

目次

- 1.相転移と臨界現象

 - 相転移と臨界現象

 - イジング模型

- 2.数値解析

 - モンテカルロ法

 - 有限サイズスケーリング

- 3.まとめ

- 4.研究課題

 - 相互作用に異方性がある場合

1.相転移と臨界現象

- 相転移とは、温度や圧力などの巨視的な変化に伴って相の間の急激な移り変わりが起きる現象を指す。理論的には物理量を表す関数の特異性として特徴づけられる。
- 臨界点において物質は異常な性質を示し、それを臨界現象と呼ぶ。
- 臨界現象を定量的に特徴づける量として臨界指数があり、これを求める事がこの分野の研究目的の一つとなっている。

- 物理量の発散の度合い(特異性)は一般に、臨界点からのパラメータのずれのべきになっている。
- 例えば、磁性体の臨界指数の定義は次のようになる。

χ :磁化率, C :比熱, m :自発磁化, ξ :相関距離

t は臨界温度 T_c からのずれで無次元量を表す。

$$\chi \propto |t|^{-\gamma} (T > T_c), |t|^{-\gamma'} (T < T_c)$$

$$C \propto |t|^{-\alpha} (T > T_c), |t|^{-\alpha'} (T < T_c)$$

$$m \propto |t|^{-\beta} (T < T_c)$$

$$\xi \propto |t|^{-\nu} (T > T_c), |t|^{-\nu'} (T < T_c)$$

$$|t| = \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|$$

イジング模型

- 相転移・臨界現象の研究において、問題が厳密に解ける例は限られている。
- イジング模型は相転移を示す最も簡単なモデルである。
- 1944年にオンサーガーによって求められた2次元イジング模型の厳密解はこの分野に重要な役割を果たした。

- 2次元イジング模型の考え方

図1のような正方格子上的スピンの相互作用を考える。

このとき、ハミルトニアンは次式で与えられる。

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i$$

S_i は格子点*i*にあるイジングスピン ($S_i = \pm 1$)
 $\langle i,j \rangle$ は相互作用しているスピンの対を表す。

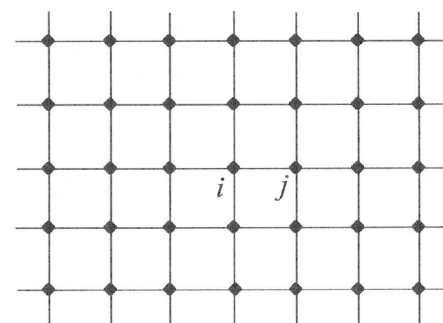


図1

- 2次元イジング模型は、系のサイズが ∞ の極限において、臨界温度 $kT_c/J \approx 2.269$ で相転移を起こすことが知られている。
- 比熱 C や帯磁率 χ の相図は $T=T_c$ で特異性が現れる。

図2は帯磁率 χ が $T=T_c$ で発散している様子を表す。

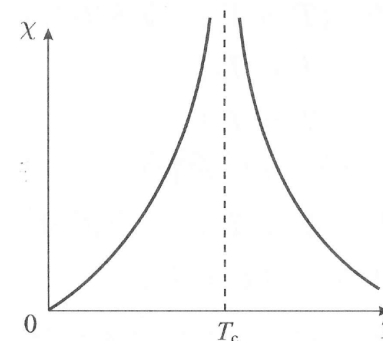


図2

2. 数値解析

- イジング模型は1次元、2次元(外部磁場なし)の場合に厳密解が得られている。
- 1次元の場合は簡単に解く事ができるが、2次元の場合は複雑な計算を要する。
- ここでは、相転移のシミュレーションに重要な役割を果たすモンテカルロ法と有限サイズスケーリングの説明をする。

モンテカルロ法

- モンテカルロ法とは、相転移の研究法の一つであり、あたかも数値実験で相転移の様子をシミュレーションするようにもみえるのでモンテカルロシミュレーションとも呼ばれる。
- モンテカルロ法は、各状態をカノニカル分布に従って発生させ、その状態をサンプルとする。この方法ではサンプルの単純平均が物理量Aの期待値を与える。

$$\langle A \rangle_{MC} = \frac{1}{N_{MC}} \sum_i A_i \quad , \quad N_{MC} \text{ はサンプル数}$$

2次元イジング模型のシミュレーションの考え方

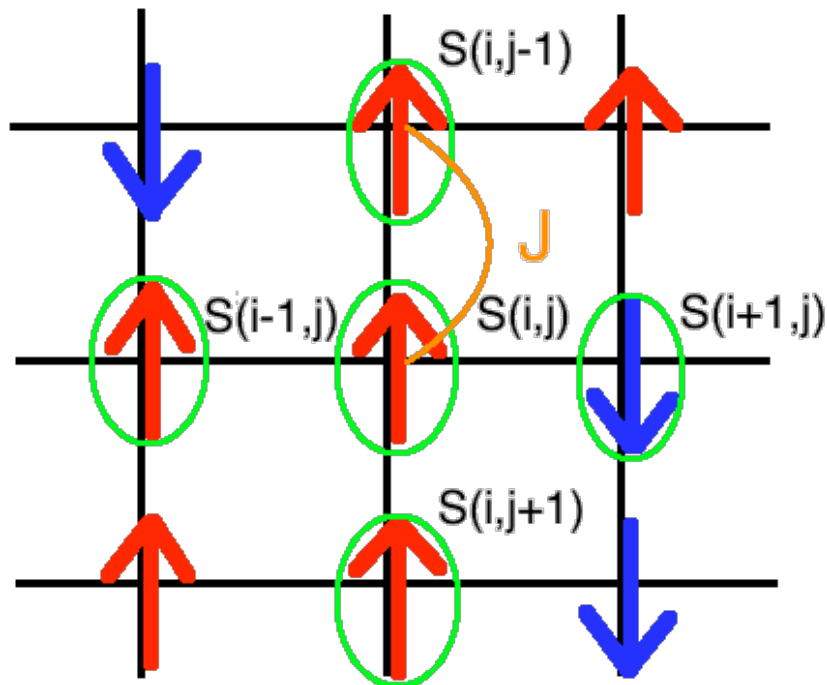


図3 周期的境界条件:
 $S(i+L,J)=S(1,j)$
 $S(i,j+L)=S(i,1)$

- 図3は、正方格子上的スピンの様子である。(赤:+1,青:-1)
- 中心にあるスピン $S(i,j)$ は上下左右のスピンから相互作用を受ける。
- $S(i,j)$ の上下左右のスピンを調べて、+1のスピンが多いと $S(i,j)=1$ にフリップしやすい。
- 全てのスピンを一回ずつフリップさせるのを1モンテカルロステップ(MCS)とする。

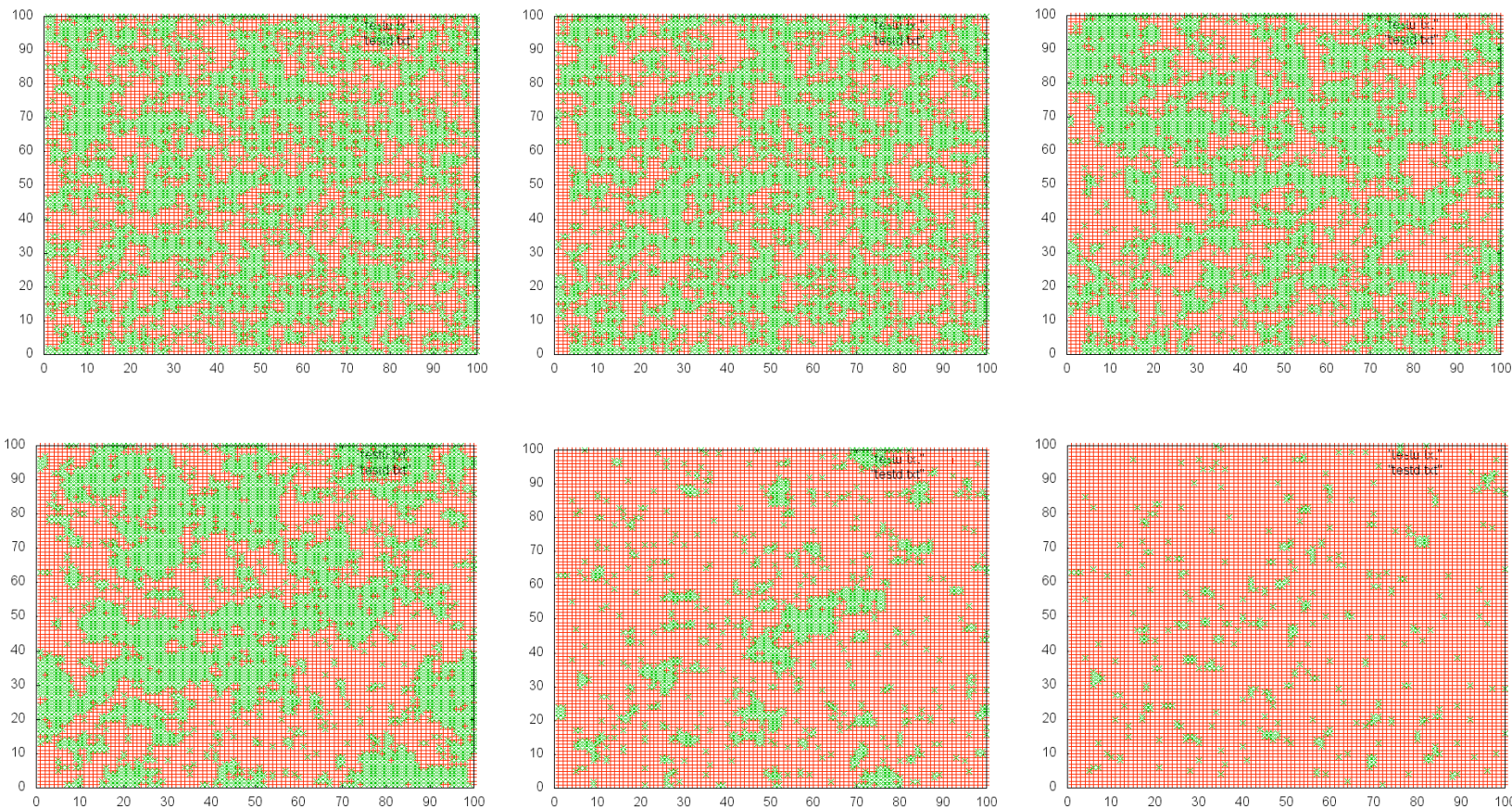
アルゴリズムの概要

- ①全てのスピンのランダムな初期値を与える。
- ②温度を決める。
- ③スピンを一つ選び周りのスピンの状態を調べる。
- ④③と温度の2つに依存したボルツマン分布に従う確率でスピンをフリップさせる。
- ⑤必要な物理量をとる。
- ⑥③～⑤を繰り返す。
- ⑦求めたい物理量を⑤から求める。

- ※③～⑥のうち、最初の1000回は平衡状態に達する前のデータなので捨てる。

スピンのシミュレーション

L=100
INT=1000
MCS=2000
Temp:3.0→2.0

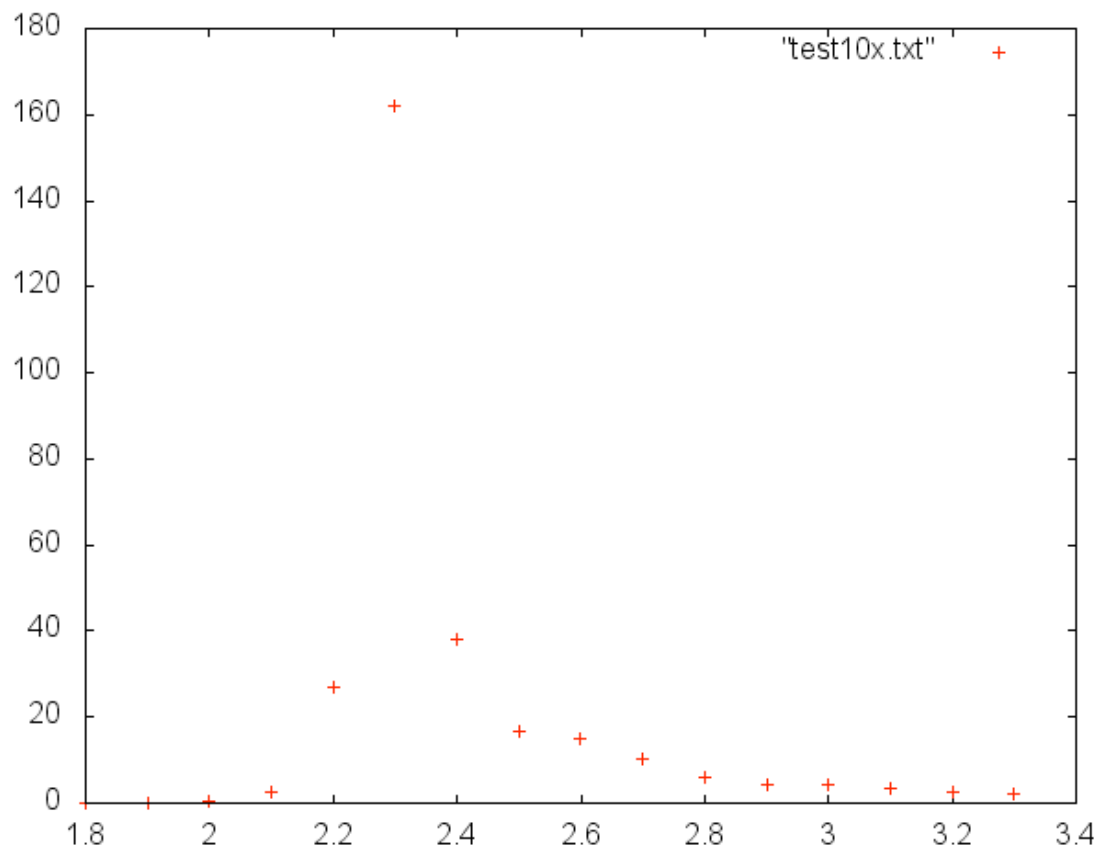


左上から右にTemp=3.0,2.8,...2.0のスピンの様子

温度と帯磁率の関係

- 図4はモンテカルロシミュレーションによる帯磁率 χ の計算結果である。(L=100,INT=1000,MCS=2000)

図4



帯磁率の臨界指数を求める

- 帯磁率 χ は

$$\chi \propto |t|^{-\gamma}$$

と表されるので、両辺の対数をとると

$$\log(\chi) \propto -\gamma \log|t|$$

となり、傾き $-\gamma$ の直線としてみなせる。

- つまり、データをプロットしたときに回帰直線の傾きを調べればよい。

回帰直線

図5
 $T > T_c$

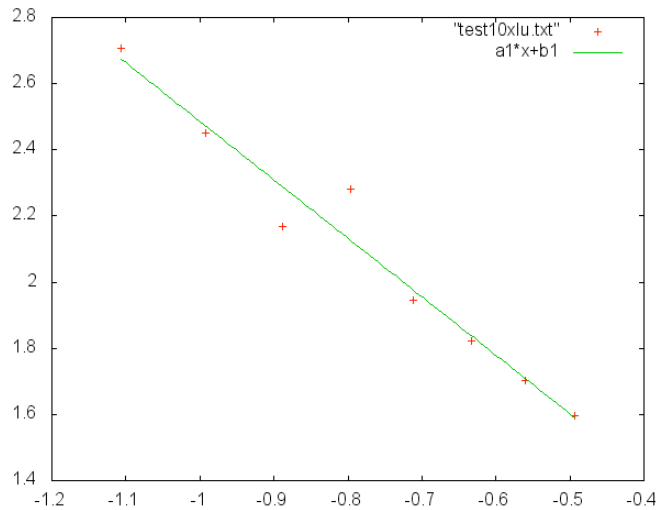
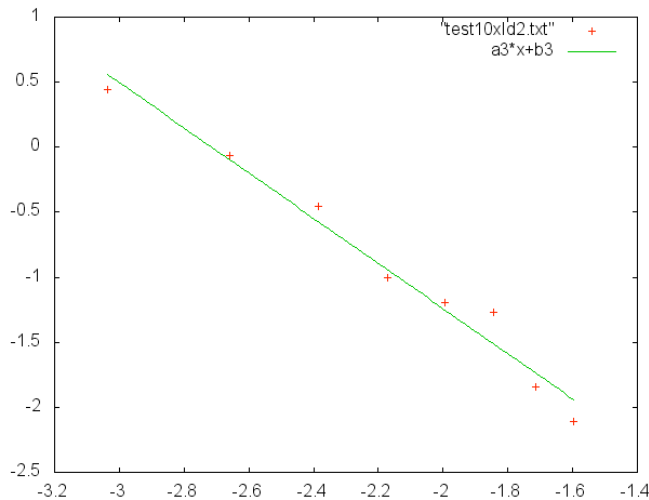


図6
 $T < T_c$



- 図5は $T > T_c$ における回帰直線で、
$$\log(\chi) = -1.767 \log(t) + 0.718$$
$$|t| = \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|$$
- 図6は $T < T_c$ における回帰直線で、
$$\log(\chi) = -1.737 \log(t) - 4.715$$
- 回帰直線の傾きは厳密解 $\gamma = 1.75$ に近い値をとる。

有限サイズスケーリング

- 臨界現象は巨視的な系の物理現象であり、臨界点付近における物理量の特異性は系の大きさが無限大になった極限でのみ生じる。
- 数値計算では有限の大きさの系を扱うため、有限系のデータから無限系の特性を特徴づける臨界指数を推定しなければならない。
- 有限サイズスケーリングは、この目的を達成する方法として確立している。

- 有限サイズスケーリング

磁化率を例にとって説明する。相関長 ξ 、磁化率 χ は臨界指数 γ 、 ν を用いて次のように表せる。

$$\chi = |t|^{-\gamma} \quad \dots \textcircled{1}$$
$$\xi = |t|^{-\nu} \quad \dots \textcircled{2}$$
$$|t| = \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|$$

①、②より

$$\chi = \xi^{\frac{\gamma}{\nu}}$$

- ①は、 $t=0$ 、つまり $T=T_c$ で帯磁率 χ は発散してしてしまう。

$t=0$ でも発散しないようにしたい。

- 相関長 ξ が系のサイズ L の c 倍とすると

$$\xi = |t|^{-\nu} = cL \quad c = \frac{|t|^{-\nu}}{L} = \left(|t| L^{\frac{1}{\nu}} \right)^{-\nu} = \chi^{-\nu}$$

- まず、 χ は $|t|$ と $f(x) = f\left(|t|L^{1/v}\right)$ の関数とおく

$$\begin{aligned}\chi &= |t|^{-\gamma} f\left(|t|L^{1/v}\right) \\ &= |t|^{-\gamma} \left(|t|L^{1/v}\right)^a = |t|^{-\gamma+a} L^{a/v} \\ &= L^{\gamma/v}\end{aligned}$$

スケーリング則より $\gamma = v(2 - \eta)$ つまり $\gamma/v = 2 - \eta$ であるから

$$\chi = L^{\gamma/v} = L^{2-\eta} \dots \textcircled{3}$$

と表せる。

- また、 $L \rightarrow \infty$ の系を考えるので L についても発散しないようにする。
- χ は L と $g(x) = g(|t|L^{1/v})$ の関数とおく

$$\chi = L^{2-\eta} g(|t|L^{1/v}) \dots \textcircled{4}$$

- $g(x)$ と $f(x)$ の関係は③④より

$$\begin{aligned} g(|t|L^{1/v}) &= |t|^{-\gamma} L^{\eta-2} f(|t|L^{1/v}) = |t|^{-\gamma} L^{-\gamma/v} f(|t|L^{1/v}) \\ &= (|t|L^{1/v})^{-\gamma} f(|t|L^{1/v}) \end{aligned}$$

- したがって

$$g(x) = x^{-\gamma} f(x)$$

- ④ $\times L^{\eta-2}$ より $L^{\eta-2} \chi = g(|t|L^{1/v}) \dots \textcircled{5}$

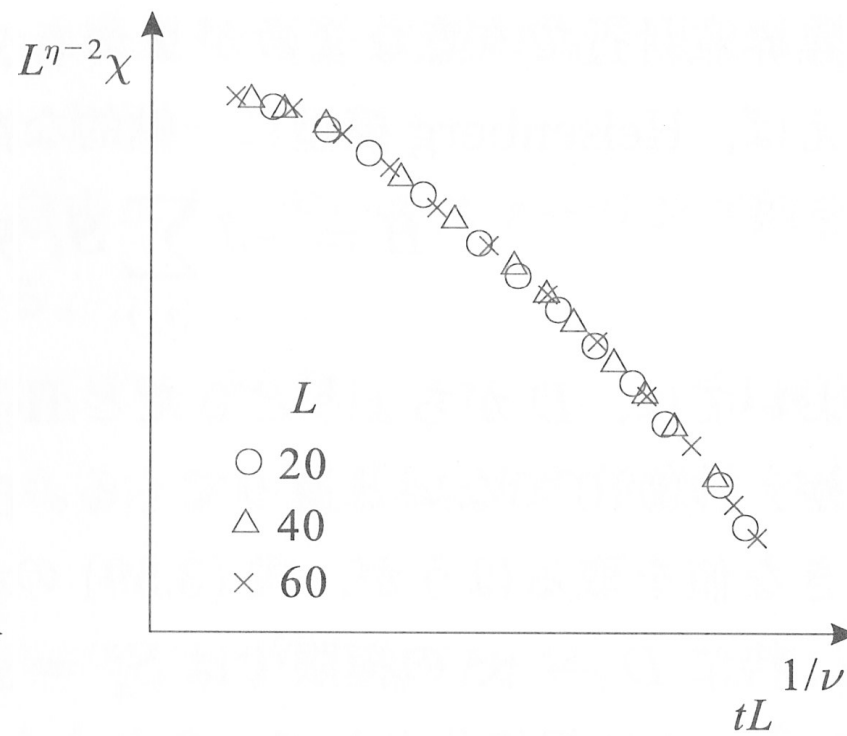
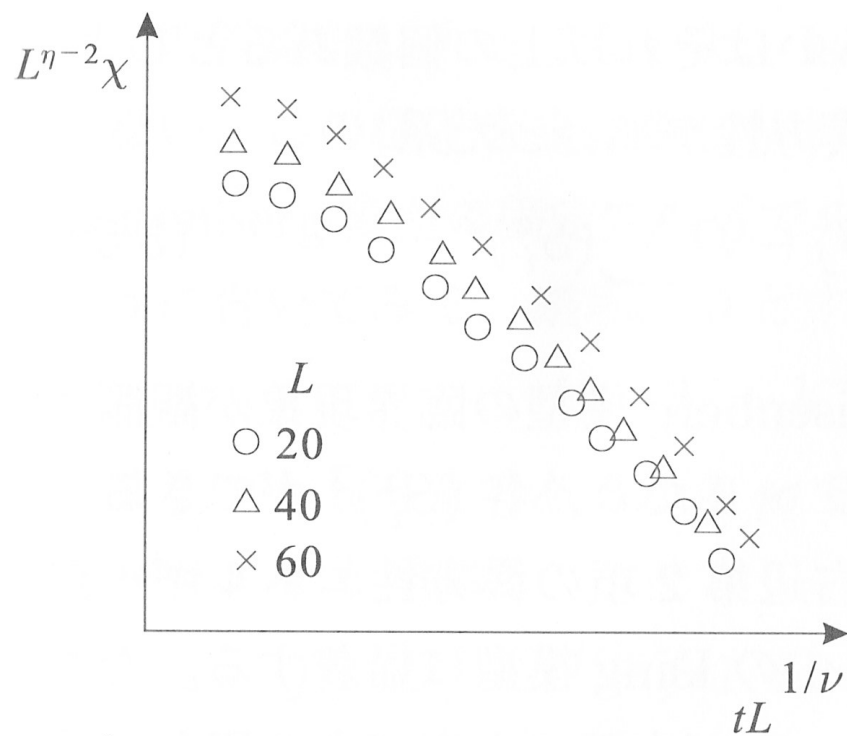
有限サイズスケーリングによるデータ解析

- ⑤式を用いて数値計算のデータ解析を行う。
- まずLを一つの値に固定してtを動かして得られたデータを、横軸 $tL^{1/\nu}$ 縦軸 $L^{\eta-2}\chi$ としてプロットする。
- 次に別のLに対して同様のプロットをする。このとき η と ν の推定値を調整して同一の曲線に一番よく乗ると思われる値を臨界指数の値として採用する。
- T_c が未知の場合は T_c の値も推定しながら作業を行う。

データ解析の例

推定値が正しくない

推定値が正しい



解析結果 ($T < T_c$)

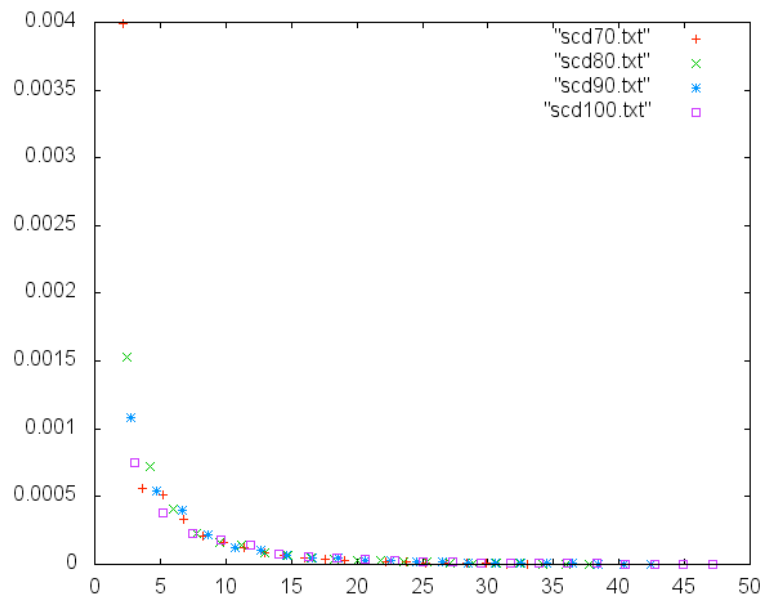


図7

系のサイズ:70,80,90,100
INT=1000,MCS=2000

- 図7は、 $T < T_c$ におけるデータ解析の結果であり、各パラメータは以下の値を設定してある。
 $\nu = 1.00$
 $\eta = 0.25$
 $T_c = 2.269$
- 上の値は厳密解と同じであり、このときデータが一曲線上に乗っていることがわかる。

解析結果 ($T > T_c$)

図8

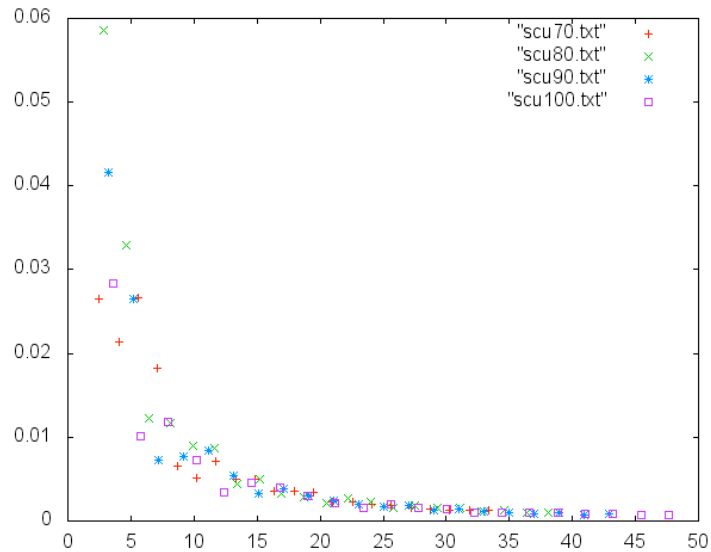
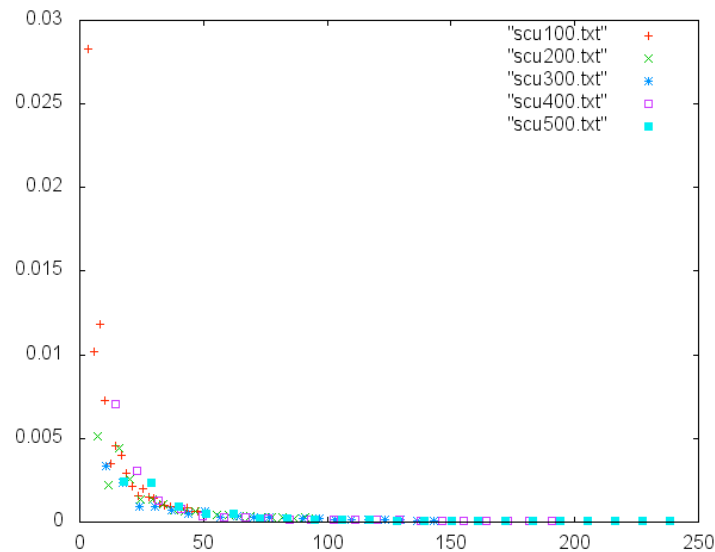


図9



- 図8,9は、 $T > T_c$ におけるデータ解析の結果であり、各パラメータは以下の値を設定してある。

$$\nu = 1.00$$

$$\eta = 0.25$$

$$T_c = 2.269$$

- パラメータの値は理論値と等しいが、横軸が $[0, 15]$ でデータにばらつきが見られる。

系のサイズ

図1: $L=70, 80, 90, 100$

図2: $L=100, 200, 300, 400, 500$

$INT=1000, MCS=2000$

3.まとめ

- 回帰直線の傾きから臨界指数 γ を求めた。
 $\gamma = 1.767, 1.737$ という値は厳密解である $\gamma = 1.75$ に近く、よい結果が得られた。
- 有限サイズスケーリングにより臨界指数を評価した。
2次元イジング模型は厳密解が得られている為、比較的簡単に同一曲線上にデータを乗せる事ができた。
しかし $T > T_c$ においては臨界温度付近ではばらつきが見られるので、その原因を調べて改善したい。

4.研究課題

- 2次元イジング模型のシミュレーションをした。
- この研究から、次はどんな研究が出来るか。
- スピンの相互作用の強さを縦と横で異なる値にするとどうなるのか。

相互作用に異方性がある場合

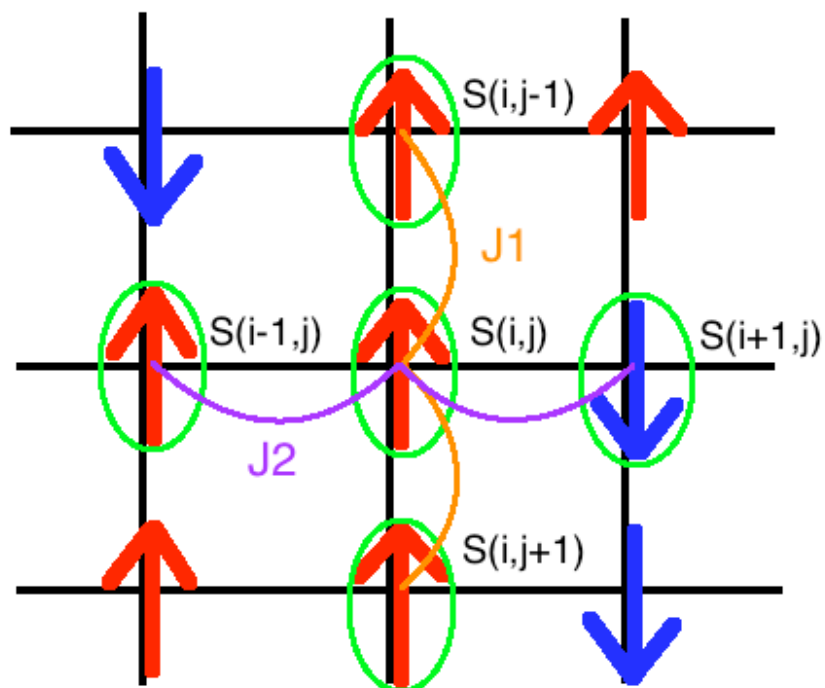
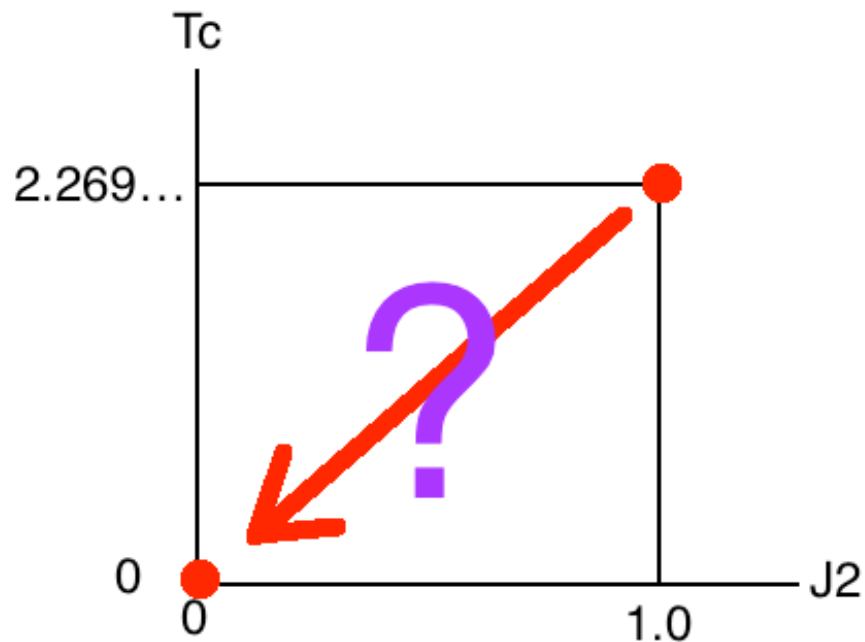


図10 縦方向:J1
横方向:J2

- 図10は、スピンの相互作用係数に異方性を持たせたものである。
- $J1=1.0, J2=0.8$ とすれば、縦にスピンのそろいやすくなる。
- このときの臨界温度 T_c を調べたい。

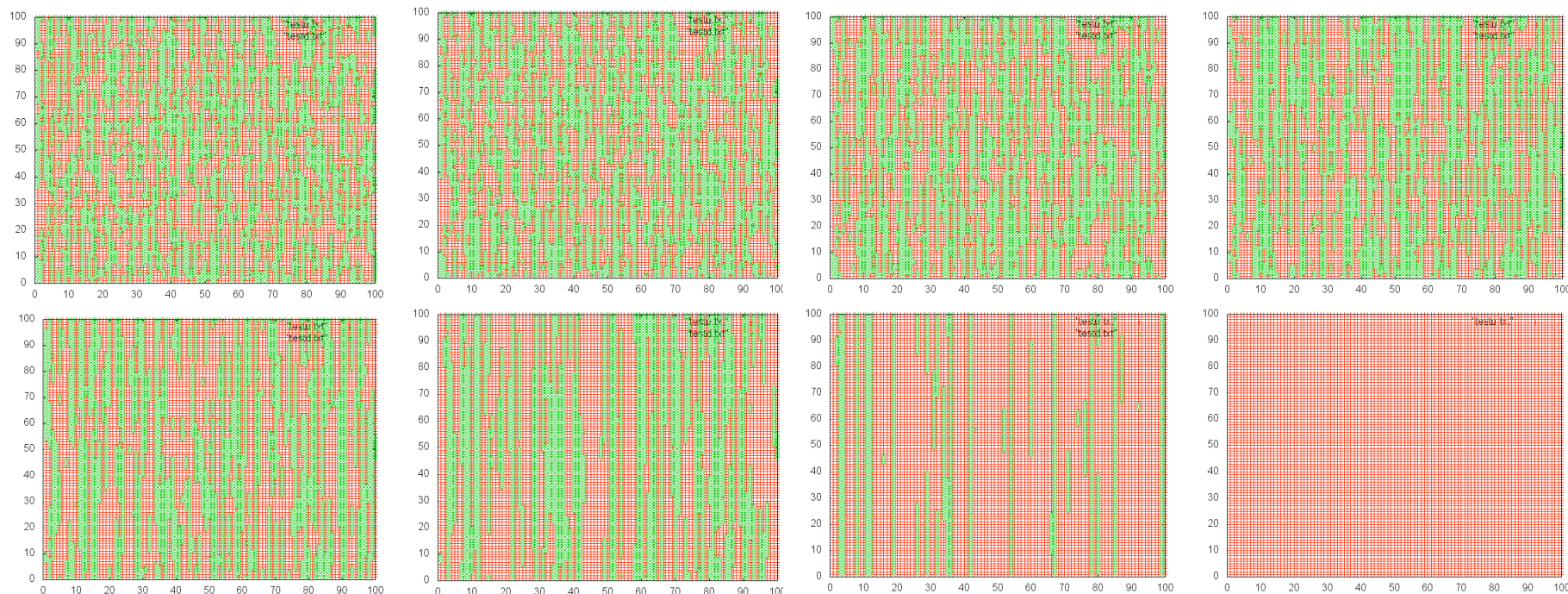
臨界温度の相図



- 1次元イジング模型は相転移を起こさないので臨界温度は $T_c=0$
- 2次元イジング模型の厳密解は $T_c=2.269\dots$
- $J_1=1.0$ として J_2 を変化させると、 J_2 と T_c の相図が描ける。

スピンのシミュレーション

L=100
INT=1000
MCS=2000
temp:1.0→0.3



左上から右にTemp=1.0,0.8,...,0.3のスピンの様子

○ 参考文献

相転移・臨界現象の統計物理学 西森秀稔 著 (2005)

熱・統計力学 宮下精二著 (1993)