

[解答] 5.6 (ポッツ模型)

(1) スピン配位 $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ に対して定義される秩序変数 $x(\sigma, \sigma)$ はピンとこない量かもしれない．イジング模型である $q = 2$ のときには，Potts 変数 σ のとりうる値は 0 と 1 である．このとき秩序変数は

$$x(\sigma = 0, \sigma) = \frac{1}{N} \sum_i \delta(\sigma = 0, \sigma_i) = 1 - x(\sigma = 1, \sigma)$$

であり， $\sigma = 0$ と $\sigma = 1$ のそれぞれの状態をとるスピンの割合である．イジングスピン $S_i = 1 - 2\sigma_i$ の磁化を $m = \frac{1}{N} \sum_i S_i$ とすると，磁化とこの秩序変数は次の関係がある．

$$m(\sigma) = \frac{1}{N} \sum_i S_i = \frac{1}{N} \sum_i (1 - 2\sigma_i) = 1 - 2(x(\sigma = 1, \sigma)).$$

つまり，ミクロな状態 σ に依存するこの秩序変数はイジング模型の磁化を q 状態 Potts 模型に一般化したミクロな秩序変数と言える．これを用いて分配関数が表せると，全結合イジング模型 (Husimi-Temperley 模型) と同じ方針で解析できる．

ミクロな秩序変数は， $0 \leq x(\sigma, \sigma) \leq 1$ であり，

$$\sum_{\sigma} x(\sigma, \sigma) = 1$$

が成り立つ．全結合 Potts 模型のエネルギー関数はこの秩序変数を用いて，次のように表せる．

$$\begin{aligned} E(\sigma) &= -\frac{J}{2N} \sum_{i,j} \delta(\sigma_i, \sigma_j) - N \sum_{\sigma=0}^{q-1} u_{\sigma} \frac{1}{N} \sum_i \delta(\sigma, \sigma_i) + \frac{J}{2} \\ &= -\frac{J}{2N} \sum_{i,j} \sum_{\sigma=0}^{q-1} \delta(\sigma, \sigma_j) \delta(\sigma, \sigma_j) - N \sum_{\sigma=0}^{q-1} u_{\sigma} \frac{1}{N} \sum_i \delta(\sigma, \sigma_i) + \frac{J}{2} \\ &= -\frac{JN}{2} \sum_{\sigma=0}^{q-1} x(\sigma, \sigma)^2 - N \sum_{\sigma=0}^{q-1} u_{\sigma} x(\sigma, \sigma) + \frac{J}{2} \end{aligned} \quad (5.128)$$

以下ではエネルギー関数の $O(1)$ の項は無視する． $\mathbf{u} = (u_0, \dots, u_{q-1})$ として，分配関数は，

$$\begin{aligned} Z(T, N, \mathbf{u}) &= \sum_{\sigma} \exp(-\beta E(\sigma)) = \sum_{\sigma} \prod_{\sigma} \exp\left(N\beta \left(\frac{J}{2} x(\sigma, \sigma)^2 + u_{\sigma} x(\sigma, \sigma)\right)\right) \\ &= \sum_{\sigma} \left(\prod_{m_{\sigma}} \left(\sum_{\sigma} \delta(m_{\sigma}, x(\sigma, \sigma)) \right) \right) \prod_{\sigma} \exp\left(N\beta \left(\frac{J}{2} x(\sigma, \sigma)^2 + u_{\sigma} x(\sigma, \sigma)\right)\right) \\ &= \sum_{m_{\sigma}} \sum_{\sigma} \left(\prod_{\sigma} \delta(m_{\sigma}, x(\sigma, \sigma)) \right) \exp\left(N \sum_{\sigma} \left(\beta \left(\frac{J}{2} m_{\sigma}^2 + u_{\sigma} m_{\sigma}\right) \right)\right) \end{aligned} \quad (5.129)$$

となる．ここで， $m_{\sigma} = (m_0, \dots, m_{q-1})$ は，Potts 状態 σ に対する変数 m_{σ} を要素とする補助変数である．その補助変数に関する和は， $m_{\sigma} \in \{0, 1/N, 2/N, \dots, 1\}$ であつ $\sum_{\sigma} m_{\sigma} = 1$ の条件を満たす領域でとる．補助変数はマクロな秩序変数の意味を持つことは後で議論する．スピン配

位に関する状態和はクロネッカーデルタの項だけである．この状態和は N 個のボールを q 個の箱にそれぞれ Nm_σ ずつ分配する場合の数と同じである．その部分を計算すると，

$$\sum_{\sigma} \left(\prod_{\sigma} \delta(m_\sigma, x(\sigma, \sigma)) \right) = \frac{N!}{\prod_{\sigma=0}^{q-1} N m_\sigma!} \simeq \exp \left(N \log N - N \sum_{\sigma} m_\sigma \log m_\sigma \right)$$

である．最後はスターリングの公式を用いた．この項はスピン配位の場合の数に起因し，エントロピー項と呼ぶべき量である²⁶．

ここまでまとめると，分配関数は

$$\begin{aligned} Z(T, N, \mathbf{u}) &= \sum_{\mathbf{m}_\sigma} \exp \left(N \sum_{\sigma} \left(\frac{\beta J}{2} m_\sigma^2 + \beta u_\sigma m_\sigma - m_\sigma \log m_\sigma \right) \right), \\ &\simeq \int_V \prod_{\sigma=0}^{q-1} dm_\sigma \exp \left(N \sum_{\sigma} \left(\frac{\beta J}{2} m_\sigma^2 + \beta u_\sigma m_\sigma - m_\sigma \log m_\sigma \right) \right), \end{aligned}$$

であり，十分大きい N で和を積分に置き換えている．その積分領域は，

$$V = \{ \mathbf{m}_\sigma | \forall \sigma, 0 \leq m_\sigma \leq 1, \sum_{\sigma} m_\sigma = 1 \},$$

である．Landau の疑似自由エネルギー密度 $g(\mathbf{m}_\sigma; T, \mathbf{u})$ を

$$g(\mathbf{m}_\sigma; T, \mathbf{u}) = -\frac{J}{2} \sum_{\sigma} m_\sigma^2 - \sum_{\sigma} u_\sigma m_\sigma + \frac{1}{\beta} \sum_{\sigma} m_\sigma \log m_\sigma$$

と定義し， N を十分大きいとして，この積分を鞍点法²⁷で評価する．これを用いて自由エネルギー密度は

$$f(T, \mathbf{u}) = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z(T, N, \mathbf{u}) = \text{extr}_{\mathbf{m}_\sigma; |\mathbf{m}_\sigma|=1} g(\mathbf{m}_\sigma; T, \mathbf{u}) \quad (5.130)$$

²⁶もし Bragg-Williams 近似を知っているなら，この項は Bragg-Williams 近似の状態数の計算に相当する．ここでは，状態数の対数をエントロピーとして，エネルギー項と合わせて自由エネルギーを構成するが，熱力学の議論が登場してヒューリスティックのようやや困惑するかもしれない．ここでは淡々と分配関数の計算の中で現れている．ここで議論している系は Bragg-Williams 近似が正確である系と言える．もちろん，一般に Bragg-Williams 近似の議論が“正しい”ことは統計力学が熱力学と整合をとるように構成されているからである．カノニカル分布での分配関数の計算が熱力学関数と対応づけられているのは Boltzmann の原理とつながっているからと言ってもよいだろう．

²⁷これをここで鞍点法と呼んでしまうこともやや ja-gon な気がする．Laplace 近似のことである． $g(\mathbf{m}_\sigma)$ を極値 \mathbf{m}_σ^* の周りで Taylor 展開する：

$$g(\mathbf{m}_\sigma) = g(\mathbf{m}_\sigma^*) + \sum_{\sigma} \frac{\partial g(\mathbf{m}_\sigma)}{\partial m_\sigma} \Big|_{\mathbf{m}_\sigma = \mathbf{m}_\sigma^*} (m_\sigma - m_\sigma^*) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \frac{\partial^2 g(\mathbf{m}_\sigma)}{\partial m_\sigma \partial m_{\sigma'}} \Big|_{\mathbf{m}_\sigma = \mathbf{m}_\sigma^*} (m_\sigma - m_\sigma^*)(m_{\sigma'} - m_{\sigma'}^*) + \dots$$

極値の条件から一階微分の項はゼロになる． $\delta \mathbf{m}_\sigma^T = (m_0 - m_0^*, m_1 - m_1^*, \dots, m_{q-1} - m_{q-1}^*)$ とすると，

$$g(\mathbf{m}_\sigma) = g(\mathbf{m}_\sigma^*) + \frac{1}{2} \delta \mathbf{m}_\sigma^T \hat{H} \delta \mathbf{m}_\sigma + \dots$$

となる．ここで \hat{H} はヘッセ行列

$$(\hat{H})_{\sigma\sigma'} = \frac{\partial^2 g(\mathbf{m}_\sigma)}{\partial m_\sigma \partial m_{\sigma'}} \Big|_{\mathbf{m}_\sigma = \mathbf{m}_\sigma^*}$$

となる²⁸ . 拘束条件を *Lagrange* 未定定数法として表すと ,

$$f(T, \mathbf{u}) = \text{extr}_{\mathbf{m}_\sigma, \lambda} \left(g(\mathbf{m}_\sigma; T, \mathbf{u}) + \lambda \left(\sum_\sigma m_\sigma - 1 \right) \right)$$

である . 鞍点 (極値) 条件は ,

$$-\beta J m_\sigma - \beta u_\sigma + \log m_\sigma + 1 + \beta \lambda = 0 \quad (5.131)$$

$$\sum_\sigma m_\sigma - 1 = 0 \quad (5.132)$$

であり , これらから

$$m_\sigma = \exp(\beta J m_\sigma + \beta u_\sigma - 1 - \beta \lambda), \quad \sum_\sigma e^{\beta J m_\sigma + \beta u_\sigma} = e^{1 + \beta \lambda}$$

となり , λ を消去すると ,

$$m_\sigma = \frac{e^{\beta J m_\sigma + \beta u_\sigma}}{\sum_\sigma e^{\beta J m_\sigma + \beta u_\sigma}} \quad (5.133)$$

が得られる . これが極値となる m_σ の満たすべき条件であり , 自己無撞着方程式²⁹と呼ばれる . この方程式の解を式 (5.130) に代入して自由エネルギー密度が得られる³⁰ .

ここで秩序変数に戻って , その意味を議論する . ミクロな状態に依存する秩序変数 $x(\sigma, \sigma)$ はマクロな観測量ではなく , カノニカル分布ではその期待値がマクロな観測量になる . そこで , ミクロな秩序変数の期待値 $\langle x(\sigma, \sigma) \rangle$ を調べると ,

$$\langle x(\sigma, \sigma) \rangle = \frac{\sum_\sigma x(\sigma, \sigma) e^{-\beta E(\sigma)}}{Z(T, N, \mathbf{u})} = \frac{1}{\beta N} \frac{\partial}{\partial u_\sigma} \log Z(T, N, \mathbf{u}) \quad (5.134)$$

となるが , 熱力学極限 ($N \rightarrow \infty$) では,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle x(\sigma, \sigma) \rangle = -\frac{\partial}{\partial u_\sigma} f(T, \mathbf{u}) = -\frac{\partial}{\partial u_\sigma} \text{extr}_{\mathbf{m}_\sigma; |\mathbf{m}_\sigma|=1} g(\mathbf{m}_\sigma; T, \mathbf{u}) = m_\sigma^* \quad (5.135)$$

となる . ここで , m_σ^* は g の極値を与える m_σ の値である . このように補助変数として導入した m_σ にはマクロな秩序変数としての意味があることがわかる .

である . この二次項まではガウス積分で計算することができる .

$$\begin{aligned} Z(T, N, \mathbf{u}) &= \int \prod_\sigma dm_\sigma e^{-\beta N g(\mathbf{m}_\sigma; T, \mathbf{u})} \simeq e^{-\beta N g(\mathbf{m}_\sigma^*; T, \mathbf{u})} \int \prod_\sigma dm_\sigma e^{-\frac{\beta N}{2} \delta \mathbf{m}_\sigma^T \hat{H} \delta \mathbf{m}_\sigma} \\ &= e^{-\beta N g(\mathbf{m}_\sigma^*; T, \mathbf{u})} \sqrt{\left(\frac{2\pi}{\beta N} \right)^q \frac{1}{\det H}} \end{aligned}$$

²⁸ ガウス積分の項は熱力学極限には寄与しないことを確認できる . ただし , ヘッセ行列に負の固有値があるときにはガウス積分はできないことに注意しよう .

²⁹ これもここで出てくると ja-gon である . どころが自己無撞着なのかは不明である . そもそもこの「自己無撞着 (じこむどうちゃく)」という単語はこの文脈以外で見たことがない . self-consistent の和訳だと思われる .

³⁰ 自己無撞着方程式は解析的には解けないので , まだ自由エネルギーは求まっていないのではないかと思ってしまうかもしれない . しかし , 元々の分配関数は $O(N)$ 個のミクロな変数の状態和で定義されていて , それがたった一つの非線形方程式を解けばよいところまで到達できたので , これは解けたも同じ ... と考える .

(2) “磁場” $u_\sigma = 0$ の場合を考えて，この系の相転移について議論する．

[常磁性解]: この自己無撞着方程式 (5.133) の自明な解に

$$\mathbf{m}_\sigma^{(P)} = (1/q, 1/q, \dots, 1/q) \quad (5.136)$$

が温度に依存せず存在する．これは q 個の Potts 状態 σ はどれも等価であり，対称相に相当する．“温度”が高くと，どこかの同盟国が有意に多くなることはなくどれも同等であることが示された．磁性体の言葉にならって，この解を常磁性解と呼ぶことにする．

そこで，この常磁性解の安定性を調べてみる． $\epsilon_\sigma = (\epsilon_0, \dots, \epsilon_{q-1})$ ， $\mathbf{m}_\sigma = \mathbf{m}_\sigma^{(P)} + \epsilon_\sigma$ として，自己無撞着方程式 (5.133) の ϵ_σ の線形項までを求めると，

$$\begin{aligned} \text{左辺} &= \frac{1}{q} + \epsilon_\sigma \\ \text{右辺} &= \frac{e^{\beta J(1/q + \epsilon_\sigma)}}{\sum_{\sigma'} e^{\beta J(1/q + \epsilon_{\sigma'})}} = \frac{e^{\frac{\beta J}{q}(1 + \beta J \epsilon_\sigma)}}{\sum_{\sigma'} e^{\frac{\beta J}{q}(1 + \beta J \epsilon_{\sigma'})}} + O(\epsilon^2) = \frac{1 + \beta J \epsilon_\sigma}{q + \sum_{\sigma'} \beta J \epsilon_{\sigma'}} + O(\epsilon^2) \\ &= \frac{1}{q}(1 + \beta J \epsilon_\sigma) \left(1 - \frac{\beta J}{q} \sum_{\sigma'} \epsilon_{\sigma'}\right) + O(\epsilon^2) = \frac{1}{q} + \frac{\beta J}{q} \epsilon_\sigma - \frac{\beta J}{q^2} \sum_{\sigma'} \epsilon_{\sigma'} + O(\epsilon^2) \end{aligned}$$

となる．両辺を比較すると，

$$\epsilon_\sigma = \sum_{\sigma'} M(\sigma, \sigma') \epsilon_{\sigma'} \quad (5.137)$$

と線形方程式で表され，行列 $M(\sigma, \sigma')$ は

$$M(\sigma, \sigma') = \frac{\beta J}{q} \left(1 - \frac{1}{q}\right) \delta(\sigma, \sigma') - \frac{\beta J}{q^2} (1 - \delta(\sigma, \sigma')) \quad (5.138)$$

となる．この線形方程式を ϵ_σ の反復方程式とみなすと，固定点 $\epsilon_\sigma = 0$ は常磁性解に相当する．ここでは常磁性固定点の周りの線形安定性解析を行っていて，常磁性解の安定条件はこの行列 $M(\sigma, \sigma')$ の最大固有値が 1 以下であることである．

この行列は対角化することができて，固有値 λ は，

$$\lambda = \frac{\beta J}{q} \left(1 - \frac{1}{q}\right) - (q-1) \frac{\beta J}{q^2} = 0, \quad \lambda = \frac{\beta J}{q} \left(1 - \frac{1}{q}\right) + \frac{\beta J}{q^2} = \frac{\beta J}{q} \quad (5.139)$$

の 2 つであり，後者が $(q-1)$ 重縮退している．つまり，常磁性解は $\beta J \leq q$ では安定である．この安定性の限界温度を T_P とすると，

$$k_B T_P = \frac{J}{q} \quad (5.140)$$

である．

ここまでに明らかになったことは，少なくとも $\beta J > q$ ，つまり $T < T_P$ の領域では常磁性解は安定ではないことがわかった．そこでの解の候補として，Potts 状態 $\sigma = 0$ を特別視し， $\sigma = 0$ の強磁性解 \mathbf{m}_σ^F

$$\mathbf{m}_\sigma^F = \left(\frac{1 + (q-1)m_0}{q}, \frac{1}{q}(1 - m_0), \dots, \frac{1}{q}(1 - m_0) \right) \quad (5.141)$$

を考える．この解はパラメータ m_0 を含み，規格化条件を満たしている．少なくとも， $T < T_P$ ではパラメータ m_0 は非ゼロとなる．この解を自己無撞着方程式に代入して， m_0 の満たすべき条件を導くと，

$$e^{\beta J m_0} = \frac{1 + (q-1)m_0}{1 - m_0} \quad (5.142)$$

となる．数値的に求めたこの方程式の解 m_0^* を用いて，自由エネルギー密度は，

$$\begin{aligned} f(T, \mathbf{u} = 0)^F &= -\frac{J}{2} \left(\left(\frac{1 + (q-1)m_0^*}{q} \right)^2 + (q-1) \left(\frac{1 - m_0^*}{q} \right)^2 \right) \\ &\quad + k_B T \left(\left(\frac{1 + (q-1)m_0^*}{q} \right) \log \left(\frac{1 + (q-1)m_0^*}{q} \right) \right. \\ &\quad \left. + (q-1) \left(\frac{1 - m_0^*}{q} \right) \log \left(\frac{1 - m_0^*}{q} \right) \right) \end{aligned} \quad (5.143)$$

となる．

[$q = 2$ のとき]: これはイジング模型である．このとき，強磁性解は

$$\mathbf{m}_\sigma^F = \left(\frac{1 + m_0}{2}, \frac{1 - m_0}{2} \right)$$

であり，自由エネルギー密度は m_0 の符号反転に対して不変である．すなわち，非線形方程式 (5.142) の解 m_0^* が存在すれば， $-m_0^*$ も解である．図 14 にその解の温度依存性を示した．

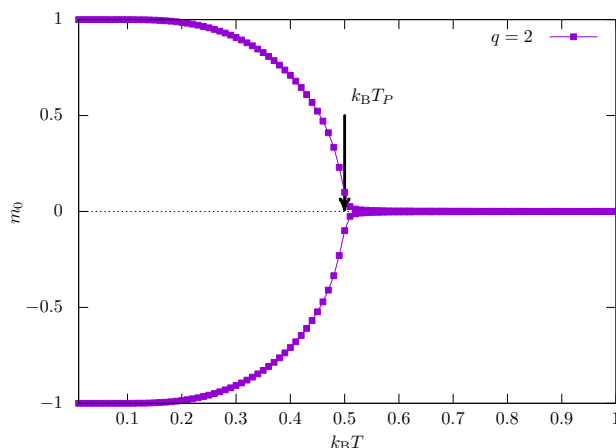


図 14: $q = 2$ のときの自己無撞着方程式 (5.142) の解． $T > T_P$ では m_0 はゼロであるが，転移温度以下では非ゼロの値を持つことがわかる．つまり，温度を下げると常磁性解が不安定になり，そこで対称性の破れた解に転移することを意味している．このように解の不安定化を伴い，秩序変数が 0 から連続的に立ち上がる転移を二次転移と呼ぶ．

[$q > 2$ のとき]:

特に $q = 5$ のときに，異なる初期条件から自己無撞着方程式 (5.142) を解き，その収束した解の温度依存性を図 15(左) に示す． $T < T_P$ で常磁性解 $m_0 = 0$ の解は存在しないが， $T > T_P$ において，常磁性解以外にも $m_0 \neq 0$ の解が現れる．積分評価 (5.130) の観点から， $g(m_\sigma)$ の極小値を探すために幾つかの温度での $g(m_0; T)$ を示す (図 15(右))． $T = 1.5T_P$ では， $m_0 = 0$ が最小値であるが，温度を下げると， $m_0 = 0$ が極小であるまま， $m_0 > 0$ に極小値が現れ，やがて $m_0 > 0$ が最小値になる．

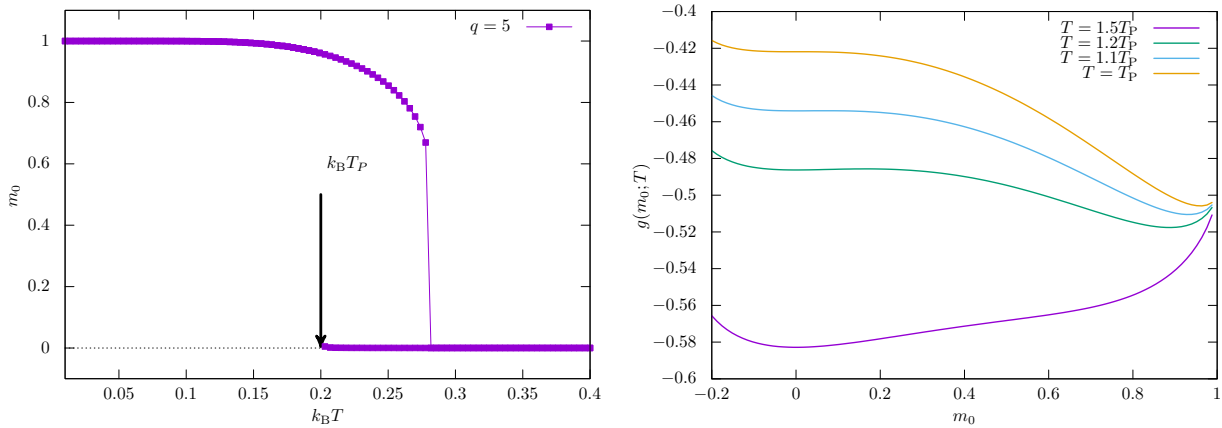


図 15: (左) $q = 5$ のときの磁化の温度依存性. (右) $q = 5$ のときの m_0 の関数としてみた“疑似”自由エネルギー. 温度は $T = 1.5T_P, 1.2T_P, 1.1T_P, T_P$ である.

この常磁性解と強磁性解の 2 つの解の m_0 の値のときの Landau の疑似自由エネルギー $g(m_0)$ の値が自由エネルギー密度を与える. その温度依存性を図 16 に示す. 2 つの解のうち, 自由エネルギー密度の値が小さい方が正しい解である³¹. 2 つの曲線の交点を示す温度で, 高温の常磁性相から低温の強磁性相へ相転移が起きる. この系では転移温度で秩序変数がジャンプすることがわかる. このように転移温度で秩序変数のトビがある転移を一次相転移と呼ぶ.

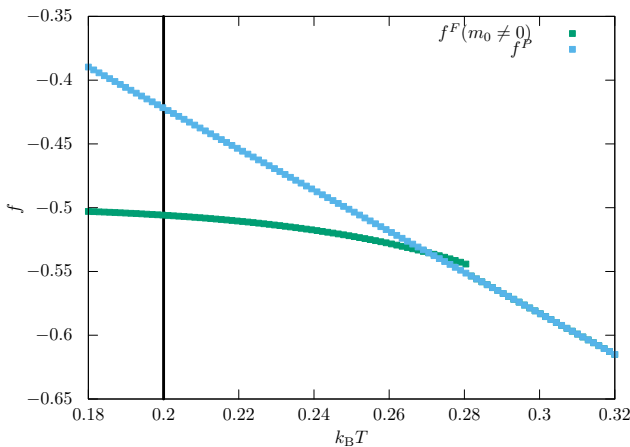


図 16: 自己無撞着方程式の 2 つの解が与える自由エネルギー密度の温度依存性. 直線は $T = T_P$ を表す. 交点が相転移温度を表す.

[相図]:

$Potts$ 状態の数 q を変えたときの転移温度を数値的に調べてみる. q が小さい領域では温度を下げると二次転移で強磁性相になるが, q が大きな領域では一次転移になる. 常磁性解 $m_0 = 0$ の安定性が失われるよりも高温で一次転移する. その境目は数値計算の結果, $q = 2$ であるこ

³¹強磁性解 (5.141) 以外の解がより小さな値を出す可能性もあるかもしれない. 例えば, $\sigma = 0$ の一つだけでなく, 2 つの状態が同時に他の $q - 2$ 状態よりも大きな値を持つなどが考えられる. それらの候補を思いつけば, 解を構成して自由エネルギー密度の値を計算してみるとよい. この強磁性解よりもよい解は見つからない.

とがわかる．図 17 に相図を示す．非線形方程式は一般の q で定義されるため，整数以外の q でも同様の手続きで相境界を求めている．

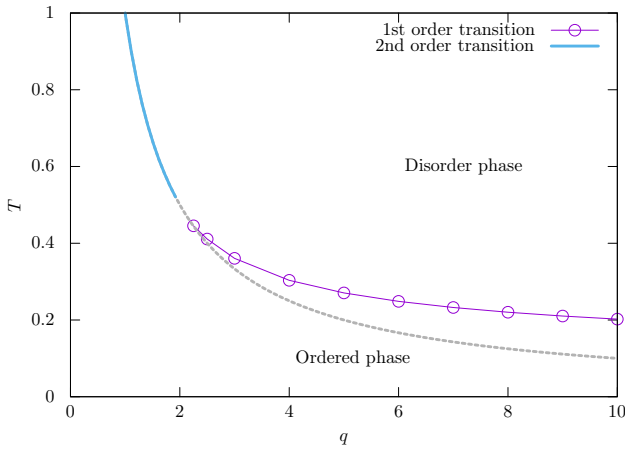


図 17: $q - T$ 平面での相図． $q \leq 2$ では二次転移． $q \geq 3$ では一次転移で低温の秩序相になる．点線は常磁性解 $m_0 = 0$ の安定限界線．

ここまでの問題に与えられたポッツ模型に関する考察である．この模型ではポッツ変数 σ は全ての対で相互作用する全結合系である．これは平均場模型と呼ばれて，平均場近似が正確な解を与える．また，一般には空間次元が無限大極限の模型と考えられる．

補足事項をいくつかまとめておく．

変分法的平均場近似 平均場近似の解析の別方法に関することを少し説明する．ここでは正確に解ける“平均場模型”の解析を行った．別に変分法的に求めることも可能である³²．例えば， σ 個のパラメータ $\Lambda_\sigma = (\Lambda_0, \dots, \Lambda_{q-1})$ を用いて，ミクロ状態 σ に対する確率分布

$$Q(\sigma; \Lambda_\sigma) = \frac{1}{Z_Q} \prod_{\sigma} \exp(-\Lambda_\sigma x(\sigma, \sigma))$$

を導入する．ここで Z_Q は規格化定数である．この近似確率分布と真のカノニカル分布

$$P(\sigma) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E(\sigma))$$

との KL divergence

$$D(Q||P) = \sum_{\sigma} Q(\sigma) \log \left(\frac{Q}{P} \right)$$

が最小になるようにパラメータを求める³³．

平面グラフ そもそも問題は地図を見ながら提示したので，二次元の平面グラフ上に定義された模型であるべきであった．二次元グラフ上で，最近接間の対にしか相互作用がない模型はこれまでものすごく研究されてきて，ほぼ完全にわかっているとよい．ここで解析した平均場模型では $q > 2$ で一次転移になるが，二次元強磁性模型では $q > 4$ で一次転移となる．三次元模型では $q > 2$ では一次転移になることが厳密に証明されている．

³²はずである．まだ自分ではやってない．きつこうやって求めるはず．

³³イジング模型に対する計算は私の講義では示した．多くの教科書には $\sigma_i = \langle \sigma_i \rangle + (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle)$ としゆらぎを無視して... と書かれているが，もう現代的には KL でよいと思う．

彩色問題 ポッツ模型は反強磁性相互作用のときにさまざまな興味深い性質がある．例えば，数独は特別な格子上の 9 状態ポッツ模型になる．一般に，彩色問題は反強磁性ポッツ模型の最低エネルギー状態に対応する．2000 年代になり，ランダムグラフ上の彩色問題の研究がレプリカ法などのランダム系の統計力学の技術を使って研究された．そこではガラス転移が起きるなど，興味深い結果が得られている．そのうちに，レプリカ法を使う問題を出すかもしれない．