

物性理論特論 II 第 14 回

Berezinskii-Kosterlitz-Thouless 転移

川崎猛史

大阪大学 D3 センター/ 大学院理学研究科物理学専攻

Last update : July 29, 2025

第 14 回講義資料目次

1 講義のスケジュール

2 Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 転移

- XY 模型におけるスピン波近似
- Mermin-Wagner の定理
- スピン相関関数
- 準長距離秩序と渦の生成

3 まとめ

第 14 回講義資料目次

1 講義のスケジュール

2 Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 転移

- XY 模型におけるスピン波近似
- Mermin-Wagner の定理
- スピン相関関数
- 準長距離秩序と渦の生成

3 まとめ

1. 講義のスケジュール

- 1 4/15：第 1 回
- 2 4/22：第 2 回
- 3 5/07：第 3 回
- 4 5/13：第 4 回
- 5 5/20：第 5 回
- 6 5/27：第 6 回
- 7 6/03：第 7 回
- 8 6/10：第 8 回
- 9 6/17：第 9 回
- 10 6/24：第 10 回
- 11 7/01：第 11 回
- 12 7/08：第 12 回
- 13 7/15：第 13 回
- 14 7/22：休講
- 15 7/29：第 14 回

第 14 回講義資料目次

1 講義のスケジュール

2 Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 転移

- XY 模型におけるスピン波近似
- Mermin-Wagner の定理
- スピン相関関数
- 準長距離秩序と渦の生成

3 まとめ

2. Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 転移

- これまでは、 Z_2 対称性をもつ Ising 普遍クラスに焦点を当て、臨界現象について議論してきた。
- Ising モデルは、スピン系として非常に単純化されたモデルであり相転移現象を記述可能な理論モデルとして、多くの物理学者によって広く研究されてきた。
- 実際には、スピンの向きは環境によって多様な方向を取り得る。
- このように、連続的な回転対称性（一般に $O(n)$ 対称性）をもつスピン模型として、3 次元では Heisenberg 模型、2 次元では XY 模型が提案されている。
- 特に 2 次元の XY 模型では、通常の対称性の自発的破れとは異なる、特異な相転移（欠陥形成が安定化するトポロジカル相転移）が存在することが知られている（図 1）。

2. Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 転移 (2)

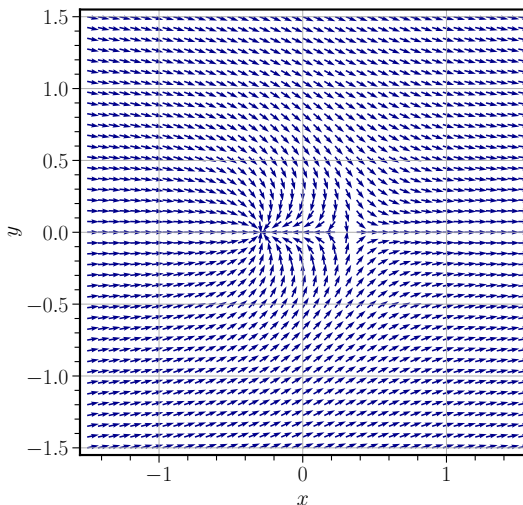


図 1: XY 模型における低温秩序相。点欠陥が存在し、ゆるやかにスピンの波打つ準長距離秩序を形成している。今回はこの準長距離秩序の物理を議論する。

2. Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 転移 (3)

- この転移は、発見者の名にちなんで Berezinskii – Kosterlitz – Thouless (BKT) 転移と呼ばれる [V. L. Berezinsky, Sov. Phys. JETP 32, 493 (1971), J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. 6, 1181 (1973)]。
- この種のトポロジカル相転移は、ヘリウム 4 の超流動薄膜においても実験的に観測されている [D. J. Bishop and J. D. Reppy, Phys. Rev. Lett. 40, 1727 (1978)]。
- これらの理論的業績により、Kosterlitz と Thouless は 2016 年にノーベル物理学賞を受賞した。
- 一方先駆的な貢献を果たした Berezinskii は若くして亡くなっており、同賞の受賞には至らなかった。
- 近年では、超伝導薄膜、2 次元磁性体、薄膜拘束剛体球系など、さまざまな実験系において BKT 転移の兆候が観測されており、理論と実験の両面で活発に研究が進められている。

2.1. XY 模型におけるスピン波近似

♣ XY 模型におけるスピン波近似

- XY 模型や Heisenberg 模型に代表される連続自由度系では、2 次元以下の系において長距離秩序が存在せず特異な相転移（トポロジカル転移）が生じることが知られている。
- XY 模型のハミルトニアンは、スピン変数 $\mathbf{S}_i = (\cos \phi_i, \sin \phi_i)$ を用いて次のように表される：

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\phi_i - \phi_j) \quad (1)$$

- 特に低温では、隣接スピンはほとんど同じ方向を向くため、

$$\phi_i - \phi_j \ll 1 \quad (2)$$

が成り立つ。

- このような状況では、 $\cos(\phi_i - \phi_j)$ を 2 次まで展開して

$$\cos(\phi_i - \phi_j) \sim 1 - \frac{1}{2}(\phi_i - \phi_j)^2 \quad (3)$$

と近似できる。

2.1. XY 模型におけるスピン波近似 (2)

- また、長距離の振る舞いを記述するため、格子モデルを連続場へと近似するとき、

$$\phi_i - \phi_j \sim \nabla \phi \cdot \ell \quad (4)$$

が成り立つ。ただし、 ℓ は格子間の微小ベクトルである。

- よって、以下の 2 次式は

$$(\phi_i - \phi_j)^2 \sim (\nabla \phi)^2 \ell^2 \quad (5)$$

と近似できる。これは秩序相の連続体極限に対応するいわゆる スピン波近似である。

- 以上を踏まえ、ハミルトニアンは次のように表される：

$$\begin{aligned} H &\sim -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(1 - \frac{1}{2} (\phi_i - \phi_j)^2 \right) \\ &\sim -J \cdot \text{const.} + \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\phi_i - \phi_j)^2 \\ &\sim \frac{J}{2} \int d^d \mathbf{r} (\nabla \phi)^2 \end{aligned} \quad (6)$$

2.1. XY 模型におけるスピン波近似 (3)

- このようにして、いわゆる **Ginzburg** 項のみをもつ有効ハミルトニアンが得られる。ここで第 1 項の定数は統計力学的な計算に寄与しないため無視する。
- また、定数 J は連続極限をとったとき、元の格子モデルとは次元が異なるが、定数の吸収によりくり込まれた定数として解釈できる。
- 以下では、この有効ハミルトニアンに基づき、2 次元以下の系で長距離秩序が存在しないこと (**Mermin-Wagner の定理**) を示す。

2.2. Mermin-Wagner の定理

♣ Mermin-Wagner の定理

- 前節に引き続き、スピン波近似に基づく有効ハミルトニアン

$$H \sim \frac{J}{2} \int d^d \mathbf{r} (\nabla \phi)^2 \quad (7)$$

を考える。

- このハミルトニアンから得られる安定構造は、変分原理

$$\frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{r})} = 0 \quad (8)$$

を満たす場 $\phi(\mathbf{r})$ に対応する。

- $h = (\nabla \phi)^2$ とおくと、 $H = \int d^d \mathbf{r} h$ の変分は

$$\begin{aligned} \delta H &= \int d^d \mathbf{r} \left(\frac{\partial h}{\partial \phi} \delta \phi(\mathbf{r}) + \frac{\partial h}{\partial (\nabla \phi)} \cdot \delta (\nabla \phi) \right) \\ &= \int d^d \mathbf{r} \left(\frac{\partial h}{\partial \phi} - \nabla \cdot \frac{\partial h}{\partial (\nabla \phi)} \right) \delta \phi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (9)$$

となる（部分積分と境界での変分消失を用いた）。

2.2. Mermin-Wagner の定理 (2)

- よって、汎関数微分は

$$\frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{r})} = \frac{\partial h}{\partial \phi} - \nabla \cdot \frac{\partial h}{\partial (\nabla \phi)} \quad (10)$$

で与えられる。

- いま $h = (\nabla \phi)^2$ より、

$$\frac{\partial h}{\partial \phi} = 0, \quad \frac{\partial h}{\partial (\nabla \phi)} = 2 \nabla \phi$$

であるから、

$$\frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{r})} = -2 \nabla \cdot \nabla \phi = -2 \nabla^2 \phi \quad (11)$$

となる。

- よって、変分条件より

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = 0 \quad (12)$$

が得られる。すなわち、 ϕ はラプラス方程式を満たす。

2.2. Mermin-Wagner の定理 (3)

- ここで、境界条件 $\phi(x=0)=0$, $\phi(x=L)=\phi_0$ を課すと、解は

$$\phi(x) = \frac{\phi_0}{L}x \quad (13)$$

となる。

- このとき、勾配は一様であり、

$$\nabla\phi(\mathbf{r}) = \left(\frac{\phi_0}{L}, 0, 0\right) \quad (14)$$

となる。これをハミルトニアンに代入すると、

$$\begin{aligned} H &\sim \frac{J}{2} \int d^d\mathbf{r} (\nabla\phi)^2 \\ &= \frac{J}{2} \left(\frac{\phi_0^2}{L^2}\right) \cdot L^d = \frac{J}{2} \phi_0^2 L^{d-2} \end{aligned} \quad (15)$$

を得る。

- よって、 $d > 2$ のとき、 $H \propto L^{d-2}$ は系サイズ L の増大とともに発散するため、ねじれた構造を維持するにはエネルギーが必要である。すなわち、ねじれ構造は不安定であり、長距離秩序が安定であることを意味する。

2.2. Mermin-Wagner の定理 (4)

- 一方、 $d \leq 2$ のとき、 H は系サイズに対して有界または減衰するため、ねじれた構造がエネルギー的に安定となる。よって、長距離秩序は不安定であることが示唆される。
- このように、連続自由度系において 2 次元以下で長距離秩序が存在しないことを示すのが、**Mermin - Wagner** の定理である [N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. 17, 1133 (1966)]。

2.3. スピン相関関数

♣ スピン相関関数

- 前節では、連続スピン自由度をもつ 2 次元以下の系において長距離秩序が不安定であること (Mermin – Wagner の定理) を示した。ここではその補足として、秩序変数 (スピン) の相関関数を計算する。
- 第 6 回・第 12 回と同様に、Ginzburg 型のハミルトニアンを Fourier 変換して解析する。
- 有効ハミルトニアンを Fourier 展開したものは次の通りである：

$$\begin{aligned} H &\sim \frac{J}{2} \int d^d \mathbf{r} (\nabla \phi)^2 \\ &= \frac{J}{2} \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} q^2 |\tilde{\phi}(\mathbf{q})|^2 \end{aligned} \quad (16)$$

- 相関関数はスピン変数 $\mathbf{S}(\mathbf{r})$ を用いて次のように定義される：

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{S}(\mathbf{0}) \rangle \\ &= \langle \cos(\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0})) \rangle \\ &= \langle e^{i(\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0}))} \rangle \end{aligned} \quad (17)$$

2.3. スピン相関関数 (2)

- このように実数でる相関関数が複素表示できる根拠は、複素相関関数の空間並進対称性および空間反転対称性によりかならず虚部が 0 になるからである (レポート課題)。
- この表現はモーメント母関数であり、その対数はキュムラント母関数となる。実際に展開すると：

$$\begin{aligned}\log\langle e^{i(\phi(\mathbf{r})-\phi(\mathbf{0}))}\rangle &= \log\left(1 + i\langle\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0})\rangle - \frac{1}{2}\langle(\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0}))^2\rangle + \cdots\right) \\ &= i\langle\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0})\rangle_c - \frac{1}{2}\langle(\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0}))^2\rangle_c + \cdots\end{aligned}\quad (18)$$

- ここで $\langle\cdot\rangle_c$ はキュムラント (累積モーメント) である。
- よって、式 (17) は、キュムラント展開形式で書くと

$$\langle e^{i(\phi(\mathbf{r})-\phi(\mathbf{0}))}\rangle = \exp\left\{i\langle\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0})\rangle_c - \frac{1}{2}\langle(\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0}))^2\rangle_c + \cdots\right\}\quad (19)$$

とかける。

- 次に、キュムラントの平均操作を熱平均として計算する。

2.3. スピン相関関数 (3)

- 一般的物理量 A の熱平均は次式で与えられる：

$$\langle A \rangle = \frac{\int \mathcal{D}[\tilde{\phi}] A(\{\phi\}) \exp \left[-\beta \frac{J}{2} \int \frac{d^d \mathbf{q}'}{(2\pi)^d} q'^2 |\tilde{\phi}(\mathbf{q}')|^2 \right]}{\int \mathcal{D}[\tilde{\phi}] \exp \left[-\beta \frac{J}{2} \int \frac{d^d \mathbf{q}'}{(2\pi)^d} q'^2 |\tilde{\phi}(\mathbf{q}')|^2 \right]} \quad (20)$$

- これをもとに、 $\langle \phi(\mathbf{r}) \rangle$ は以下のように Fourier モードに平均が掛かった形：

$$\langle \phi(\mathbf{r}) \rangle = \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \langle \tilde{\phi}(\mathbf{q}) \rangle e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (21)$$

をとることから、 $\langle \tilde{\phi}(\mathbf{q}) \rangle$ は、 $\mathbf{q}' \neq \mathbf{q}$ は全て約分でキャンセルし、次のように計算する。

$$\langle \tilde{\phi}(\mathbf{q}) \rangle = \frac{\int d\tilde{\phi}(\mathbf{q}) \tilde{\phi}(\mathbf{q}) \exp \left[-\beta \frac{J}{2V} q^2 |\tilde{\phi}(\mathbf{q})|^2 \right]}{\int d\tilde{\phi}(\mathbf{q}) \exp \left[-\beta \frac{J}{2V} q^2 |\tilde{\phi}(\mathbf{q})|^2 \right]} = 0 \quad (22)$$

- これは奇関数の積分であるので $\langle \phi(\mathbf{r}) \rangle = 0$ 、すなわちキュムラント 1 次 (= 平均) は消失する。

2.3. スピン相関関数 (4)

- これと合わせて、ガウス分布に対しては 3 次以上のキュムラントは消失することに注意することで、相関関数は次のように表される：

$$G(\mathbf{r}) = \exp \left[-\frac{1}{2} \langle (\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0}))^2 \rangle \right] \quad (23)$$

- 次に、平均二乗変位 $\langle (\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0}))^2 \rangle$ を評価する。空間平均により：

$$\begin{aligned} \langle (\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0}))^2 \rangle &= \frac{1}{V} \int d^d \mathbf{r}' \langle (\phi(\mathbf{r} + \mathbf{r}') - \phi(\mathbf{r}'))^2 \rangle \\ &= \frac{1}{V} \int d^d \mathbf{r}' \{ \langle \phi(\mathbf{r} + \mathbf{r}')^2 \rangle - 2 \langle \phi(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}') \rangle + \langle \phi(\mathbf{r}')^2 \rangle \} \end{aligned} \quad (24)$$

- 平均二乗変位に含まれる各項を明示的に計算すると、まず第 1 項 ($\phi(\mathbf{r} + \mathbf{r}')^2$ の平均) は、 $\frac{1}{V}$ 以降：

$$\begin{aligned} \int d^d \mathbf{r}' \langle \phi(\mathbf{r} + \mathbf{r}')^2 \rangle &= \int d^d \mathbf{r}' \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d \mathbf{q}'}{(2\pi)^d} \langle \tilde{\phi}(\mathbf{q}) \tilde{\phi}(\mathbf{q}') \rangle e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{q}') \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{r}')} \\ &= \int d^d \mathbf{r}' \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d \mathbf{q}'}{(2\pi)^d} \langle \tilde{\phi}(\mathbf{q}) \tilde{\phi}(\mathbf{q}') \rangle e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}'} e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}} \\ &= \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \langle |\tilde{\phi}(\mathbf{q})|^2 \rangle \end{aligned} \quad (25)$$

2.3. スピン相関関数 (5)

- 第 2 項 (交差項) は：

$$\begin{aligned}\int d^d \mathbf{r}' \langle \phi(\mathbf{r} + \mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}') \rangle &= \int d^d \mathbf{r}' \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d \mathbf{q}'}{(2\pi)^d} \langle \tilde{\phi}(\mathbf{q}) \tilde{\phi}(\mathbf{q}') \rangle e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} + \mathbf{r}')} e^{i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}'} \\ &= \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \langle |\tilde{\phi}(\mathbf{q})|^2 \rangle e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}\end{aligned}\quad (26)$$

- 第 3 項 ($\phi(\mathbf{r}')^2$ の平均) は、第 1 項と同様に計算される：

$$\begin{aligned}\int d^d \mathbf{r}' \langle \phi(\mathbf{r}')^2 \rangle &= \int d^d \mathbf{r}' \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d \mathbf{q}'}{(2\pi)^d} \langle \tilde{\phi}(\mathbf{q}) \tilde{\phi}(\mathbf{q}') \rangle e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}'} \\ &= \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \langle |\tilde{\phi}(\mathbf{q})|^2 \rangle\end{aligned}\quad (27)$$

- よって、平均二乗変位は以下のように定式化される：

$$\begin{aligned}\langle (\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0}))^2 \rangle &= \frac{1}{V} \{ (25) - 2 \cdot (26) + (27) \} \\ &= \frac{1}{V} \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \langle |\tilde{\phi}(\mathbf{q})|^2 \rangle [2 - 2 \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})] \\ &= \frac{2}{V} \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \langle |\tilde{\phi}(\mathbf{q})|^2 \rangle [1 - \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})]\end{aligned}\quad (28)$$

2.3. スピン相関関数 (6)

- ここで、これまでの熱平均の議論と同様に $\langle |\tilde{\phi}(\mathbf{q})|^2 \rangle$ は以下のように計算される：

$$\langle |\tilde{\phi}(\mathbf{q})|^2 \rangle = \frac{V}{\beta J q^2}$$

- したがって、平均二乗変位は次のように書ける：

$$\langle (\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0}))^2 \rangle = \frac{2}{\beta J} \int \frac{d^d \mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1 - \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})}{q^2} \quad (29)$$

- この積分を球座標により評価すると：

$$\langle (\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0}))^2 \rangle = \frac{2S_d}{\beta J (2\pi)^d} \int_{1/r}^{1/a} dq q^{d-3} \quad (30)$$

ここで積分の下限が $q = 1/r$ であるのは、 $\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} \ll 1$ で $1 - \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \rightarrow 0$ となり変位に寄与しないためである。上限の $q = 1/a$ は連続体としての意味をもつためのカットオフである。

2.3. スピン相関関数 (7)

- 特に $d = 2$ の場合：

$$\begin{aligned}
 \langle (\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0}))^2 \rangle &= \frac{2S_2}{\beta J (2\pi)^2} \int_{1/r}^{1/a} \frac{dq}{q} \\
 &= \frac{2 \cdot 2\pi}{\beta J (2\pi)^2} \log\left(\frac{r}{a}\right) \\
 &= \frac{1}{\pi\beta J} \log\left(\frac{r}{a}\right)
 \end{aligned} \tag{31}$$

- この結果をスピン相関関数の定義に代入すると：

$$\begin{aligned}
 G(\mathbf{r}) &= \exp\left[-\frac{1}{2} \langle (\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0}))^2 \rangle\right] \\
 &= \exp\left[-\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\pi\beta J} \log\left(\frac{r}{a}\right)\right] \\
 &= \left(\frac{a}{r}\right)^\eta, \quad \eta = \frac{1}{2\pi\beta J}
 \end{aligned} \tag{32}$$

- したがって、 $d = 2$ においてはスピン相関関数 $G(\mathbf{r})$ は距離 r に対して冪乗的に減衰し、長距離秩序は存在しないことがわかる。

2.4. 準長距離秩序と渦の生成

♣ 準長距離秩序と渦の生成

- 前節では、2 次元 XY モデルの低温状態をよく表すスピン波近似の下で、長距離秩序が存在せず、準長距離秩序が普遍的に現れることを示した。
- このようなべき減衰は臨界現象と類似するが、臨界現象では冪減衰が見られるのは臨界点近傍に限られる。一方、今回の系では低温状態全体にわたって普遍的に観測される。
- このように、低次元系における長距離秩序の成立を禁止するのが **Mermin-Wagner** の定理 である。
- では、長距離秩序が禁止されているとき、スピンは空間的にどのように分布しているのだろうか？
- また、完全にランダムな無秩序状態とは何が異なるのだろうか？
- これらの違いを理解する上で鍵となるのが、渦の生成である。
- 特に低温状態では、巻き方の異なる渦がペアを成して結合し、局所的な秩序を破壊しながらも、大域的な秩序を維持できることが理論的に示される。以下では、渦の生成に関する統計力学を構築する。

2.4. 準長距離秩序と渦の生成 (2)

- まず、スピン位相 ϕ を渦の中心を原点とする極座標 (r, θ) で表すと、

$$\phi = n\theta + \text{const} \quad (33)$$

と書ける。ここで n は渦の巻数 (**winding number**) を表す。

- 具体的な関数とスピン分布の可視化を図 2 に示す。
- 渦の中心は点欠陥と呼ばれ、点欠陥の影響が遠方まで及んでいることが視覚的に確認できる。

2.4. 準長距離秩序と渦の生成 (3)

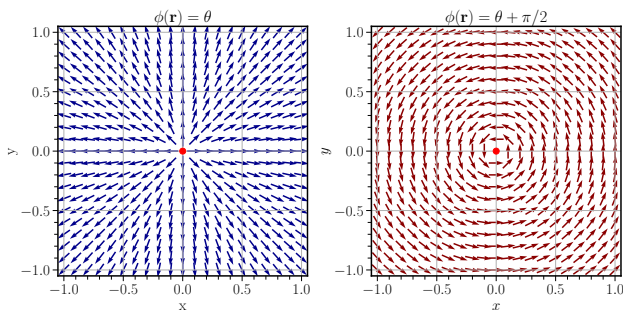


図 2: (左) $\phi = \theta$ の渦場. (右) $\phi = \theta + \frac{\pi}{2}$ の渦場. いずれも巻数 $n = 1$ の渦を表しており, 中心から回転しながらスピンの配置されていることがわかる.

2.4. 準長距離秩序と渦の生成 (4)

- 次に、この ϕ を、前節までに扱ってきたスピン波近似下の有効ハミルトニアン

$$H \sim \frac{J}{2} \int d^d \mathbf{r} (\nabla \phi)^2 \quad (34)$$

に代入し、渦の生成エネルギーおよび自由エネルギーの変化を評価する。

- ここでは、2 次元の ∇ を極座標に変換する必要がある。極座標系での偏微分は以下の通り：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \end{aligned} \quad (35)$$

- よって勾配演算子 ∇ は、

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (36)$$

と表される。

2.4. 準長距離秩序と渦の生成 (5)

- このとき, $\phi = n\theta + \text{const}$ を代入すると,

$$\nabla\phi = \frac{n}{r} \mathbf{e}_\theta \quad (37)$$

となる。

- これをハミルトニアンに代入することで, 巻数 n の渦に対応する内部エネルギーは,

$$\begin{aligned} U &= \frac{J}{2} \int d^2\mathbf{r} \left(\frac{n}{r}\right)^2 \\ &= J \int_a^L \pi r \left(\frac{n}{r}\right)^2 dr \\ &= \pi J n^2 \int_a^L \frac{1}{r} dr \\ &= \pi J n^2 \log\left(\frac{L}{a}\right) \end{aligned} \quad (38)$$

- 次に、自由エネルギーを評価するために、渦の生成に伴うエントロピーを考慮する。

2.4. 準長距離秩序と渦の生成 (6)

- エントロピーは、 L^2 の系において渦の中心が配置可能な場所の数に対応する。単位格子面積を a^2 とすれば、

$$W = \frac{L^2}{a^2} \quad (39)$$

これより、ボルツマンの原理により、

$$S = k_B \log W = 2k_B \log \left(\frac{L}{a} \right) \quad (40)$$

- よって、自由エネルギー F は、

$$\begin{aligned} F &= U - TS \\ &= (\pi J n^2 - 2k_B T) \log \left(\frac{L}{a} \right) \end{aligned} \quad (41)$$

- 渦の生成により F が減少するのは、次の条件が満たされるとき：

$$T > \frac{\pi J n^2}{2k_B} \quad (42)$$

- このように渦が自発的に生成される高温相では無秩序状態が支配的であり、特に $n = 1$ のときの温度を境に準長距離秩序の有無が切り替わる。

2.4. 準長距離秩序と渦の生成 (7)

- この現象は渦の生成に関わるトポロジカルな相転移であり、**Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 転移**と呼ばれる。
- BKT 転移温度は、 $n = 1$ の渦が安定に生成し始める温度であり、

$$T_{\text{BKT}} = \frac{\pi J}{2k_{\text{B}}} \quad (43)$$

- このときのスピン相関関数は

$$\left\langle e^{i(\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{0}))} \right\rangle = \left(\frac{a}{r} \right)^{1/4} \quad (44)$$

となり、べき減衰の指数が $1/4$ であることが BKT 転移点の特徴である。

♣ 渦対の形成と準長距離相互作用

- 最後に、低温において渦対（単独の渦ではなく）が生成されることにより、準長距離秩序が安定に維持される機構を示す。
- 渦を特徴づける重要な物理量が、前節までに登場した巻数 (winding number) n であり、これは渦度あるいはトポロジカル電荷とも呼ばれる。

2.4. 準長距離秩序と渦の生成 (8)

- 図 3 は、 $n = \pm 1$ の巻数をもつ渦が対を成して存在する状況を可視化したものである。渦の近傍を除けば、スピンは大域的な秩序を形成している様子が確認できる。ただし、ゆるやかな位相の変化が存在するため、これは長距離秩序ではなく、準長距離秩序である。
- このように、巻数の総和がゼロ ($n_{\text{total}} = 0$) となるように渦がペアを成すことで、大域的には渦が存在しないような（無渦的な）構造となる。
- 対をなす 2 つの渦の間隔を r としたとき、渦の形成に伴うエネルギーの影響は距離 r の範囲に局在し、それを超える領域にはほとんど影響を及ぼさない。
- したがって、渦の生成エネルギーを概算する際には、式 (38) を用いて積分の上限を L ではなく r とすることができる。2 つの渦の重ね合わせとして評価すれば、

$$\begin{aligned}
 U(r) &= 2 \cdot \frac{J}{2} \int d^2\mathbf{r} \left(\frac{n}{r}\right)^2 \\
 &= J \int_a^r \pi r \left(\frac{1}{r}\right)^2 dr \\
 &= \pi J \int_a^r \frac{1}{r} dr \\
 &= \pi J \log\left(\frac{r}{a}\right)
 \end{aligned} \tag{45}$$

となる。

2.4. 準長距離秩序と渦の生成 (9)

- このポテンシャルエネルギーは、渦対が互いに距離 r だけ離れたときの相互作用エネルギーとみなすことができる。
- 実際は詳細な計算により、距離 $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ 離れた、巻き数 n_i, n_j をもつ渦がおりなすスピン全体のエネルギーは

$$U_{\text{tot}}(r) = -\pi J n_i n_j \log\left(\frac{r}{a}\right) + \pi J (n_i + n_j)^2 \log(L/a) \quad (46)$$

となり、中性条件により右辺第 2 項が 0 になる [西森, 培風館 参照]。

- この対数的な相互作用は、2 次元クーロンガスにおける電荷間のポテンシャルと同一形式であり、巻数 n がトポロジカル電荷とみなされる所以である。
- つまり、この相互作用は r が大きくなるほど大きくなり、 $r \sim a$ (格子サイズ) のときにはほとんどエネルギーコストがかからない。したがって、渦同士が近接してペアを形成する傾向があり、低温では離れた位置に渦対が形成されるのは困難であることを示唆している。
- このような低温領域では近接した渦対が安定に存在する。このように欠陥構造が安定に存在する状態をトポロジカル相と呼ぶことがある。
- 単独の渦が安定に形成されるようになるのは $T > T_{\text{BKT}}$ の領域であり、このとき多数の渦が出現して互いに干渉するため、スピン配置は乱れた無秩序状態となる。

2.4. 準長距離秩序と渦の生成 (10)

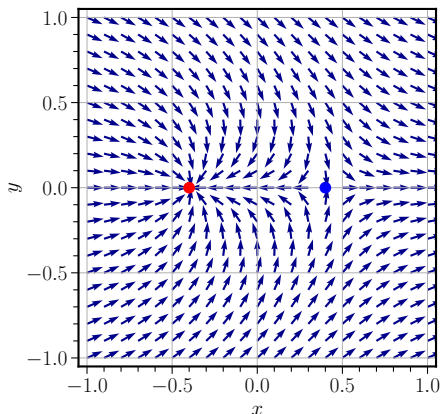


図 3: 巻数 $n = \pm 1$ の渦が対を形成している様子 (赤 $n = 1$, 青 $n = -1$)。渦の近傍を除けばスピン配向は大域的な整列構造を示しており、準長距離秩序が実現されていることが視覚的にわかる。このような構造はスピン系に限らず、原子・分子の並進秩序や液晶中にも見られる。

第 14 回講義資料目次

1 講義のスケジュール

2 Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 転移

- XY 模型におけるスピン波近似
- Mermin-Wagner の定理
- スピン相関関数
- 準長距離秩序と渦の生成

3 まとめ

3. まとめ

第 14 回のまとめ

- XY 模型において低温状態において準長距離秩序が形成され、BKT 転移を経て、無数の渦が生成し無秩序状態に転移することを学んだ
- 渦が対を作ることによって準長距離秩序を形成すること学んだ。

レポート課題について

- ELC から課題を確認し、答案を 8/10 23:59 までに ELC 所定箇所よりアップロードせよ。
- 成績入力の観点から、提出期限を厳守せよ。遅れたものについては成績に反映できない可能性が高い。やむを得ない事情でどうしても間に合わない場合は理由を添えて連絡せよ。