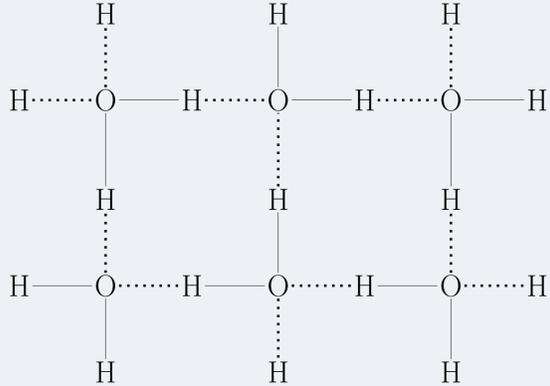


6頂点模型とその周辺

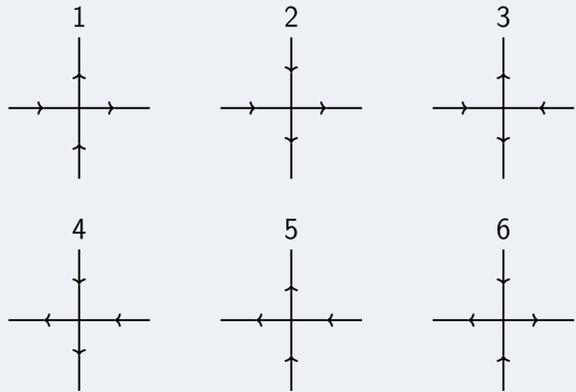
大学院修士課程1年 矢萩 脩

6頂点模型とは

2次元平面上に広がる氷のモデルを考える。氷はいくつもの水分子が規則正しく(格子状に)配列したものである。これを簡易的に表したものを以下に示す。ただし、1つの酸素原子は共有結合で2つの水素原子と、分子間力でほかの2つの水分子にある水素原子と結合しているものとする。



さて、ある酸素原子に注目してみよう。酸素原子からは4本のポンドが出ている。そのうち2本を水素原子との結合パターンが共有結合(上の図の"—"のポンド)であるものを選ぶ通り数は、全部で ${}_4C_2 = 6$ 通りある。これが6頂点模型と呼ばれる理由である。格子の頂点に酸素原子、辺に水素原子があるとして、水素原子と共有結合をしている酸素分原子を頂点に向かう矢印、水素原子と分子間力によって結合している酸素原子を頂点から出ていく矢印として表すと、6頂点模型は次のように表される。



6頂点模型の分配関数

統計物理学において分配関数 Z を求めることは非常に有益である。なぜならば、分配関数 Z は自由エネルギー $F = -k_B T \ln Z$ やエントロピー $S = -\partial F / \partial T$ のような物理量を求めることができるからである。したがって、上で説明した6頂点模型においても分配関数 Z を求めたい。そのために次を定義する。

V : 頂点全体の集合

C : 矢印の配置全体の集合. すなわち, $V = \{(i, j) | 1 \leq i \leq N, 1 \leq j \leq M\}$

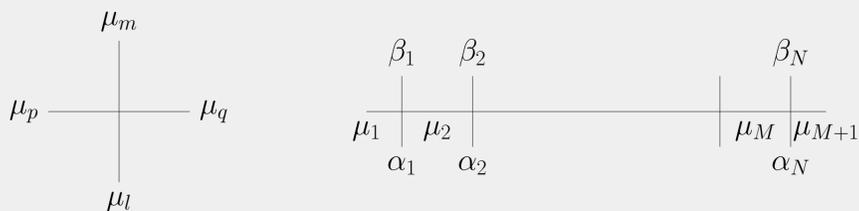
s : 矢印が決定した状態

w_{ij} : 頂点 i, j におけるボルツマンウェイト(局所ボルツマンウェイト)

このとき分配関数 $Z_{M,N}$ を次のように決定する。

$$Z_{M,N} = \sum_{s \in C} W(s) = \sum_{s \in C} \prod_{i,j \in V} w_{ij}(s) = \sum_{\text{すべての } \mu \text{ の配置}} \prod_{i,j \in V} w_{ij}(\mu_p, \mu_q, |\mu_l, \mu_m)$$

ただし、最右辺の表示は下左図のように対応している。



このとき、1次元イジング模型と同様に転送行列 T を考える。上右図にあるような格子の行を1つ考えたとき転送行列 T は次のようになる。

$$T_{\alpha, \beta} = \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_{N+1} \\ \mu_1 = \mu_{N+1}}} w(\mu_1, \mu_2 | \alpha_1, \beta_1) \cdots w(\mu_M, \mu_{M+1} | \alpha_N, \beta_N)$$

この転送行列を用いると分配関数 $Z_{M,N}$ は以下のように表される。

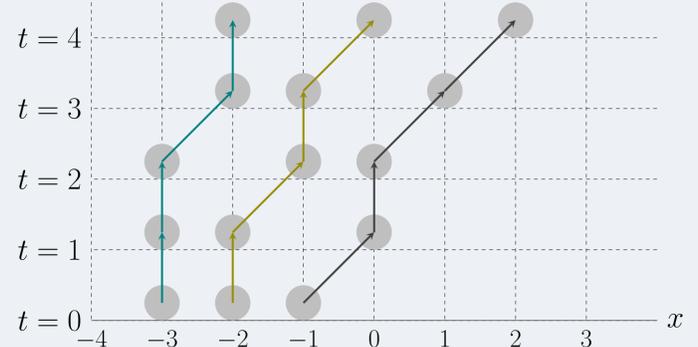
$$Z_{M,N} = \text{tr} T^M$$

非対称排他過程

6頂点模型の話は、非対称排他過程(Asymmetric Exclusion Process)というものに関係している。非対称排他過程とは、多粒子ランダムウォーク模型の1つである。具体的には以下のような規則にしてがって拡散していくものである。

- 時刻 $t = 0$ において粒子は、 $\mathbb{Z}^1 < 0$ なる位置に埋まっている。
- 各粒子は、各時刻において確率 p で右隣のサイトにジャンプする。ただし右隣のサイトに粒子がいる場合、ジャンプすることはできない。

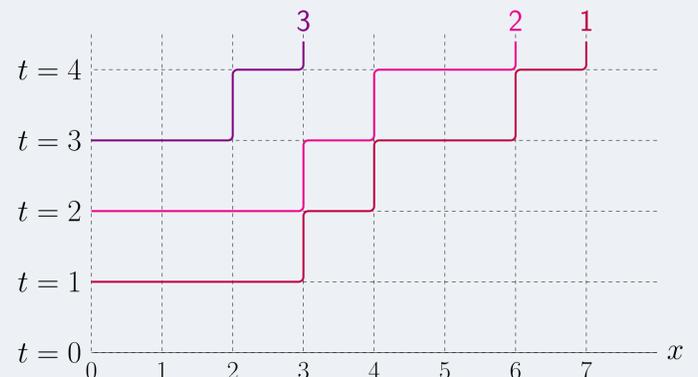
この条件のもと、横軸に位置 x 、縦軸に時刻 t をとったときのグラフの例である。



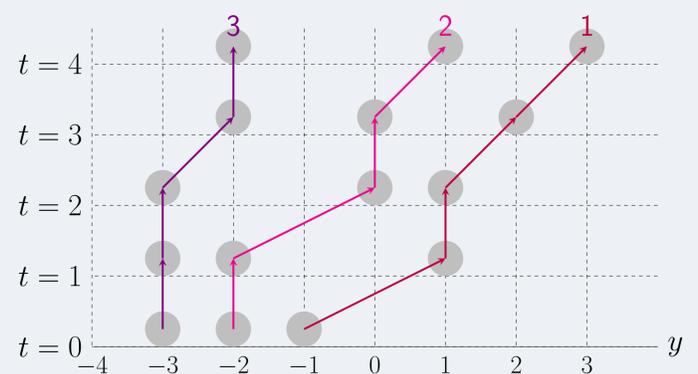
左にある6頂点模型の矢印表示において、下向きと左向きの矢印をもつ辺を水色の実線、上向きと右向きの矢印をもつ辺を点線で表す。



ある6頂点模型の矢印の配置が次のようになったときを考える。



このグラフに、 $y = x - t - 1$ という変換をして横軸に y 、縦軸に時刻 t をとったグラフは以下のように非対称排他過程を示す(ただし初期条件として時刻 $t = 0$ のときに粒子が $\mathbb{Z}^1 < 0$ なる位置に埋まっているとする)。このとき右のサイトへジャンプする確率は、ボルツマンウェイトを各頂点にあてて得られる。



参考文献

- 可積分系の数理 [朝倉書店] 中村佳正, 高崎金久, 辻本諭, 尾角正人, 井ノ口順一 著