパラメタを変化させた時、系が異なる性質を持つ相へ移る現象を相転移という。相転移の種類は熱力学量の転移点での特異性の具合によって分別される。熱力学において基本的な量である自由エネルギーに着目し、系の体積やエントロピー等の、自由エネルギーの 1 回微分に不連続性が現れるとき、1 次転移と呼ばれる。また、比熱や帯磁率等の、自由エネルギーの 2 回微分に不連続性または発散が現れるとき、2 次転移と呼ばれる。前者は非連続相転移、後者は連続相転移と呼ばれることもある。

磁性体の磁気相転移を例に説明する。磁性体では高温側から温度を下げていくとある温度で相転移が起き、低温側で磁化を持つようになる。秩序相は秩序変数が期待値を持つことで定義されるが、磁性体の場合、秩序変数は磁化である。このような場合、一般に、高温側で無秩序相にあったものが、転移点において自発的対称性の破れが起こり、低温側で秩序相が実現しているものと解釈できる。このように、対称性と相転移は密接に関係している。

相転移には非連続相転移と連続相転移の 2 種類が存在するが、連続相転移は臨界現象を伴う。臨界現象とは、あるパラメタを変化させた時に、転移点近傍において物理量がパラメタのべき乗で発散する等の現象のことである。そのべきのことを臨界指数と呼び、温度や磁場をパラメタとして、各物理量の臨界指数は以下のように定義される。

$$C \propto |t|^{-\alpha} \quad (T > T_C) \quad (1.1)$$

$$M \propto |t|^\beta \quad (T < T_C) \quad (1.2)$$

$$\chi \propto |t|^{-\gamma} \quad (T > T_C) \quad (1.3)$$

$$M \propto |H|^{1/\delta} \quad (T = T_C) \quad (1.4)$$

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

$$G(r) \propto r^{-d+2-\eta} \quad (T = T_C) \quad (1.6)$$

臨界指数の組によって、相転移はクラス分けされる。これより、一見異なる系であっても、同じ臨界指数の組を持つ相転移が起きる場合、それらの系は本質的に同じ系である。

1.3 スケーリングとくりこみ群

1.3.1 くりこみ群

それでは、臨界点近傍ではどのようなことが起こっているのか考えてみる。前節で見たように、系の特徴的な長さを表す相関長 ξ は臨界点において発散する。これは、例えばスピン系の

1.3 スケーリングとくりこみ群

9

場合、あるスピンとはるかに離れているスピンが臨界点では相関している、つまり系全体が相関し合っていることを意味する。これより、臨界点では様々なスケールでの揺らぎが同時に発生しており、物理量に異常が生じるのである。よって、臨界点では系をどんなに拡大して見ても同じ性質を持つ、自己相似性が実現している。

ここから、短いスケールでの揺らぎは取り除き、長いスケールの揺らぎだけに注目することで、系が臨界点にあるか否かを判別することができ、系の性質を抽出できると考えられる。これがくりこみ群の基本的な考え方である。この考え方に従うと、臨界指数のような臨界現象の本質を記述する量は、系の詳細に依らずに、系の次元や対称性のような本質的な要素のみに依存していると考えられる。このような信念を universality と呼ぶ。

この考え方を体系化したのが、くりこみ変換を利用したくりこみ群の方法 [10] である。くりこみ変換とは、系においてまず部分和を取り、元の系とつじつまが合うようスケール変換を行うことである。これは、短いスケールでの物理を取り除き、長いスケールのものだけに注目することに相当する。ここで、スピン系を例にくりこみ変換を利用したくりこみ群の考え方を説明する。系には温度や磁場などの様々なパラメタが存在するが、それらが結合定数としてスピン変数を通して系の性質を決めている。この系においてスケール b のくりこみ変換を施すと、定義より系の自由度の数 N と 1 自由度当たりの長さのスケール r は共に b^{-d} 倍される。 d は空間次元である。

今、様々なパラメタの組を $\mathbf{K}$ と表す。スケール b のくりこみ変換後のパラメタを $\mathbf{K}'$ と表すと、

$$\mathbf{K}' = R(\mathbf{K}) \quad (1.7)$$

となる。 R はくりこみ変換の関数を表す。ここでは相転移における臨界現象を扱いたいので、固定点 K_0 近傍でのパラメタの動きに注目する。パラメタ $\mathbf{K} = \mathbf{K}_0 + \delta\mathbf{K}$ がスケール b のくりこみにより $\mathbf{K}' = \mathbf{K}_0 + \delta\mathbf{K}'$ に変化するとすると、 $\delta\mathbf{K}$ が小さいことを利用して

$$\begin{aligned} \mathbf{K}' &= R(\mathbf{K}_0 + \delta\mathbf{K}) \\ &\sim R(\mathbf{K}_0) + \sum_i \left. \frac{\partial R(\mathbf{K})}{\partial K_i} \right|_{\mathbf{K}=\mathbf{K}_0} \delta K_i \end{aligned}$$

となるから

$$\delta\mathbf{K}' = M\delta\mathbf{K} \quad (1.8)$$

と表せる。ここで、

$$M_{nm}^{(b)} \equiv \left. \frac{\partial K'_n}{\partial K_m} \right|_{\mathbf{K}=\mathbf{K}_0} \quad (1.9)$$

であり、 M はくりこみ変換のスケール b と固定点 K_0 に依存している。行列 M の i 番目の固有値を $\lambda_i^{(b)}$ 、固有ベクトルを $\mathbf{e}_i^{(b)}$ とすると

$$M^{(b)}\mathbf{e}_i^{(b)} = M^{(b)}\lambda_i^{(b)} \quad (1.10)$$

となる。ここで、スケール b のくりこみ変換の後にスケール b' のくりこみ変換を行うことと、スケール bb' のくりこみ変換を一度に行うことは同等であるので、

$$M^{(b)} M^{(b')} = M^{(bb')} \quad (1.11)$$

であるから、固有値についても

$$\lambda_i^{(b)} \lambda_i^{(b')} = \lambda_i^{(bb')} \quad (1.12)$$

が成り立つ。これを満たす λ の b 依存性はべきなので、

$$\lambda_i = b^{y_i} \quad (1.13)$$

が得られる。

ここで固定点近傍でのパラメタのくりこみについての関係式 (1.8) に戻る。 $\delta \mathbf{K}$ は一般に行列 M の固有ベクトルを使って表せるので、

$$\delta \mathbf{K} = \sum_i g_i^{(b)} \mathbf{e}_i^{(b)} \quad (1.14)$$

と書ける。 g_i はスケーリング場と呼ばれる。よって、(1.8)、(1.10) より

$$\begin{aligned} \sum_i g_i'^{(b)} \mathbf{e}_i^{(b)} &= \delta \mathbf{K}' = M^{(b)} \sum_i g_i^{(b)} \mathbf{e}_i^{(b)} \\ &= \sum_i \lambda_i^{(b)} g_i^{(b)} \mathbf{e}_i^{(b)} \end{aligned} \quad (1.15)$$

となり

$$g_i'^{(b)} = \lambda_i^{(b)} g_i^{(b)} = b^{y_i} g_i^{(b)} \quad (1.16)$$

が成り立つ。これより、 y_i の値によって以下の3つの場合が考えられる。

- 1) $y_i > 0$ のとき、くりこみを繰り返すと g_i が大きくなり、最終的に $g_i \rightarrow \infty$ となる。この時、スケーリング場 g_i を relevant という。
- 2) $y_i < 0$ のとき、くりこみを繰り返すと g_i が小さくなり、最終的に $g_i \rightarrow 0$ となる。この時、スケーリング場 g_i を irrelevant という。
- 3) $y_i = 0$ のとき、くりこみを繰り返しても g_i の値は変化しない。この時、スケーリング場 g_i を marginal という。

くりこみ変換を繰り返すことは長波長の物理のみを捉えていくことであるので、これにより我々は長波長の極限で有効的なパラメタを知ることができ、どのパラメタが相転移において重要になるかを知ることができる。

ここで、2つのパラメタ g_i, g_j のみに注目し、くりこみによるパラメタの流れを見ていく。両者は転移点において0となるよう定義されている。例えば $y_i < 0, y_j > 0$ のときのくりこ

1.3 スケーリングとくりこみ群

11

みによるパラメタの流れは図 (1.1) のようになる。これより、 $g_j = 0$ のときのみパラメタの流れが臨界固定点に向かっていくことが分かる。 $g_j = 0$ を臨界面と呼ぶ。固定点の周りでの g_i 、 g_j の振る舞いより、実際に観測できる物理量が臨界点近傍でどのように振る舞うかがわかるのである。

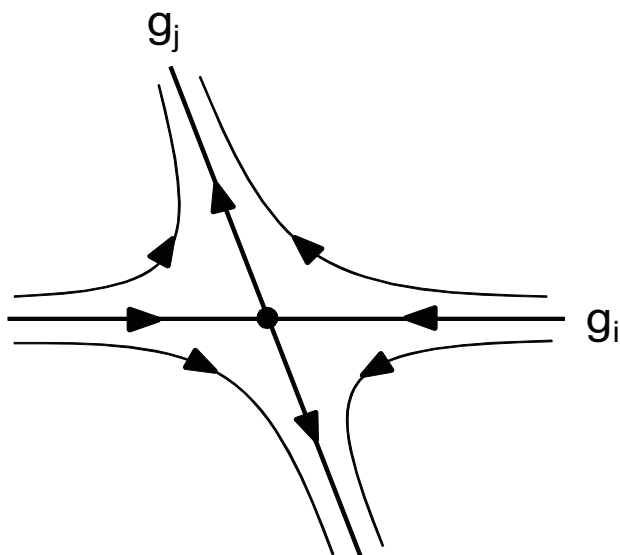


図 1.1 $y_i < 0$ 、 $y_j > 0$ のときのくりこみによるパラメタの流れ。図の黒丸 ($g_i = g_j = 0$) が固定点である。

上述の例はただ 1 つの臨界固定点が存在する場合であったが、複数個臨界固定点が存在する場合や、BKT 転移のように臨界固定点が連続的に繋がった臨界固定線が存在する場合もある。これに関しては第 2 章でくわしく説明する。

1.3.2 スケーリング則

前節で、相転移を特徴付けるものはスケーリング場 $\{g_i\}$ のくりこみの流れに凝縮されていることを見た。本節では、くりこみ変換の方法を用いて、臨界指数の関係式を導出する。

スケール b のくりこみを行うことで、1 自由度あたりの自由エネルギーは

$$f(\{g_i\}) = b^{-d} f(\{g'_i\}) \quad (1.17)$$

となる。ここで、任意の i について $g'_i = b^{y_i} g_i$ を満たす。系には様々なスケーリング場が存在しているが、系の性質を決める上で重要なのは温度に関するスケーリング場 t と、磁場に関するスケーリング場 h である。ただし、 t, h は転移点において 0 と定義される。ここでは、この他のスケーリング場は相転移において重要な寄与を及ぼさないと仮定して、議論を進める。く

りこみを n 回繰り返した時、自由エネルギーは

$$f(t, h) = b^{-nd} f(b^{ny_t} t, b^{ny_h} h) \quad (1.18)$$

となるが、くりこみを十分繰り返すことで $b^{ny_t} t = 1$ とすることができる。このとき、 $b^n = t^{-1/y_t}$ を代入することで、適当な関数 $\tilde{f}$ を用いて (1.18) は

$$f(t, h) = t^{d/y_t} f(1, ht^{-y_h/y_t}) \equiv t^{d/y_t} \tilde{f}(ht^{-y_h/y_t}) \quad (1.19)$$

と書くことができる。これをスケーリング則と呼ぶ。

このスケーリング則から、我々は臨界指数の満たす関係式を導くことができる。例えば、比熱は自由エネルギーの温度について2階微分に比例するので、(1.18)において $h = 0$ として

$$C(t, 0) \propto \frac{\partial^2 f(t, 0)}{\partial t^2} \propto t^{d/y_t - 2} \quad (1.20)$$

となる。ここで、臨界指数の定義 (1.1) と比較することで

$$\alpha = 2 - \frac{d}{y_t} \quad (1.21)$$

を得る。同様の手続きを磁化、帯磁率についても行うことができ、我々は臨界指数 β, γ, δ について以下の式を得ることができる [13][24]。

$$\beta = \frac{d - y_h}{y_t} \quad (1.22)$$

$$\gamma = \frac{2y_h - d}{y_t} \quad (1.23)$$

$$\delta = \frac{y_h}{d - y_h} \quad (1.24)$$

これらの方程式から y_t, y_h, d を消去することにより、臨界指数 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ についてのスケーリング関係式

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (1.25)$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad (1.26)$$

を得ることができる。

また、相関関数のスケール変換を考えることで臨界指数 ν, η についての関係式も得られ

$$\nu = \frac{1}{y_t} \quad (1.27)$$

$$\eta = d - 2y_h + 2 \quad (1.28)$$

を得る [13][24]。以上より、臨界指数 ν, η について以下のような関係式が導かれる。

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (1.29)$$

$$2 - \alpha = d\nu \quad (1.30)$$

1.3 スケーリングとくりこみ群

13

これはハイパースケール関係式と呼ばれている。このように、6つの臨界指数 $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu, \eta$ は独立ではなく、それらの間には4つの関係式が存在する。よって、スケール関係式 (1.25)、(1.26) とハイパースケール関係式 (1.29)、(1.30) を合わせて考えることで、6種類の臨界指数のうち2つが分かれば、4つの関係式より残りの4つの臨界指数も求めることができるのである。

1.3.3 有限サイズスケールリング

相転移において実際に臨界指数を求めようとする時、単純には比熱や帯磁率等の物理量を測定し、転移点周りでの振る舞いから臨界指数を直接求められると考えられる。しかし、実験や数値計算では有限サイズの系を扱うため、熱力学極限で本来現れる正しい臨界指数からは必ずずれが生じる。この問題を解決し、正確な臨界指数を有限系から求める方法が有限サイズスケールリングの方法である。

ここでもくりこみの考え方が役立つ。今、スケール b でのくりこみ変換を考え、1自由度あたりの自由エネルギーを、系のサイズにあらわに依存する形で書くと

$$\begin{aligned} f(t, h, L^{-1}) &= b^{-d} f(t', h', L'^{-1}) \\ &= b^{-d} f(b^{y_t} t, b^{y_h} h, bL^{-1}) \end{aligned} \quad (1.31)$$

となる。ここで例えば比熱の有限サイズスケールリングを説明するために、(1.31) を温度で2階微分して $h = 0$ 置くと

$$C(t, 0, L^{-1}) = b^{-d+2y_t} f''(b^{y_t} t, 0, bL^{-1}) \quad (1.32)$$

となる。ここで $b = L$ とすると、適当な関数 $\tilde{f}$ を用いて

$$C(t, 0, L^{-1}) = L^{\alpha/\nu} \tilde{f}(tL^{1/\nu}) \quad (1.33)$$

と表せる。ただし、関係式 (1.27) を用いた。これより、 α と ν をフィッティングパラメタとして、 x 軸を $tL^{1/\nu}$ 、 y 軸を $CL^{-\alpha/\nu}$ として得られたデータをプロットすると、正しい (α, ν) を選んだときに全てのデータが同一の曲線上に乗る。ゆえに、最適なフィッティングを行うことにより臨界指数を決定することができる。このようにして、有限サイズ系のデータから熱力学極限で起きる相転移の臨界指数を決定する方法を有限サイズスケールリングという。

ここで述べた方法は、くりこみにより自由エネルギーが (1.31) のように変化することを仮定しているので、これに従わない BKT 転移の場合には同様の有限サイズスケールリングを行うことができない。この問題を解決するのが、原田、川島により提案された BKT 転移における有限サイズスケールリングの方法 [36][37] である。これについては第2章6節で詳しく述べる。

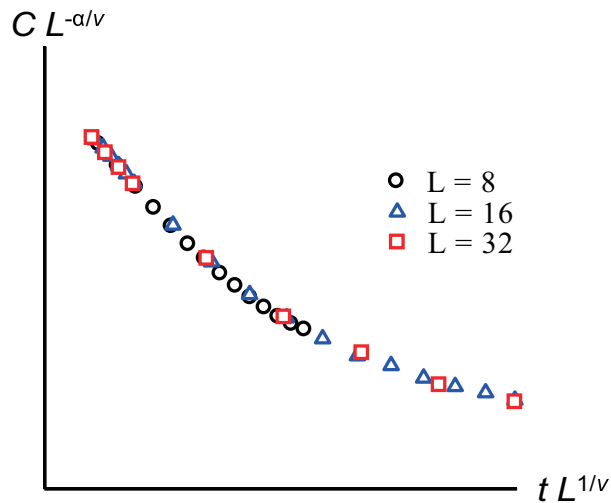


図 1.2 最適なパラメタ (α, ν) を選んだ場合の比熱の有限サイズスケーリングの例。系のサイズに依らず 1 つの曲線上に乗っている様子が分かる。

1.4 双対性

双対性とは、パラメタを別のパラメタに置き換える変換に対して系の性質が不変、すなわち分配関数が不変に保たれる性質のことである [22]。具体的には、ある模型の分配関数がパラメタの組 $\mathbf{K}$ と $\mathbf{K}^*$ の 2 種類で表現できる時、

$$Z(\mathbf{K}) = f(\mathbf{K}, \mathbf{K}^*) Z(\mathbf{K}^*) \quad (1.34)$$

の関係式を満たす場合に、その模型が双対性を持つという。ただし、 $f(\mathbf{K}, \mathbf{K}^*)$ はパラメタ $\mathbf{K}$ 、 $\mathbf{K}^*$ についての解析関数である。パラメタ $\mathbf{K}$ 、 $\mathbf{K}^*$ は独立ではなく、ある関数 g を用いて

$$g(\mathbf{K}, \mathbf{K}^*) = 0 \quad (1.35)$$

の関係にある。

双対関係式を用いることで、我々は模型を厳密に解くことなく、その相転移について様々な情報を得ることができる。例えば、ある模型がただ 1 つの転移点 $\mathbf{K}_c$ を持ち、相転移を起こすとする。この時、分配関数 $Z(\mathbf{K})$ は $\mathbf{K} = \mathbf{K}_c$ において特異性を持つ。ここで (1.34) より、 $f(\mathbf{K}, \mathbf{K}^*)$ は解析的であるので、 $Z(\mathbf{K}^*)$ も $\mathbf{K}^* = \mathbf{K}_c$ において特異性を持つことが要請される。よって、転移点において $\mathbf{K} = \mathbf{K}^* = \mathbf{K}_c$ が成り立つので、(1.35) よりその値 $\mathbf{K}_c$ を厳密に求めることができる。この例としては 2 次元イジング模型があり、高温展開して得られた分配関数と低温展開して得られた分配関数が (1.34) のような双対関係式を満たす [23]。

1.5 本研究の目的

15

次に、ある模型が2つの転移点を持ち、そのうちの一方の転移点が具体的にわかっていたとする。例えば、パラメタ K で表現した場合に $K = K_c$ で相転移が起きるとすると、(1.35) から求められる、それに対応する $K^* = K_c^*$ においても同じ種類の相転移が起きることが分かる。この場合、 $K_c \neq K_c^*$ である。この例として、本研究で扱う2次元 p 状態クロック模型があり、高温側で BKT 転移が起きる転移点が分かっているので、低温側での転移点の値を具体的に求めることができ、その相転移も BKT 転移となる。ゆえに、2種類のパラメタの関係式 (1.35) を求めることが重要である。詳しくは第3章で説明する。

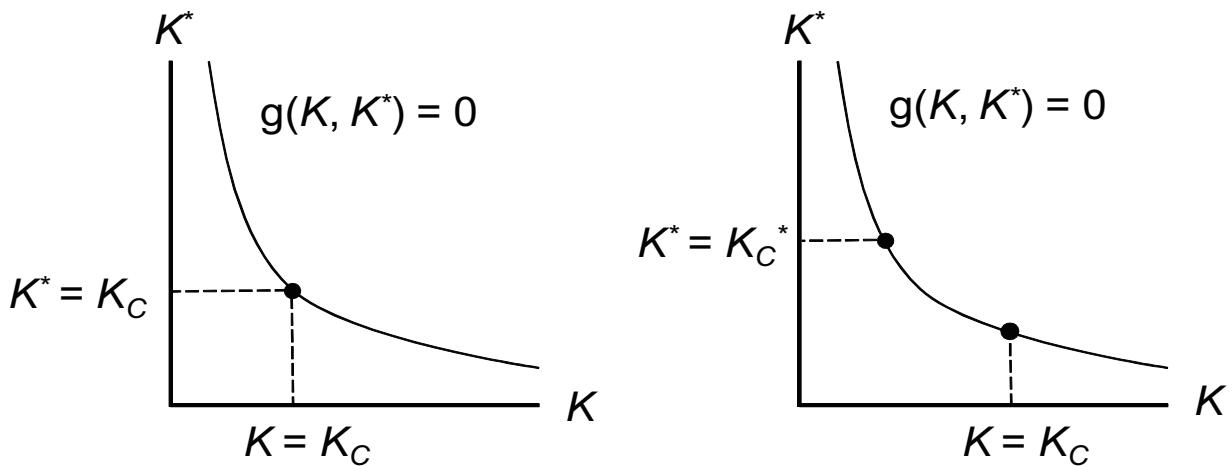


図 1.3 相転移点が1つの時(左)と2つの時(右)のパラメタ K と K^* の関係。相転移点が1つの場合は、 $g(K_c, K_c) = 0$ の方程式を解くことで転移点を厳密に求めることができる。相転移点が2つの場合は、一方の転移点 K_c が分かっているならば、 $g(K_c, K_c^*) = 0$ の方程式からもう一方の転移点 K_c^* も求めることができる。

1.5 本研究の目的

$U(1)$ 対称性を持つ2次元系は、Berezinskii[15]、Kosterlitz、Thouless[16]の2次元 XY 模型の研究により、空間次元と内部対称性の特殊性から BKT 転移が生じることが明らかになった。一方、 Z_p 対称性を持つ2次元系の相転移については、Jose らの Z_p 異方性の摂動を受けた2次元 XY 模型の研究 [20] 以来、その離散対称性に関わらず $p \geq 5$ で BKT 転移が生じると考えられてきた。しかし近年、2次元 p 状態クロック模型の研究を行った Baek らは、helicity modulus の数値計算結果が BKT 転移での振る舞いと異なることから、 $p = 5$ において BKT 相が現れないことを主張している [48]。また、Baek ら同様の数値計算結果は他の研究グループからも提示されており [49][50]、空間2次元の Z_p 対称性を持つ系において、 $p \geq 5$ の場合には BKT 転移が生じるというこれまでの通説が疑問視されている。この模型は次元、

対称性の観点から極めて基本的な模型であるため、その相転移を明確にすることは相転移の基礎研究における喫緊の課題である。

よって、本研究の目的は、2 次元 p 状態クロック模型における上述の問題点を解決し、BKT 転移が生じる p の範囲を明らかにすることである。さらに一般的に、空間 2 次元の Z_p 対称性を持つ系における相転移の統一的な理解を目指す。

1.6 本論文の構成

本論文のおおまかな構成は以下のようになっている。第 2 章と第 3 章は過去の研究のレビューであり、本研究で扱う BKT 転移と p 状態クロック模型の相転移の理論的背景を説明する。本研究において新規性を持つのは第 4、5、6 章である。第 4 章では高温展開により helicity modulus を解析的に計算し、近年の数値計算結果の解釈に問題があることを示す。さらに第 5 章では 2 次元 p 状態クロック模型における BKT 転移を解析するための手法について説明し、第 6 章で実際に解析していく。

より具体的に、本論文の各章ごとの構成は以下のようになっている。第 2 章では、2 次元 XY 模型と 2 次元 Villain 模型を用いることで BKT 転移の発生機構、その特徴を見ていく。1 節では Mermin-Wagner の定理 [14] により 2 次元 XY 模型は有限温度で秩序相を持つことが禁止されていることを説明し、2 節で高温展開と低温でのスピン波近似を考え相関関数を計算することにより、高温と低温では異なる相にあり、相転移が存在するべきことを示す。3 節ではスピン波中の渦励起が BKT 転移を誘起する [16] ことを説明する。4 節ではより定量的に BKT 転移を扱うために、2 次元 XY 模型の相転移と同じユニバーサリティクラスに属すると考えられる 2 次元 Villain 模型 [54] を導入し、双対変換を行うことにより 2 次元 Coulomb ガス模型にマッピングできることを見る。その描像での電荷の束縛・非束縛転移 [29] が BKT 転移に対応している。5 節では、BKT 転移におけるくりこみ群方程式である BKT 方程式を導出し、臨界点近傍で相関長が指数関数的に発散することから通常の臨界指数が定義できないこと [17] や、通常の有限サイズスケーリングを用いることができないことを見る。さらに 6 節では、原田、川島により提案された BKT 転移において有効な有限サイズスケーリング法 [36][37] について説明する。

第 3 章では、本研究の研究対象である 2 次元 p 状態クロック模型の相転移を説明する。1 節では、2 次元 p 状態クロック模型が自己双対性 [22] を持つことを説明する。2 節ではその結果を利用することで、BKT 方程式から 2 次元 p 状態クロック模型におけるくりこみ群方程式を導出し、その特徴を見る [20]。そして 3 節において、Jose らが導いた p 状態クロック模型を $p \leq 4$ の時と $p \geq 5$ の時に分けて導く。 $p \leq 4$ の時はくりこみ群方程式ではなく、その相転移の性質がよくわかっている模型にマッピングすることで相図を導く [39][40][42]。4 節において、それに反する最近の数値計算結果 [48] を紹介する。この問題点を明らかにすることが本研

究の主な目的である。

第4章では、高温展開により helicity modulus を解析的に計算する。1節では具体的な計算について説明し、最近の数値計算で用いられている helicity modulus の高温側での形を具体的に導出する。2節ではその結果と数値計算結果の比較を行い、高温展開により得られた式の正当性を確認するとともに、近年の数値計算結果の解釈に問題があることを示す。

第5章では、BKT 転移に対する Z_p 異方性の効果を見る。この章で得られた結果を、第6章での解析に用いている。1節では、3章において導入した Z_p 異方性の摂動を受けた2次元 XY 模型と2次元 p 状態クロック模型の関係を見る。2節では、2章で説明した BKT 転移における有限サイズスケーリングの式 [36][37] を Z_p 異方性がある場合に拡張する。ここでは、 Z_p 異方性を摂動的に扱うことで、異方性がある場合には helicity modulus に補正項が出てくるとを示し、BKT 転移点近傍で有効な補正項を具体的に導出する。

第6章では、5章で求めた Z_p 異方性の効果を補正項として考慮した BKT 転移における有限サイズスケーリングを行うことにより、2次元 p 状態クロック模型と Z_5 異方性の摂動を加えた2次元 XY 模型における BKT 転移を見る。1節では本章における数値計算法の概略を示した。2節では BKT 転移の場合に適している相関関数の比を用いた転移温度の決定法について述べる。3節から具体的に解析を行い、BKT 転移が生じると考えられる $p = 5, 6$ の場合を扱うことで、 $p = 6$ に比べ $p = 5$ ではスケーリングにずれが生じることを見る。4節では Z_5 異方性中の2次元 XY 模型を扱う。ここでは、異方性が十分大きい場合に helicity modulus が5状態クロック模型での振る舞いを再現するのに対し、有限サイズスケーリングを行うと異方性の影響がほとんど効いてこないことから、有限サイズ系の p 状態クロック模型では helicity modulus の universal jump は BKT 転移であるかどうかを判定する有効な基準とはならないことを示す。これは4章の高温展開による結果とも一貫している。

第 2 章

Berezinskii-Kosterlitz-Thouless 転移

第 1 章で述べたように、相転移には不連続相転移と連続相転移がある。連続相転移の例として 2 次相転移があるが、2 次相転移は通常、自発的対称性の破れを伴い、それにより低温相で秩序変数が有限の値を持ち、高温相 (常磁性相) と区別される。しかし、連続相転移には自発的対称性の破れを伴わない相転移も存在する。その一例が本章で解説する Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 転移である。BKT 転移は 1970 年代に 2 次元古典 XY 模型において初めてその存在が指摘され [15][16]、2 次元 Bose 液体の超流動転移の文脈でも盛んに研究されてきた [32]。BKT 転移は低温におけるスピン波相での渦励起により誘起されるが、低温側と高温側で渦についてのトポロジーが異なることから、トポロジカル相転移とも呼ばれる。BKT 転移は、2 次相転移のような臨界指数ではうまく記述できず、また転移点周りで相関長が指数関数的に極めて急速に発散するという特徴を持つ [17]。ゆえに有限サイズ効果が著しく、加えて対数補正が効いてくること [30] から、実験や数値計算で BKT 転移を解析することが困難であり、その研究の進展が遅れたという経歴がある。このように、BKT 転移は 2 次相転移とは全く異なる特徴を持つ相転移である。以下では、2 次元古典 XY 模型を用い、BKT 転移が起きるメカニズムやその特徴を詳しく見ていく。

2.1 Mermin-Wagner の定理

まず、統計力学における極めて重要な定理を紹介する。

「連続対称性を持つ 1 次元及び 2 次元の系では、対称性が自発的に破れた秩序状態は有限温度では存在できない。」

これは Mermin-Wagner の定理 [14] と呼ばれ、極めて一般的に証明されている。これより、一見すると連続対称性を持つ 1 次元及び 2 次元の系では相転移が起きないように思えるが、以下に見ていくように、対称性が破れない相転移は禁止されていない。そのような相転移として BKT 転移があり、これは $U(1)$ 対称性を持つ 2 次元古典 XY 模型において起きる相転移であ

2.2 XY 模型における高温展開と低温展開

19

る。上記の模型において、高温展開をして得られる高温相と低温展開をして得られる相が異なることから、相転移の存在が示される。またそれは、低温でのスピン波相における渦励起により引き起こされるものである。

2.2 XY 模型における高温展開と低温展開

2次元古典 XY 模型のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}'} = -J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \cos(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'}) \quad (2.1)$$

と書ける。ここでは正方格子を考えており、 $\mathbf{r}$ は正方格子上のサイトの位置を、 $\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle$ は最隣接サイトのペアを表す。また、 $\mathbf{S}_{\mathbf{r}}$ はサイト $\mathbf{r}$ において 2次元平面上を 360 度回転できるスピンを、 $\theta_{\mathbf{r}}$ はその角度を表す。ここでは強磁性である $J > 0$ の場合を考える。

相の性質を良く表す物理量として相関関数があるが、高温展開の方法を用いることで、2次元 XY 模型の高温側での相関関数の振る舞いを知ることができる。詳細は付録 A に譲り結果だけ述べると、高温における相関関数の長距離での振る舞いは

$$G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \sim \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}{\xi}\right) \quad (2.2)$$

となる。 ξ は相関長である。この相関関数の指数関数的な減衰は、常磁性における典型的な振る舞いである。

一方低温においては、系のエネルギーを下げるために、隣同士のスピン間の角度が小さくなる。この時、 $\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'} \ll 1$ であるので、(2.1) のハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \cos(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'}) \sim -J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left\{ 1 - \frac{1}{2}(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'})^2 \right\} \\ &= \frac{J}{2} \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'})^2 + \text{const.} \end{aligned} \quad (2.3)$$

と書ける。定数項は系に影響を及ぼさないので無視することができ、このような近似をスピン波近似と呼ぶ。

次に高温展開の時と同様に、相関関数を計算する。

$$G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \langle \cos(\theta_{\mathbf{r}_1} - \theta_{\mathbf{r}_2}) \rangle = \left\langle e^{i(\theta_{\mathbf{r}_1} - \theta_{\mathbf{r}_2})} \right\rangle \quad (2.4)$$

この期待値を、スピン波近似のハミルトニアン (2.3) を用いて計算する。(2.3) は角度の変数に対して 2 次形式なので、付録 B にあるように多重 Gauss 積分と格子 Green 関数を用いて期

待値 (2.4) を求めることができる。詳細は付録 B に譲り結果のみ述べると、低温における相関関数は

$$G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \left(\frac{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}{a} \right)^{-\frac{T}{2\pi J}} \quad (2.5)$$

となる。 a は格子定数である。相関関数は、系が常磁性にある場合は距離に関して指数関数的に減衰し、秩序相にある場合は減衰しない。一方、(2.5) はべき減衰の形をしているが、これは系がちょうど臨界点上にある時の相関関数の振る舞いである。ここで特筆すべき点は、べきが温度 T に依存していることである。(2.5) はスピン波近似が正しい限り必ず成り立つので、スピン波近似できる低温相では、臨界点が広がっていることになる。固定点ではなく、固定線になっているのである。これを準長距離秩序と呼ぶことがある。スピンの間の角度が長距離にわたって揃っているわけではないが、非常にゆっくりと変化しているのである。

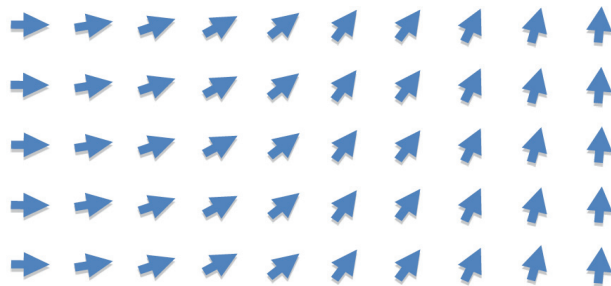


図 2.1 2次元正方格子上的 XY 模型におけるスピン波の様子。

これより、相関関数についての臨界指数 η は

$$\eta = \frac{T}{2\pi J} \quad (2.6)$$

となり、温度に依存することが分かる。

2.3 渦の効果と BKT 転移

2 節において、高温展開と低温展開を用いて相関関数を計算することにより、系は高温側で常磁性相に、低温側で準長距離秩序相にあることを見た。これより明らかに、高温側と低温側の間に自明でない転移点があり、相転移が起きることが推察される。これが渦の効果によって引き起こされることを本節では見ていく [24]。

スピン波近似が成り立つような十分低温側では、スピンの間の角度が長距離にわたって非常にゆっくりと変化しているが、温度を上げていくと、スピンの間の角度が大きく変化する状態も許されるようになる。このような状況では、渦状のスピン配意も生じるようになる。そこで、低温のスピン波近似が成り立つ領域において、渦の発生による効果を考えよう。 x 軸から

2.3 渦の効果と BKT 転移

21

の角度 ϕ を用いて位置 $\mathbf{r}$ にあるスピン変数 $\theta_{\mathbf{r}}$ を

$$\theta_{\mathbf{r}} = n\phi + \text{const.} \quad (2.7)$$

のように表すと、その近辺に渦が生じている状況を表せる。ここで、 n は整数であり、その値によって渦の種類が決まる。例えば $n = 1$ の時は図 (2.2) の左側のような、 $n = -1$ の時には右側のような渦となる。



図 2.2 2次元正方格子上の XY 模型における渦の様子。左側に渦度 +1 の正の渦、右側に渦度 - 1 の負の渦がある。

(2.7) より

$$(\nabla\theta)_r = \frac{\partial\theta}{\partial r} = 0 \quad (2.8)$$

$$(\nabla\theta)_\phi = \frac{1}{r} \frac{\partial\theta}{\partial\phi} = \frac{n}{r} \quad (2.9)$$

となるので、(2.3) のハミルトニアンにおいて格子を連続化して考えると、渦の生成に要するエネルギーは

$$E = \frac{J}{2} \int r dr d\theta (\nabla\theta)^2 = \frac{J}{2} \int \frac{n^2}{r^2} r dr d\theta = n^2 \pi J \log(L/r_0) + E_c \quad (2.10)$$

となる。ここで、 L は系のサイズ (積分の上限)、 r_0 は渦の芯の半径 (積分の下限)、 E_c は芯のエネルギーである。一方、渦の中心を置く場合の数は $(L/r_0)^2$ に比例するから、エントロピーは

$$S = \log \left[\left(\frac{L}{r_0} \right)^2 \cdot \text{const.} \right] \quad (2.11)$$

である。よって、1つの渦の生成による自由エネルギーの変化分は

$$\Delta F = (\pi J - 2T) \log \left(\frac{L}{r_0} \right) + \text{const.} \quad (2.12)$$

となる。

これより、渦の発生による相転移を議論することができる。 $T < T_{BKT} \equiv \pi J/2$ の低温側では、渦の発生により自由エネルギーが増加するので渦の発生は抑えられるが、 $T > T_{BKT}$ の高温側では、渦の発生により自由エネルギーが減少するので、渦が大量に発生し、常磁性状態へと転移する。これを BKT 転移と呼ぶ。ここで注意すべきは、高温側で系はもちろん $U(1)$ 対称性を持っているが、低温側においても系は $U(1)$ 対称性を保ったままであり、それにも関わらず、相転移が起きていることである。これは、自発的対称性の破れにより生じる通常の相転移と明らかに異なっている。

ここではスピン波中の単独の渦励起を考えることにより、BKT 転移が生じることを見た。しかし、実際は渦励起は単独では起こらず、複数個の渦が同時に励起するような状況が起きる。また、これらの渦は相互作用をするために多体問題となり、単純に一体問題を考えて得られた結果が正しいとは限らない。ゆえに次章において、2 次元 XY 模型と同じユニバーサリティクラスを持つと考えられ、より解析のし易い Villain 模型を導入し、この模型から厳密に 2 次元 Coulomb ガス模型の描像が得られることを示す。これにより、BKT 転移が 2 次元 Coulomb ガス模型における電荷の束縛・非束縛転移に対応していることを見る。

2.4 Villain 模型

本節では、2 次元 XY 模型と同じユニバーサリティクラスを持つと考えられる Villain 模型 [54] を導入し、双対変換を行うことにより、Solid-on-Solid 模型 [28]、さらには 2 次元 Coulomb ガス模型へと変形できることを示す [24]。

Villain 模型の分配関数は

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\theta_{\mathbf{r}} \sum_{\{m_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}\}} \exp \left[-\frac{K}{2} \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'} - 2\pi m_{\mathbf{r},\mathbf{r}'})^2 \right] \quad (2.13)$$

と表される。ここで $\mathbf{r}$ は正方格子上的のサイト位置を表し $K \equiv J/T$ である。また、 $\int \mathcal{D}\theta_{\mathbf{r}} = \prod_{\mathbf{r}} \int d\theta_{\mathbf{r}}$ であり、 $m_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}$ は $-\infty$ から ∞ の整数値を取る。この分配関数は、全てのスピンの対しての大局的変換 $\theta \rightarrow \theta + \alpha$ (α は任意の実数) に対して不変であり、また、あるスピンの対しての局所的変換 $\theta_{\mathbf{r}} \rightarrow \theta_{\mathbf{r}} + 2\pi m_{\mathbf{r}}$ ($m_{\mathbf{r}}$ は整数) に対して不変である。

一方、XY 模型の分配関数は、(2.1) より

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\theta_{\mathbf{r}} \exp \left[K \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \cos(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'}) \right] \quad (2.14)$$

のように表され、Villain 模型と同じ対称性を持つことがすぐに確認できる。ここで、XY 模型

2.4 Villain 模型

23

の低温極限で妥当であるスピン波近似を行った

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\theta_{\mathbf{r}} \exp \left[-\frac{K}{2} \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'})^2 \right] \quad (2.15)$$

の分配関数を考える。この分配関数は大局的な $U(1)$ 対称性を持つが、局所の変換 $\theta_{\mathbf{r}} \rightarrow \theta_{\mathbf{r}} + 2\pi m_{\mathbf{r}}$ ($m_{\mathbf{r}}$ は整数) に対して不変でない。

ある系の相転移のユニバーサリティクラスは対称性によって分類できるという相転移の基本的な考え方に従うと、XY 模型と Villain 模型における相転移は同じユニバーサリティクラスに属すると考えられる。ゆえに、XY 模型の相転移を考える際、XY 模型そのものの代わりに、より解析のし易い Villain 模型を用いることが正当化されたと考えられる。

2.4.1 2次元 Coulomb ガス描像

Villain 模型 (2.13) に双対変換を施すと、次の分配関数へと変形することができる (付録 C 参照)。

$$\mathcal{Z} = \text{const.} \cdot \sum_{\{\mu_{\mathbf{r}}\}} \exp \left[-\frac{1}{2K} \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (\mu_{\mathbf{r}} - \mu_{\mathbf{r}'})^2 \right] \quad (2.16)$$

これは、固体表面の滑らかさが温度を変えることによって急激に変化するラフニング転移を記述する、Solid-on-Solid(SOS) 模型 [28] の分配関数と一致している。また、これは Villain 模型の双対表現であるため、元の分配関数 (2.13) と比較すると、Boltzmann factor において K の位置が逆数的になっている。すなわち、元の模型 (2.13) での高温領域が、新たな模型 (2.16) での低温領域に対応している。

さらに、離散変数 μ で表された SOS 模型 (2.16) を、より解析し易くするために、連続変数 ϕ で表すことを考える。Poisson の和公式

$$\sum_{\mu=-\infty}^{\infty} g(\mu) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\phi \tilde{g}(\phi) e^{2\pi i n \phi} \quad (m \text{ は整数}) \quad (2.17)$$

を用いると、(2.16) は

$$\mathcal{Z} = \text{const.} \int \mathcal{D}\phi_{\mathbf{R}} \cdot \sum_{\{m_{\mathbf{R}}\}} \exp \left[2\pi i \sum_{\mathbf{R}} m_{\mathbf{R}} \phi_{\mathbf{R}} - \frac{1}{2K} \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle} (\phi_{\mathbf{R}} - \phi_{\mathbf{R}'})^2 \right] \quad (2.18)$$

となる。ここで $\mathbf{R}$ は双対空間でのサイト位置を表し、 $m_{\mathbf{R}}$ は $-\infty$ から ∞ までの整数値を取る。(2.18) は ϕ について 2 次形式になっているので積分することができ、以下のように格子

Green 関数を用いて表すことができる (付録 B 参照)。

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_{SW} \sum_{\{m_{\mathbf{R}}\}} \exp \left[-2\pi^2 K \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} m_{\mathbf{R}} \mathcal{G}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') m_{\mathbf{R}'} \right] \quad (2.19)$$

ここで、定数項はスピン波の寄与としてまとめてある。格子 Green 関数 $\mathcal{G}(\mathbf{R})$ は赤外発散を含む項 $\mathcal{G}(0)$ と含まない項 $\mathcal{G}'(\mathbf{R})$ に明示的に分けることができ、

$$\mathcal{G}(\mathbf{R}) = \mathcal{G}(0) + \mathcal{G}'(\mathbf{R}) \sim \frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{L}{a} \right) - \frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{|\mathbf{R}|}{a} \right) - \frac{1}{4} \quad (2.20)$$

と表される (付録 B 参照)。ここで L は系のサイズ、 a は格子定数である。この近似は $|\mathbf{R}|$ が大きい所において正当化され、 $\mathcal{G}(0)$ は系のサイズに対して対数的に発散する項である。これより、(2.19) は

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_{SW} \sum_{\{m_{\mathbf{R}}\}} \exp \left[-2\pi^2 K \left\{ \sum_{\mathbf{R}} m_{\mathbf{R}} \right\}^2 \mathcal{G}(0) \right] \exp \left[-2\pi^2 K \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} m_{\mathbf{R}} \mathcal{G}'(\mathbf{R} - \mathbf{R}') m_{\mathbf{R}'} \right] \quad (2.21)$$

と書けるが、 $\mathcal{G}(0)$ が対数発散するので、一つ目の指数関数の項において、 $m_{\mathbf{R}}$ の和が有限の場合は分配関数にほとんど影響を与えないことがわかる。これより、分配関数に効いてくるのは、系全体で渦の符号が 0、すなわち中性条件 $\sum_{\mathbf{R}} m_{\mathbf{R}} = 0$ を満たすものであることがわかる。よって、(2.21) は

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_{SW} \sum'_{\{m_{\mathbf{R}}\}} \exp \left[-2\pi^2 K \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} m_{\mathbf{R}} \mathcal{G}'(\mathbf{R} - \mathbf{R}') m_{\mathbf{R}'} \right] \quad (2.22)$$

と書ける。ここで和のプライム記号は、和が渦の中性条件を満たすもののみ取ることを示している。 $\mathcal{G}'(0) = 0$ に注意し、 $\mathcal{G}'(\mathbf{R} - \mathbf{R}')$ の具体系を代入すると、

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_{SW} \sum'_{\{m_{\mathbf{R}}\}} \exp \left[\frac{\pi^2 K}{2} \sum_{\mathbf{R} \neq \mathbf{R}'} m_{\mathbf{R}} m_{\mathbf{R}'} + \pi K \sum_{\mathbf{R} \neq \mathbf{R}'} m_{\mathbf{R}} \ln \left(\frac{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|}{a} \right) m_{\mathbf{R}'} \right] \quad (2.23)$$

となるが、さらに中性条件を用いて

$$0 = \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} m_{\mathbf{R}} m_{\mathbf{R}'} = \sum_{\mathbf{R} \neq \mathbf{R}'} m_{\mathbf{R}} m_{\mathbf{R}'} + \sum_{\mathbf{R}} m_{\mathbf{R}}^2 \quad (2.24)$$

と書けることから、(2.23) は

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_{SW} \sum'_{\{m_{\mathbf{R}}\}} \exp \left[-\frac{\pi^2 K}{2} \sum_{\mathbf{R}} m_{\mathbf{R}}^2 + \pi K \sum_{\mathbf{R} \neq \mathbf{R}'} m_{\mathbf{R}} \ln \left(\frac{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|}{a} \right) m_{\mathbf{R}'} \right] \quad (2.25)$$

2.4 Villain 模型

25

となる。ここで $m_{\mathbf{R}}$ を位置 $\mathbf{R}$ に存在する電荷だと考えると、指数関数の中の第 1 項が電荷のポテンシャル項であり、第 2 項が電荷同士の相互作用項の形になっている。2 次元において電荷の相互作用は対数の形で現れるので、この模型はまさに 2 次元 Coulomb ガス模型と等価である。さらに、フガシティーと呼ばれる電荷の発生を制御する変数を導入すると

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_{SW} \sum_{\{m_{\mathbf{R}}\}}' \exp \left[\ln y \sum_{\mathbf{R}} m_{\mathbf{R}}^2 + \pi K \sum_{\mathbf{R} \neq \mathbf{R}'} m_{\mathbf{R}} \ln \left(\frac{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|}{a} \right) m_{\mathbf{R}'} \right] \quad (2.26)$$

と表せる。ただし、

$$y = y_0 e^{-\frac{\pi^2 K}{2}} \quad (2.27)$$

$$y_0 = e^{-\mu K} \quad (2.28)$$

であり、 μ が化学ポテンシャル、 y_0 がフガシティーである。これより、我々は 2 次元 Villan 模型が厳密に 2 次元 Coulomb ガス模型にマッピングできることを示すことができた。以下、Coulomb ガス描像を用いて、低温側と高温側で異なる相にあることを示し、この相転移が BKT 転移の物理的描像に対応していることを見ていく。

低温相

まず低温相、すなわち K が十分大きい場合を考える。この時、(2.27) より $y \ll 1$ なので、 $\ln y \rightarrow -\infty$ となる。(2.26) の渦の分配関数の指数関数内の第 1 項を見てみると、 $m_{\mathbf{R}}^2$ の和が大きい場合の寄与はほとんど 0 であり、分配関数に影響を及ぼさないことが分かる。ゆえに低温において、電荷の発生はほとんどないと考えられる。さらに中性条件によって、正負の電荷が発生したとして、指数関数内の第 2 項の電荷の相互作用の項を見てみると、低温で $K \gg 1$ なので、 $|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|$ が大きい場合の寄与はほとんど 0 であり、分配関数に影響を及ぼさないことが分かる。よって電荷同士の距離は小さい、すなわち正負の電荷には強い引力が働き、両者は強く束縛され、電荷の対として存在していることが分かる。よって、低温において、系は電荷の発生が押さえられ、電荷は対として存在する相にあることがわかる。この相は電荷が全く存在していない場合とトポロジ的に同等である。

高温相

次に高温相、すなわち K が十分小さい場合を考える。この時、(2.27) より $y \sim 1$ なので、 $\ln y \rightarrow 0$ となる。指数関数内の第 1 項を見てみると、 $m_{\mathbf{R}}^2$ の和が大きかろうが小さかろうが、分配関数への寄与はほとんど変わらないことが分かる。ゆえに高温において、電荷が大量に発生することが許されると考えられる。さらに、指数関数内の第 2 項の電荷の相互作用の項を見てみると、低温で $K \ll 1$ なので、 $|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|$ が大きかろうが小さかろうが分配関数への寄与はほとんど変わらないことが分かる。よって電荷同士の相関は弱く、電荷はほとんど自由に存在

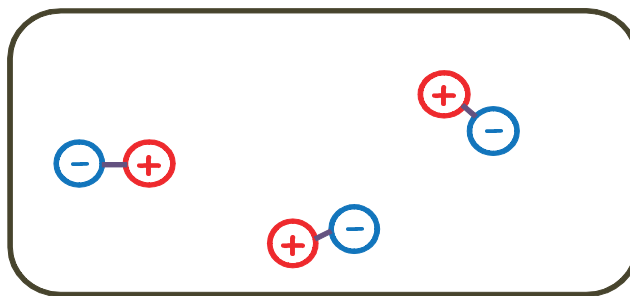


図 2.3 2 次元 Coulomb ガス描像での低温相の様子。低温では電荷の発生が抑制され、さらに正負の電荷には強い引力が働くので両者は強く束縛され、電荷の対として存在していることが分かる。

していることが分かる。よって、高温において、系は電荷が大量に発生し、電荷はほとんど自由に存在する相にあることがわかる。この相は電荷が全く存在していない場合とトポロジ的に異なっている。

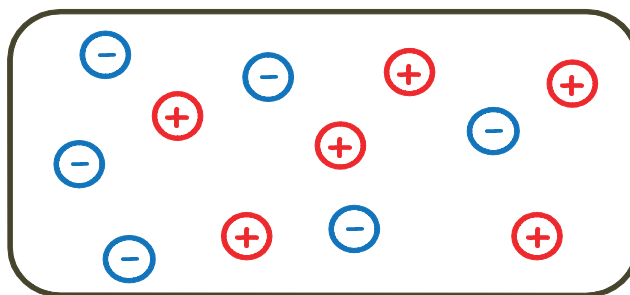


図 2.4 2 次元 Coulomb ガス描像での高温相の様子。高温では電荷の発生が促進され、さらに電荷同士の相関は弱いために電荷はほとんど自由に存在していることが分かる。

以上、低温相と高温相の考察により、2 次元 Coulomb ガスモデルでは、低温での電荷がほとんど存在せず、対として存在する相から、高温での電荷が大量に発生し、ほとんど自由に存在する相への相転移が生じると考えられる。これが BKT 転移の物理的描像である。

2.5 くりこみ群による BKT 転移の解析

前節では、2 次元 XY 模型と同じユニバーサリティクラスに属すると考えられる Villain 模型を 2 次元 Coulomb ガスモデルにマッピングすることで、BKT 転移が電荷の束縛・非束縛相転移であることを見た。本節では、くりこみ群による解析を行うことにより、より定量的に BKT 転移を解析していく [26]。

2.5 くりこみ群による BKT 転移の解析

27

2.5.1 BKT 方程式の導出

これまでに我々は、BKT 転移がスピン波中の渦励起により誘起される相転移であることを見てきた。よって、渦の影響も考慮した相関関数を考えることで、BKT 転移を記述することができると思われる。ここで、スピンが作る場 $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ を考えると、スピン波の場合は $\nabla\phi(\mathbf{r})$ 、渦の場合は $\nabla \times \boldsymbol{\psi}(\mathbf{r})$ と表すことができるので

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \nabla\phi(\mathbf{r}) + \nabla \times \boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}) \quad (2.29)$$

と表現することができる。ただし、 ϕ はスカラーポテンシャルであり、 $\boldsymbol{\psi}$ は系が存在する平面に垂直な成分 ψ のみを持つベクトルポテンシャルである。

$\mathbf{u}(\mathbf{r})$ の相関関数として

$$\langle \mathbf{u}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{u}(0) \rangle = \langle \nabla\phi(\mathbf{r}) \cdot \nabla\phi(0) \rangle + \langle (\nabla \times \boldsymbol{\psi}(\mathbf{r})) \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi}(0)) \rangle \quad (2.30)$$

を考える。ただし、 $\langle \nabla\phi \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi}) \rangle$ の項は部分積分により消えるので、はじめから取り除いている。この相関関数はスピン波中の渦励起を考慮したハミルトニアンを用いて付録 D のように計算することができ、(2.30) を実空間で積分したものは

$$\frac{2}{K_R} = \frac{2}{K} + \frac{(2\pi)^4}{a^4} \left. \frac{\langle m_{\mathbf{k}} m_{-\mathbf{k}} \rangle}{k^2} \right|_{\mathbf{k}=0} \quad (2.31)$$

となる。ただし、 K_R は渦も考慮した場合の実行的な逆温度である。

我々は系の長波長 (低エネルギー) の振る舞いに興味があるので、 $m_{\mathbf{k}}$ を k について展開し、低次の項を考える。 $k \ll 1$ の時、 k について 4 次以上の高次の項は十分小さいので

$$\langle m_{\mathbf{k}} m_{-\mathbf{k}} \rangle \sim A_0 + A_1 k^2 \quad (2.32)$$

と表せる。ただし

$$A_0 = \langle m_{\mathbf{k}} m_{-\mathbf{k}} \rangle|_{\mathbf{k}=0} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{R} \langle m_{\mathbf{R}} m_0 \rangle \quad (2.33)$$

$$A_1 = \frac{1}{4} \nabla_{\mathbf{k}}^2 \langle m_{\mathbf{k}} m_{-\mathbf{k}} \rangle|_{\mathbf{k}=0} = -\frac{1}{4(2\pi)^2} \int d\mathbf{R} R^2 \langle m_{\mathbf{R}} m_0 \rangle \quad (2.34)$$

である。ここで、系の中性条件 $\int d\mathbf{R} m_{\mathbf{R}} = 0$ を考えると、 $A_0 = 0$ となることが分かる。次に A_1 を導くために、2 次元 Coulomb ガス描像の分配関数 (2.26) を用いて、 $\langle m_{\mathbf{R}} m_0 \rangle$ を求める。

$$\begin{aligned} \langle m_{\mathbf{R}} m_0 \rangle &= \frac{1}{Z} \sum'_{\{m_{\mathbf{R}}\}} m_{\mathbf{R}} m_0 \exp \left[\pi K \sum_{\mathbf{R}' \neq \mathbf{R}''} m_{\mathbf{R}'} \ln \left(\frac{|\mathbf{R}' - \mathbf{R}''|}{a} \right) m_{\mathbf{R}''} + \ln y \sum_{\mathbf{R}'} m_{\mathbf{R}'}^2 \right] \\ &= \frac{1}{Z} \sum'_{\{m_{\mathbf{R}}\}} m_{\mathbf{R}} m_0 \exp \left[2\pi K m_{\mathbf{R}} \ln \left(\frac{R}{a} \right) m_0 + \ln y (m_{\mathbf{R}}^2 + m_0^2) \right] \end{aligned} \quad (2.35)$$

となる。ここではスピン波近似が妥当である領域での渦の効果を考えたいので、低温極限 $K \gg 1$ を考える。この時、(2.27) より $y \ll 1$ すなわち $\ln y \rightarrow -\infty$ となる。この条件下では渦の和の中で重要なものは $m = 0, \pm 1$ である。最低次の項まで考えることにすると、分母については渦が全くない場合が重要となり、1 となる。分子については $m_R = 0$ または $m_0 = 0$ の項は消えるので、中性条件も考えると、最低次の項は $m_R = 1, m_0 = -1$ の場合となる。ゆえに、(2.35) は

$$\langle m_R m_0 \rangle \sim \frac{-2 \exp[-2\pi K \ln(R/a)] y^2}{1} = -2y^2 \left(\frac{R}{a}\right)^{-2\pi K} \quad (2.36)$$

となる。これと (2.34) より、(2.31) は

$$\begin{aligned} K_R^{-1} &= K^{-1} + 4\pi^3 y^2 \int_a^\infty \frac{dR}{a} \left(\frac{R}{a}\right)^{3-2\pi K} + O(y^4) \\ &= K^{-1} + 4\pi^3 y^2 \int_1^\infty dR R^{3-2\pi K} + O(y^4) \end{aligned} \quad (2.37)$$

となる。ただし、右辺第2式では $R \rightarrow R/a$ と定義し直した。

式 (2.37) より、我々は BKT 転移のくりこみ群方程式を得ることができる。まず、 R の積分範囲 $1 \leq R \leq b$ ($b = 1 + dl$) について部分和を取ると

$$\int_1^b dR R^{3-2\pi K} = \frac{b^{4-2\pi K} - 1}{4 - 2\pi K} \sim dl \quad (2.38)$$

となるので、(2.37) は

$$K_R^{-1} = K^{-1} + 4\pi^3 y^2 dl + 4\pi^3 y^2 \int_b^\infty dR R^{3-2\pi K} \quad (2.39)$$

となる。ここで、スケール変換として積分変数を $bR \rightarrow R$ と変換すると

$$K_R^{-1} = (K')^{-1} + 4\pi^3 (y')^2 \int_1^\infty dR R^{3-2\pi K} \quad (2.40)$$

となる。ただし

$$(K')^{-1} = K^{-1} + 4\pi^3 y^2 dl \quad (2.41)$$

$$y' = y + (2 - \pi K)y dl \quad (2.42)$$

である。これより、 K と y についてのくりこみ群方程式

$$\frac{dK^{-1}}{dl} = 4\pi^3 y^2 \quad (2.43)$$

$$\frac{dy}{dl} = (2 - \pi K)y \quad (2.44)$$

2.5 くりこみ群による BKT 転移の解析

29

を得る。さらに、変数変換

$$2 - \pi K \rightarrow x \quad (2.45)$$

$$4\pi y \rightarrow y \quad (2.46)$$

を行い、転移点近傍では $x, y \ll 1$ であることから x, y について最低次の項まで取ると、式 (2.43)、(2.44) は

$$\frac{dx}{dl} = y^2 \quad (2.47)$$

$$\frac{dy}{dl} = xy \quad (2.48)$$

と表せる。これが BKT 転移におけるくりこみ群方程式である。

2.5.2 くりこみの流れ

BKT 方程式 (2.47)、(2.48) は解析的に解くことができ、その解は

$$x^2 - y^2 = \text{const.} \quad (2.49)$$

となる。BKT 転移点では $x = y = 0$ なので、転移点に相当する解は $y = \pm x$ である。BKT 転移点より低温側の BKT 相では渦の効果はくりこまれて最終的に 0 になるので、BKT 方程式からくりこみの流れを考えると、BKT 転移に相当するのは $y = -x$ である。以上の考察により得られる BKT 転移におけるくりこみの流れを図 (2.5) に示した。

これより、BKT 転移では 2 種類の相が存在することが分かる。まず高温側の常磁性相であるが、これは図 (2.5) において白色の領域に対応する。この相では、くりこむに従い x, y ともに大きくなる、すなわち渦の効果はどんどん大きくなっていき、高温極限にある自明な固定点へと向かっていく。すなわち、系は常磁性相にある。一方、図 (2.5) において赤色のついた領域は、低温側の BKT 相に対応する。この相では、くりこむにつれて y は小さくなっていき、最終的に 0 になる。すなわち、BKT 相では渦の効果が消えるのである。さらに重要な点は、くりこんだ先で行きつく x の値が初期条件に依存している点である。これは低温側では固定点が拡がっており、固定線になっていることに対応している。ここから、第 2 節で見たように、低温側で臨界点がつながっているという予想が正しいことが確認できる。

2.5.3 BKT 転移の性質

次に、転移点付近での物理量の特性を見る。転移点では $x^2 - y^2 = 0$ が成り立つので、転移点より少し上の温度では

$$x^2 - y^2 = -c^2 t \quad \left(t = \frac{T - T_{KT}}{T_{KT}} \right) \quad (2.50)$$

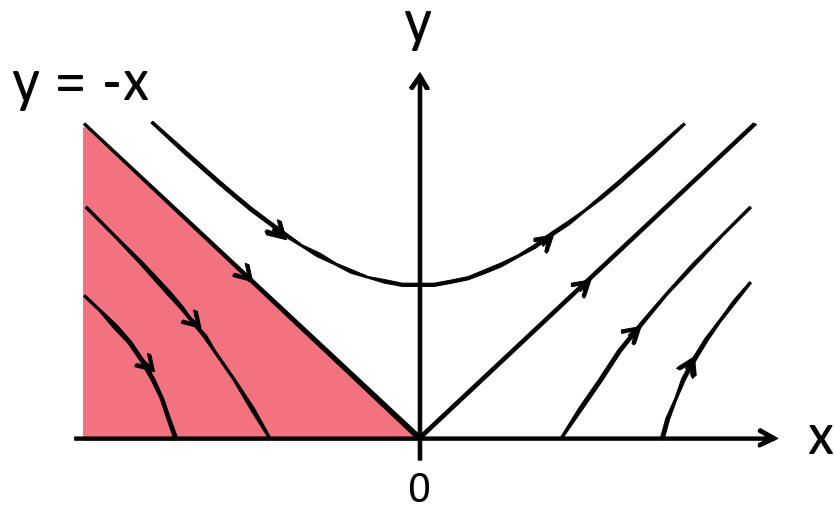


図 2.5 BKT 転移におけるくりこみの流れ。白色の領域 (常磁性相) ではくりこみを繰り返すと渦の効果を表す y が大きくなっていくのに対し、赤色の領域 (BKT 相) では渦の効果が無くなる様子が分かる。また、BKT 相では $x \leq 0$ 、 $y = 0$ に固定線が存在していることも窺える。

が成り立つ。ただし c は実定数である。この時、 x と l の関係を

$$l = l_0 + \frac{1}{c\sqrt{t}} \tan^{-1} \frac{x}{c\sqrt{t}} \quad (2.51)$$

と解析的に求めることができる。くりこみを繰り返すと $x \rightarrow \infty$ となるので、 $\tan^{-1} \rightarrow \frac{\pi}{2}$ に向かっていく。よって、くりこみを繰り返して十分大きくなった所を Λ とすると

$$\Lambda = l_0 + \frac{\pi}{2c\sqrt{t}} \quad (2.52)$$

と書ける。ここで、元の系での相関長 ξ とスケール b でのくりこみ変換後の相関長 ξ' が $\xi' = \xi/b$ と書けるので、無限小変換 $b = 1 + dl$ による変換を考えると

$$\frac{d\xi}{dl} = -\xi \quad (2.53)$$

という、 ξ についてのくりこみ群方程式を得ることができる。これを解くと $\xi \propto e^{-l}$ という解が得られる。チルダの記号は、この相関長がくりこみを繰り返した後の系におけるものであることを表す。よって、くりこみのサイズが Λ となった時、元の系での相関長は

$$\xi \sim e^{\Lambda} \propto \exp\left(\frac{\pi}{2c\sqrt{t}}\right) \quad (2.54)$$

2.6 BKT 転移における有限サイズスケーリング

31

となる。これより、高温側から転移点に近づいていくと相関長が指数関数的に発散することが分かる。これは 2 次相転移におけるべき的な発散と比べて極めて強いため、有限サイズ系での数値計算を行う際には有限サイズ効果に十分注意しなければならない。

次に、BKT 転移における自由エネルギーの特異性を見る。スケーリング則は相関長を用いて $f = b^{-d}g(b/\xi)$ と表せるが、 $\xi = b$ とすると、

$$f = \xi^{-d}g(1) \sim \exp\left(-\frac{\pi}{c\sqrt{t}}\right) \quad (2.55)$$

となる。第 3 式では $d = 2$ を用いた。この式より、BKT 転移では自由エネルギーの特異性が極めて弱く、何回でも微分可能であることがわかる。これより、BKT 転移は実験や数値計算において観測しづらいこと、また、例えば比熱のような自由エネルギーの 2 階微分が不連続、または発散するような 2 次相転移とは全く異なる相転移であることがわかる。

helicity modulus の universal jump

さらに特筆すべき点として、図 (2.6) のように、BKT 転移点において物理量 helicity modulus がユニバーサルジャンプをするという特徴がある [27][32]。helicity modulus は系に対して捻り境界条件を加えた時の自由エネルギー増加分に関わる物理量である。^{*1}さらにユニバーサルジャンプとは、低温から転移点 T_{BKT} に近づいて行った時、転移点において熱力学極限で helicity modulus が $2T_{BKT}/\pi$ から 0 へと不連続に跳ぶ現象のことである。この詳細については付録 E を参照されたい。このように、helicity modulus は BKT 転移の観測に適しているが、有限サイズ系では跳びが鈍ってしまうという問題がある。

2.6 BKT 転移における有限サイズスケーリング

前節で見たように、BKT 転移は有限サイズ系において数値計算で観測することは原理的に非常に困難である。しかし、もともと 2 次相転移の場合も、有限サイズ系で特異性が鈍ってしまうような困難があり、それをうまく回避する方法として有限サイズスケーリング法があった。この方法はそのままでは BKT 転移の場合に用いることができないが、BKT 転移特有の有限サイズスケーリングの手法が原田、川島により開発された [36][37]。本節では、それについて解説する。

BKT 転移におけるくりこみ群方程式は式 (2.47)、(2.48) のように書けたが、前章で扱った helicity modulus (以降、 Υ と表す) を用い、スケーリング変数 x を

$$x = \pi K \Upsilon - 2 \quad (2.56)$$

^{*1} 本研究において、物理量 helicity modulus は極めて重要な位置づけにあり、その定義の仕方自体に微妙な問題を含むので、その詳細は第 4 章で述べる。

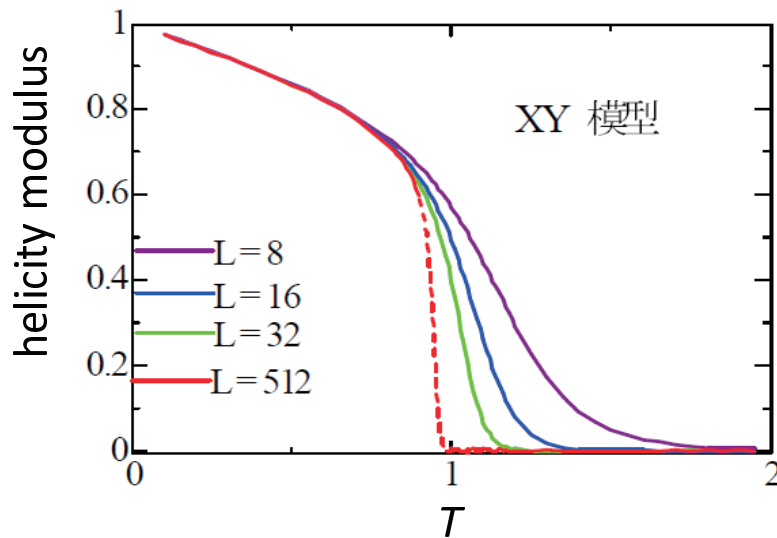


図 2.6 2次元 XY 模型において wolff algorithm[64] を用いて数値計算した helicity modulus の様子。系のサイズが大きい場合 ($L=512$) にユニバーサルジャンプをしている様子がわかる。

のように定義することもできる (ただし、 $K = J/T$)。なぜならば、helicity modulus は転移点において

$$\lim_{T \rightarrow T_{KT}-0} \Upsilon(T) = \frac{2T_{KT}}{\pi} \quad (2.57)$$

を満たすからである。これを用いると、BKT 転移におけるくりこみ群方程式は

$$\frac{dx}{dl} = -y^2 \quad (2.58)$$

$$\frac{dy}{dl} = -xy \quad (2.59)$$

と表せる。この微分方程式を解くと、

$$x = \begin{cases} \sqrt{|\Delta|} \coth(\sqrt{|\Delta|}l) & (K > K_{KT}) \\ \sqrt{|\Delta|} \cot(\sqrt{|\Delta|}l) & (K < K_{KT}) \end{cases} \quad (2.60)$$

ただし、

$$\Delta = a(K - K_{KT}) \quad (2.61)$$

$$l = \log(L/L_0) \quad (2.62)$$

である (a は定数)。よって、 K の値に関わらず、これらの変数は

$$x = l^{-1} f(l^2 \Delta) \quad (2.63)$$

2.6 BKT 転移における有限サイズスケーリング

33

という式を満たすことがわかる。これが BKT 転移におけるスケーリングの式である。ところで、2 次転移の場合の有限サイズスケーリングの式は

$$x = L^w g(L^{1/\nu} \Delta) \quad (2.64)$$

と書けるのであった。両者を比較すると、スケーリングの式の形が異なり、更に BKT 転移においては長さのスケールが $\log$ で効いていることが分かる。これによって、BKT 転移での $\log$ 補正の効果を上手く取りこんでいるのである。

次の図は、BKT 転移が起きること知られている、2 次元量子 $S = \frac{1}{2}$ XY 模型における BKT 転移の有限サイズスケーリングを行った様子である。このように、うまくスケーリング

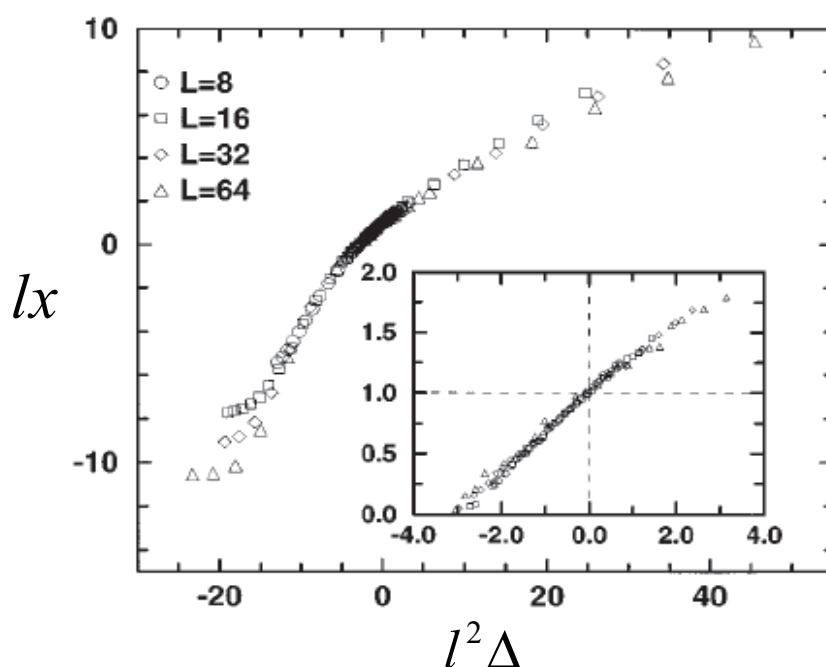


図 2.7 2 次元量子 $S = \frac{1}{2}$ XY 模型における BKT 転移の有限サイズスケーリング [37]。系のサイズに依らず 1 つの曲線上に乗っている様子が分かる。さらに挿絵を見ると、転移点近傍において右側より右側の方がうまくスケーリングを行えていることがわかる。

を行えていることがわかる。さらに注意深く見てみると、右下の挿絵において、転移点近傍では右側に比べて左側の方がうまくスケーリングを行えている様子が窺える。これは BKT 方程式でスケーリング変数の最低次の項しか考慮していないため、転移点の右側 (低温側) で若干のずれが生じているためだと考えられる。しかし、高次の項まで取り込むと解析的に有限サイズスケーリングの式を求めることは困難であり、最低次までで図 (2.7) のようにうまくスケーリングを行うことができれば十分である。以上より我々は、このスケーリングの式を用い、調べている系において BKT 転移が生じているかどうかを判別していく。

第 3 章

2 次元 p 状態クロック模型の相転移

前章では、連続相転移の中でも 2 次相転移とは全く異なる BKT 転移が起きるメカニズムとその特徴を調べ、またそれが $U(1)$ 対称性を持つ 2 次元 XY 模型において生じることを見た。それでは、この $U(1)$ 対称性を落としていく、すなわち系が Z_p 対称性を持つとき相転移はどのようなであろうか？ $p = 2$ のときは 2 次元イジング模型になるので厳密解が存在し、その相転移は秩序相から常磁性相への 2 次相転移である。ゆえに、 p の値が小さいときはイジング的な 2 次相転移が起きることがナイブには期待される。一方、 $p \rightarrow \infty$ の時は 2 次元 XY 模型となるので、前章で見たようように低温側に BKT 相が広がっており、BKT 転移を起こし高温側で常磁性相がある相図となる。よって、 p の値が大きいときは XY 的な相図になることが予想される。

以上の簡単な考察により、 Z_p 対称性を持つ系の相転移には p 依存性があり、 p の値を 2 から大きくしていったときにある p_c で BKT 相が現れるようになると考えられる。実はそれが $p_c = 5$ であることが Jose, Kadanoff らによってくりこみ群を用いて求められ、 $p \geq 5$ では低温の秩序相と高温の常磁性相の間に BKT 相が存在すると考えられている。本章では Jose, Kadanoff らの方法 [20] に従い、2 次元 p 状態クロック模型と同じ対称性を持つ、 Z_p 異方性の摂動を加えた 2 次元 XY 模型を出発点に取り、双対性とくりこみ群を用いることによりその相図を求める。そして、本研究において解決すべき課題である、その相図に疑問を呈する最近の数値計算結果についても述べる。

3.1 2 次元 p 状態クロック模型における双対性

Z_p 対称性を持つ基本的な模型として p 状態クロック模型がある。そのハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \cos(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'}) \quad (3.1)$$

3.1 2次元 p 状態クロック模型における双対性

35

と表される。ここで、 $\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle$ は最隣接サイトの組を表し、 $\theta_{\mathbf{r}} = 2\pi n_{\mathbf{r}}/p$ ($n_{\mathbf{r}} = 0, 1, \dots, p-1$) である。このハミルトニアンは、全てのスピンに対しての変換 $\theta \rightarrow \theta + 2\pi n/p$ について不変であり、かつ、あるサイト $\mathbf{r}$ にあるスピンに対しての変換 $\theta_{\mathbf{r}} \rightarrow \theta_{\mathbf{r}} + 2\pi N$ (N は整数) について不変である。ゆえに、この系は大局的な Z_p 対称性と局所的なゲージ対称性を持つ。ここで、次のような模型を考える。

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \cos(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'}) - \lambda_p \sum_{\mathbf{r}} \cos(p\theta_{\mathbf{r}}) \quad (3.2)$$

ここではスピン変数は連続的、すなわち $0 \leq \theta_{\mathbf{r}} < 2\pi$ である。この模型も大局的な Z_p 対称性と局所的なゲージ対称性を持つことがすぐに確認できる。ゆえに (3.1) と (3.2) のハミルトニアンは同じ対称性を持つので、それらの相転移は同じユニバーサリティクラスに属すると考えられる。さらに 2 章で見たように、XY 模型と Villain 模型は同じユニバーサリティクラスに属すると考えられるので、以下の分配関数で表される模型

$$\mathcal{Z}_p = \int \mathcal{D}\theta_{\mathbf{r}} \sum_{\{m_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}\}} \exp \left[-\frac{K}{2} \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'} - 2\pi m_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'})^2 + 2y_p \sum_{\mathbf{r}} \cos(p\theta_{\mathbf{r}}) \right] \quad (3.3)$$

も、 p 状態クロック模型と同じユニバーサリティクラスに属すると考えられる。ただし、

$$y_p = \frac{\beta \lambda_p}{2} \quad (3.4)$$

である。ここで、 y_p が十分小さい時、 $n_{\mathbf{r}} = 0, \pm 1$ の寄与が重要になることから

$$\sum_{\{n_{\mathbf{r}}\}} \exp [ipn_{\mathbf{r}}\theta_{\mathbf{r}} + n_{\mathbf{r}}^2 \ln y_p] \sim \exp [2y_p \cos(p\theta_{\mathbf{r}})] \quad (3.5)$$

であることを用い、また、2 章で導入したフガシティーの項を (2.26) のように導入すると、 p 状態クロック模型の相転移と同じユニバーサリティクラスに属する模型の分配関数は

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_p = \int \mathcal{D}\theta_{\mathbf{r}} \sum_{\{m_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}\}} \sum_{\{n_{\mathbf{r}}\}} \exp \left[-\frac{K}{2} \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'} - 2\pi m_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'})^2 + ip \sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}} \theta_{\mathbf{r}} \right. \\ \left. + \ln y_p \sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}}^2 + \ln y_0 f \left(\sum_{\mathbf{R}} m_{\mathbf{R}}^2 \right) \right] \end{aligned} \quad (3.6)$$

と表すことができる。ただし、関数 $f(S(\mathbf{R}))$ は双対空間で表された関数 $S(\mathbf{R})$ を実空間での表現に変換する関数である (またはその逆)。

ところで、ここまでは実空間での Villain 模型を出発点に考えてきたが、以下のような双対空間での Villain 模型

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\phi_{\mathbf{R}} \sum_{\{n_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'}\}} \exp \left[-\frac{1}{2K} \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle} (\phi_{\mathbf{R}} - \phi_{\mathbf{R}'} - pn_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'})^2 \right] \quad (3.7)$$

を考えてみる。ここで、実空間での Villain 模型の分配関数 (2.13) との違いについて述べる。まず温度については、2章4節の Villain 模型の双対変換の際も見たように、実空間と双対空間では温度が逆数的な位置にくる。次に局所的なゲージ対称性を回復するための項について、実空間では $2\pi m_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}$ であるが、双対空間では $pn_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}$ となっている。この双対空間での模型に対し双対変換を行い、実空間での模型に変形することを考える。2章4節で行った場合と同様の考察により、 $\mathbf{r} \leftrightarrow \mathbf{R}$ 、 $\theta \leftrightarrow \phi$ 、 $m \leftrightarrow n$ 、 $K \leftrightarrow 1/K$ 、 $2\pi \leftrightarrow p$ の対応に注意して、(2.18) のアナロジーより

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\theta_{\mathbf{r}} \sum_{\{n_{\mathbf{r}}\}} \exp \left[-\frac{K}{2} \sum_{\langle \mathbf{r},\mathbf{r}' \rangle} (\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'})^2 + ip \sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}} \theta_{\mathbf{r}} \right] \quad (3.8)$$

と変形できる。この (3.7) から (3.8) への双対変換により、重要な知見が得られる。それは、実空間での (3.8) の $ip \sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}} \theta_{\mathbf{r}}$ の項が、双対空間の (3.7) の $\phi_{\mathbf{R}}$ のカップリングの項に影響し、 $-pn_{\mathbf{R}}$ として顔を出すことである。一方、 p 状態クロック模型の分配関数の実空間表現である (3.6) に $ip \sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}} \theta_{\mathbf{r}}$ の項が存在していることを考えると、(3.6) に双対変換を施したとき、分配関数は

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_p = \int \mathcal{D}\phi_{\mathbf{R}} \sum_{\{n_{\mathbf{R},\mathbf{R}'}\}} \sum_{\{m_{\mathbf{R}}\}} \exp \left[-\frac{2}{K} \sum_{\langle \mathbf{R},\mathbf{R}' \rangle} (\phi_{\mathbf{R}} - \phi_{\mathbf{R}'} - pn_{\mathbf{R},\mathbf{R}'})^2 + 2i\pi \sum_{\mathbf{R}} m_{\mathbf{R}} \phi_{\mathbf{R}} \right. \\ \left. + \ln y_0 \sum_{\mathbf{R}} m_{\mathbf{R}}^2 + \ln y_p f \left(\sum_{\mathbf{r}} n_{\mathbf{r}}^2 \right) \right] \end{aligned} \quad (3.9)$$

となることがわかる。この式は (3.6) の双対空間での表現である。(3.6) と (3.9) の両者は $n \leftrightarrow m$ 、 $p\theta_{\mathbf{r}} \leftrightarrow 2\pi\phi_{\mathbf{R}}$ の変数変換の元、

$$K \leftrightarrow \frac{p^2}{4\pi^2 K} \quad (3.10)$$

$$y_0 \leftrightarrow y_p \quad (3.11)$$

のパラメタ変換を行うことで等価な模型となることが確認できる。すなわち、 p 状態クロック模型の分配関数 (3.6) は双対性を持ち、(3.10)、(3.11) のパラメタ変換に対して不変である。この事実を用いて、次節で p 状態クロック模型におけるくりこみ群方程式を求める。

3.2 くりこみ群による p 状態クロック模型の解析

XY 模型におけるくりこみ群方程式 (2.47)、(2.48) は、(3.6) において $y_p = 0$ の場合の相転移を記述するくりこみ群方程式である。ここで、便宜上 (2.47)、(2.48) を

$$\frac{dK}{dl} = -y_0^2 e^{-\pi^2 K} \quad (3.12)$$

$$\frac{dy_0}{dl} = (2 - \pi K)y_0 \quad (3.13)$$

のように、パラメタ K, y_0 について表す。ここで、(3.12)、(3.13) に対して (3.10)、(3.11) のようなパラメタ変換を行うことにより、もう一つのくりこみ群方程式

$$\frac{dK}{dl} = \frac{4\pi^2}{p^2} K^2 y_p^2 e^{-\frac{p^2}{4K}} \quad (3.14)$$

$$\frac{dy_p}{dl} = \left(2 - \frac{p^2}{4\pi K}\right) y_p \quad (3.15)$$

を得る。これは、(3.6) において $y_0 = 0$ の場合の相転移を記述するくりこみ群方程式である。すなわち、元の模型 (3.6) に対して、くりこみ群方程式 (3.12)、(3.13) は Z_p 異方性のない場合の相転移を記述するものであるのに対し、くりこみ群方程式 (3.14)、(3.15) は渦の効果を考えない場合の相転移を記述するものである。しかし実際は、両者の効果を考慮しなければならない。よって、(3.6) の相転移を記述するくりこみ群方程式は

$$\frac{dK}{dl} = -y_0^2 e^{-\pi^2 K} + \frac{4\pi^2}{p^2} K^2 y_p^2 e^{-\frac{p^2}{4K}} \quad (3.16)$$

$$\frac{dy_0}{dl} = (2 - \pi K)y_0 \quad (3.17)$$

$$\frac{dy_p}{dl} = \left(2 - \frac{p^2}{4\pi K}\right) y_p \quad (3.18)$$

となる。この方程式は、 y_0, y_p が十分小さい範囲で最低次まで正しいものであると考えられる。そして、分配関数が (3.6) で表される模型とクロック模型の対称性が同じであることから、両者は同じ相転移を示すと考えられる。よって、(3.16)、(3.17)、(3.18) が p 状態クロック模型におけるくりこみ群方程式であると考えられる。

ここでは y_0 と y_p が相互作用をしないものと仮定しているが、最低次までで他の項が現れないことは対称性の観点から次のように確認できる。まず、模型 (3.3) は $y_p \rightarrow -y_p$ の変換に対して不変である。なぜなら、上の変換を行うと、元の模型 (3.3) の $\cos$ ポテンシャルの山と谷の位置が変化するが、それに対して系の性質は変化しないはずだからである。よって、(3.16)、(3.17)、(3.18) のくりこみ群方程式も $y_p \rightarrow -y_p$ の変換に対して不変でなければならない。こ

のような状況で、くりこみ群方程式に他の項が入る可能性を考える。まず (3.16) について、最低次が2次であるので入る可能性があるのは $y_0 y_p$ に比例する項であるが、この項があると y_p の変換によって方程式が変化してしまう。同様に、(3.17) には y_p に、(3.18) には y_0 に比例する項が入る可能性があるが、これらも y_p の変換によって方程式が変化してしまうことが確認できる。

このように、我々は p 状態クロック模型におけるくりこみ群方程式 (3.16)、(3.17)、(3.18) を得ることができたので、これらの連立微分方程式を解析的に解くことができれば、3つのパラメタ K, y_0, y_p についての3次元空間でのくりこみ群の流れを追うことができ、系の性質を完全に理解することができる。しかし、これらの連立方程式は解析的に解くことが困難であるため、くりこみの流れを追うには数値的に解かざるを得ない。本研究では、数値的解析は他の論文に譲り、次節においてくりこみで行きつく熱力学極限で存在する相についてのみ見ていく。

3.3 2次元 p 状態クロック模型の相図

本節では、 p 状態クロック模型の相図を求める。まず結果を示すと、 p 状態クロック模型の相図は下図のようになる [20]。

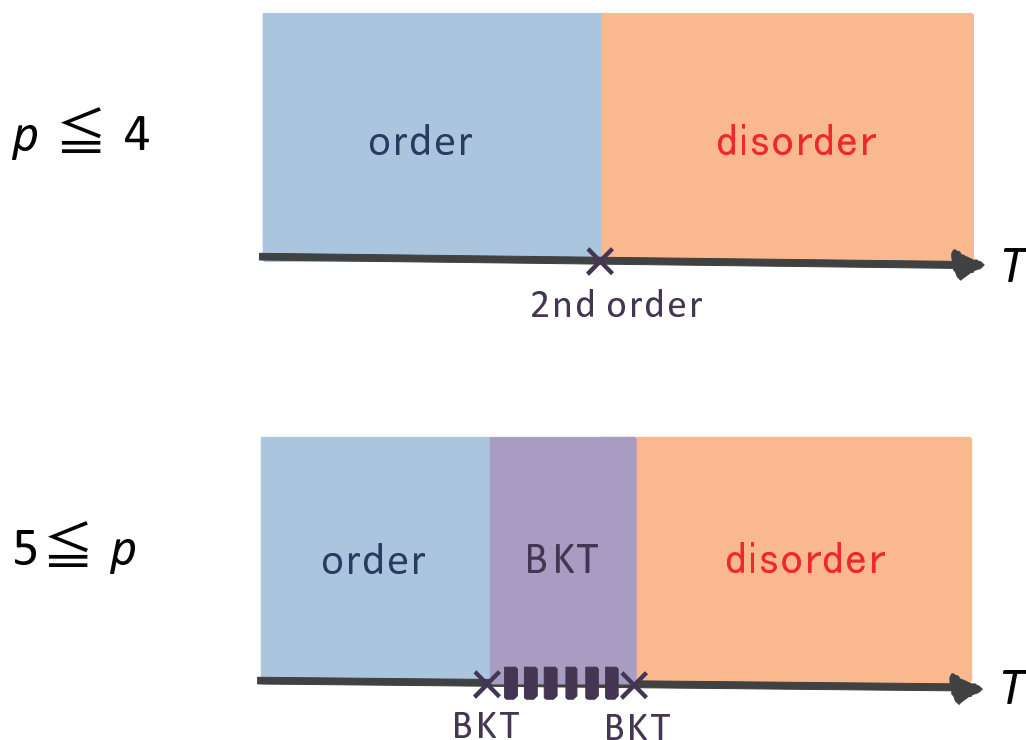


図 3.1 2次元 p 状態クロック模型の相図

3.3 2次元 p 状態クロック模型の相図

39

図 (3.1) に見られるように、 $p \leq 4$ では常磁性相から秩序相への 2 次相転移が起こる。一方、 $p \geq 5$ では常磁性相と秩序相の間に BKT 相が現れ、相転移は高温側、低温側とも BKT 転移となる。以下、前節で求めた p 状態クロック模型におけるくりこみ群方程式を用いることにより、 p 状態クロック模型の相図が図 (3.1) のようになることを見ていく。

3.3.1 $p \leq 4$ の場合

$p \leq 4$ の場合、(3.16)、(3.17)、(3.18) のくりこみ群方程式を用いて相図、相転移のタイプを決定することはできない。しかし、これらの場合にはくりこみ群を用いずとも、その相転移の性質を詳しく調べることができる。

・ $p = 2$

$p = 2$ のとき、クロック模型は明らかに 2 次元イジング模型と一致する。2 次元イジング模型は Onsager により厳密解が求められている [39] ので、その相転移の性質を完全に知ることができる。まず、系には高温側の常磁性相と低温側の秩序相が存在し、臨界温度 $T_c = \frac{2|J|}{k_B \log(1+\sqrt{2})}$ で 2 次相転移が起きる。さらに、比熱が臨界点近傍で対数発散する特徴がある。図 (3.3) に 2 次元イジングの相転移における臨界指数を表す。

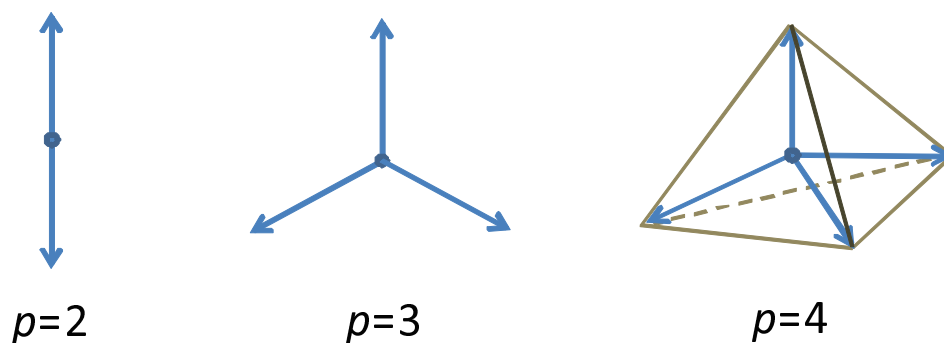
・ $p = 3$

次に $p = 3$ のときを考える。 p 状態クロック模型に似た模型として p 状態 Potts 模型 [40][41] があるが、そのハミルトニアンを示す。

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{n_i, n_j} \quad (3.19)$$

ここで、 $J > 0$ とする。 $\langle i, j \rangle$ は最隣接サイトの組を表し、 $n_i = 1, 2, \dots, p$ である。よって、隣接サイトの状態が異なる場合、そのエネルギーは全て 0 となる。クロック模型との違いは、隣接サイトの状態が異なる場合は全て同じ寄与を与えることである。このような性質から、 p 状態 Potts 模型において各サイトに存在するスピンは、 $(p-1)$ 次元空間で p 方向が対称になる方向を向く。 $p = 2, 3, 4$ の場合を図 (3.2) に示す。

これを見てわかるように、2 状態 Potts 模型はイジング模型と、3 状態 Potts 模型は 3 状態クロック模型と等価である。 p 状態 Potts 模型の相転移は詳しく研究されており、 $p \leq 4$ では連続相転移、 $p \geq 5$ では不連続相転移をすることが知られている [41]。 $p = 3$ の場合、高温側に常磁性相、低温側に秩序相が存在し、臨界温度 $T_c = \frac{2|J|}{k_B \ln(1+\sqrt{3})}$ で 2 次相転移が起きる。また、その臨界指数を図 (3.3) に示す。

図 3.2 p 状態 Potts 模型におけるスピン方向

・ $p = 4$

$p = 4$ のとき、高温展開を用いることにより、 $p = 4$ の時の分配関数は Ising 模型から得られる分配関数の 2 乗で表すことができることが知られている [42]。よって、4 状態クロック模型は Ising 模型の 2 乗、すなわち decoupled Ising 模型に変形することができるので、明らかにその相転移は Ising 模型と同様である。よって、 $p = 2$ と $p = 4$ の相転移のユニバーサリティクラスは等しい。

	α	β	γ	δ	η	ν
2次元 Ising	0	$\frac{1}{8}$	$\frac{7}{4}$	15	$\frac{1}{4}$	1
2次元 3 状態 Potts	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{9}$	$\frac{13}{9}$	14	$\frac{4}{15}$	$\frac{5}{6}$

図 3.3 2次元 Ising 模型と 3 状態 Potts 模型の臨界指数

3.3 2次元 p 状態クロック模型の相図

41

3.3.2 $p \geq 5$ の場合

$p \geq 5$ の場合、(3.16)、(3.17)、(3.18) のくりこみ群方程式を用いて相図、相転移のタイプを決定することができる。この場合、 $p^2/8\pi > 2/\pi$ となるので、

$$\begin{aligned} 0 \leq T_{eff} < \frac{8\pi}{p^2} &\implies y_0 \text{のみ irrelevant} \\ \frac{\pi}{2} < T_{eff} < \frac{8\pi}{p^2} &\implies y_0, y_p \text{ともに irrelevant} \\ \frac{\pi}{2} < T_{eff} &\implies y_p \text{のみ irrelevant} \end{aligned}$$

となる。

まず、 $0 \leq T_{eff} < 8\pi/p^2$ のとき、 $y_0 \rightarrow 0, y_p \rightarrow \infty$ となり、系は秩序相であることが予想される。この時、温度についてのくりこみ群方程式 (3.16) より、くりこむ毎に温度は低温に向かっていくので、くりこみによってパラメタは $T \rightarrow 0, y_0 \rightarrow 0, y_p \rightarrow \infty$ となる。よって、系は秩序相にある。

次に $\pi/2 < T_{eff} < 8\pi/p^2$ のとき、 $y_0 \rightarrow 0, y_p \rightarrow 0$ となるので、渦の効果も異方性の効果もない相、すなわちスピン波近似が正当化される BKT 相にあると予想される。この時、温度についてのくりこみ群方程式 (3.16) より、くりこみによって温度はある固定点に向かっていくことが予想される。すなわち、くりこみによってパラメタは $T \rightarrow T_{KT}, y_0 \rightarrow 0, y_p \rightarrow 0$ となる。また、XY 模型におけるくりこみの流れ同様、初期条件によって最終的に行きつく固定点が異なる、すなわち固定線が存在していると考えられる。よって、系は BKT 相にあり、 $\pi/2 < T_{KT} < 8\pi/p^2$ である。

最後に $\pi/2 < T_{eff}$ のとき、 $y_0 \rightarrow \infty, y_p \rightarrow 0$ となり、系は常磁性相であることが予想される。この時、(3.16) より、くりこむ毎に温度は高温に向かっていくので、くりこみによってパラメタは $T \rightarrow \infty, y_0 \rightarrow \infty, y_p \rightarrow 0$ となる。よって、系は常磁性相にある。

BKT 転移は本来、2次元 XY 模型のように $U(1)$ の連続対称性を持つ系において起きる相転移であった。よって、 Z_p 対称性を持つ p 状態クロック模型において BKT 転移が起きることは、この模型の BKT 相では系は実行的に $U(1)$ 対称性を持っていると考えることもできる。このことを emergent $U(1)$ symmetry と呼ぶこともある。

さらに、XY 模型との関連を考えるため、 $p \rightarrow \infty$ の場合を考える。この時、 $8\pi/p^2 \rightarrow 0$ なので、有限温度では秩序相が存在しない。この時、まさに XY 模型同様の相図を再現する。これは $p \rightarrow \infty$ の時に p 状態クロック模型は XY 模型と一致するはずであるという直観に一致する。

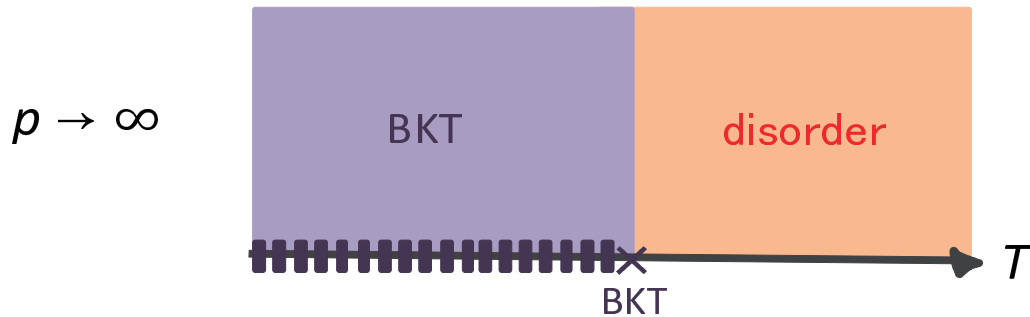


図 3.4 2次元 p 状態クロック模型における $p \rightarrow \infty$ の時の相図。これはまさに 2次元 XY 模型の相図と一致している。

3.4 最近の数値計算結果と問題点

前節でのくりこみ群による解析により、2次元 p 状態クロック模型は $p \geq 5$ において BKT 相が存在すると考えられる。この他にも、Elitzur[21] や野村 [43] による解析的な方面からのアプローチがあり、多くは Jose らの主張と同様の結果を得ている。ここ最近では、Ortiz らによる bond-algebraic 法 [46][47] を用いた研究 [44] があり、ここでも Jose らの主張を支持する結果を得ている。

このように、解析的な方面からのアプローチは多々あるが、BKT 転移の数値計算的な困難もあり、数値計算の方面からの理解は遅れていた。しかし近年、新たな数値計算手法の開発や計算機の発展に伴い、数値計算からのアプローチが可能になってきた。例えば富田らは、彼らの開発した probability-changing cluster algorithm[56] により $p = 6, 8, 12$ の場合に BKT 転移が生じることを支持しており [57]、最近では Borisenko らが種々の物理量を数値計算することにより、 $p = 5$ の場合には BKT 転移が生じることを支持する結果 [45] を得ている。

一方、数値計算方面からは $p \geq 5$ での BKT 転移の存在を疑問視する結果も出ている。その内の 1 つに、BKT 転移における helicity modulus の universal jump に注目した、Baek らによる数値計算の研究 [48] がある。図 (3.5) に $p = 5, 6$ の場合の p 状態クロック模型における helicity modulus の数値計算結果を示す。これを見ると、下図 ($p = 6$) では系のサイズを大きくすると universal jump をする様子が見られるのに対し、上図 ($p = 5$) では系のサイズを大きくした時に jump する様子は見られるが、helicity modulus が有限の値に留まっている。さらに、Baek らは $p = 5$ の Villain 模型においても数値計算を行い、この場合は helicity modulus が universal jump をする様子を確認している。これより彼らは、5 状態クロック模型における相転移は $p = 5$ の Villain 模型における相転移とユニバーサリティクラスが異なり、前者では BKT 転移が生じないことを主張している。

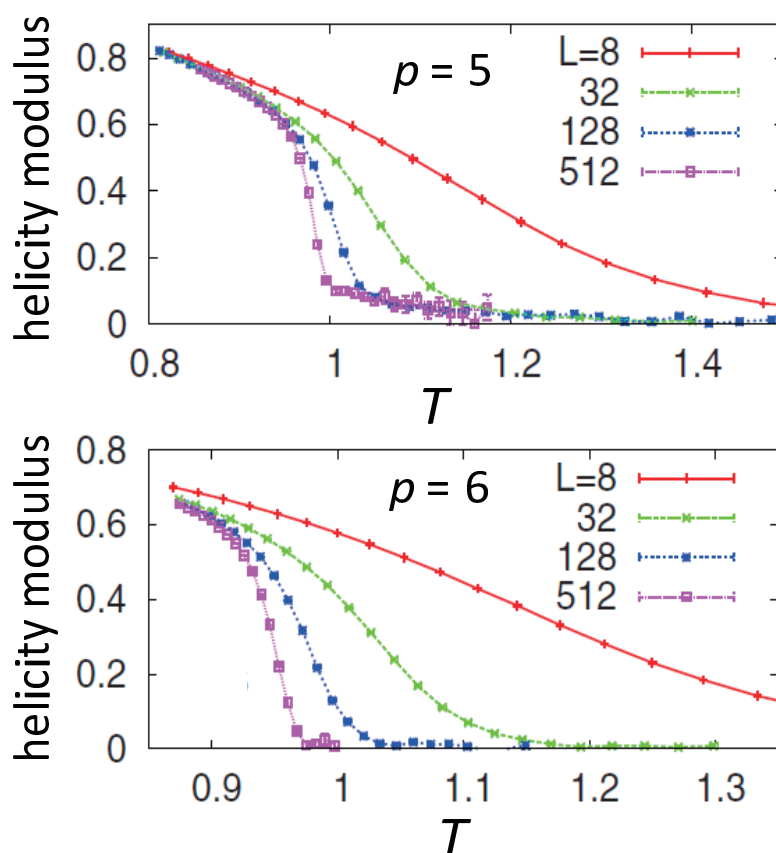


図 3.5 5、6 状態クロック模型における helicity modulus の数値計算結果 [48]。下図 ($p = 6$) では系のサイズを大きくすると universal jump をする様子が見られるのに対し、上図 ($p = 5$) ではその様子が見られないのが分かる。

Jose らの主張と異なる結論をしている研究グループは他にもあり、例えば Lapilli らは p 状態クロック模型における比熱や磁化等の物理量が XY 模型におけるものと等しい時に初めて emergent $U(1)$ symmetry が現れるはずであり、これが BKT 転移における必要条件であるという議論から、 $p \geq 8$ で BKT 転移が現れると主張している [49]。さらに、helicity modulus が universal jump をする時には高次の項 Υ_4 が転移温度において有限値を持つという Minnhagen らによる研究 [33] を参考に、Lapilli らも同様の解析を行い、ここからも $p \leq 7$ では BKT 転移が生じないと主張している [49]。Lapilli らの主張を支持する別の研究グループもあり、Hwing らは Fisher zero approach [51] を用いることで、 $p = 6$ の場合には BKT 転移ではなく 2 次転移が生じると主張している [50]。

以上のように、2 次元 p 状態クロック模型では $p \geq 5$ で BKT 転移が生じるという解析的な方面からの共通認識が、数値計算方面から多くの研究グループによって疑問視されている。しかし、上述の数値計算による研究 [48][49][50] では、共通して有限サイズ効果を十分に考慮し

ていないという問題がある。BKT 転移における相関長の指数関数的発散や対数補正に加えて、 Z_p 異方性が有限サイズ系においてどのように効いてくるかは自明ではなく、それらに十分注意する必要がある。よって本研究では、BKT 転移における有限サイズ効果をうまく扱うために、原田、川島によって開発された BKT 転移における有限サイズスケーリングの式 [36][37] を用いる。さらに、それが Z_p 異方性がある場合にどのように変更されるかを考慮し、 p 状態クロック模型における数値計算結果の解析に用いる。これにより、本研究では、数値計算の方面からの問題に直接解答を与えるべく、主に数値計算により 2 次元 p 状態クロック模型を解析していく。

第 4 章

helicity modulus

4.1 helicity modulus の定義式と計算式

ここでは Fisher らにより提案された、捻りに対する応答量である helicity modulus[34] について議論する。具体的には、helicity modulus は捻りとして系に捻り境界条件を加えた時の自由エネルギー増加分に関わる物理量である。ここでは具体的に、図 (4.1) で表されるような場合、すなわち x 軸方向の長さが L_x 、 y 軸方向の長さが L_y である 2 次元長方形格子に対し、左端のスピンを $\theta = 0$ 、右端のスピンを $\theta = \Delta$ に固定した場合の自由エネルギーを考える。ここで、捻りは系に対して自然に加えられている、すなわち、境界のスピンは本来系で許されている方向のみを向くことができる、と考えるのが自然である。例えば、 p 状態クロック模型では Δ は $2\pi/p$ の整数倍となる。

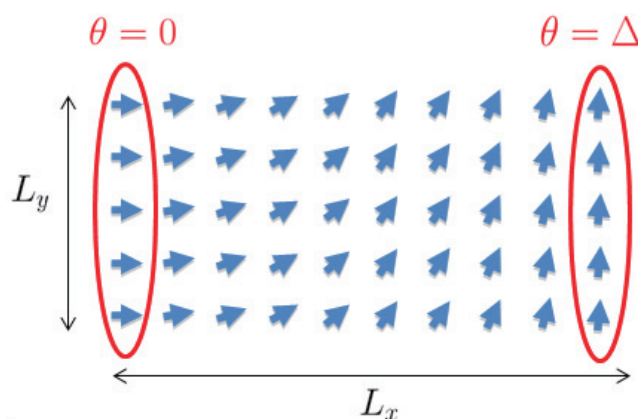


図 4.1 $L_x \times L_y$ の 2 次元長方形格子上的スピンに対し、左端のスピンを $\theta = 0$ 、右端のスピンを $\theta = \Delta$ に固定した様子。

捻りの効果が全体に万遍なく行き渡っていると仮定すると、各格子点における平均的な捻りは Δ/L_x となる。ゆえに捻りに対する応答は Δ/L_x のべき関数となることが期待されるが、

$\Delta \rightarrow -\Delta$ の変換に対して捻りに対する応答は不変なので、 Δ/L_x の奇数次の項は消えることが分かる。よって、捻り境界条件が加わることによる自由エネルギーの増加分は、十分大きな系では最低次までで

$$F(\Delta) - F(0) = \frac{\Upsilon}{2} \int d\mathbf{r} \left(\frac{\Delta}{L_x} \right)^2 = \frac{\Upsilon}{2} \frac{L_y}{L_x} \Delta^2 \quad (4.1)$$

となる。ここで、係数 Υ を helicity modulus と呼ぶことにすると、正方格子の場合 ($L_x = L_y$) には

$$\Upsilon = \frac{2(F(\Delta) - F(0))}{\Delta^2} \quad (4.2)$$

と表せる。以下、正方格子に限り話を進めていく。

式 (4.2) が helicity modulus の定義式 (2 次元正方格子における) であるが、実際に数値計算で捻り境界条件を加えた時の自由エネルギー増加分を求めることは簡単ではない。なので実際上は、系に対して捻りを (1) 無限小の大きさを (2) 大局的に加えるという 2 つの条件の元で、helicity modulus を計算することがしばしば行われる。具体的には、条件 (1) は式 (4.2) の右辺が $F(\Delta)$ の $\Delta = 0$ における 2 階微分になることに対応し、条件 (2) は、例えば 2 次元 XY 模型を考えると、式 (2.1) で表されるハミルトニアンが

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle_x} \cos \left(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'} - \frac{\Delta}{L} \right) \quad (4.3)$$

のように変更されることに対応する。よって、この場合には helicity modulus の計算式として

$$\begin{aligned} \Upsilon^{calc} &= \frac{\partial^2 F(\Delta)}{\partial \Delta^2} \Big|_{\Delta \rightarrow 0} \\ &= \frac{1}{\beta} \left[\frac{1}{Z(\Delta)^2} \left(\frac{\partial Z(\Delta)}{\partial \Delta} \right)^2 - \frac{1}{Z(\Delta)} \frac{\partial^2 Z(\Delta)}{\partial \Delta^2} \right] \Big|_{\Delta \rightarrow 0} \\ &= \frac{1}{L^2} \left\langle \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle_x} \cos(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'}) \right\rangle - \frac{\beta}{L^2} \left\langle \left(\sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle_x} \sin(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'}) \right)^2 \right\rangle \end{aligned} \quad (4.4)$$

が得られる。ここで、(4.4) が helicity modulus の計算式としてしばしば用いられるために、添え字 *calc* を付けて表している。 Υ^{calc} は期待値を求めることに対応するため、モンテカルロ法等の数値計算で比較的容易に求めることができる。

スピンが連続対称性を持つ場合、すなわち XY 模型のような場合には、スピンは任意の方向を向くことができるために条件 (1)、(2) が正当化され、 Υ の代わりに Υ^{calc} を用いても良いように思われる。しかし前述したように、スピンが離散的な方向しか向けない場合、すなわち p 状態クロック模型のような場合には、 Υ と Υ^{calc} は必ずしも一致しないと考えられる。以下の節で、高温展開を用いることにより、XY 模型では Υ と Υ^{calc} が一致するが、 p 状態クロック模型では両者が一致しないことを示す。

4.2 p 状態クロック模型における helicity modulus の高温展開

ここでは高温展開により p 状態クロック模型における helicity modulus を計算式 (4.4) に従って求める。ここでは無限小の大きさの捻りを想定していることが重要な点である。そしてその値を Υ_p^{calc} と表し、その量が常磁性相でも有限値を持つことを示す。

ハミルトニアン (4.3) を用いると、分配関数は

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_p(\Delta) &= \int \mathcal{D}\theta e^{\beta \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle_x} \cos(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'} - \frac{\Delta}{L})} \\ &= \int \mathcal{D}\theta \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} \left\{ \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle_x} \cos\left(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'} - \frac{\Delta}{L}\right) \right\}^n \\ &= \int \mathcal{D}\theta \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{Z}_p^{(n)}(\Delta) \end{aligned} \quad (4.5)$$

と表せる。ただし、 $\theta_{\mathbf{r}} = 2\pi n_{\mathbf{r}}/p$ ($n_{\mathbf{r}} = 0, 1, \dots, p-1$) であり

$$\mathcal{Z}_p^{(n)}(\Delta) = \frac{\beta^n}{n!} \left\{ \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle_x} \cos\left(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'} - \frac{\Delta}{L}\right) \right\}^n \quad (4.6)$$

である。また積分について、 $\theta_{\mathbf{r}}$ は離散的であるので

$$\int \mathcal{D}\theta \equiv \prod_{\mathbf{r}} \sum_{n_{\mathbf{r}}=0}^{p-1} \quad (4.7)$$

となる。(4.4) は分配関数の 1 階微分と 2 階微分を含むので、それらを β について最低次の項まで求めることを考える。 β について n 次の項はそれぞれ

$$\left. \frac{\partial \mathcal{Z}_p^{(n)}}{\partial \Delta} \right|_{\Delta \rightarrow 0} = \frac{\beta^n}{L(n-1)!} \int \mathcal{D}\theta \left\{ \sum_{\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle_x} \cos(\theta_{\mathbf{r}_1} - \theta_{\mathbf{r}_2}) \right\}^{n-1} \sum_{\langle \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4 \rangle_x} \sin(\theta_{\mathbf{r}_3} - \theta_{\mathbf{r}_4}) \quad (4.8)$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 \mathcal{Z}_p^{(n)}}{\partial \Delta^2} \right|_{\Delta \rightarrow 0} &= \frac{\beta^n}{L^2(n-1)!} \int \mathcal{D}\theta \left[(n-1) \left\{ \sum_{\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle_x} \cos(\theta_{\mathbf{r}_1} - \theta_{\mathbf{r}_2}) \right\}^{n-2} \left\{ \sum_{\langle \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4 \rangle_x} \sin(\theta_{\mathbf{r}_3} - \theta_{\mathbf{r}_4}) \right\}^2 \right. \\ &\quad \left. - \left\{ \sum_{\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle_x} \cos(\theta_{\mathbf{r}_1} - \theta_{\mathbf{r}_2}) \right\}^n \right] \end{aligned} \quad (4.9)$$

となる。

まず分配関数の Δ について 1 階微分である (4.8) は θ について奇関数であるので、積分することにより消えることがわかる。次に分配関数の Δ について 2 階微分である (4.9) につい

て考える。cos、sin をそれぞれ指数関数で表し、 $e^{i(\theta_r - \theta_{r'})}$ をサイト r' からサイト r へ向かう矢印のついたボンドと考えると、(4.9) を展開した時に残るのは、① ループを作るダイアグラム ② $p \times m$ 個の重なったボンドのダイアグラム (m は自然数) である。なぜならば、 p 状態クロック模型の場合には

$$\sum_{n_r=0}^{p-1} e^{\pm i\theta_r} = 0 \quad (4.10)$$

$$\sum_{n_r=0}^{p-1} e^{\pm ip\theta_r} = p \quad (4.11)$$

が成り立つあるからである。(4.11) は p 状態クロック模型特有の寄与であり、この項が Υ_p の高温展開で β について $(p-1)$ 次のべきとして有限の寄与を与えることを後ほど見ていく。

まず、① ループを作るダイアグラムの寄与を考える。ここで (4.9) を見ると、和の取り方として x 方向のみが許されているので、 x 方向にのみボンドをつなぐことができることがわかる。ゆえにループを作るダイアグラムとしては、 x 方向に 1 周するループ、もしくは最短距離のループしか許されることがわかる。 x 方向に 1 周するループの寄与の β のべきはちょうど

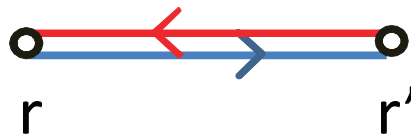


図 4.2 最短距離のループを表すダイアグラム

系のサイズ L に等しいので、熱力学極限ではその寄与は効いてこないことがわかる。よって、最短距離のループのみによって構成されたダイアグラムによる寄与を考える。(4.9) を展開して出てくる各項はそれぞれ最短距離のループを作っていくが、それらのループは 2 つのボンドによりつくられるため、 n 個のボンドからペアを作る場合の数を考えればよいことがわかる。これよりただちに、 n が奇数の場合には 1 つのボンドが余ってしまうため、ループの寄与は消えることがわかる。 n が偶数の場合に、(4.9) の被積分関数内の第 1 項、第 2 項について考える。まず、第 1 項、第 2 項ともに代表的なペアとしては、cos 同士のペアがある。このペアは同じボンドを選んだ場合に有限の値を持ち、第 2 項の n 個ペアを作る場合の数は $(n-1)!!$ となる。他には cos と sin、または sin と sin のペアが出来得るが、cos と sin のペアは奇関数となるために積分した時に消えることが分かる。sin 同士のペアについては、cos 同士のペアと同様の寄与を与える。これらの考察により、(4.9) の被積分関数内の第 1 項では $n-2$ 個の cos から cos 同士をペアに、2 個の sin その 2 つをペアにするものが有限の寄与を与え、ペアの作り方は $n-2$ 個の cos をペアにする場合の数に相当し、 $(n-3)!!$ となる。一方、第 1 項の寄

4.3 数値計算結果との比較

49

与は n 個の $\cos$ をペアにしていく場合の数で、 $(n-1)!!$ となる。以上より、(4.9) における最短距離のループのみでできるダイアグラムの寄与を考えると、第1項と第2項が完全に打ち消し合い、その寄与は0であることがわかる。

次に、 p 状態クロック模型特有の $2p \times m$ 個の重なったボンドのダイアグラムによる寄与を考える。ここでは β について最低次の $m=1$ の場合を考える。(4.9) の被積分関数内における全て同じボンドの寄与は

$$\begin{aligned} & -(p-1) \frac{1}{2^p} \left(e^{ip(\theta_{r_1}-\theta_{r_2})} + e^{-ip(\theta_{r_1}-\theta_{r_2})} \right) - \frac{1}{2^p} \left(e^{ip(\theta_{r_1}-\theta_{r_2})} + e^{-ip(\theta_{r_1}-\theta_{r_2})} \right) \\ &= -\frac{p}{2^p} \left(e^{ip(\theta_{r_1}-\theta_{r_2})} + e^{-ip(\theta_{r_1}-\theta_{r_2})} \right) \end{aligned} \quad (4.12)$$

となる。よって、 θ について積分した時の (4.12) の値は

$$\left. \frac{\partial^2 Z^{(n)}(\Delta)}{\partial \Delta^2} \right|_{\Delta \rightarrow 0} = \frac{\beta^n}{L^2(n-1)!} \int \mathcal{D}\theta \left\{ - \sum_{x,y} \cdot \frac{p}{2^p} \cdot 2 \right\} \quad (4.13)$$

となる。以上より、 p 状態クロック模型において (4.4) を高温展開により計算した場合の β について最低次の寄与は、

$$\begin{aligned} \Upsilon_p^{calc} &\sim \frac{\beta^{p-1}}{L^2(p-1)!} \frac{1}{\int \mathcal{D}\theta \cdot 1} \int \mathcal{D}\theta \cdot L^2 \frac{p}{2^{p-1}} \\ &= \frac{p}{(p-1)! 2^{p-1}} \beta^{p-1} \end{aligned} \quad (4.14)$$

となる。

4.3 数値計算結果との比較

式 (4.14) は十分高温側では正しいと考えられるが、これと実際の数値計算結果の比較を図 (4.3) に示す。このように、どの p においても高温展開により求めた (4.14) と実際の数値計算結果が高温側で一致している様子がわかる。これより、高温展開により求めた (4.14) の正当性を確認することができた。

式 (4.14) より、我々は重要ないくつかの情報を得ることができる。まず、高温展開は常磁性相では定性的には正しく、低温側に向かうにつれて β についてより高次の項の影響が出てくることを考えると、転移点付近の常磁性相では高温展開により得られる値 (4.14) より実際の Υ_p^{calc} の値は大きくなると考えられる。これは図 (4.3) でも確認することができる。よって、 Υ_p^{calc} は、 $p \rightarrow \infty$ または $T \rightarrow \infty$ においてのみ0となる。すなわち、 p 状態クロック模型では常磁性においても Υ_p^{calc} が有限の値を持つのである。

これは2つのことを示唆している。まず、 Υ_p^{calc} は常磁性相でも有限値を持つので、 p 状態クロック模型では BKT 転移が生じていたとしても Υ_p^{calc} のユニバーサルジャンプは生じ得な

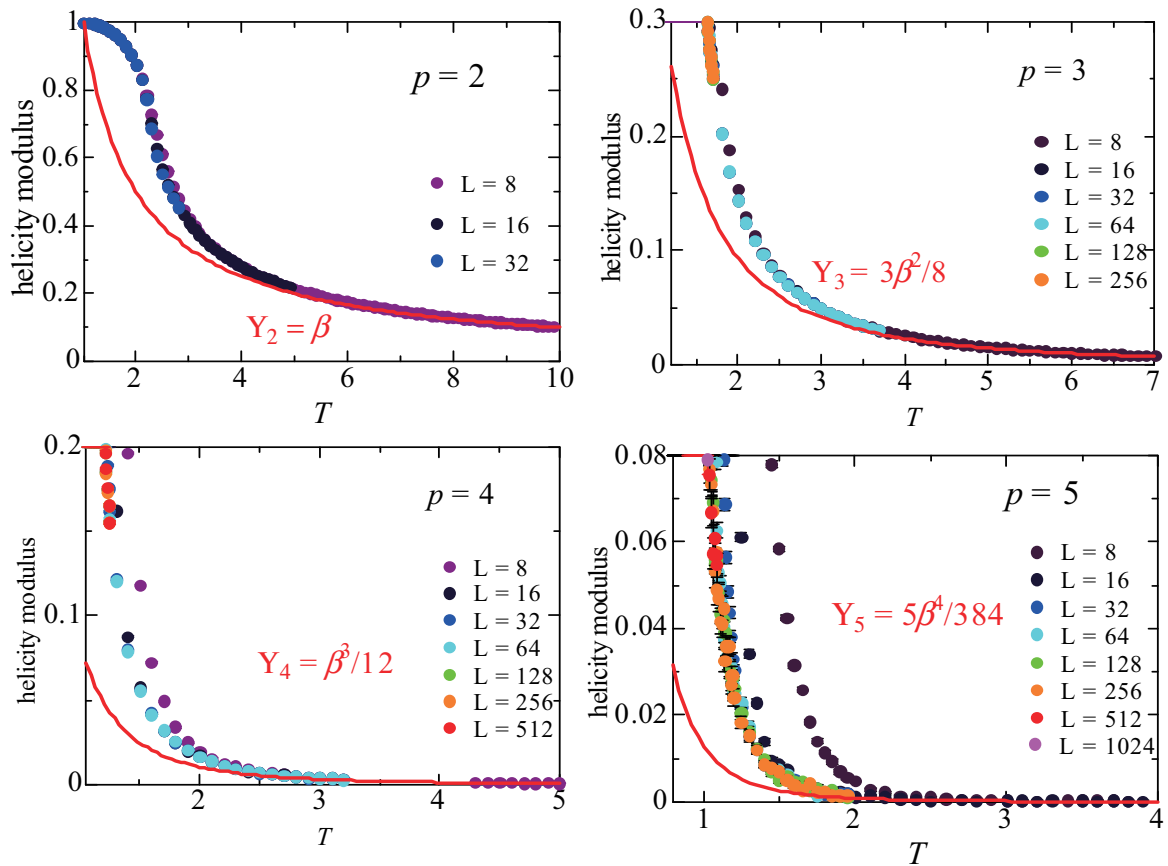


図 4.3 高温展開により解析的に求めた Υ_p^{calc} と実際の数値計算結果の比較

い。よって、Baek らが行ったように [48] ユニバーサルジャンプの有無により BKT 転移の存在の有無を議論することはできないのである。 $p \geq 6$ においてユニバーサルジャンプが生じているように見えたのは、常磁性相での有限値がたまたま小さいためであると考えられる。これは式 (4.14) を見てみると、 p の値が大きくなるに従って、 β のべきが大きくなり、係数が小さくなる、すなわち、高温側での有限値が小さくなることから窺うことができる。

さらに、常磁性相ではスピン相関関数が指数関数的に減衰することを考えると、捻り境界条件に対する応答量である helicity modulus は常磁性相において 0 であることが期待される。しかし、高温展開により得られた式 (4.14) で表される Υ_p^{calc} は常磁性相においても有限値を持つため、本来 Fisher[34] により定義されたような、捻り境界条件に対する応答量として期待されていたものである Υ_p と Υ_p^{calc} は異なる可能性があることが示唆される。しかし、 $U(1)$ 対称性を持つ XY 模型では Υ_{XY} と Υ_{XY}^{calc} が等価であること、また、本来 Z_p 対称性を持つ p 状態クロック模型でも BKT 相では emergent $U(1)$ symmetry が生じていることを考えると、BKT 相、さらには BKT 転移転近傍では Υ_p と Υ_p^{calc} が等価であることが可能性がある。

第 5 章

BKT 転移と Z_p 異方性の効果

本章からは、第 2、3 章での理論的背景や問題点を踏まえ、2 次元 p 状態クロック模型における BKT 転移について明らかにしていく。

第 2 章では、BKT 転移はその特異性が弱く有限サイズ効果が著しいために、実験や数値計算で直接観測することは困難である一方、helicity modulus を用いた BKT 転移の有限サイズスケーリング [36][37] が有効であることを見た。第 3 章では、くりこみ群による解析により、 Z_p 対称性を持つ p 状態クロック模型において $p \geq 5$ で秩序相と常磁性相の間に BKT 相が現れると考えられる [20][21] が、計算式 Υ^{calc} を用いた最近の helicity modulus の数値計算 [48] により、 $p = 5$ での BKT 相の存在が疑問視されていることを見た。

この問題を解決するには、 p 状態クロック模型において BKT 転移の有限サイズスケーリングを行うことが有効であると考えられるが、元々これは系が $U(1)$ 対称性を持つ場合に導出されている。ゆえに、原田、川島の有限サイズスケーリングの式 [36][37] をそのまま用いることはできず、系が Z_p 対称性を持つ場合でも使えるように拡張する必要がある。よって、本章では $U(1)$ 対称性を持つ系に Z_p 異方性が加わった場合の効果を調べ、 p 状態クロック模型との関係を明らかにする。さらに、 Z_p 異方性がある場合に BKT 転移における有限サイズスケーリングの式がどのように変更されるかを、摂動論の範囲で明らかにする。なお、本章では helicity modulus は全て定義式 (4.2) 通りのものを想定している。

5.1 2 次元 XY 模型に対する Z_p 異方性の効果

まず、2 次元 p 状態クロック模型と同じ対称性を持つ、 Z_p 異方性の加わった 2 次元 XY 模型を考え、 $U(1)$ 対称性を持つ系に Z_p 異方性が加わった場合の効果を考える。ハミルトニアンは (3.2) のように表される。ただし、 $0 \leq \theta < 2\pi$ である。この模型は $\lambda_p \rightarrow 0$ の極限では XY 模型、 $\lambda_p \rightarrow \infty$ の極限では p 状態クロック模型と等価である。

系の対称性が等しければ相転移のユニバーサリティクラスは等しいはずなので、2 次元 p 状

態クロック模型と Z_p 異方性の加わった 2 次元 XY 模型の相転移は同じものだと考えられる。よって、例えば 5 状態クロック模型の相転移を調べるためには、 Z_5 異方性の加わった 2 次元 XY 模型を用いればよいことがわかる。熱力学極限においては、パラメタ λ_p が relevant である場合、くりこみを繰り返すと $\lambda_p \rightarrow \infty$ に向かい、逆に λ_p が irrelevant である場合、 $\lambda_p \rightarrow 0$ に行き着く。すなわち、(3.2) の模型は λ_p の初期値に関わらず同じ相図を再現するはずである。ゆえに、2 次元 5 状態クロック模型において BKT 転移が起きるならば、 Z_5 異方性の加わった 2 次元 XY 模型においても、 λ_5 の初期値に関わらず BKT 相が転移が生じるはずである。

5.2 BKT 転移における有限サイズスケーリングと Z_q 異方性の効果

第 2 章では、BKT 転移において helicity modulus がユニバーサルジャンプする特徴を生かし、BKT 方程式を用いることで BKT 転移の有限サイズスケーリングの式を導出することができた。ここで注意すべきは、この文脈では helicity modulus は 2 次元 XY 模型と等価である 2 次元 Bose 液体から求められている点である。一方、我々が解析したいのは p 状態クロック模型における BKT 転移であるので、第 2 章での有限サイズスケーリングの式をそのまま用いることはできない。問題点は以下の二つである。

- 1) BKT 方程式と p 状態クロック模型のくりこみ群方程式が異なる
- 2) helicity modulus を計算している模型自体が異なる

1 について、ここで具体的な解決策を提案することはできない。なぜならば、 p 状態クロック模型のくりこみ群方程式 (3.16)、(3.17)、(3.18) は 3 本の連立非線形微分方程式であり、これを解析的に解くことは非常に困難であるからである。しかし、スケーリング変数 y_0, y_p は BKT 相で irrelevant であるので、BKT 相では y_p の存在を完全に無視したとしてもそれほど大きな影響は及ぼさないと考えられる。よって、我々は本来用いるべき p 状態クロック模型のくりこみ群方程式ではなく、少なくとも 0 次近似の範囲では正しい、 $y_p = 0$ とおいた BKT 方程式を用いることにする。これは、(2.63) の原田、川島の BKT 転移における有限サイズスケーリングの式自体は変更されないことを意味する。

しかし、2 について我々は摂動論の範囲で解決策を提案することができる。元々、BKT 転移での有限サイズスケーリングの式に現れる helicity modulus は 2 次元 XY 模型のもの (Υ_{XY}) を想定していた。ゆえに、 p 状態クロック模型において求めた helicity modulus (Υ_p) をそのまま用いることはできない。BKT 転移での有限サイズスケーリングで用いることのできるものは Υ_{XY} であり、 Υ_p には Z_p 異方性由来の有限サイズ効果が生じるのである。ここで、 Z_p

5.2 BKT 転移における有限サイズスケーリングと Z_q 異方性の効果

53

対称性を持つ p 状態クロック模型が $U(1)$ 対称性を持つ XY 模型から対称性を落としていったものと考え、 Υ_p は Υ_{XY} から何らかの補正が加わったものと捉えることができる。これはまさに摂動論のアイデアである。クロック模型そのものを用いては XY 模型からのずれという形で物理量を求めることができないので、クロック模型の代わりに Z_p 異方性の加わった XY 模型を用いることを考える。これにより我々は、 λ_p を摂動として扱うことで、 Υ_p の Υ_{XY} からのずれを摂動的に求めていく。

5.2.1 Υ_p の摂動計算

Z_p 異方性の摂動を加えた XY 模型に大域的な捻りを加えた時、ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_p(\Delta) = - \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \cos \left(\phi_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} - \frac{\Delta}{L} \right) - \lambda_p \sum_{\mathbf{r}} \cos(p\theta_{\mathbf{r}}) \quad (5.1)$$

のように書ける。ここで、 $\phi_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \equiv \theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'}$ である。この時、異方性に関する部分を展開すると、分配関数は

$$\begin{aligned} Z_p(\Delta) &= \int \mathcal{D}\theta_{\mathbf{r}} e^{-\beta \mathcal{H}_p(\Delta)} = \int \mathcal{D}\theta_{\mathbf{r}} e^{-\beta \mathcal{H}_{XY}(\Delta)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta \lambda_p)^n}{n!} \left[\sum_{\mathbf{r}} \cos(p\theta_{\mathbf{r}}) \right]^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta \lambda_p)^n}{n!} Z_p^{(n)}(\Delta) \end{aligned} \quad (5.2)$$

のように表せる。ここで、

$$Z_p^{(n)}(\Delta) = \int \mathcal{D}\theta_{\mathbf{r}} e^{-\beta \mathcal{H}_{XY}(\Delta)} \left[\sum_{\mathbf{r}} \cos(p\theta_{\mathbf{r}}) \right]^n \quad (5.3)$$

と定義した。計算式 (4.4) を使い、 λ_p を十分小さいとして Υ_p を λ_p について逐次計算することを考える。 n 次の項は

$$\begin{aligned} \Upsilon_p^{(n)} &= \frac{1}{\beta} \left[\left(\frac{1}{Z_p^{(n)}} \frac{\partial Z_p^{(n)}}{\partial \Delta} \right)^2 - \frac{1}{Z_p^{(n)}} \frac{\partial^2 Z_p^{(n)}}{\partial \Delta^2} \right] \Big|_{\Delta=0} \\ &= \frac{(\beta \lambda_p)^n}{L^2 n!} \left[\frac{\beta^2}{L^2} \left\langle \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle_x} \sin(\phi_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}) \left(\sum_{\mathbf{r}} \cos(p\theta_{\mathbf{r}}) \right)^n \right\rangle^2 \right. \\ &\quad + \left\langle \left(\sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle_x} \cos(\phi_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}) \right) \left(\sum_{\mathbf{r}} \cos(p\theta_{\mathbf{r}}) \right)^n \right\rangle \\ &\quad \left. - \beta \left\langle \left(\sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle_x} \sin(\phi_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}) \right)^2 \left(\sum_{\mathbf{r}} \cos(p\theta_{\mathbf{r}}) \right)^n \right\rangle \right] \end{aligned}$$

$$\xrightarrow{\phi \sim 0} \frac{(\beta\lambda_p)^n}{n!} \left\langle \left(\sum_{\mathbf{r}} \cos(p\theta_{\mathbf{r}}) \right)^n \right\rangle \quad (5.4)$$

と表すことができる。ここで、右辺第3式では、 $\phi \sim 0$ のスピン波近似を用いている。これは $T \sim T_{BKT}$ で十分妥当な近似であると考えられる。これにより我々は、 T_{BKT} 近傍において摂動の n 次の項 $\Upsilon_p^{(n)}$ を求めることができる。

まず1次の項を求める。元の模型 (5.1) を見てみると、 λ_p の符号が変化しても、ポテンシャルの山と谷の位置が変わるだけであり、系に対する大局的な捻りを加えた時のエネルギー変化は等しいと考えられる。よって、 λ_p の奇数次の補正は消えることが分かる。ゆえに、最低次の補正は2次である。

2次の補正項は

$$\Upsilon_p^{(2)} = \frac{(\beta\lambda_p)^2}{2!} \left\langle \left(\sum_{\mathbf{r}} \cos(p\theta_{\mathbf{r}}) \right)^2 \right\rangle \quad (5.5)$$

であるので、期待値の部分を求めることを考える。この場合は系に捻りを加えていない模型、すなわちハミルトニアン (5.1) の $\Delta = 0$ の場合についての期待値を求めるので、一般化された磁化と帯磁率は

$$M_p = -\frac{\partial F}{\partial \lambda_p} = \frac{1}{\beta Z_p} \frac{\partial Z_p}{\partial \lambda_p} \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned} \chi_p &= \left. \frac{\partial M_p}{\partial \lambda_p} \right|_{\lambda_p \rightarrow 0} = \frac{1}{\beta} \left[\frac{1}{Z_p} \frac{\partial^2 Z_p}{\partial \lambda_p^2} - \left(\frac{1}{Z_p} \frac{\partial Z_p}{\partial \lambda_p} \right)^2 \right] \Bigg|_{\lambda_p \rightarrow 0} \\ &= \frac{1}{\beta} \left[\frac{1}{Z_p} \frac{\partial^2 Z_p}{\partial \lambda_p^2} - \beta^2 M_p^2 \right] \Bigg|_{\lambda_p \rightarrow 0} \end{aligned} \quad (5.7)$$

となる。Mermin-Wagner の定理より、有限温度では $M_p = 0$ となるので、(5.7) の右辺は中括弧内の第1式のみ残る。帯磁率を具体的に計算すると

$$\begin{aligned} \chi_p &= \frac{1}{\beta Z_p} \frac{\partial^2 Z_p}{\partial \lambda_p^2} = \frac{1}{\beta Z_p} \frac{\partial^2}{\partial \lambda_p^2} \int \mathcal{D}\theta_{\mathbf{r}} e^{-\beta \mathcal{H}_p} \\ &= \frac{1}{\beta Z_p} \beta^2 \int \mathcal{D}\theta_{\mathbf{r}} e^{-\beta \mathcal{H}_p} \left[\sum_{\mathbf{r}} \cos(p\theta_{\mathbf{r}}) \right]^2 \\ &= \beta \left\langle \left[\sum_{\mathbf{r}} \cos(p\theta_{\mathbf{r}}) \right]^2 \right\rangle \end{aligned} \quad (5.8)$$

となる。これを (5.5) に代入することで

$$\Upsilon_p^{(2)} = \frac{(\beta\lambda_p)^2}{2} \frac{\chi_p}{\beta} \quad (5.9)$$

5.2 BKT 転移における有限サイズスケーリングと Z_q 異方性の効果

55

を得る。

3 次の項については、奇数次の項であるので 1 次同様に消え、次に残るのは 4 次の項になる。しかし、 λ_p が十分小さいとすると、4 次の項は 2 次の項に比べて十分小さく、無視できる。より高次の項についても同様である。よって、我々は λ_p について 2 次までを考慮し、 Υ_p の Υ_{XY} からのずれを求める。

5.2.2 補正項のサイズ依存性

前節より、最低次の補正項は 2 次であり、(5.9) のようになることがわかった。すなわち、

$$\Upsilon_p \sim \Upsilon_{XY} + \Upsilon_p^{(2)} = \Upsilon_{XY} + \frac{(\beta\lambda_p)^2}{2} \frac{\chi_p}{\beta} \quad (5.10)$$

と表せる。これを用いて、我々は Z_p 対称性を持つ系において helicity modulus を数値計算し、その結果得た Υ_p から補正項を取り除くことによって、BKT 転移の有限サイズスケーリングに従う Υ_{XY} を得ることができると考えられる。しかし、(5.9) を完全に計算することは困難である。よって、我々は $\Upsilon_p^{(2)}$ の系のサイズ依存性を求めるに留め、それにより $\Upsilon_{XY} = \Upsilon_p - \Upsilon_p^{(2)}$ を BKT 転移の有限サイズスケーリングに用いることにする。したがって、本節では $\beta\lambda_p$ と χ_p/β のサイズ依存性を考える。

 $\beta\lambda_p$ のサイズ依存性

$\beta\lambda_p$ のサイズ依存性は、3 章 2 節で扱った p 状態クロック模型におけるくりこみ群方程式を用いることで求めることができる。 $\beta\lambda_p$ に関するのは y_p についてのくりこみ群方程式 (3.18) であるが、 y_p が小さい極限では、 y_p と $\beta\lambda_p$ の関係は (3.4) のように比例関係にあるのであった。ゆえに、式 (3.18) を $\beta\lambda_p$ について解くと、最低次までで

$$\beta\lambda_p \propto e^{\left(2 - \frac{p^2 T}{4\pi}\right)l} = L^{2 - \frac{p^2 T}{4\pi}} \quad (5.11)$$

となる。ここで、BKT 転移では $l = \log L$ と表せることを用いた。

 χ_p/β のサイズ依存性

一般化された帯磁率は (5.8) のように表せたが、並進対称性を用いると

$$\begin{aligned} \left\{ \sum_{\mathbf{r}} \cos(p\theta_{\mathbf{r}}) \right\}^2 &= \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \cos(p\theta_{\mathbf{r}}) \cos(p\theta_{\mathbf{r}'}) \\ &= N \sum_{\mathbf{R}} \cos(p\theta_{\mathbf{0}}) \cos(p\theta_{\mathbf{R}}) \\ &= \frac{N}{2} \sum_{\mathbf{R}} \{ \cos[p(\theta_{\mathbf{0}} + \theta_{\mathbf{R}})] + \cos[p(\theta_{\mathbf{0}} - \theta_{\mathbf{R}})] \} \end{aligned} \quad (5.12)$$

となる。よって、期待値を取ると右辺第3式の第1項は M_p と同一視できるので消え、第2項は一般化された相関関数となる。よって、一般化された帯磁率 (5.8) は連続理論で

$$\chi_p \propto \beta \int d\mathbf{r} G_p(\mathbf{r}) \quad (5.13)$$

と書ける。ここで (1.6) のアナロジーより、2次元において一般化された相関関数は臨界点直上で

$$G_p(\mathbf{r}) \propto r^{-\eta_p} \quad (5.14)$$

と表せる。ただし、 η_p は一般化された相関関数についての臨界指数である。この値は相関関数の時同様に計算することができ、BKT 相では

$$\eta_p = \frac{p^2 T}{2\pi} \quad (5.15)$$

となる (付録 B 参照)。注目しているのは $p \geq 5$ の場合であり、このとき BKT 転移点近傍 ($T \sim T_{BKT} = \pi/2$) において、

$$2 - \eta_p = 2 - \frac{p^2 T}{2\pi} \sim 2 - \frac{p^2 \pi}{2\pi \cdot 2} \leq 2 - \frac{5^2}{4} = -\frac{17}{4} \quad (5.16)$$

となる。よって、(5.13) 中の $G_p(\mathbf{r})d\mathbf{r}$ の長距離の振る舞いは無視することができる。ゆえに、 $p \geq 5$ の時、2次元における帯磁率は短距離のものが重要になるので、そのサイズ依存性はなく、

$$\frac{\chi_p}{\beta} \propto \text{const.} \quad (p \geq 5) \quad (5.17)$$

となる。

5.2.3 $\Upsilon_p^{(2)}$ のサイズ依存性

以上より、 $\Upsilon_p^{(2)}$ のサイズ依存性は、転移点近傍において、

$$\Upsilon_p^{(2)} = \frac{(\beta\lambda_p)^2}{2} \frac{\chi_p}{\beta} \propto \left(L^{2 - \frac{p^2 T_{BKT}}{4\pi}} \right)^2 = L^{4 - \frac{p^2}{4}} \quad (5.18)$$

となる。ここで、 $T_{BKT} = \pi/2$ であることを用いた。特に、5 状態クロック模型における補正項のサイズ依存性は

$$\Upsilon_5^{(2)} = L^{4 - \frac{5^2}{4}} = L^{-\frac{9}{4}} \quad (5.19)$$

となる。

5.2.4 有限サイズスケーリングにおける補正項

2 章 6 節より、BKT 転移の有限サイズスケーリングの式は $x = \pi K \Upsilon_{XY} - 2$ 、 $\Delta = a(K - K_{BKT})$ 、 $l = \ln(L/L_0)$ を用いて (2.63) のように表されるのであった。(5.10) を代入すると、 x は

$$\begin{aligned} x &\sim \pi K(\Upsilon_p - \Upsilon_p^{(2)}) - 2 \\ &= \pi K \Upsilon_p - 2 - \pi K \Upsilon_p^{(2)} \end{aligned} \quad (5.20)$$

となり、 Z_p 異方性の効果は $\pi K \Upsilon_p^{(2)}$ として現れる。ここで、 $\Upsilon_p^{(2)}$ のサイズ依存性 (5.18) を用いると

$$\pi K \Upsilon_p^{(2)} = c K L^{4 - \frac{p^2}{4}} \quad (5.21)$$

となる。ただし、 c はフィッティングにより決まる定数である。以上より、 Z_p 異方性の摂動が加わった場合の BKT 転移の有限サイズスケーリングの式

$$\pi K \Upsilon_p - 2 - c K L^{4 - \frac{p^2}{4}} = l^{-1} f(l^2 \Delta) \quad (5.22)$$

が得られる。フィッティングパラメタは K_{BKT} , L_0 , c の 3 つである。

これを用いて、我々は $p \geq 5$ の Z_p 対称性を持つ系において helicity modulus (Υ_p) を数値計算し、補正項 $\Upsilon_p^{(2)}$ を考慮することによって、BKT 転移の有限サイズスケーリングを行うことができる。次章ではこの方法を用いて、 Z_p 対称性を持つ系における BKT 転移の存在の調べていく。

第 6 章

2 次元 p 状態クロック模型における BKT 転移

本章が本研究の結果となる章である。第 3 章で述べたように、本研究の目的は p 状態クロック模型の完全な相図を作ること、特に、 $p = 5, 6, 7$ における相転移が BKT 転移であるかどうかを明らかにすることである。そのために、第 4 章で求めた Z_p 異方性による補正を考慮した BKT 転移の有限サイズスケーリングを行い、 Z_p 対称性を持つ系での BKT 相の存在を議論する。ここで考える模型は、

- 1) 2 次元 p 状態クロック模型
- 2) Z_p 異方性中の 2 次元 XY 模型

の 2 つである。前章で見たように、2 の模型で異方性の大きさを無限大にした極限が 1 の模型であるので、2 の模型は 1 を含んだ、より一般的な模型である。ゆえに、1 の模型でなく、2 の模型も用いることでより広い視点での議論が可能となる。この両者の模型を用いることで、2 次元 p 状態クロック模型の相図を明らかにしていく。

6.1 数値計算法

ここでは、本研究で用いた数値計算の概略を述べる。まず、本研究では一貫して古典モンテカルロ法 [61] [62] により数値計算を行った。その中の代表的なものとしてメトロポリス法 [63] があるが、この方法は 1 Monte Carlo Step (MCS) でただ 1 つのスピンフリップを試行するため、クラスターが多数発生しているような状況ではスピンフリップの採用確率が低く、非効率的である。この現象は臨界点近傍で生じるため、critical slowing down と呼ばれる。特に、相関長の発達が指数関数的な BKT 転移の場合、この影響は顕著である。

この問題を解決する方法の 1 つが、wolff により提案された cluster algorithm [64] である。

6.2 相関関数の比を用いた転移温度の決定

59

この方法では、あるスピンをクラスターの種として選び、それに隣接しているスピンの中で同様の方向を向いているスピンをある確率でクラスターに含める。新たにクラスターに加わったスピンについても隣接スピンについて同様の操作をし、これを繰り返す。そして最終的にできた1つのクラスター中のスピンを一斉にフリップさせる。これが Wolff algorithm における 1MCS である。2次元イジング模型における Wolff algorithm を用いた 1MCS の前後の様子を下図に示す。

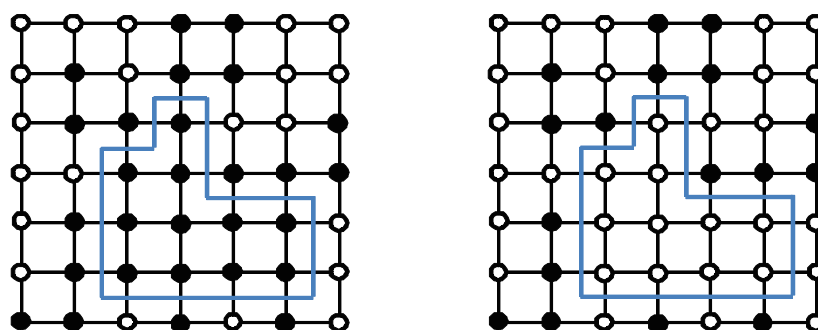


図 6.1 2次元イジング模型における wolff cluster algorithm によるクラスターフリップの様子。白丸と黒丸がそれぞれアップスピンとダウンスピンを表しており、青線で囲まれた部分がクラスターである。

臨界点近傍のようなクラスターが多数発生している状況では、この方法はメトロポリス法のように1つ1つスピンをフリップする場合に比べて明らかに採用される確率が高く、スピンのフリップの効率が良い。このように、Wolff algorithm は転移点近傍でクラスターが多数生じることを上手く利用している方法である。またこの方法は、イジング模型のような離散自由度の場合だけでなく、XY 模型のような連続自由度の場合にも有効である。

本研究では一貫して上述の Wolff algorithm を使い、2次元 p 状態クロック模型、 Z_p 異方性中の2次元 XY 模型それぞれにおいて相関関数と helicity modulus を数値計算した。相関関数はその定義通り数値計算し、helicity modulus については、定義式 (4.2) 通り自由エネルギーを数値計算することが困難なこともあり、無限小捻りを加えた場合の計算式 (4.4) を用いて数値計算した。(4.2) と (4.3) は異なるものであるが、有効的に $U(1)$ 対称性が生じている BKT 相では両者の違いはほとんどないと考えられる。それぞれの計算において、熱平衡までには $O(10^5)$ MCS、実際の測定に $O(10^6)$ MCS かけ数値計算を行った。誤差の評価は Binning 法 [65] を用いた。

6.2 相関関数の比を用いた転移温度の決定

前章において、我々は Z_p 異方性の摂動による補正を考慮した BKT 転移の有限サイズスケールリングの式 (5.22) を導出した。しかし、この方法ではフィッティングパラメタが K_{BKT} 、

L_0 、 c の3種類あるため、最適なスケーリングを行うことが困難である。そこで、フィッティングパラメタを減らすために、転移温度 T_{BKT} については相関関数の比を用いて独立に求めることを考える。

転移温度を決定する方法は色々あるが、付録 G に詳しく述べているように、BKT 転移が生じる可能性のある場合には、相関関数の比を用いる方法が適している [55]。図 (6.2) に 6 状態クロック模型における Binder 比と相関関数の比の数値計算結果を示す。

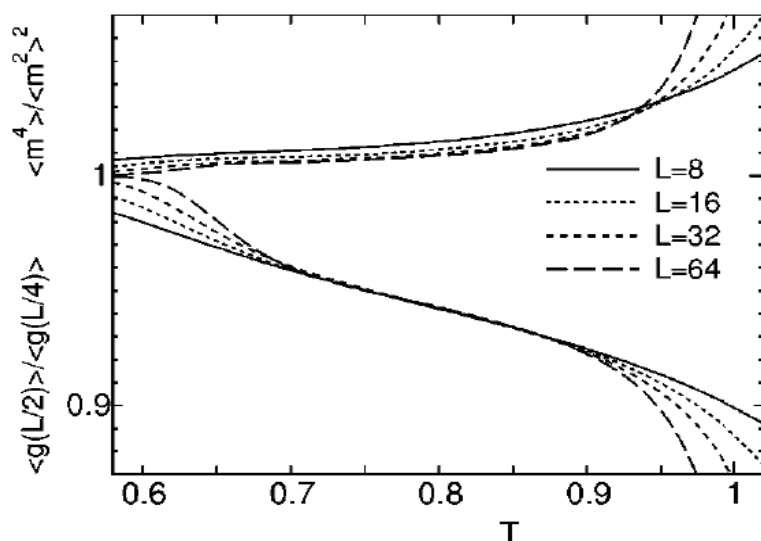


図 6.2 6 状態クロック模型における Binder 比 (上) と相関関数の比 (下) の数値計算結果 [55]。Binder 比は BKT 転移の有限サイズ効果のため、相関関数の比に比べて転移温度を高く見積もってしまっている。

これを見ると、Binder 比は高温側において一点で交わっているのに対し、相関関数の比では系のサイズに関わらず値が一定になるラインが存在し、この領域が BKT 相に対応している。さらに、Binder 比から見積もられる臨界温度 (図の交点) は相関関数の比から見積もられるもの (重なり始める所) よりも高温側に位置していることが見てとれる。これは、Binder 比が BKT 転移における有限サイズ効果をうまく扱えず、見積もられた臨界温度が高温側にシフトしてしまっていることを意味している。これより BKT 転移では、臨界温度の決定にしばしば用いられる Binder 比よりも相関関数の比の方が転移温度の決定に適していると考えられる。

そこで、BKT 転移が生じているかどうか依存せず、5 状態クロック模型における転移温度を相関関数の比を用いて決定することができる。図 (6.3) に 5 状態クロック模型における相関関数の比の数値計算結果を示す。

これを見ると、 $p = 6$ では系のサイズに関わらず値が一定となる領域の存在がはっきりと確認できるのに対して、 $p = 5$ ではただ一点で交わっているようにも見える。これは、 $p = 5$ では理論的に予測される BKT 相が非常に狭いために、系のサイズに関わらず値が一定となる領域

6.2 相関関数の比を用いた転移温度の決定

61

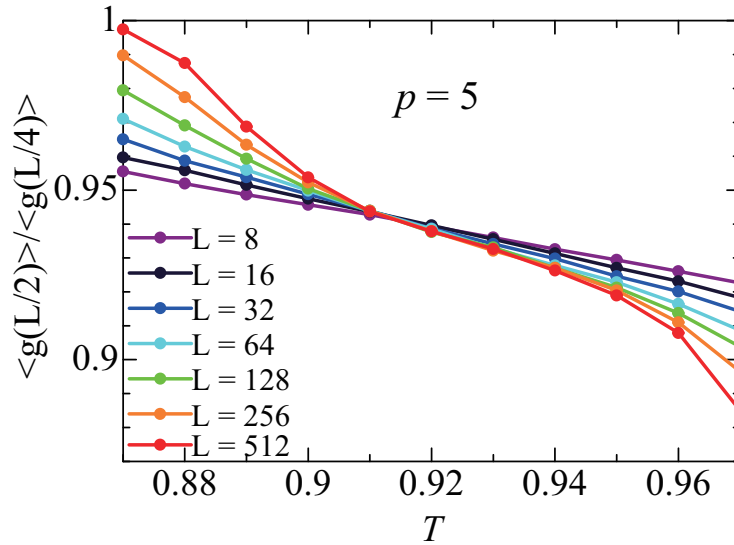


図 6.3 5 状態クロック模型における相関関数の比の数値計算結果。BKT 相の指標となる、相関関数の比が重なる領域を判別することが困難であり、2 次転移の場合と区別することができない。これは $p = 5$ の場合、理論的に予想される BKT 相が非常に狭いことと対応している。

が非常に狭いのを反映していることや、 $p = 6$ よりも異方性の効果が強く、それによる有限サイズ効果が強く効いている可能性が考えられる。よって、5 状態クロック模型において相関関数の比を用いて BKT 相の存在を確認することは難しい。しかし、BKT 転移であるかどうかに関わらず、転移温度は決定することができる。

本研究では、相関関数の比を計算し、さらに有限サイズスケーリングを行うことで転移温度を求めた。詳細は付録 G に譲り結果だけを述べると、例えば相関関数の比 $\langle g(L/2) \rangle / \langle g(L/4) \rangle$ は次の関係式を満たす。

$$\frac{\langle g(L/2) \rangle}{\langle g(L/4) \rangle} = f(L/\xi) \quad (6.1)$$

これより、 x 軸として L/ξ 、 y 軸として相関関数の比をプロットすると、最適なフィッティングパラメタを選んだ場合に 1 つの曲線上に乗ることが分かる。BKT 転移の場合は $\xi \propto e^{a/\sqrt{t}}$ となるので、フィッティングパラメタは T_{BKT} と a の 2 つである。図 (6.4) に、5 状態クロック模型における相関関数の比の有限サイズスケーリングの結果を示す。

図を見ると、系のサイズに関わらず、1 つの曲線上に乗っている様子が分かる。これより、5 状態クロック模型の転移温度は

$$T_{BKT} = 0.944(4) \quad (6.2)$$

であると見積もった。解析の詳細については付録 F を参照されたい。この T_{BKT} を用いて、以降の節で 5 状態クロック模型における BKT 転移の有限サイズスケーリングを行っていく。

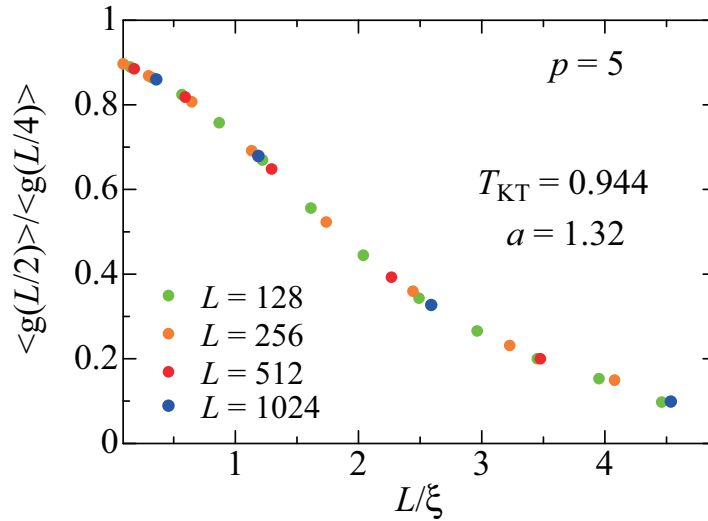


図 6.4 5 状態クロック模型における相関関数の比の有限サイズスケーリング。系のサイズに関わらず、1 つの曲線上に乗っている様子が分かる。

6.3 p 状態クロック模型における BKT 転移の有限サイズスケーリング

6.3.1 $p \geq 6$

まず、6 状態クロック模型において、 Z_6 異方性による補正を考慮した BKT 転移の有限サイズスケーリングを行い、BKT 相の有無を議論する。(5.18) より、補正項のサイズ依存性は

$$\Upsilon_6^{(2)} = L^{4 - \frac{6^2}{4}} = L^{-5} \quad (6.3)$$

となる。 $p = 5$ の場合 ($L^{4 - \frac{5^2}{4}} = L^{-\frac{9}{4}}$) と比較すると、 $-9/4 > -5$ より、補正項の影響が小さいことがわかる。

この補正項を考慮する前と考慮した後で有限サイズスケーリングを行った結果が図 (6.5) である。ここでは、6 状態クロック模型の転移温度として $T_{BKT} = 0.9008(6)$ [57] を用いており、 L_0, c がフィッティングパラメタである。図のスケーリングを行った際のパラメタの値は図中に示してある。

このように $p = 6$ の場合には、補正項を考慮しない場合でも十分うまくスケーリングを行えており、補正項を考慮した場合とほとんど変わらないことがわかる。第 3 章で見たように、6 状態クロック模型には低温側と高温側にそれぞれ BKT 転移点が存在するが、この結果は、高温側の BKT 転移点近傍では Z_6 異方性の効果はほとんど無視できるということを意味している。これは、 Z_6 異方性が relevant になり始める低温側の BKT 転移点が高温側の BKT 転移

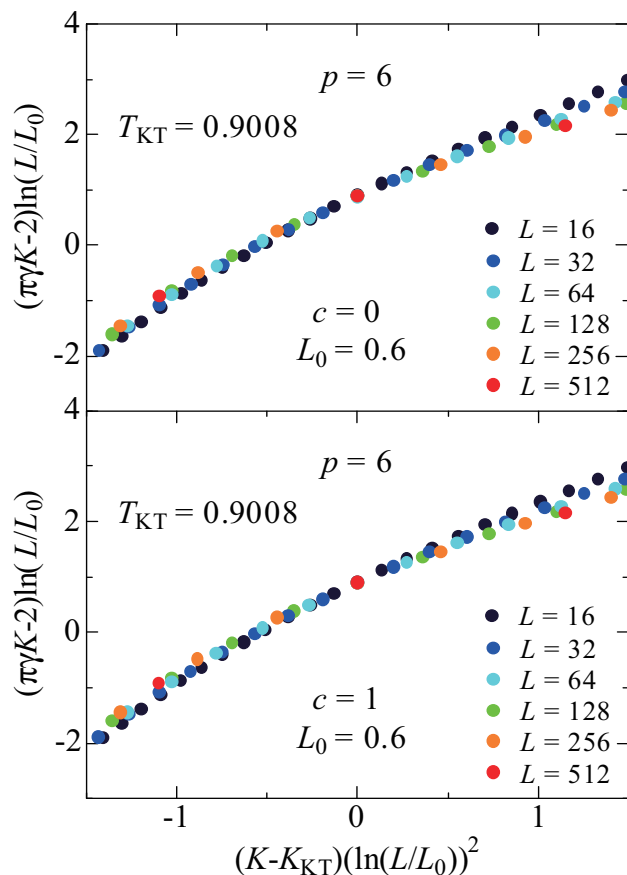


図 6.5 p 状態クロック模型における補正項を考慮する前 (上) と考慮した後 (下) の有限サイズスケーリング。補正項を考慮する前後でほとんど結果が変わらない様子がわかる。

点から十分離れているからだと解釈できる。 $p \geq 6$ の場合は Z_p 異方性が relevant になり始める BKT 転移点がさらに低温側にシフトするため、高温側の BKT 転移点近傍では補正項を考慮せずに BKT 転移の有限サイズスケーリングを行うことができるであろう。実際、 $p = 7$ の場合にも、図 (6.5) のように $p = 6$ の場合とほぼ同様の有限サイズスケーリングを行えることを確認した。これより、 $p \geq 6$ では BKT 転移が起き、BKT 相が存在すると考えられる。

6.3.2 $p = 5$

次に、5 状態クロック模型において、 Z_5 異方性による補正を考慮した BKT 転移の有限サイズスケーリングを行い、BKT 相の有無を議論する。1 節で述べたように、 T_{BKT} については相関関数の比を用いて独立に求めたものである $T_{BKT} = 0.944$ を使い、 L_0, c をフィッティングパラメタとして有限サイズスケーリングを行う。この方法により、補正項を考慮する前と考慮した後で有限サイズスケーリングを行った結果を図 (6.6) に示す。フィッティングに用いたパラメタの値は図 (6.6) 内に示してある。

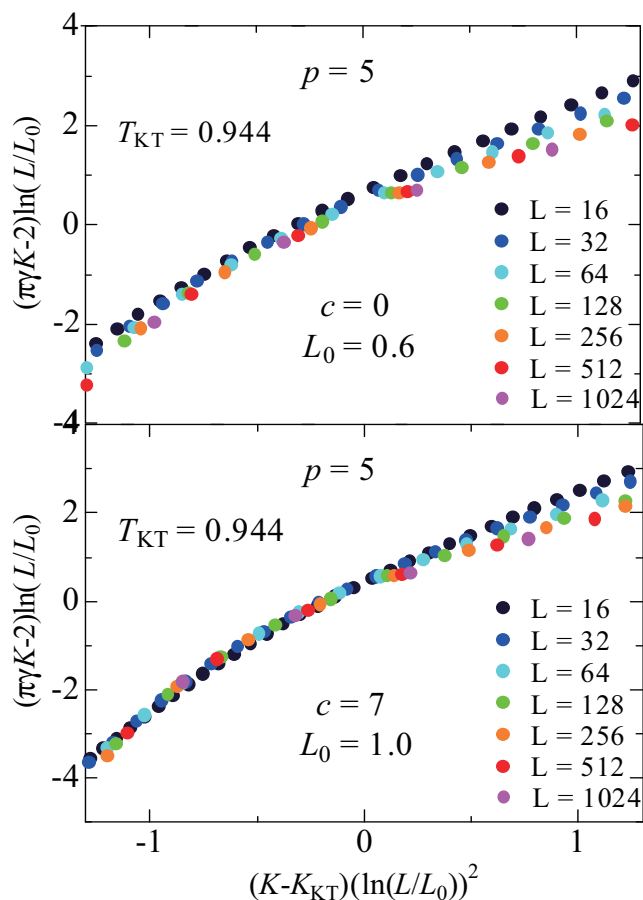


図 6.6 5 状態クロック模型における補正項を考慮する前 (上) と考慮した後 (下) の有限サイズスケーリング。補正項を考慮した後ではスケーリングが改善されている様子がわかる。

図 (6.6) を見てわかるように、補正項を考慮する前はスケーリングの式に乗っている様子が見られず、系のサイズが異なるとずれが大きく生じているのに対し、補正項を考慮するとスケーリングが改善している様子が見られる。しかし、ずれは依然として生じており、 $p = 6$ の場合と比べると、うまくスケーリングできているとは言い難い状況である。これより、5 状態クロック模型における高温側の BKT 転移点近傍では、 $p \geq 6$ の場合と異なり、 Z_5 異方性の効果が強く効いてくることがわかる。これは、 Z_5 異方性が relevant になり始める低温側の BKT 転移点が高温側の BKT 転移点と近いためだと考えることができる。

このように、5 状態クロック模型では、 Z_5 異方性を摂動的に扱い得られた補正項を用い BKT 転移における有限サイズスケーリングを改善することはできるが、 $p = 6$ の場合と比較して十分でないという難点が残る。この点について、次節で詳しく見ていく。

6.3.3 Z_5 異方性の摂動的扱いの妥当性

我々は補正項を考慮する際、 Z_5 異方性が摂動的に扱えると仮定してきた。しかし、実際に helicity modulus を数値計算している系は、クロック模型、すなわち $\lambda_5 \rightarrow \infty$ の場合である。 λ_5 が irrelevant なスケーリング変数であるならば、BKT 転移点近傍でくりこみ変換を繰り返すことによって、 λ_5 は 0 に向かっていくと考えられる。しかし、系のサイズが小さい場合には、くりこみが十分に行えないために λ_5 が小さくなりきれず、有限サイズ効果が生じる。よって、系のサイズが小さいとき、 Z_5 異方性の効果が強く効いてくる、すなわち λ_5 を摂動的に扱うことが困難であると考えられる。

以上の考察より、系のサイズが小さいデータを取り除くことで、5 状態クロック模型についても、 Z_5 異方性を摂動的に扱うことが正当化されると考えられる。そこで、 $L \geq 32$ のデータのみを用い、 Z_5 異方性を摂動的に扱い得られた補正項を用い BKT 転移における有限サイズスケーリングを行った結果を図 (6.7) に示す。このように、図 (6.6) と比べ、十分にずれが小さい範囲でスケーリングを行えていることがわかる。転移点の左側に比べて右側の方がずれが生じている様子が窺えるが、これは 2 章 6 節で説明したように、原田、川島の有限サイズスケーリング [36][37] そのもので生じていたものであり、異方性の効果ではないと考えられる。

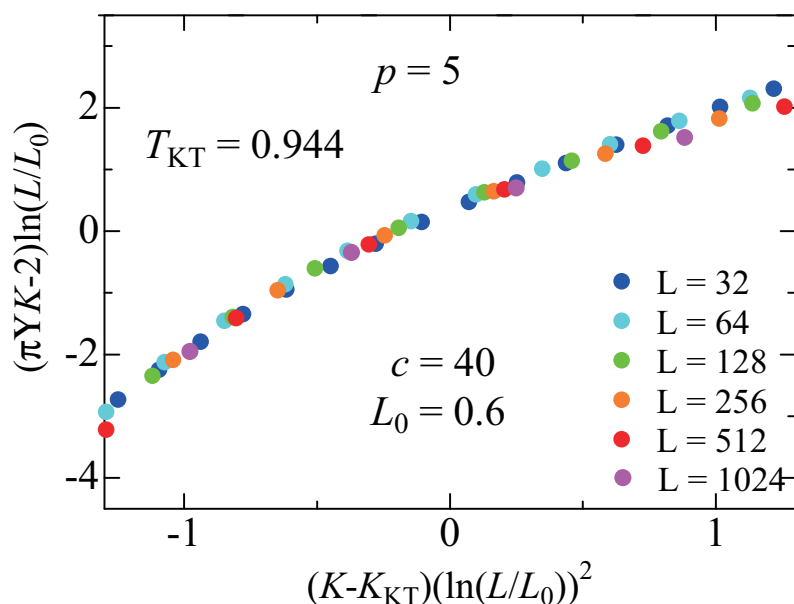


図 6.7 系のサイズが十分大きい場合のデータのみを考慮した、5 状態クロック模型における補正項を考慮した有限サイズスケーリング。

以上より、 $p=5$ のとき、系のサイズが十分大きい場合、具体的には $L \geq 32$ においては、 Z_5 異方性の摂動的扱いが妥当であり、それにより求めた補正項を考慮することによって、BKT

転移における有限サイズスケーリングを行うことができた。したがって、 $p = 5$ では BKT 転移が起きると考えられる。

6.4 Z_5 異方性中の 2 次元 XY 模型における BKT 転移

ここでは、5 状態クロック模型における BKT 転移の存在をより確かにするために、同じユニバーサリティクラスに属すると考えられる、 Z_5 異方性の加わった 2 次元 XY 模型の相転移を調べる。ハミルトニアンは (3.2) であり、異方性の大きさはパラメタ λ_5 に現れる。

まず、 Z_5 異方性の加わった 2 次元 XY 模型における helicity modulus の λ_5 依存性を図 (6.8) に示す。図を見ると、 $\lambda_5 = 0.1$ では XY 模型の、 $\lambda_5 = 10$ では 5 状態クロック模型の

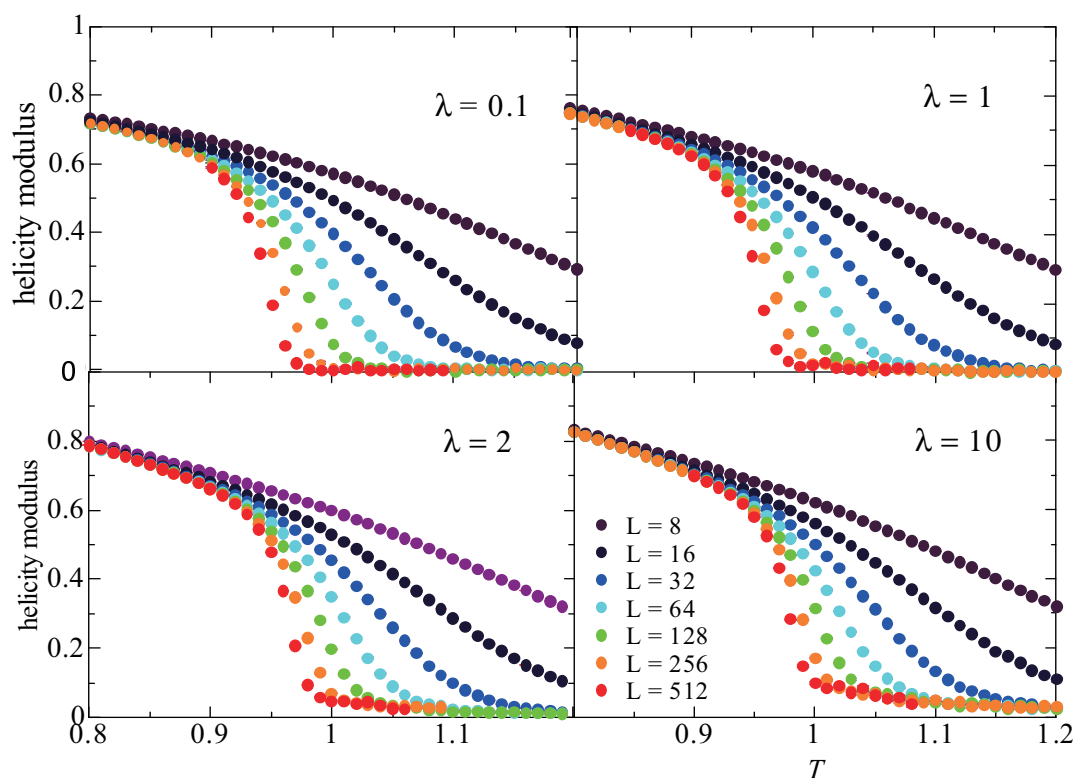


図 6.8 Z_5 異方性の加わった 2 次元 XY 模型における λ_5 の大きさを変化させた時の helicity modulus の数値計算結果。異方性が小さい場合には 2 次元 XY 模型同様の振る舞いが見られ、異方性が大きい場合には 2 次元 p 状態クロック模型同様の振る舞いが見られる。

helicity modulus とほぼ一致した振る舞いをしている。これは、 $L \leq 512$ 程度の大きさの有限サイズ系において、異方性が $\lambda_5 = 0.1$ 程度であればほぼその影響を無視することができ、異方性が $\lambda_5 = 10$ 程度であれば、系は $\lambda_5 \rightarrow \infty$ の時とほぼ同様の性質を持つことを意味している。逆にこれは、 $L = 512$ 程度の大きさであっても、異方性がある程度大きい場合には有限サ

6.4 Z_5 異方性中の 2 次元 XY 模型における BKT 転移

67

イズ効果が強く効いてくることを示している。

次に、 Z_5 異方性の加わった 2 次元 XY 模型の転移温度を求めるために、相関関数の比を計算し、有限サイズスケリングを行う。例として、 $\lambda_5=2$ の場合の結果を図 (6.9) に示す。横軸は L/ξ 、縦軸は相関関数の比であり、2 つのパラメタを $T_{BKT} = 0.921$ 、 $a = 1.53$ とす

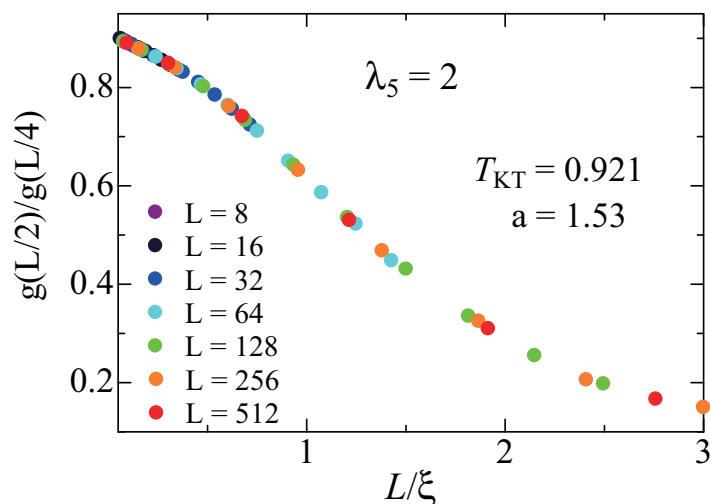


図 6.9 $\lambda_5 = 2$ の場合の Z_5 異方性の加わった 2 次元 XY 模型における相関関数の比の有限サイズスケリングの様子。系のサイズに依らず 1 つの曲線に乗っている様子が分かる。

ると、最適なフィッティングをすることができる。これより、 $\lambda_5 = 2$ の場合の転移温度は $T_C = 0.921(1)$ と見積もることができる。

同様に、 Z_5 異方性の加わった 2 次元 XY 模型の転移温度の λ_5 依存性を求める。その結果を図 (6.10) に示す。

図に見られるように、 λ_5 が十分小さい所、具体的には $\lambda_5 \leq 0.5$ では 2 次元 XY 模型の BKT 転移点 $T_{BKT} = 0.8933(6)$ [57] を再現し、 λ_5 が大きいところでは 2 次元 5 状態クロック模型の転移温度 $T_{BKT} = 0.944(4)$ を再現している。これにより、 Z_5 異方性の加わった 2 次元 XY 模型は異方性がある程度大きいところでは 5 状態クロック模型の性質を再現し、両者が同じユニバーサリティクラスを持つことがもっともらしいと言うことができる。

次に Z_5 異方性の加わった 2 次元 XY 模型において、上で求めた転移温度 T_{BKT} を用い、 L_0 、 c をフィッティングパラメタとして有限サイズスケリングを行うことにより、BKT 転移の存在を確かめる。補正項を考慮する前と考慮した後で有限サイズスケリングを行った結果の λ_5 依存性を図 (6.11) に示す。フィッティングに用いたパラメタの値は図内に示してある。 $\lambda_5 < 1$ の場合、 Z_5 異方性の効果が小さいため、補正項を考慮する必要がないので、ここでは $1 \leq \lambda_5 \leq 4$ の結果のみを示す。これを見ると、補正項を考慮する前でも十分良いスケリングが行えていることがわかる。これは、 $1 \leq \lambda_5 \leq 4$ の範囲では異方性を小さいと見なせるこ

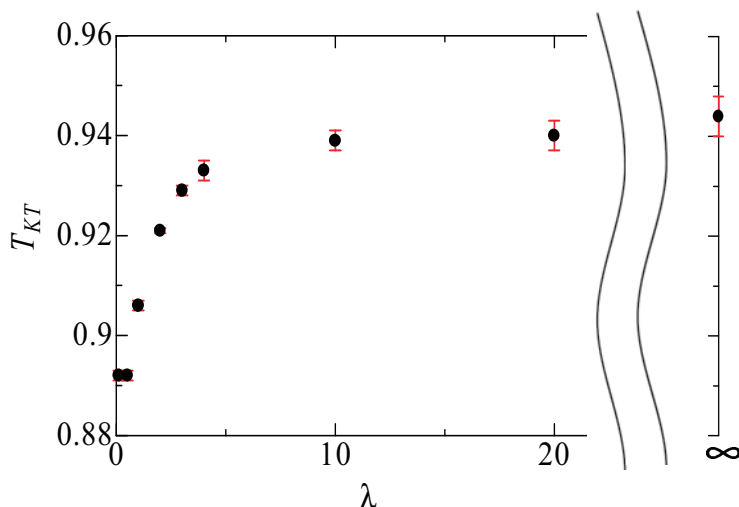


図 6.10 Z_5 異方性の加わった 2 次元 XY 模型の BKT 転移温度の λ_5 依存性の様子。
 $\lambda_5 \rightarrow 0$ で XY 模型の $T_{BKT} = 0.8933(6)$ [57] に、 $\lambda_5 \rightarrow \infty$ で 5 状態クロック模型の
 $T_{BKT} = 0.944(4)$ に近づいている様子が窺える。

とを意味している。また、補正を考慮する前に比べ、補正項を考慮することでさらにスケール
 ing が改善していることも窺える。この時、補正項の係数であるフィッティングパラメタ c が
 $c \propto \lambda_5$ となっていることに注目すべきである。これは、異方性が小さい範囲では補正項が λ_5 に
 比例すべきであるというナイーブな予想と一貫しており、前章で議論した摂動論の有効性を裏
 付けるものである。

最後に、 $\lambda_5 = 10$ の時の有限サイズスケールリングの様子を図 (6.12) に示す。
 5 状態クロック模型の場合には、補正項を考慮することで初めて十分なスケールリングを行え
 ていたが、 $\lambda_5 = 10$ の場合には、補正項を考慮することでスケールリングが改善している様子
 が分かるのはもちろんのこと、補正項を考慮せずとも十分良いスケールリングが行えているこ
 とが分かる。この事実と、 $\lambda_5 = 10$ の時の helicity modulus の数値計算結果 (図 (6.8)) が 5
 状態クロック模型での振る舞い (図 (3.5)) と非常に似ていた事実とを合わせて考えることで、
 我々は重要な知見を得ることができる。すなわち、異方性の加わった場合の有限サイズ系で
 は、helicity modulus のユニバーサルジャンプは BKT 転移であるかどうかを判別する有効な
 基準ではないのである。これは第 4 章の高温展開により得られた知見と一貫している。我々
 は helicity modulus のユニバーサルジャンプを直接扱う代わりに、BKT 転移における有限サ
 イズスケールリングを行うことで、BKT 転移が生じていることを明確に知ることができるの
 である。

以上のように、 λ_5 をパラメタとした Z_5 異方性中の 2 次元 XY 模型において、補正項を考慮
 した BKT 転移の有限サイズスケールリングが成立することを確認した。これは、5 状態クロッ

6.4 Z_5 異方性中の 2 次元 XY 模型における BKT 転移

69

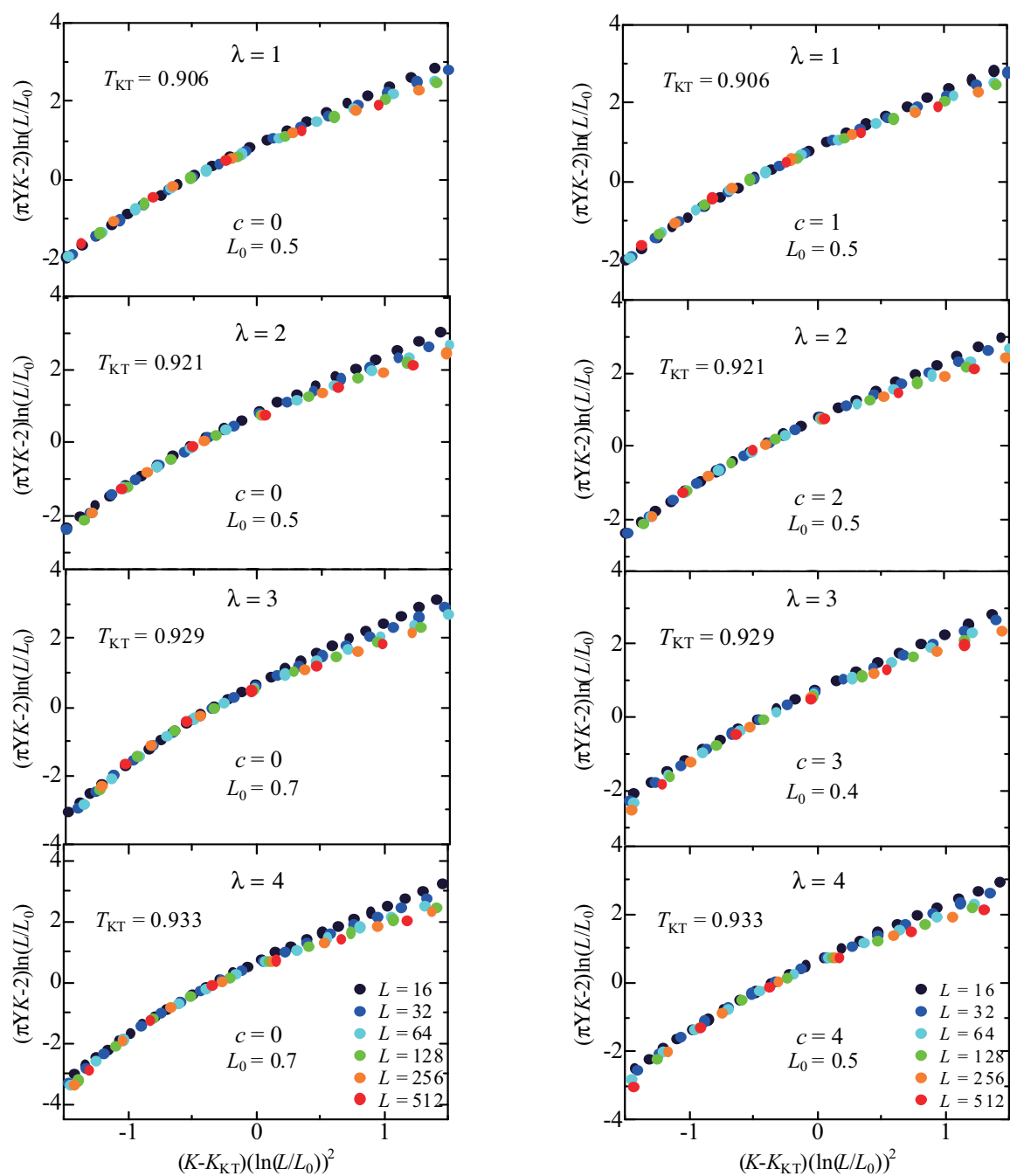


図 6.11 補正項を考慮する前 (左) と考慮した後 (右) の有限サイズスケーリング

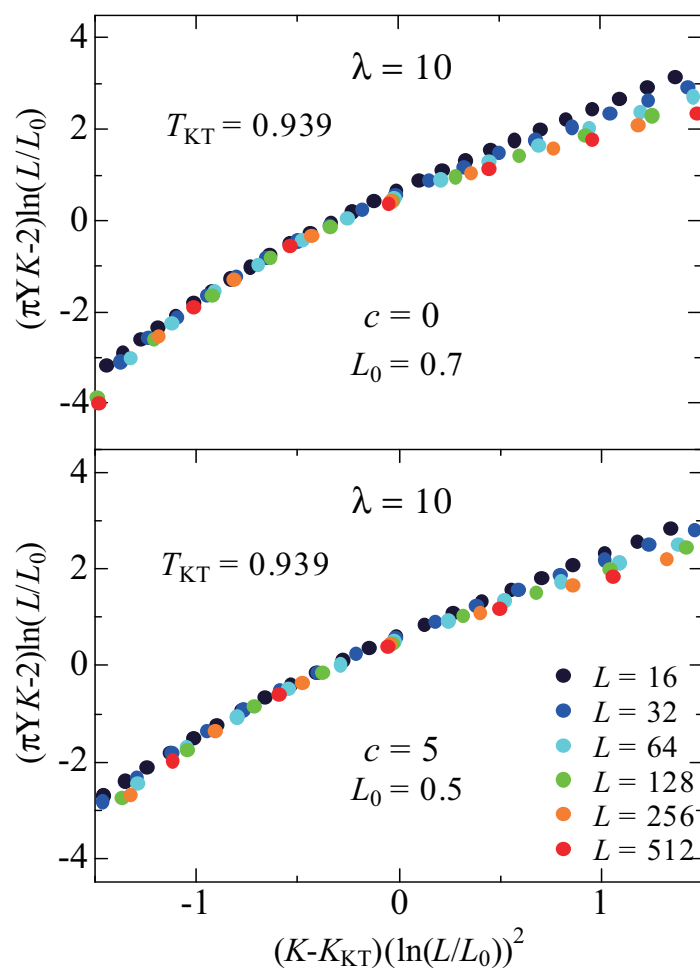


図 6.12 $\lambda_5 = 10$ の時の補正項を考慮する前 (左) と考慮した後 (右) の有限サイズスケールリング。補正項を考慮せずとも十分良いスケールリングが行えているが、補正項を考慮することでさらに改善している様子が分かる。

ク模型における BKT 転移の存在を支持する結果であると言える。

第 7 章

結論

2 次元 p 状態クロック模型はその離散対称性にも関わらず、Jose[20] や Elitzur[21] の研究以来、 $p \geq 5$ で $U(1)$ 対称性を持つ系特有の BKT 転移が生じると考えられていた。しかし近年、数値計算により求めた無限小捻りに対する helicity modulus が常磁性相においても有限値を持ち、BKT 転移の特徴であるユニバーサルジャンプをしないという点から、 $p = 5$ での BKT 転移の存在を疑問視する主張がある [48][49][50]。本研究ではこの問題点を明らかにするため、2 次元 p 状態クロック模型における BKT 転移について調べた。

まず、常磁性相において helicity modulus が有限値を持つ問題を明らかにするために、高温展開を用いて無限小捻りに対する helicity modulus を解析的に計算した。得られた結果は以下の 2 点である。

- p 状態クロック模型では helicity modulus が常磁性相において熱力学極限でも有限値を持つことを示した。これは任意の p において helicity modulus のユニバーサルジャンプが成立し得ないことを意味しているために、ユニバーサルジャンプの有無により BKT 転移の存在の有無を議論することはできないことを意味している。
- そもそも常磁性相では捻りに対する系の応答は 0 であることが期待されるために、 p 状態クロック模型のような離散状態スピン系では、無限小捻りに対する helicity modulus は相の特徴を正確に反映した応答ではない可能性があることを示唆している。

以上より、Baek らが行ったような、 $p = 5$ において helicity modulus のユニバーサルジャンプが見られないために BKT 転移が生じないという考察 [48] は適切でないことを明らかにした。 $p \geq 6$ においてユニバーサルジャンプが生じているように見えたのは、常磁性相での有限値がたまたま小さいためであると考えられる。これは式 (4.14) を見てみると、 p の値が大きくなるに従って、 β のべきが大きくなり、係数が小さくなる、すなわち、高温側での有限値が小さくなることから窺うことができる。

さらに我々は、helicity modulus のユニバーサルジャンプにより BKT 転移の有無を判別す

るのではなく、BKT 転移が生じる場合に有効な有限サイズスケーリングの手法 [36][37] を用いることにより、 $p = 5$ における BKT 転移の有無を調べた。この手法は系が $U(1)$ 対称性を持つ場合にのみ有効であったため、異方性を摂動として扱うことで Z_p 対称性を持つ場合にも有効な手法へ拡張した。これを用い、 Z_p 異方性の効果を補正項として考慮した BKT 転移における有限サイズスケーリングを行った。得られた結果は以下の3点である。

- 5 状態クロック模型において相関関数の比を数値計算し、BKT 転移の場合の温度依存性を持つ相関長を用いた有限サイズスケーリングを行い、うまくスケーリングが行えていることを確認した。また、この方法で転移温度を求め、 $T_{BKT} = 0.944(4)$ と見積もった。
- 本研究で開発した Z_p 異方性の効果を補正項として考慮した BKT 転移における有限サイズスケーリングを行うことにより、5 状態クロック模型でスケーリングが成立することを示した。
- $p \geq 6$ の p 状態クロック模型の場合には、補正項を考慮せずともスケーリングが成立することを示した。

これらの結果は、 $p \geq 5$ における p 状態クロック模型では BKT 転移が生じることを支持している。無限小捻りに対する helicity modulus(4.4) が定義式 (4.2) と異なる可能性があるにも関わらず (4.4) を用いた有限サイズスケーリングが成立したことは、転移点近傍のようなスピン波近似が成り立つ領域では (4.4) と (4.2) が等価になる可能性があることを示唆している。これは $U(1)$ 対称性を持つ XY 模型では計算式 (4.4) と定義式 (4.2) が等価であること、また本来 Z_p 対称性を持つ p 状態クロック模型において BKT 相では emergent $U(1)$ symmetry が生じていることを考慮すると、もっともらしいと考えられる。

さらに、 $p \geq 6$ の p 状態クロック模型の場合には、補正項を考慮せずともスケーリングが成立することから、 p の値が大きくなるにつれて異方性の効果が小さくなることを明らかにした。 $p = 5$ において補正項が必要であったこと、また常磁性相での helicity modulus の有限値が大きかったことを考えると、 $p = 6$ から急激に Z_p 異方性の効果が小さくなることが示唆される。しかしこれは、計算式を用いたことによる効果である可能性も否定することはできない。

以上より、我々は p 状態クロック模型では $p \geq 5$ において BKT 転移が存在することを支持すると結論する。

付録 A

XY 模型の高温展開

ここでは、高温展開の方法を用いることにより、2次元 XY 模型の高温における相関関数を求める [52]。ハミルトニアンは (2.1) となるので、相関関数は、その定義により

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) &= \langle \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \rangle \\ &= \langle \cos(\theta_{\mathbf{r}_1} - \theta_{\mathbf{r}_2}) \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\theta \exp \left[J\beta \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \cos(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'}) \right] \cos(\theta_{\mathbf{r}_1} - \theta_{\mathbf{r}_2}) \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

と表せる。 $\int \mathcal{D}\theta = \prod_k \int_0^{2\pi} d\theta_k$ である。ここで、高温極限である $T \rightarrow \infty$ すなわち $\beta \rightarrow 0$ である状況を考える。(A.1) の指数関数の部分をテイラー展開すると、 $\beta \rightarrow 0$ より、展開の低次の項が相関関数の振る舞いを決める。このような方法で物理量の振る舞いを求めることを高温展開と呼ぶ。展開について n 次の項を $G^{(n)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ と表すと

$$G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = G^{(0)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + G^{(1)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + G^{(2)}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \dots \quad (\text{A.2})$$

と書ける。

まず、分母、すなわち分配関数を求める。

$$\begin{aligned} Z &= \int \mathcal{D}\theta \exp \left[J\beta \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \cos(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'}) \right] \\ &= \int \mathcal{D}\theta \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left[J\beta \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \cos(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'}) \right]^m \\ &= \int \mathcal{D}\theta \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(\frac{J\beta}{2} \right)^m \left[\sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left\{ e^{i(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'})} + e^{-i(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'})} \right\} \right]^m \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

ここで、 m 次の項である

$$\left[\sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left\{ e^{i(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'})} + e^{-i(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'})} \right\} \right]^m \quad (\text{A.4})$$

を考える。 $e^{i(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'})}$ をサイト $\mathbf{r}$ から $\mathbf{r}'$ へ向かう矢印のついたボンドだと考えると、(A.4) を展開した各項は、図 (A.1) のようなダイアグラムで表現できる。例えば、A 点のように、出ていく矢印が 1 つだけのサイトに対しては、

$$\int_0^{2\pi} d\theta_A e^{-i\theta_A} = 0 \quad (\text{A.5})$$

となり、B 点のように、出ていく矢印が 2 つのサイトに対しては、

$$\int_0^{2\pi} d\theta_B e^{-2i\theta_B} = 0 \quad (\text{A.6})$$

となり、両方とも消えてしまう。C 点のように入ってくる矢印と出ていく矢印の数が等しい場合のみ

$$\int_0^{2\pi} d\theta_C e^{i(\theta_C - \theta_C)} = 2\pi \quad (\text{A.7})$$

のように、有限の値を持つ。

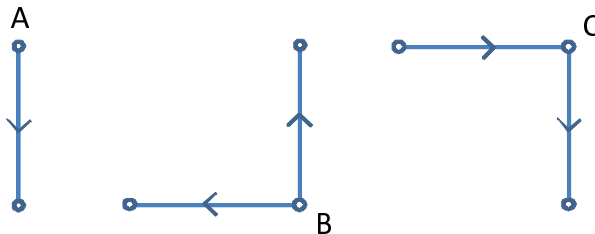


図 A.1 展開の各項に対応するダイアグラム

よって、(A.4) を展開した時に残るのは、図 (A.1) の C 点のような点のみで構成されたループのダイアグラムのみである。これを図 (A.2) に表す。これを満たす最低次の項は $m = 2$ である。

次に、(A.1) の分子を考えると、(A.4) と同様にして、 m 次の項は

$$\begin{aligned} & \left[\sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left\{ e^{i(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'})} + e^{-i(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'})} \right\} \right]^m \cos(\theta_{\mathbf{r}_1} - \theta_{\mathbf{r}_2}) \\ &= \left[\sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left\{ e^{i(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'})} + e^{-i(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'})} \right\} \right]^m \frac{1}{2} \left\{ e^{i(\theta_{\mathbf{r}_1} - \theta_{\mathbf{r}_2})} + e^{-i(\theta_{\mathbf{r}_1} - \theta_{\mathbf{r}_2})} \right\} \quad (\text{A.8}) \end{aligned}$$

となる。相関長 $\xi \equiv [\ln(2/J\beta)]^{-1}$ とすると、高温での相関関数の長距離での振る舞いは

$$G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \sim \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}{\xi}\right) \quad (\text{A.10})$$

となり、指数関数的に減衰する。これは常磁性における相関関数の典型的な振る舞いである。

付録 B

多重 Gauss 積分と格子 Green 関数

B.1 多重 Gauss 積分

B.1.1 1 変数の場合

1 変数の場合、Gauss 積分は簡単に実行できる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{a}{2}x^2} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \quad (\text{B.1})$$

ただし、 $a > 0$ とする。また、上の場合を一般化した次の Gauss 積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{a}{2}x^2 + bx} = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{2a}} \quad (\text{B.2})$$

は、 $x \rightarrow x + b/a$ の変数変換を行うことにより、(B.1) を用いて求めることができる。ここで、(B.2) は b が実数のときはもちろん、虚数の場合でも成り立つ。以下、積分範囲は基本的に $-\infty$ から ∞ とし、明らかな場合は省略することとする。

B.1.2 多変数の場合

多変数の場合、1 変数のとき同様に Gauss 積分を行うことができ

$$\int d\mathbf{x} e^{-\frac{1}{2} \mathbf{x} A \mathbf{x}} = (2\pi)^{N/2} (\det A)^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{B.3})$$

となる。ただし、 $\mathbf{x}$ は N 個の成分を持つ実ベクトルであり、 A は $N \times N$ 個の成分を持つ正定値の実対称行列である。(B.3) は次のようにして証明することができる。まず、行列 A は直交行列 O を用いて $A = {}^t O D O$ のように対角化することができる。ただし、 D は正の対角成分のみを持つ対角行列である。行列 O はベクトルの変換 $\mathbf{x} \rightarrow O\mathbf{x}$ により取り込むことができ、積分にはヤコビアンが現れるが、 $\det O = 1$ より寄与を及ぼさない。これより、積分の指数関

数の肩は ${}^t\mathbf{x}D\mathbf{x}/2$ となるが、 D が対角成分のみを持つので N 個の変数 x_i ($i = 1, 2, \dots, N$) について独立に Gauss 積分を実行することができ、それぞれの寄与は $\sqrt{2\pi/d_i}$ となる。 d_i は対角行列 D の i 番目の成分である。ここで、 $\prod_{i=1}^N d_i = \det D = \det A$ に注意すると、(B.3) を得ることができる。

1 変数の時と同様に、これを一般化した次の多変数 Gauss 積分も実行することができる。

$$\int d\mathbf{x} e^{-\frac{1}{2}{}^t\mathbf{x}A\mathbf{x} + {}^t\mathbf{j}\cdot\mathbf{x}} = (2\pi)^{N/2} (\det A)^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{1}{2}{}^t\mathbf{j}A^{-1}\mathbf{j}} \quad (\text{B.4})$$

これは、 $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + A^{-1}\mathbf{j}$ の変数変換を行うことにより確認することができる。

我々は (B.4) を用いることにより、Gauss 分布に従う確率変数について期待値を求めることができる。今、(B.4) の両辺に左から微分演算子 $\partial_{j_m j_n}^2|_{\mathbf{j}=0}$ を掛けることを考える。左辺からは指数関数の肩から $x_m x_n$ が降りてき、右辺からは A_{mn}^{-1} が降りてくるので

$$\langle x_m x_n \rangle = A_{mn}^{-1} \quad (\text{B.5})$$

が得られる。ただし、任意の変数 X について

$$\langle X \rangle \equiv (2\pi)^{-N/2} (\det A)^{\frac{1}{2}} \int d\mathbf{x} e^{-\frac{1}{2}{}^t\mathbf{x}A\mathbf{x}} X \quad (\text{B.6})$$

と定義される。ところで、 A^{-1} はその定義より $\sum_j A_{ij} A_{jk}^{-1} = \delta_{i,k}$ の関係式を満たす。よって、 A^{-1} は A の格子 Green 関数と捉えることができる。次節において、本論文で取り扱っているモデルで現れる格子 Green 関数の具体系を求めていく。

(B.5) は偶数個の積の場合に一般化することができる。例えば (B.4) の両辺に左から 4 回微分の演算子 $\partial_{j_k j_l j_m j_n}^4|_{\mathbf{j}=0}$ をかける時、左辺からは単純に $x_k x_l x_m x_n$ が降りてくるだけだが、右辺からは微分演算子をつける順番によって異なる寄与が得られる。具体的には $A_{kl}^{-1} A_{mn}^{-1}$ 、 $A_{km}^{-1} A_{ln}^{-1}$ 、 $A_{kn}^{-1} A_{lm}^{-1}$ の 3 通りが考えられる。よって

$$\langle x_k x_l x_m x_n \rangle = A_{kl}^{-1} A_{mn}^{-1} + A_{km}^{-1} A_{ln}^{-1} + A_{kn}^{-1} A_{lm}^{-1} \quad (\text{B.7})$$

が得られる。これは $2n$ 個の変数の場合も同様の手続きを行うことにより

$$\langle x_{i_1} x_{i_2} \cdots x_{i_{2n}} \rangle = \sum_{\text{paring of } \{i_1, \dots, i_{2n}\}} A_{i_{k_1} i_{k_2}}^{-1} \cdots A_{i_{k_{2n-1}} i_{k_{2n}}}^{-1} \quad (\text{B.8})$$

を得ることができる。ただし、和は $2n$ 個の $\{i_1, \dots, i_{2n}\}$ についてペア n 個を作る全ての場合の数について取る。(B.8) は Wick の定理と呼ばれる。これより、我々は Gauss 分布に従う変数 $\{x_i\}$ について偶数個の積の期待値を計算することができる。

B.2 格子 Green 関数

79

B.1.3 連続変数の場合

これまでは離散変数の場合を扱ってきたが、これを連続変数の場合に拡張することができる。例えば、離散多変数の場合の一般的な Gauss 積分 (B.4) を連続変数の場合に拡張すると

$$\begin{aligned} & \int \mathcal{D}x(\mathbf{r}) \exp \left[-\frac{1}{2} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' x(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}, \mathbf{r}') x(\mathbf{r}') + \int d\mathbf{r} j(\mathbf{r}) x(\mathbf{r}) \right] \\ & \propto (\det A)^{-\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{1}{2} \int \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' j(\mathbf{r}) A^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') j(\mathbf{r}') \right] \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

となる。同様に、(B.5) を連続変数の場合に拡張すると

$$\langle x(\mathbf{r}) x(\mathbf{r}') \rangle = A^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (\text{B.10})$$

を得る。

B.2 格子 Green 関数

前節では Gauss 分布に従う変数についてその期待値を求め、格子 Green 関数を用いて記述できることを見た。本節では、 $-\infty$ から ∞ までの連続的な値を取る変数 ϕ により表されるハミルトニアン

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2} \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (\phi_{\mathbf{r}} - \phi_{\mathbf{r}'})^2 \quad (\text{B.11})$$

を用いて、格子 Green 関数の具体系を求め、その応用例を考える。

次の期待値を求めることを考える。

$$\begin{aligned} \langle \exp [i^t \mathbf{j} \cdot \phi] \rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}_{SW}} \int \mathcal{D}\phi_{\mathbf{r}} \exp \left[-\frac{K}{2} \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (\phi_{\mathbf{r}} - \phi_{\mathbf{r}'})^2 + i^t \mathbf{j} \cdot \phi \right] \\ &\propto \frac{1}{\mathcal{Z}_{SW}} \int \mathcal{D}\phi_{\mathbf{r}} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (\phi_{\mathbf{r}} - \phi_{\mathbf{r}'})^2 + i \sum_{\mathbf{r}} j_{\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{r}} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

ただし、 $K \equiv J\beta$ 、 $\phi = {}^t(\phi_{\mathbf{r}_1}, \phi_{\mathbf{r}_2}, \dots, \phi_{\mathbf{r}_N})$ であり、右辺第2項では $\phi \rightarrow \phi/\sqrt{K}$ 、 $j \rightarrow \sqrt{K}j$ と定義し直した。前節で得た公式 (B.4) を生かすためには、 N 行 N 列の正定値の実対称行列 A を用いて

$$\langle \exp [i^t \mathbf{j} \cdot \phi] \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_{SW}} \int \mathcal{D}\phi_{\mathbf{r}} \exp \left[-\frac{1}{2} {}^t \phi A \phi + i^t \mathbf{j} \cdot \phi \right] \quad (\text{B.13})$$

の形にしなければならない。(B.12) の $\sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (\phi_{\mathbf{r}} - \phi_{\mathbf{r}'})^2$ においてあるサイト $\mathbf{k}$ に注目すると

$$(\phi_{\mathbf{k}} - \phi_{\mathbf{k}+\delta})^2 = \phi_{\mathbf{k}}^2 + \phi_{\mathbf{k}+\delta}^2 - 2\phi_{\mathbf{k}}\phi_{\mathbf{k}+\delta} \quad (\text{B.14})$$

となる。ここで $\delta = \pm x, \pm y$ であり、 x, y はそれぞれ x 軸、 y 軸の正方向に格子定数分だけ進むベクトルである。 δ が 4 種類あることより、 $\phi_{\mathbf{k}}^2$ の項は和の中で 4 回現れることに注意すると (B.12) と (B.13) が等価であるためには、行列 A が次の性質を持てば良いことが分かる。

$$A_{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j} = \begin{cases} 4 & (\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j) \\ -1 & (\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j + \delta) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad (\text{B.15})$$

これより、行列 A が実対称行列であることがわかる。

格子 Green 関数を求めるために、逆行列 $A^{-1} = \mathcal{G}$ を求める。行列 A と $\mathcal{G}$ に Fourier 変換を行うと

$$A_{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k} A(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \quad (\text{B.16})$$

$$\mathcal{G}_{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k} \mathcal{G}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \quad (\text{B.17})$$

となる。(B.15) より、行列 A の波数成分について

$$\begin{aligned} A(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{R}} A_{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_i + \mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \\ &= 4 - (e^{-ik_x} + e^{ik_x} + e^{-ik_y} + e^{ik_y}) \\ &= 4 - 2 \cos k_x - 2 \cos k_y \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

が得られる。一方

$$\begin{aligned} (A\mathcal{G})_{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j} &= \sum_{\mathbf{R}} A_{\mathbf{r}_i, \mathbf{R}} \mathcal{G}_{\mathbf{R}, \mathbf{r}_j} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int \int d\mathbf{k} d\mathbf{k}' A(\mathbf{k}) \mathcal{G}(\mathbf{k}') \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{R}) + i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{r}_j)} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k} A(\mathbf{k}) \mathcal{G}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

となるが、 $\mathcal{G}$ の定義より $(A\mathcal{G})_{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j} = \delta_{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j}$ が成り立つので

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}) = A(\mathbf{k})^{-1} \quad (\text{B.20})$$

となる。よって、(B.18)、(B.20) より

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j} &= \mathcal{G}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k} A(\mathbf{k})^{-1} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \\ &= \frac{1}{2(2\pi)^2} \int d\mathbf{k} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}}{2 - \cos k_x - \cos k_y} \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

が得られる。

B.3 (2.19) の導出

81

最後に格子 Green 関数を具体的に計算する。系のサイズ L が大きくなると波数 $k \ll 1$ を取りうるようになるが、(B.21) を見るとその寄与は発散を与える。この赤外発散を上手く扱うために、次のように発散を含まない Green 関数 $\mathcal{G}'(\mathbf{r})$ を定義する。

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}) = \mathcal{G}'(\mathbf{r}) + \mathcal{G}(0) \quad (\text{B.22})$$

$$\mathcal{G}'(\mathbf{r}) = \frac{1}{2(2\pi)^2} \int d\mathbf{k} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - 1}{2 - \cos k_x - \cos k_y} \quad (\text{B.23})$$

$\mathcal{G}(0)$ が発散を含む項であり、 $\mathcal{G}'(\mathbf{r})$ は $k \ll 1$ のとき分子が 0 となるため、発散しない。 $|\mathbf{r}| \gg 1$ の時、 $\mathcal{G}'(\mathbf{r})$ の積分が値を持つ区間は k が $1/r$ よりも大きい所である。よって、極座標を用いて積分することにより

$$\mathcal{G}'(\mathbf{r}) \sim -\frac{1}{2(2\pi)^2} \int_{1/r}^{\pi} k dk \int_0^{2\pi} d\theta_k \frac{1}{k^2/2} \sim -\frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{|\mathbf{r}|}{a} \right) + \text{const.} \quad (\text{B.24})$$

を得る。 a は格子定数であり、定数項は詳細な計算により $\text{const.} \sim -1/4$ となることが知られている [53]。また、 $\mathcal{G}(0)$ についても詳細は文献 [25] に譲り結果のみを述べると、スピン波近似を行った時の格子 Green 関数の具体系は以下ようになる。

$$\mathcal{G}'(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{|\mathbf{r}|}{a} \right) - \frac{1}{4} \quad (\text{B.25})$$

$$\mathcal{G}(0) = \frac{1}{2\pi} \ln \left(\frac{L}{a} \right) \quad (\text{B.26})$$

B.3 (2.19) の導出

式 (2.18) において $\phi_{\mathbf{R}} \rightarrow \sqrt{K} \phi_{\mathbf{R}}$ と変数変換すると、まさに (B.12) の形をしている。2 式の対応を考えると

$$j_{\mathbf{R}} = 2\pi i \sqrt{K} n_{\mathbf{R}} \quad (\text{B.27})$$

となる。よって、公式 (B.4) を用いることで指数関数の肩の部分が

$$\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} j_{\mathbf{R}} \mathcal{G}_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} j_{\mathbf{R}'} = -2\pi^2 K \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} n_{\mathbf{R}} \mathcal{G}(\mathbf{R} - \mathbf{R}') n_{\mathbf{R}'} \quad (\text{B.28})$$

となることを求めることができ、(2.19) を示すことができる。

B.4 スピン波領域の相関関数の計算

式 (B.4) を用いることにより、スピン波近似のハミルトニアン (2.3) を用い、一般化された相関関数

$$G_p(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \langle \cos(\theta_{\mathbf{r}_1} - \theta_{\mathbf{r}_2}) \rangle = \left\langle e^{ip(\theta_{\mathbf{r}_1} - \theta_{\mathbf{r}_2})} \right\rangle \quad (\text{B.29})$$

を計算することができる。期待値を定義通り書き下すと

$$G_p(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\mathcal{Z}_{SW}} \int \mathcal{D}\theta_{\mathbf{r}} \exp \left[ip(\theta_{\mathbf{r}_1} - \theta_{\mathbf{r}_2}) - \frac{K}{2} \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'})^2 \right] \quad (\text{B.30})$$

となる。ここで、 $K \gg 1$ の低温では $\theta_{\mathbf{r}}$ の値が大きいものの寄与は極めて小さいことを利用して、本来は $-\pi$ から π である変数 $\theta_{\mathbf{r}}$ の定義域を $-\infty$ から ∞ に拡張する。これにより、(B.30) は Gauss 積分可能となる。この時、(B.30) の形は Villain 模型から 2 次元 Culomb ガス模型にマッピングする前である (2.18) と同様の形をしている。ただし、(B.30) は (2.18) の $m_{\mathbf{R}_1}$ と $m_{\mathbf{R}_2}$ のみが有限で、他は 0 である場合に対応している。また、 $m_{\mathbf{R}_1}$ と $m_{\mathbf{R}_2}$ は逆符号であるために、(B.30) も中性条件を満たしていることが確認できる。以上より、(2.18) から (2.26) を得たときと同様の議論から、 $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \gg 1$ の場合、一般化された相関関数は

$$G_p(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \propto \exp \left[-\frac{p^2}{2\pi K} \ln \left(\frac{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}{a} \right) \right] = \left(\frac{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}{a} \right)^{-\frac{p^2}{2\pi K}} \quad (\text{B.31})$$

となることが分かる。これより、 $p = 1$ の時、通常 of 相関関数 (2.5) の形になることが確認できる。

付録 C

Villain 模型の双対変換

ここでは、2次元古典 XY 模型と同じユニバーサリティクラスに属すると考えられる、2次元 Villain 模型の双対変換について説明する。ここでは文献 [24] に沿って話を進める。

Villain 模型の分配関数は、2章4節で導入したように

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\theta_{\mathbf{r}} \sum_{\{m_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}\}} \exp \left[-\frac{K}{2} \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (\phi_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} - 2\pi m_{\mathbf{r},\mathbf{r}'})^2 \right] \quad (\text{C.1})$$

と表される。ここで、 $K \equiv J/T$ 、 $\phi_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} \equiv \theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'}$ であり、 $m_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}$ は $-\infty$ から ∞ の整数値を取る。まず、(C.1) において Boltzmann factor を $u(\phi_{\mathbf{r},\mathbf{r}'})$ と表すと、

$$u(\phi_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}) = \sum_{\{m_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}\}} \exp \left[-\frac{K}{2} \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (\phi_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} - 2\pi m_{\mathbf{r},\mathbf{r}'})^2 \right] \quad (\text{C.2})$$

である。このとき

$$\begin{aligned} \tilde{u}(l_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}) &= \int d\phi_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} e^{il_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}\phi_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}} \sum_{\{m_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}\}} \exp \left[-\frac{K}{2} \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (\phi_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} - 2\pi m_{\mathbf{r},\mathbf{r}'})^2 \right] \\ &= \sum_{\{m\}} \int d\phi \exp \left[-\frac{K}{2} \left\{ \phi - \left(2\pi m + \frac{il}{K} \right) \right\}^2 - \frac{l^2}{2K} + 2i\pi ml \right] \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{K}} \sum_m \exp \left[-\frac{l^2}{2K} - 2i\pi ml \right] \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{K}} e^{-\frac{l^2}{2K}} \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

より、

$$u(\phi_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}) = \frac{1}{2\pi} \sum_{l_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}=-\infty}^{\infty} \tilde{u}(l_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}) e^{-il_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}\phi_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi K}} \sum_{\{l_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}\}} e^{-\frac{l_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^2}{2K} - il_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}\phi_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}} \quad (\text{C.4})$$

となる。ゆえに、(C.1) は

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{l_{r,r'}\}} \int \mathcal{D}\theta_r \prod_{\langle r,r' \rangle} \frac{1}{\sqrt{2\pi K}} \exp \left[-\frac{l_{r,r'}^2}{2K} - il_{r,r'} \phi_{r,r'} \right] \quad (\text{C.5})$$

と変形できる。

ここで、格子点 r の周りのスピンとボンドを考える。図 (C.1) のように、矢印の向きを右及び上向きに取り、 $\phi_{r,r'} = \theta_r - \theta_{r'}$ の r' から r へ矢印が向くように符号を決めることにする。

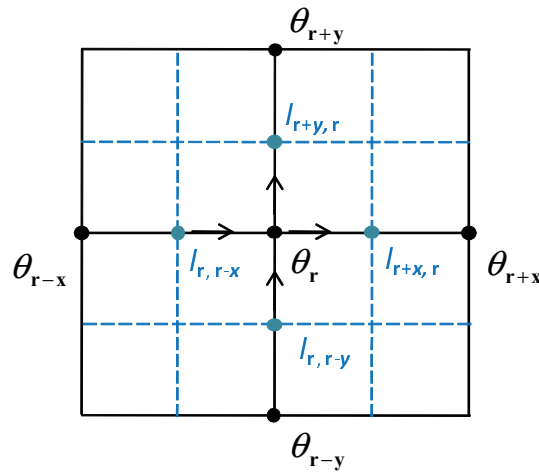


図 C.1 格子点 r の周りのスピンとボンドの向き。

この時、(C.5) 中に現れる θ_r を含む項は

$$\begin{aligned} \sum_{r'=r\pm x, r\pm y} l_{r,r'} \phi_{r,r'} &= l_{r,r-x} \phi_{r,r-x} + l_{r+x,r} \phi_{r+x,r} + l_{r,r-y} \phi_{r,r-y} + l_{r+y,r} \phi_{r+y,r} \\ &= l_{r,r-x} (\theta_r - \theta_{r-x}) + l_{r+x,r} (\theta_{r+x} - \theta_r) + l_{r,r-y} (\theta_r - \theta_{r-y}) \\ &\quad + l_{r+y,r} (\theta_{r+y} - \theta_r) \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

である。ただし、 x, y はそれぞれ右向き、上向きに 1 つの格子点だけ進むベクトルである。ここで l が湧きだしのない場であるという条件 ($\nabla \cdot l = 0$)、すなわち

$$l_{r,r-x} - l_{r+x,r} + l_{r,r-y} - l_{r+y,r} = 0 \quad (\text{C.7})$$

という条件を課すと、(C.5) 中の θ_r を含む項は

$$\int d\theta_r e^{-i(l_{r,r-x} - l_{r+x,r} + l_{r,r-y} - l_{r+y,r})\theta_r} = 1 \quad (\text{C.8})$$

のように、簡単に計算できる。これを用いると、(C.5) は

$$\mathcal{Z} \propto \sum'_{\{l_{r,r'}\}} \prod_{\langle r,r' \rangle} e^{\frac{l_{r,r'}^2}{2K}} \quad (\text{C.9})$$

となる。ただし、プライムは全ての $\mathbf{r}$ について条件 (C.7) を満たす和を取る記号を表す。

さらに、湧きだしの無い場はローテーションで書けるので、双対格子点上に存在するベクトル場 $\boldsymbol{\mu}$ を用いて、連続極限で

$$\begin{aligned} \mathbf{l} &= \nabla \times \boldsymbol{\mu} \\ \Leftrightarrow \begin{pmatrix} l_x \\ l_y \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \partial_y \mu \\ -\partial_x \mu \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

と書ける。これを離散的に表すと

$$\begin{aligned} l_{\mathbf{r}+\mathbf{x},\mathbf{r}} &= \mu_{\mathbf{r}'} - \mu_{\mathbf{r}'-\mathbf{y}}, \quad l_{\mathbf{r}+\mathbf{y},\mathbf{r}} = -(\mu_{\mathbf{r}'} - \mu_{\mathbf{r}'-\mathbf{x}}), \\ l_{\mathbf{r},\mathbf{r}-\mathbf{x}} &= \mu_{\mathbf{r}'-\mathbf{x}} - \mu_{\mathbf{r}'-\mathbf{x}-\mathbf{y}}, \quad l_{\mathbf{r},\mathbf{r}-\mathbf{y}} = -(\mu_{\mathbf{r}'-\mathbf{y}} - \mu_{\mathbf{r}'-\mathbf{x}-\mathbf{y}}) \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

となる。これを用いると、(C.9) は

$$\mathcal{Z} = \text{const} \cdot \sum_{\mu_{\mathbf{r}}=-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{1}{2K} \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} (\mu_{\mathbf{r}} - \mu_{\mathbf{r}'})^2 \right] \quad (\text{C.12})$$

と書ける。この分配関数が、定数倍を無視して SOS 模型の分配関数と一致する。元の分配関数 (C.1) と比較すると、Boltzmann factor において K の位置が逆数的になっている。すなわち、元の模型 (C.1) での高温領域が、新たな模型 (C.12) での低温領域に対応している。これはまさに、後者の模型が前者の模型に対して双対変換を行った結果得られたものであることを表している。

付録 D

渦の相関関数

2章3節では単独の渦が生成する場合を考えてきた。ここではより实际的に、複数個の渦励起がある場合を考え、渦の影響も考慮した相関関数を考える。ここでは文献 [26] に沿って話を進める。

まず、渦がある場合を特徴付ける量である、ある閉曲線に沿った θ の変化分の線積分を考える。 $\nabla\theta = \mathbf{u}$ と表すと、渦が無いときは

$$\oint_C d\mathbf{l} \cdot \mathbf{u} = \int d\mathbf{S} \cdot (\nabla \times \mathbf{u}) = 0 \quad (\text{D.1})$$

であるが、渦があるときは

$$\oint_C d\mathbf{l} \cdot \mathbf{u} = \int d\mathbf{S} \cdot (\nabla \times \mathbf{u}) = 2\pi \sum_{\mathbf{r}_i} m_{\mathbf{r}_i} \quad (\text{D.2})$$

となる。渦が無い場合はスピン波の場合であり、 $\mathbf{u} = \nabla\phi$ のように書ける。ここで、 ϕ はスカラーポテンシャルである。一方、渦がある場合は、(D.2) より

$$\nabla \times \mathbf{u} = 2\pi \mathbf{z} \sum_{\mathbf{r}_i} n_{\mathbf{r}_i} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = 2\pi \mathbf{z} \rho(\mathbf{r}) \quad (\text{D.3})$$

を満たす。 $\mathbf{z}$ は系が存在する平面に垂直な単位ベクトルであり、 $\mathbf{r}_i$ は渦がある位置を表す。また、渦密度として

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i m_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (\text{D.4})$$

を導入した。ここで、系が存在する平面に垂直な成分 ψ のみを持つベクトルポテンシャル $\boldsymbol{\psi}$ を用いて $\mathbf{u} = \nabla \times \boldsymbol{\psi}$ と表すと、(D.3) は

$$\nabla \times \mathbf{u} = \nabla \times (\nabla \times \boldsymbol{\psi}) = \nabla(\nabla \cdot \boldsymbol{\psi}) - \nabla^2 \boldsymbol{\psi} = -\nabla^2 \boldsymbol{\psi} \quad (\text{D.5})$$

となる。(D.3)、(D.5) より、 $\psi(\mathbf{r})$ はポアソン方程式

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{r}) = -2\pi \rho(\mathbf{r}) \quad (\text{D.6})$$

を満たすことがわかる。この解は Green 関数を用いて

$$\psi(\mathbf{r}) = -2\pi \int d\mathbf{r}' \mathcal{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}') \quad (\text{D.7})$$

と表せる。Green 関数は $\nabla^2 \mathcal{G}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})$ の解であり、その波数成分は Fourier 変換を施すことにより

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}) = \frac{1}{k^2} \quad (\text{D.8})$$

となることが分かる。

元の議論に戻ると、スピンの作る場について、スピン波の場を $\mathbf{u} = \nabla \phi$ 、渦の場を $\mathbf{u} = \nabla \times \boldsymbol{\psi}$ と表すことができるので、一般に (2.29) のように表現することができる。この時、ハミルトニアン (2.3) は

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2} \int d\mathbf{r} \mathbf{u}^2 = \frac{J}{2} \int d\mathbf{r} [(\nabla \phi)^2 + (\nabla \times \boldsymbol{\psi})^2] \quad (\text{D.9})$$

と表せる。ただし、ここでは低温でスピンの角度が滑らかに変化する場合を考えており、格子を連続化している。また、 $\nabla \phi \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi})$ の項は部分積分により消えるので始めから取り除いている。これより、ハミルトニアンを $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{SW} + \mathcal{H}_V$ のように、スピン波による寄与 $\mathcal{H}_{SW}$ と渦による寄与 $\mathcal{H}_V$ に分けることができることがわかる。

次に、(D.9) を用いて $\mathbf{u}$ の相関関数 (2.30) を計算することを考える。ハミルトニアン (D.9) に Fourier 変換を施すと

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2} \int d\mathbf{r} \mathbf{u}^2(\mathbf{r}) = \frac{2\pi J}{2} \int d\mathbf{k} \mathbf{u}(\mathbf{k}) \mathbf{u}(-\mathbf{k}) \quad (\text{D.10})$$

となるが、これは 2 次形式なので、Fourier 変換を用いて Gauss 積分を実行すると

$$\int d\mathbf{r} \langle \mathbf{u}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{u}(0) \rangle = 2\pi \int d\mathbf{k}' \langle \mathbf{u}(0) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{k}') \rangle = \langle \mathbf{u}^2(\mathbf{k}) \rangle|_{\mathbf{k}=0} = \frac{2}{K_R} \quad (\text{D.11})$$

と計算できる。ここで、ハミルトニアン (D.10) の形から $\langle \mathbf{u}(0) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{k}') \rangle = 0$ ($\mathbf{k}' \neq 0$) となることを用いた (付録 B 参照)。 K_R は渦がある場合の逆温度である。

次に (2.30) の右辺について考える。ハミルトニアンはスピン波の寄与と渦の寄与に分けて考えることができるので、スピン波の寄与である (2.30) の右辺第 1 項は (D.11) 同様に計算することができる

$$\int d\mathbf{r} \langle \nabla \phi(\mathbf{r}) \cdot \nabla \phi(0) \rangle = \frac{2}{K} \quad (\text{D.12})$$

となる。ただし、 K は渦がない場合の逆温度である。また、(2.30) の右辺第 2 項は Fourier 変

換を用いて計算することができ

$$\begin{aligned}
 \langle (\nabla \times \boldsymbol{\psi}(\mathbf{r})) \cdot (\nabla \times \boldsymbol{\psi}(\mathbf{r}')) \rangle &= (2\pi)^2 \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \nabla \mathcal{G}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \cdot \nabla' \mathcal{G}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_2) \langle \rho(\mathbf{r}_1) \rho(\mathbf{r}_2) \rangle \\
 &= - \int \int d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 \frac{\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2}{k_1^2 k_2^2} \langle \rho(\mathbf{k}_1) \rho(\mathbf{k}_2) \rangle e^{i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}')} \\
 &= (2\pi)^2 \int d\mathbf{k} \frac{1}{k^2} \langle \rho(\mathbf{k}) \rho(-\mathbf{k}) \rangle e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \quad (\text{D.13})
 \end{aligned}$$

から $\mathbf{r}' \rightarrow 0$ として得られる。ただし、右辺第 2 項では (D.8) を使い、右辺第 3 項では、ハミルトニアンが (D.10) の形から $\mathbf{k}_2 = -\mathbf{k}_1$ 成分しか期待値が残らないことを用いた (付録 B 参照)。また、最終的に $\mathbf{k}_1 \rightarrow \mathbf{k}$ と定義し直している。

以上より、 $\mathbf{u}$ の相関関数 (2.30) を実空間で積分することにより

$$\frac{2}{K_R} = \frac{2}{K} + (2\pi)^4 \left. \frac{\langle \rho(\mathbf{k}) \rho(-\mathbf{k}) \rangle}{k^2} \right|_{\mathbf{k}=0} \quad (\text{D.14})$$

となる。さらに (D.4) において格子を連続化すると $\sum \sim a^{-2} \int$ なので $\rho_{\mathbf{k}} = m_{\mathbf{k}}/a^2$ となることより、(2.31) を得る。

付録 E

ユニバーサルジャンプ

BKT 転移では、物理量 helicity modulus がユニバーサルジャンプをするという特徴がある。これは、2 次元 XY 模型における helicity modulus が、2 次元 Bose 液体における超流動密度に対応し、その超流動密度が BKT 転移点においてユニバーサルジャンプを起こす [32] ことにより理解できる。ここではこれらについて簡単に説明する。

E.1 helicity modulus と超流動密度

2 次元ボース液体が超流動状態にある時、 $\langle\psi(\mathbf{r})\rangle$ が秩序変数となる。この位相を 2 次元 XY 模型のスピンの向きと解釈することで、2 次元ボース液体と 2 次元 XY 模型が等価であると解釈することができる。本節ではこの事実を用い、2 次元 XY 模型における helicity modulus が 2 次元ボース液体の超流動密度に対応していることを示す [34]。

まず、2 次元ボース液体が超流動成分を持つことによる自由エネルギーの変化 ΔF を考える。温度 T の時の超流動密度を $\rho_s(T)$ 、超流動速度を $\mathbf{u}_s$ とすると、現象論的に

$$\Delta F = \frac{1}{2}\rho_s(T) \int d\mathbf{r} \mathbf{u}_s^2(\mathbf{r}) \quad (\text{E.1})$$

と表せる。一方、 $\langle\psi(\mathbf{r})\rangle$ が位相 $\theta(\mathbf{r})$ を持つとすると、波動関数は

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\theta(\mathbf{r})}\psi_0(\mathbf{r}) \quad (\text{E.2})$$

と書ける。ただし、位相は位置について滑らかに変化しているので $\theta(\mathbf{r}) = \nabla\theta(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{r}$ となる。これより、超流動速度は

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_s &= \left\langle \psi \left| \frac{\mathbf{p}}{m} \right| \psi \right\rangle \\ &= -\frac{i\hbar}{m} \int d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\hbar}{m} \nabla \theta(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

と表せる。よって、(E.1) は

$$\Delta F = \frac{1}{2} \rho_s(T) \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 \int d\mathbf{r} (\nabla \theta_{\mathbf{r}})^2 \quad (\text{E.4})$$

となる。

次に、2次元 XY 模型に大域的な捻りを加えた時の自由エネルギー変化を考える。例えばサイズ L の系に x 軸方向に Δ_x だけ捻りを加えるとすると、ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}(\Delta_x) = - \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle_x} \cos \left(\theta_{\mathbf{r}} - \theta_{\mathbf{r}'} - \frac{\Delta_x}{L} \right) \quad (\text{E.5})$$

のように書ける。ここで、 $\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle_x$ は x 方向のペアを考えるときのみ Δ_x が現れることを表している。 $\Delta_x \ll 1$ の時の自由エネルギー変化 ΔF を Δ_x について最低次の項まで求めることを考える。まず、 $\Delta_x \rightarrow -\Delta_x$ の変換をしてもハミルトニアンは質的に変化しないことを考えると、 Δ_x について 1 次の項は表れない。よって最低次の項は 2 次であり、系には一様に $\Delta_x/L = \nabla \theta_{\mathbf{r}}$ の捻りが加わっているので、捻りによる自由エネルギーの変化分は

$$\Delta F = \frac{1}{2} \Upsilon(T) \int d\mathbf{r} \left(\frac{\Delta_x}{L} \right)^2 = \frac{1}{2} \Upsilon(T) \int d\mathbf{r} (\nabla \theta_{\mathbf{r}})^2 \quad (\text{E.6})$$

と表せる。よって、2次元ボース液体が超流動成分を持つ時の自由エネルギー変化分 (E.4) と 2次元 XY 模型へ大域的な捻りを加えた時の自由エネルギー変化分 (E.6) を比較することにより、helicity modulus と超流動密度は

$$\Upsilon(T) = \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 \rho_s(T) \quad (\text{E.7})$$

の関係にあることが分かる。

E.2 ユニバーサルジャンプ

2次元ボース液体の超流動成分のハミルトニアンは (E.4) より

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \rho_s(T) \int d\mathbf{r} \mathbf{u}_s^2(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \rho_s(T) \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 \int d\mathbf{r} (\nabla \theta(\mathbf{r}))^2 \quad (\text{E.8})$$

と表すことができるが、これはまさに 2次元 XY 模型でのスピン波近似を行った時のハミルトニアン (2.3) で格子を連続化した場合に対応している。これより 2つの模型には $(\hbar/m)^2 \rho_s(T) \leftrightarrow J$ の対応関係があることがわかる。よって、2次元 XY 模型のスピン波近似中での渦励起と同様の励起を 2次元ボース液体でも考慮することにより、2章と全く同様の議論を行うことで、後者の模型においても BKT 転移が生じることを示すことができる。

E.2 ユニバーサルジャンプ

91

まず 2 次元 XY 模型において、転移点でユニバーサルジャンプが起きることを見る。第 2 章 5 節で求めた BKT 転移のくりこみ群方程式 (2.47)、(2.48) より

$$\lim_{T \rightarrow T_{BKT}-0} K_R = \frac{\pi}{2} \quad (\text{E.9})$$

$$\lim_{T \rightarrow T_{BKT}+0} K_R = 0 \quad (\text{E.10})$$

が導ける。ここで K_R はくりこみを繰り返して得られた $K = J/T$ の値である。よって、2 次元ボース液体との対応関係より、超流動密度 $\rho_s(T)$ は

$$\lim_{T \rightarrow T_{BKT}-0} \frac{\hbar^2 \rho_s(T)}{m^2 T} = \frac{\pi}{2} \quad (\text{E.11})$$

$$\lim_{T \rightarrow T_{BKT}+0} \frac{\hbar^2 \rho_s(T)}{m^2 T} = 0 \quad (\text{E.12})$$

の性質を持つことがわかる。これは、 T_{BKT} において超流動密度に関する量 $\rho_s(T)/T$ が系の詳細に依らないユニバーサルな跳びを示すことを表している。この跳びをユニバーサルジャンプという。

さらに ρ_s と Υ の関係式 (E.7) を用いることによって、 Υ も $T = T_{BKT}$ においてユニバーサルジャンプを示すことが分かる。これは BKT 転移における重要な性質である。これにより、我々は 2 次元 XY 模型において計算可能な helicity modulus のユニバーサルジャンプを観測することにより、BKT 転移の存在を確認することができる。

付録 F

BKT 転移温度の決定法

F.1 2 次転移における転移温度の決定法

有限サイズ系のデータを用いて熱力学極限での転移温度を求める方法は、これまでに数多く開発されてきた。原理的には、ある物理量について T_c をフィッティングパラメタとして有限サイズスケーリングを行えばよいが、臨界指数も含めるとパラメタの数が多くなってしまい、スケーリングを行ってパラメタを決めるのが難しくなってしまう。そこでしばしば用いられるのが Binder cumulant を用いる方法 [58] である。Binder cumulant は以下のように定義される。

$$U = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2} \quad (\text{F.1})$$

詳細は原著論文 [58] に譲り、ここでは結果のみ述べると、(F.1) の右辺第 2 項は熱力学極限で

$$\frac{\langle M^4 \rangle}{\langle M^2 \rangle^2} = \begin{cases} 3 & (T > T_C) \\ 1 & (T < T_C) \end{cases} \quad (\text{F.2})$$

を満たす。一方、転移点近傍では、有限サイズ系で

$$\frac{\langle M^4 \rangle}{\langle M^2 \rangle^2} = g(tL^{1/\nu}) \quad (\text{F.3})$$

となる。ただし、 $t = (T - T_{BKT})/T_{BKT}$ である。ゆえに、Binder cumulant は転移点において系のサイズに依らず、一定の値を取る。よって、Binder cumulant を色々な L に対してプロットすると、転移点においてそれらが一点で交わるという性質がある。

この方法はフィッティングを行う必要がなく、転移点特有の効果を上手く取り込んでいる。通常の 2 次転移では Binder cumulant を用いる方法で十分な場合が多いが、BKT 転移の場合は事情が異なる。BKT 転移では転移点近傍で対数補正が効いてくるため、Binder cumulant はこの影響を受けてしまい、正確な転移点を求めるのが難しいという問題が生じる [55]。

F.2 BKT 転移における転移温度の決定法

BKT 転移では転移点近傍で対数補正が効いてくるためにその転移温度を正確に決定することは困難であり、これまでに様々な手法が提案されてきた。一つは相関長を用いた方法である。BKT 転移点近傍で相関長は

$$\xi \propto \exp(a/\sqrt{t}) \quad (\text{F.4})$$

と表せる。ただし、 a はパラメタである。有限サイズ系での転移温度 $T_{BKT}(L)$ では $\xi = L$ となるので、(F.4) を $T = T_{BKT}(L)$ について解くと

$$T_{BKT}(L) = T_{BKT} + \frac{a^2 T_{BKT}}{(\ln bL)^2} \quad (\text{F.5})$$

となる。 T_{BKT} は熱力学極限での転移温度であり、 b はパラメタである。これより、例えばいくつかのサイズの有限サイズ系での比熱のデータのピーク位置から $T_{BKT}(L)$ を見積もり、 T_{BKT} 、 a 、 b をフィッティングパラメタとして (F.5) の形になるようフィッティングすることで、 T_{BKT} を求めることができる。しかし、BKT 転移でのピークは非常に弱く、確認しづらいこと、またフィッティングパラメタが3つあることから、この方法で正確な T_{BKT} を求めることは困難であると考えられる。

次に、helicity modulus のユニバーサルジャンプを用いる方法 [59] も考えられる。helicity modulus は転移点において

$$\Upsilon(L) = \Upsilon(\infty) \left[1 + \frac{1}{2} \frac{1}{\ln L + c} \right] \quad (T = T_{BKT}) \quad (\text{F.6})$$

と表せる [59]。ただし、 $\Upsilon(L)$ はサイズ L における helicity modulus であり、 $\Upsilon(\infty)$ は熱力学極限における helicity modulus である。ここで、 $\Upsilon(\infty)$ は (2.57) のように、転移点で $2T_{BKT}/\pi$ の値を取る性質を持つので、色々な L について $\Upsilon(L)$ をある温度で計算し、 c をフィッティングパラメタとして

$$\Upsilon(L) = \frac{2T}{\pi} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{1}{\ln L + c} \right] \quad (\text{F.7})$$

の形でフィッティングを行い、最もずれの小さいものを選ぶことより T_{BKT} を決定できる。この方法はフィッティングパラメタが c の一つだけである点が優れている。しかし、 $\Upsilon(L)$ の (F.6) の形は必ずしも正確でなく、疑問点が残る。

この他にも、Olsson による BKT 転移のくりこみ群方程式を利用した詳細な数値計算による転移温度の評価 [60] もあるが、本研究では、比較的取り組みやすい相関関数の比を用いる方法 [55] により BKT 転移温度を求めている。この方法は対数補正の影響を軽減する効果があ

り、BKT 転移特有の有限サイズ効果をうまく扱うことができる。まず、熱力学極限では、転移点において相関関数は (1.6) のように距離のべき乗のみの関数になるが、有限サイズ系では異なる。有限サイズ系では転移点近傍において、ある関数 h を用いて、一般に

$$\langle g(r, t, L) \rangle \sim r^{-d+2-\eta} h(r/L, L/\xi) \quad (\text{F.8})$$

のように表せる。この時、異なる距離の相関関数の比を取ると

$$\frac{\langle g(r, t, L) \rangle}{\langle g(r', t, L) \rangle} = \left(\frac{r}{r'} \right)^{-d+2-\eta} \frac{h(r/L, L/\xi)}{h(r'/L, L/\xi)} \quad (\text{F.9})$$

となる。ここで、2つの比、 r/r' と r/L を固定すると、(F.9) の式は L/ξ のみについての関数となり

$$\frac{\langle g(r, t, L) \rangle}{\langle g(r', t, L) \rangle} = f(L/\xi) \quad (\text{F.10})$$

と表すことができる。これより、 x 軸として L/ξ 、 y 軸として相関関数の比をプロットすると、最適なフィッティングパラメタを選んだ場合に 1 つの曲線上に乗ることが分かる。この有限サイズスケーリングの式は 2 次転移の場合も BKT 転移の場合も用いることができる。2 次転移の場合は $\xi \propto t^{-\nu}$ となるので、フィッティングパラメタは T_c と ν の 2 つである。BKT 転移の場合は $\xi \propto e^{a/\sqrt{t}}$ となるので、フィッティングパラメタは T_{BKT} と a の 2 つである。相関関数の比と富田、岡部により開発された Probability changing cluster algorithm[56][57] を組み合わせて BKT 転移温度を求めることもできるが、本研究では比較的取り組みやすい有限サイズスケーリングによる最適なフィッティングを行うことにより BKT 転移温度を求めている。

F.2.1 スケーリングの誤差の評価

BKT 転移の場合には、 x 軸として $L/\xi = Le^{-a/\sqrt{t}}$ 、 y 軸として相関関数の比をプロットした時、最適なフィッティングパラメタ a 、 T_{BKT} を選んだときには、(F.10) よりデータは系のサイズに依らずに同一の曲線上に乗ることが分かる。この方法による、 $\lambda_5 = 1$ の時の Z_5 異方性の摂動を加えた 2 次元 XY 模型における有限サイズスケーリングの結果を図 (F.1) に示す。このように、図内に示すフィッティングパラメタ $T_{BKT} = 0.907$ 、 $a = 1.66$ を選んだ時、系のサイズに依らずデータが同一の曲線上に乗っている様子が分かる。本研究では、上図のような多数のデータ点を適切な区域に分けてそれぞれ 3 次関数のスケーリング関数でフィッティングし、最小二乗法によりデータ点とスケーリング関数のずれの和がもっとも小さくなるものを最適なフィッティングとした。

しかし、本来異方性が存在する場合には、相関関数の比は (F.10) の形で正確に表せるわけではなく、異方性による非自明な有限サイズ効果が効いてくる。ゆえに、系のサイズが小さい場

F.2 BKT 転移における転移温度の決定法

95

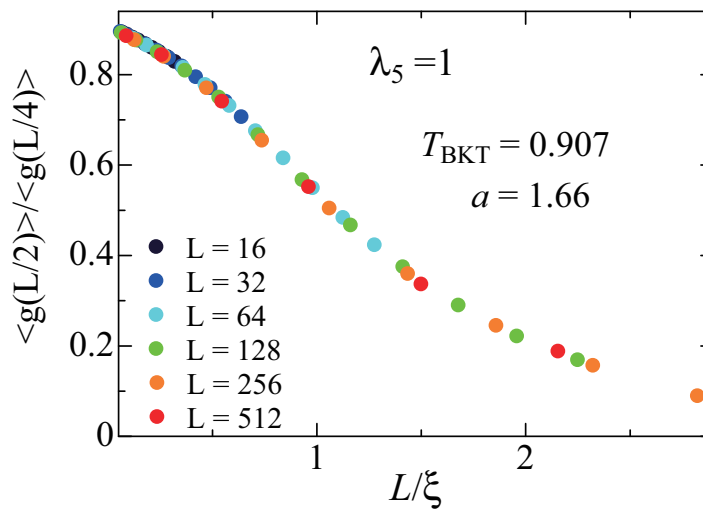


図 F.1 $\lambda_5 = 1$ の時の Z_5 異方性の摂動を加えた 2 次元 XY 模型における、相関関数の比の有限サイズスケリング。図内に示してあるフィッティングパラメタ $T_{BKT} = 0.907$ 、 $a = 1.66$ を選んだ時、系のサイズに依らずデータが同一の曲線上に乗っている様子が分かる。

合には、上述の方法ではうまくフィッティングできない恐れがある。よって本研究では、以下のようにして転移温度の見積もりを行った。まず、全ての系のサイズについてのデータ点を用い、上述の方法により最も誤差が小さくなる場合のパラメタとして $T_{BKT}(L_1)$ を求める。ただし、 L_1 は最も小さい系のサイズである (本研究では $L_1 = 8$)。次に、系のサイズが最も小さいデータ点を取り除き、同様にして $T_{BKT}(L_2)$ を求める。ただし、 L_2 は 2 番目に小さい系のサイズである (本研究では $L_2 = 16$)。このようにして順次 $T_{BKT}(L_n)(n \geq 1)$ を求めていき、 $T_{BKT}(L_n)$ の値が安定したところで、最終的な転移温度 T_{BKT} として見積もる。 Z_5 異方性の摂動を加えた 2 次元 XY 模型と 5 状態クロック模型における、相関関数の比の有限サイズスケリングにより見積もった転移温度と用いた系のサイズの最小値の関係を図 (F.2) に示す。これを見ると、異方性が小さい場合 ($\lambda_5 = 1, 4$) には比較的早い段階 ($L = 8$ や $L = 16$ を取り除いた段階) で転移温度が安定するのに対し、異方性が大きい場合 ($\lambda_5 = 10$ や 5 状態クロック模型) には転移温度が安定していない様子が分かる。ゆえに、異方性が大きい場合により正確な転移温度を求めるためには、さらに大きい系で数値計算を行う必要があるが、BKT 転移では系のサイズの効果は対数的にしか効いてこないために、異方性の効果を十分弱めるほど大きな系での数値計算は現実的に非常に困難である。よって本研究では、系のサイズの最大値を $L = 512$ や $L = 1024$ 程に留め、多少の誤差を含む範囲で転移温度の評価をしている。その結果求めた転移温度の λ_5 依存性が図 (6.10) である。

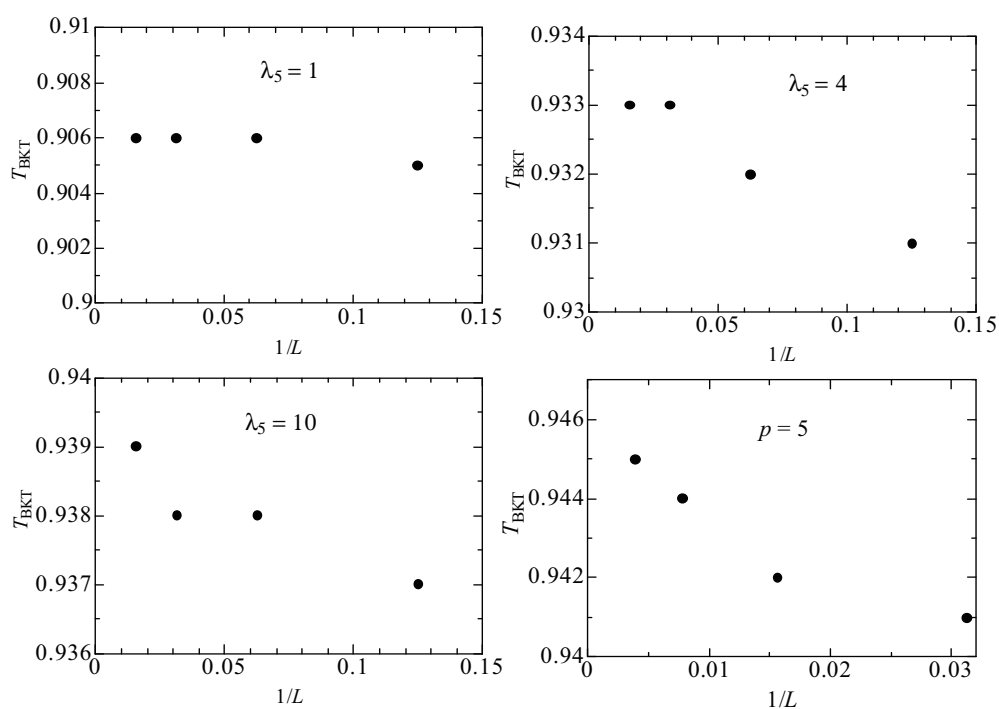


図 F.2 Z_5 異方性の摂動を加えた 2 次元 XY 模型と 5 状態クロック模型における、相関関数の比の有限サイズスケーリングにより見積もった転移温度と用いた系のサイズの最小値の関係。

参考文献

- [1] Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, Phys. Rev. **122**, 345 (1961)
- [2] Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, Phys. Rev. **124**, 246 (1961)
- [3] P. W. Higgs, Phys. Lett. **12**, 132 (1964)
- [4] P. W. Higgs, Phys. Rev. Lett. **13**, 508 (1964)
- [5] P. W. Higgs, Phys. Rev. **145**, 1156 (1966)
- [6] S. Tomonaga, Prog. Theor. Phys. **1**, 27 (1946)
- [7] J. Schwinger, Phys. Rev. **73**, 416 (1948)
- [8] R. P. Feynman, Phys. Rev. **76**, 769 (1949)
- [9] L. P. Kadanoff, Physics **2**, 263 (1966)
- [10] K. G. Wilson, Phys. Rev. B **4**, 3174 (1971)
- [11] K. G. Wilson and J. Kogut, Phys. Repts. C **12**, 75 (1974)
- [12] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group* (Frontiers in Physics, 1992)
- [13] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics* (Cambridge University Press, 1996)
- [14] N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966)
- [15] V. L. Berezinskii, Sov. Phys. JETP **32**, 493 (1971)
- [16] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973)
- [17] J. M. Kosterlitz, J. Phys. C **7**, 1046 (1974)
- [18] A. M. Polyakov, Phys. Lett. B **59**, 79 (1975)
- [19] E. Brézin and J. Zinn-Justin, Phys. Rev. Lett. **36**, 691 (1976)
- [20] J. V. Jose, L. P. Kadanoff, S. Kirkpatrick, and D. R. Nelson, Phys. Rev. B **16**, 1217 (1977)
- [21] S. Elitzur, R. B. Pearson and J. Shigematsu, Phys. Rev. D **19**, 3698 (1979)
- [22] R. Savit, Rev. Mod. Phys. **52**, 453 (1980)
- [23] H. A. Kramers and G. H. Wannier, Phys. Rev. **60**, 252 (1941)

- [24] 西森秀稔, 相転移・臨界現象の統計物理学 (培風館, 2005)
- [25] J. B. Kogut, Rev. Mod. Phys. **20**, 659 (1979)
- [26] 西川恭治、森弘之, 統計物理学 (朝倉書店, 2000)
- [27] D. R. Nelson, *Defects and Geometry in Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, 2002)
- [28] J. M. Kim and J. M. Kosterlitz, Phys. Rev. Lett. **62**, 2289 (1989)
- [29] P. Minnhagen, Rev. Mod. Phys. **59**, 1001 (1987)
- [30] K. Nomura, Phys. Rev. B **48**, 16814 (1993)
- [31] K. Nomura and K. Okamoto, J. Phys. A **27**, 5773 (1994)
- [32] D. R. Nelson and J. M. Kosterlitz, Phys. Rev. Lett. **39**, 1201 (1977)
- [33] P. Minnhagen and B. J. Kim, Phys. Rev. B. **67**, 172509 (2003)
- [34] M. E. Fisher, M. N. Barber and D. Jasnow, Phys. Rev. A **8**, 1111 (1973)
- [35] T. Ohta and D. Jasnow, Phys. Rev. B **20**, 139 (1979)
- [36] K. Harada and N. Kawashima, Phys. Rev. B **55**, R11949 (1997)
- [37] K. Harada and N. Kawashima, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 2768 (1998)
- [38] G. Ortiz, E. Cobanera and Z. Nussinov, Nucl. Phys. B **854**, 780 (2012)
- [39] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944)
- [40] R. B. Potts, Proc. Camb. Phil. Soc. **48**, 106 (1952)
- [41] F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982)
- [42] D. D. Betts, Can. J. Phys. **42**, 1564 (1964)
- [43] K. Nomura, J. Phys. A **39**, 2953 (2006)
- [44] G. Ortiz, E. Cobanera and Z. Nussinov, Nucl. Phys. B **854**, 780 (2012)
- [45] O. Borisenko, G. Cortese, R. Fiore, M. Gravina and A. Papa, Phys. Rev. E **83**, 041120 (2011)
- [46] Z. Nussinov and G. Ortiz, Phys. Rev. B **79**, 214440 (2009)
- [47] E. Cobanera, G. Ortiz and Z. Nussinov, Phys. Rev. Lett. **104**, 020402 (2010)
- [48] S. K. Baek and P. Minnhagen, Phys. Rev. E **82**, 031102 (2010)
- [49] C. M. Lapilli, P. Pfeifer, and C. Wexler, Phys. Rev. Lett. **96**, 140603 (2006)
- [50] Chi-Ok Hwang, Phys. Rev. E **80**, 042103 (2009)
- [51] M. E. Fisher, *Lectures in Theoretical Physics*, edited by W. E. Brittin, Vol. 7c (University of Colorado Press, Boulder, 1965)
- [52] 永長直人, 物性論における場の量子論 (岩波書店, 1995)
- [53] F. Spitzer, *Principles of Random Walk* (Princeton, Van Nostrand, 1964)
- [54] J. Villain, J. Phys. (Paris), **36**, 581 (1975)
- [55] Y. Tomita and Y. Okabe, Phys. Rev. B **66**, 180401(R) (2002)

-
- [56] Y. Tomita and Y. Okabe, Phys. Rev. Lett. **86**, 572 (2001)
 - [57] Y. Tomita and Y. Okabe, Phys. Rev. B **65**, 184405 (2002)
 - [58] K. Binder, Z. Phys. B **43**, 119 (1981)
 - [59] H. Weber and P. Minnhagen, Phys. Rev. B **37**, 5986 (1988)
 - [60] P. Olsson, Phys. Rev. B **52**, 4526 (1995)
 - [61] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Oxford University Press, 1999)
 - [62] D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge University Press, 2000)
 - [63] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller and E. Teller, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953)
 - [64] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989)
 - [65] V. Ambegaokar and M. Troyer, Am. J. Phys. **78**, 150 (2010)

謝辞

本研究は押川正毅教授のご指導の下行われました。研究初期の段階では、自分で研究をうまく進めることができなかったにも関わらず、辛抱強く見守って下さいました。それにより、研究を主体的に進める力が少しは養われた気がします。また、2年間の共同研究を通して、押川先生の鋭い視点と深い洞察力には驚きっぱなしであり、言葉に表せない数多くのことを学ばせて頂きました。この場を借りて、感謝の意を記します。

共同研究者である富田さんには、数値計算について全くの素人である自分に対し、丁寧にご指導して頂きました。また数値計算のみならず、研究で問題にぶつかる度に議論をして頂きました。物性研の川島先生には、本研究において手法を使わせて頂いたのとともに、研究について度々大変有用なアドバイスを頂きました。京大の原田さんには、本研究において手法を使わせて頂いたのとともに、研究において問題が生じた際、アドバイスをして頂きました。

助教の多田さんには度々議論をして頂き、特に修論発表間際に生じた新たな問題について多大な貢献をして頂きました。前助教の大久保さん、客員所員の Cazalilla さん、博士研究員の Tsai さんには短い間でしたが、研究に対する姿勢について多くのことを学ばせて頂きました。博士研究員の島田さんには解析的な視点から有用なアドバイスを頂きました。研究室のメンバーである D3 の古谷さん、高吉さん、Eggel さん、D1 の Nie さん、M1 の西原くん、M0 の高田さんには日常生活において大変お世話になりました。秘書の辻さん、前秘書の羽部さん、また松下さん、小貫さん、川田さんにはいつも明るく話しかけて頂きました。

こうしてみると、この一年間は、周りの方々のたくさんの協力があって、初めて成り立っていたものだと感じます。この場を借りて、感謝の意を記します。最後に、自分をここまで育ててくれ、金銭面での援助だけでなく、今でも自分の支えとしてお世話になっている、両親に感謝します。