

相転移と臨界現象の 統計物理学

田崎 晴明

統計物理学とは？

統計？



物理学？



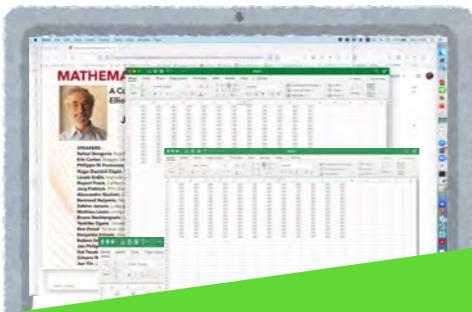
ではなく、「ミクロとマクロをつなぐ科学」

(多くの場合、単純な) 規則に従う (多くの場合、小さな) 要素が無数に集まった際に生まれる新しいふるまい、性質、法則を探求する学問

相転移現象

統計物理学とは？

統計？



物理学？



すべてのものは原子や分子が
集まってできている！

ではなく、

「私たちの脳は小さな
脳細胞が集まったもの！」

(多くの場合、
小さな) 要素が無数に集まつた際に生まれる新しい
ふるまい、性質、法則を探求する学問

相転移現象

相転移と臨界現象の 統計物理学

小さくてあまり面白くないものが
すごくたくさん集まると勝手にびっくりする
ような面白いことをやり始めるという話

田崎 晴明

目次

- 相転移とは何か？
- パーコレーションの相転移
- パーコレーションの臨界現象
- 相転移と長距離秩序
- 量子スピン系の奇妙なふるまい
トポロジカルな相転移
- まとめ



相転移とは何か？

水と氷の相転移

固体（氷）

0°C

液体（水）



水は（1気圧の環境では）ちょうど0度を境に固体から液体へと、とつぜん変化する

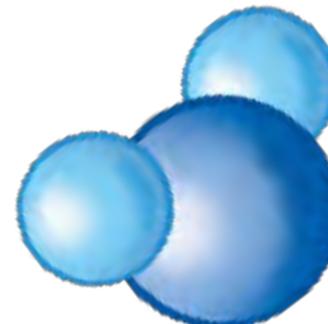
相転移 物理系のパラメターを変化させたとき、ある値で系の「マクロな性質」が質的に変化

物質の三態、強磁性相転移、超伝導転移、宇宙初期の真空の相転移…

相転移はなぜおきるのか？

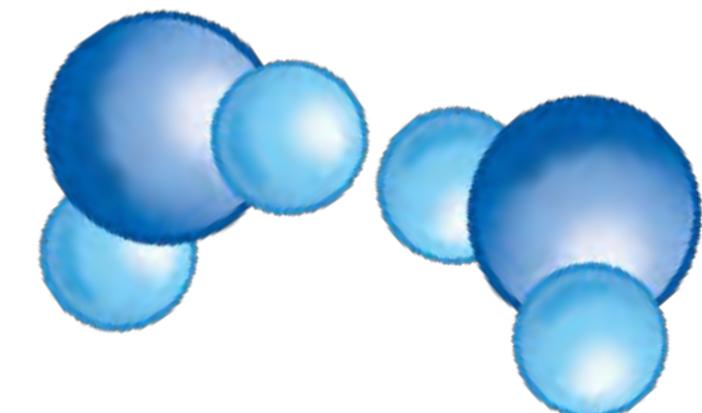
□ 0度で水分子の形が変化？

分子の形は変わらない



□ 0度で水分子間の力が変化？

力は変わらない



□ 0度になったことを知って他の分子に命令を出す
「司令塔」の分子がいる？

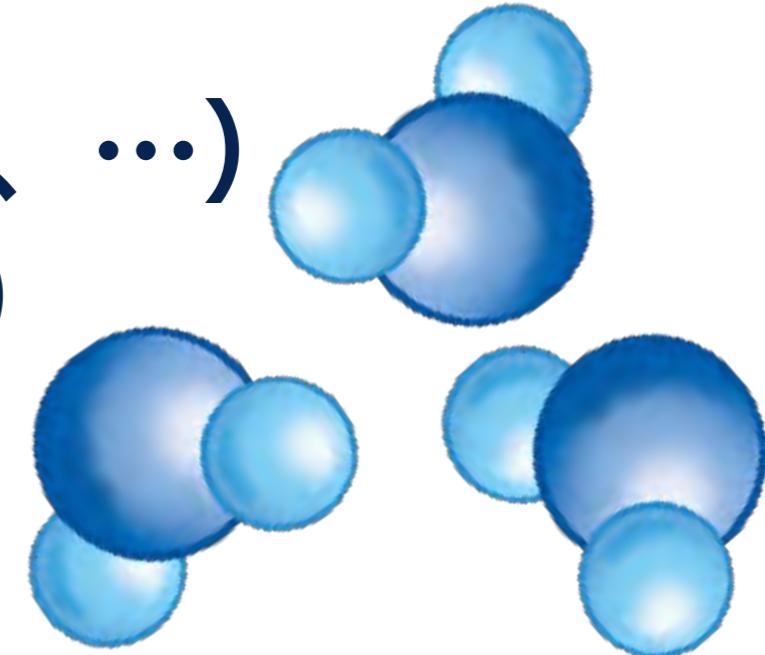
分子はみな同じ単純な構造

「温度計」を内蔵しているわけではない



相転移はなぜおきるのか？

- 分子の個数が少ないと（1個、2個、…）
相転移は起きない（なだらかな変化）

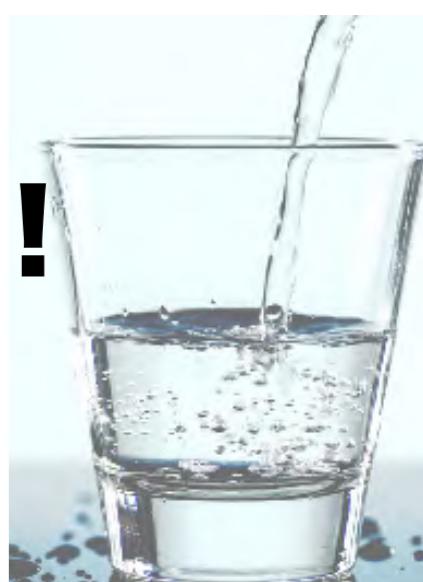


相転移は、膨大な数の分子が互いに影響しあった結果、全体として生み出される「協力現象」

個々の要素（この場合は水の分子）が単純でも全体として非自明な性質が出現する！



本当にそんなことがおきるのか？！

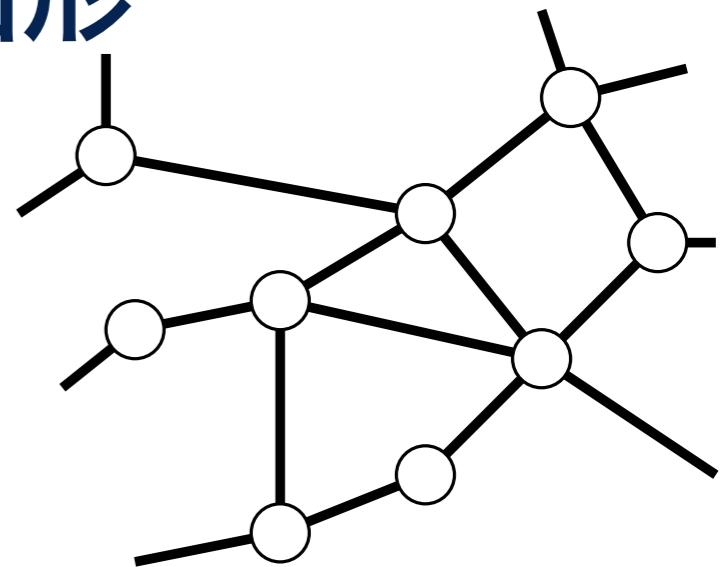


パーコレーションの 相転移

パーコレーションの定義

格子（グラフ） = 頂点を辺で結んだ図形

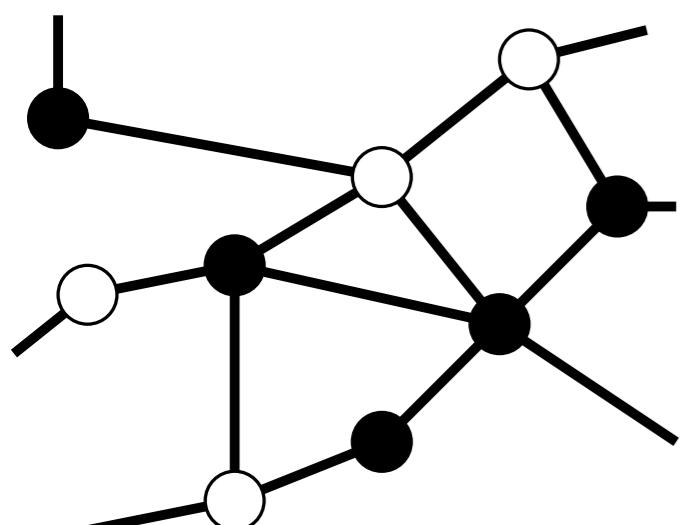
連結な（すべての頂点が辺を介してつながっている）無限グラフ



モデルのパラメター p ($0 \leq p \leq 1$)

基本ルール

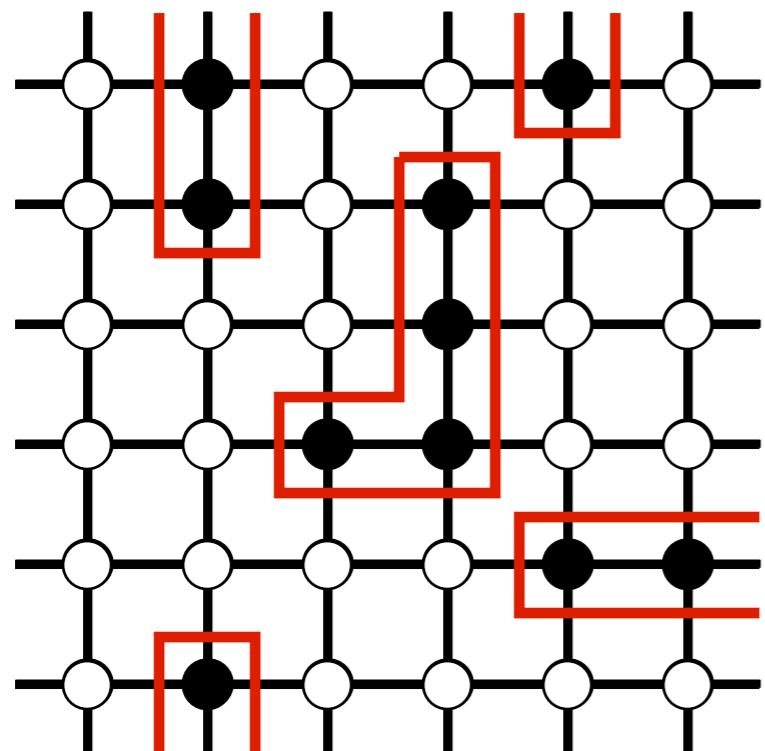
p を決めると●のランダムな図形
(パーコレーションの配位) が作られる



各々の頂点は独立に確率 p で ●
確率 $1 - p$ で ○。
辺で結ばれた2つの●は繋がっている
繋がっている●の集まり = クラスター

クラスターのふるまい

繋がっている・の集まり = クラスター



正方格子

パーコレーションの配位
クラスター

$p = 0$

クラスターなし



$0 < p \ll 1$

少数の小さなクラスター



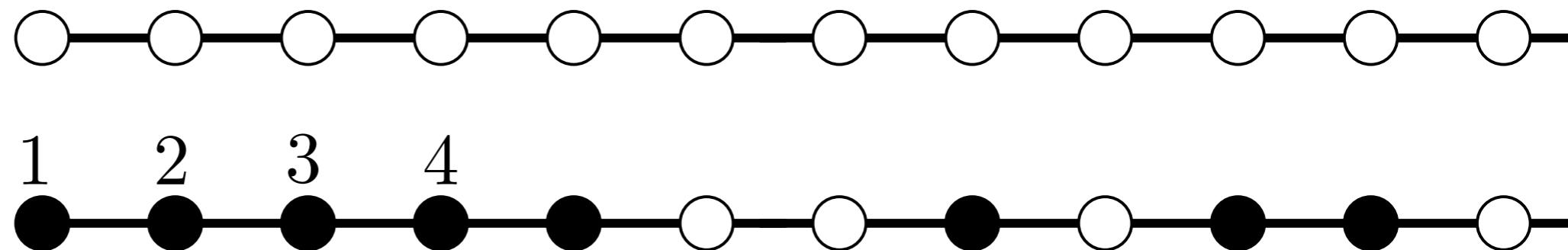
$p = 1$

格子全体がクラスター



一般の p でのクラスターはどうなるだろう？

1次元格子上のパーコレーション

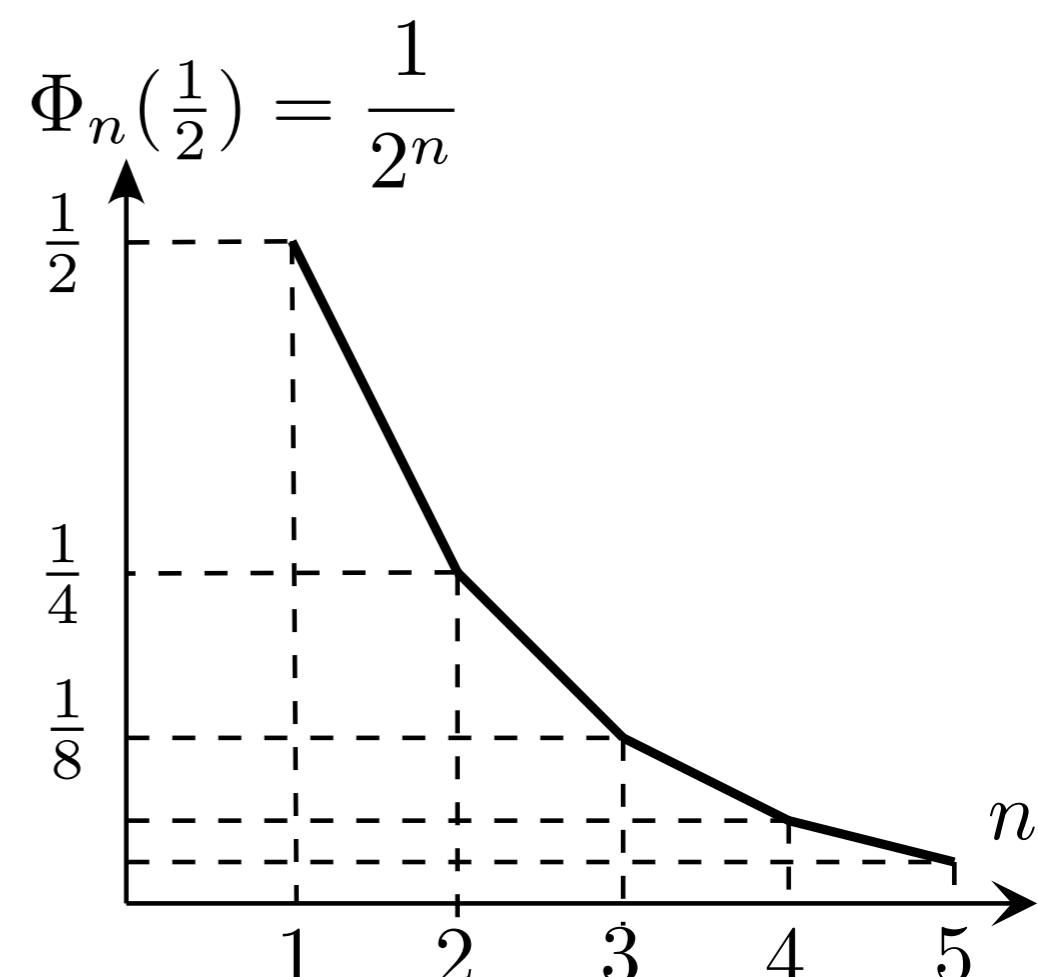


頂点 1 を含むクラスターが頂点 n を含む確率

$$\Phi_n(p) = \underbrace{p \times \cdots \times p}_n = p^n$$

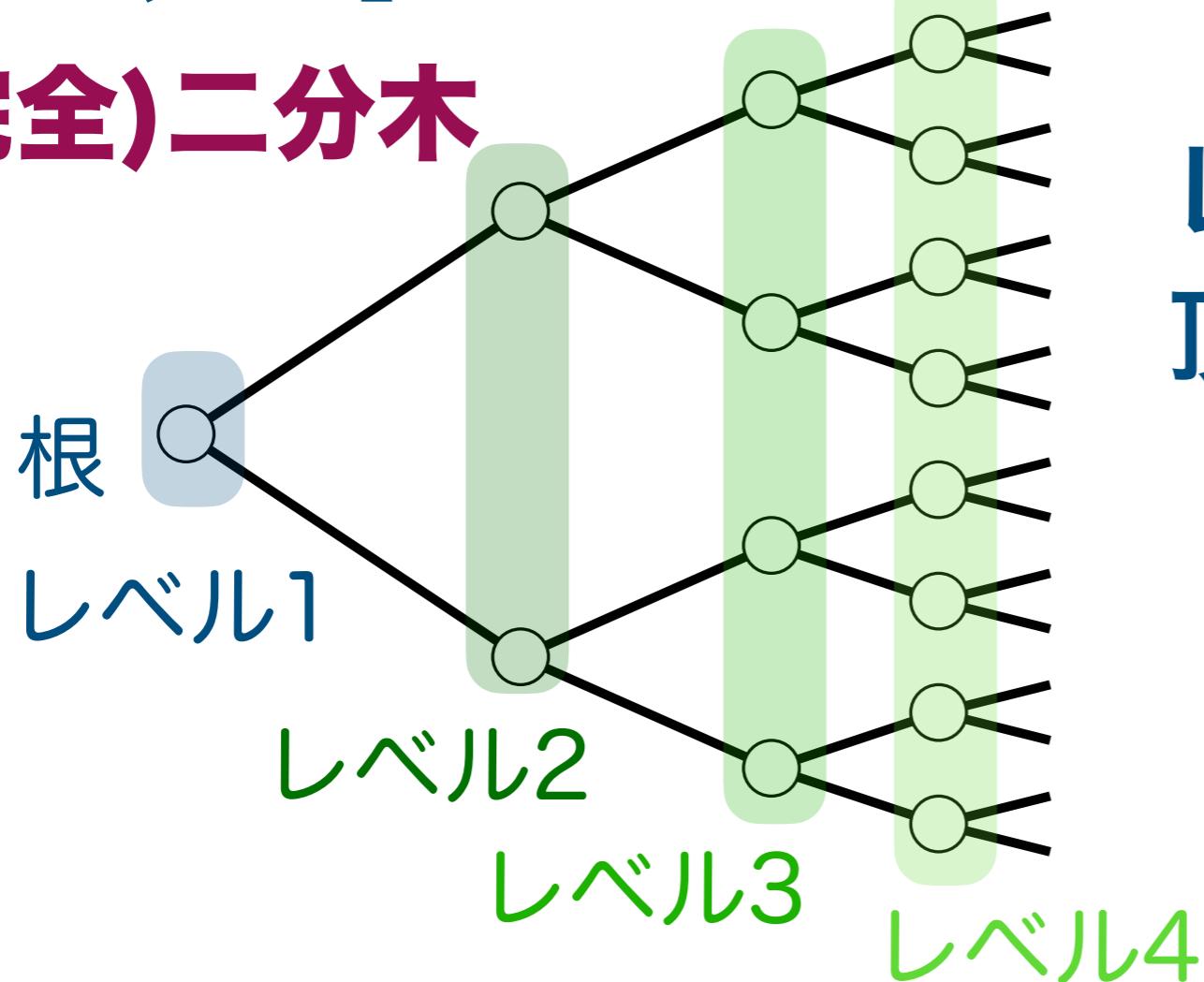
$p < 1$ なら n が大きくなると
 $\Phi_n(p)$ は急激にゼロに近づく

クラスターは必ず有限



二分木上のパーコレーション

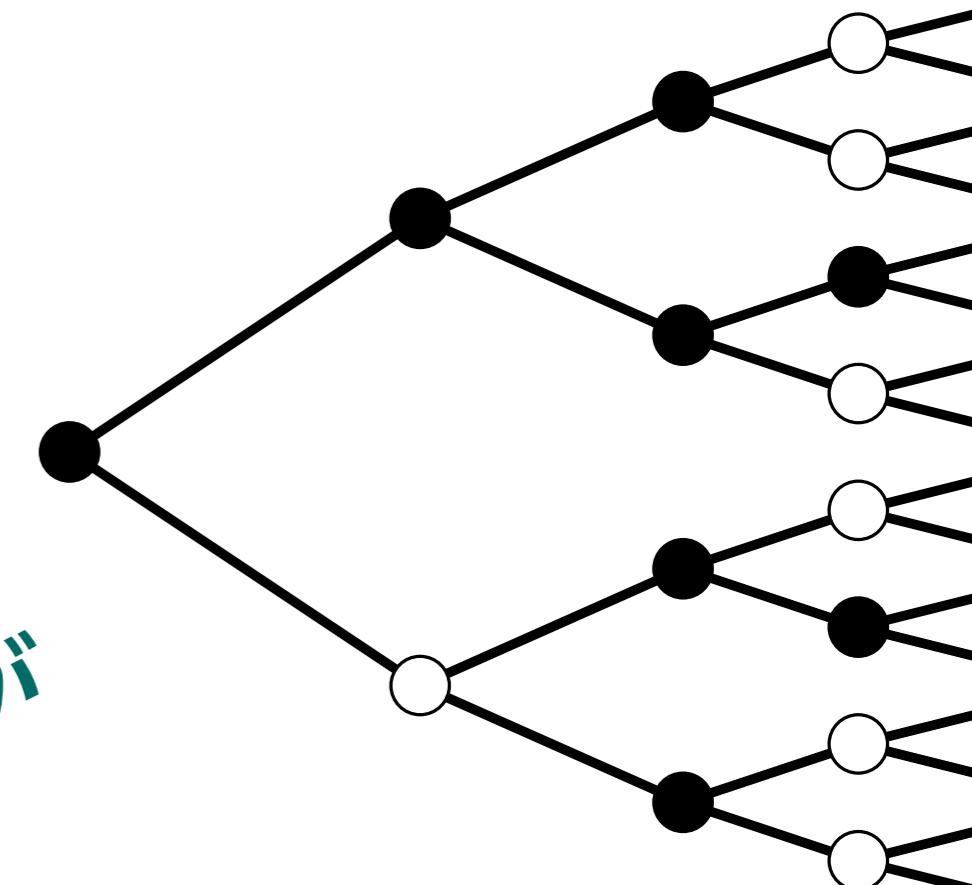
(完全)二分木



レベル n には 2^{n-1} 個の
頂点がある

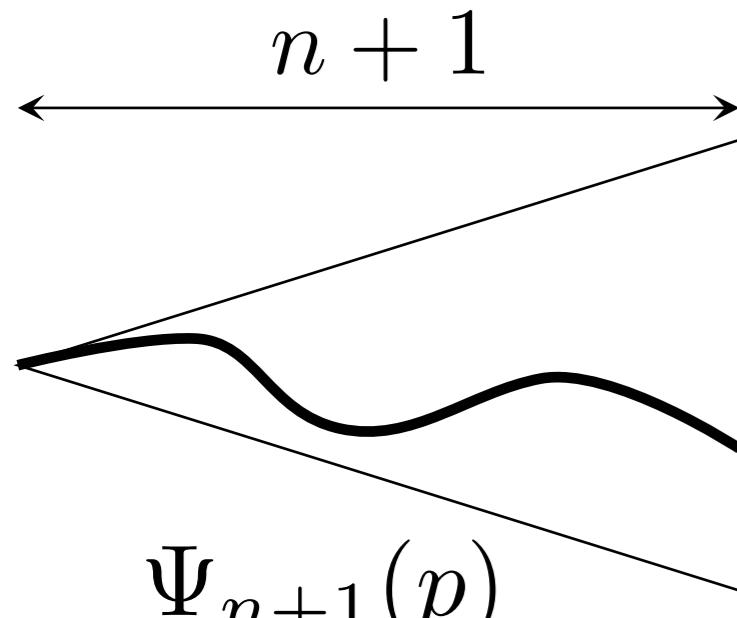
p を決めてパーコレーション
の配位を作る

$\Psi_n(p)$ 根を含むクラスターが
レベル n に達する確率

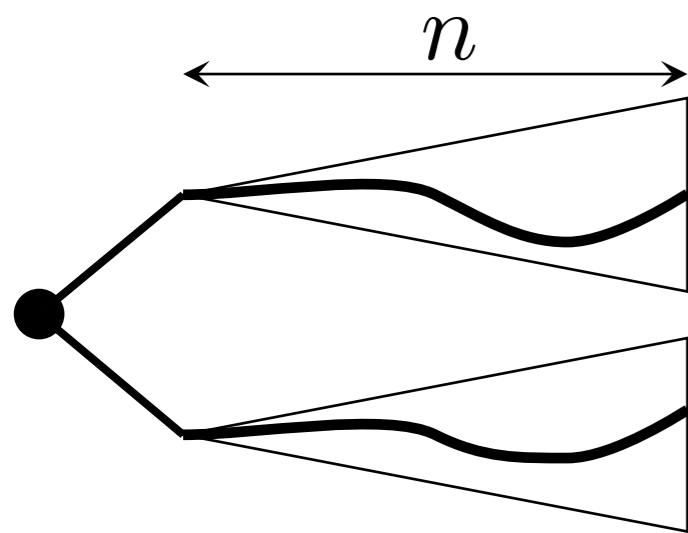
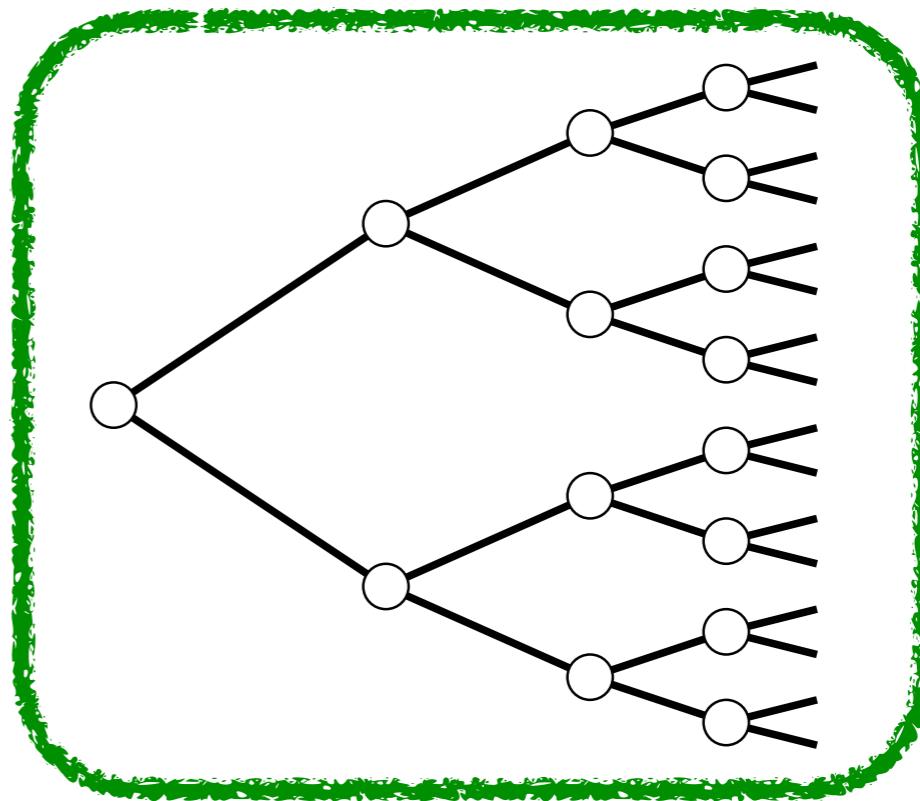


確率 $\Psi_n(p)$ の漸化式

$\Psi_n(p)$ 根を含むクラスターがレベル n に達する確率



=

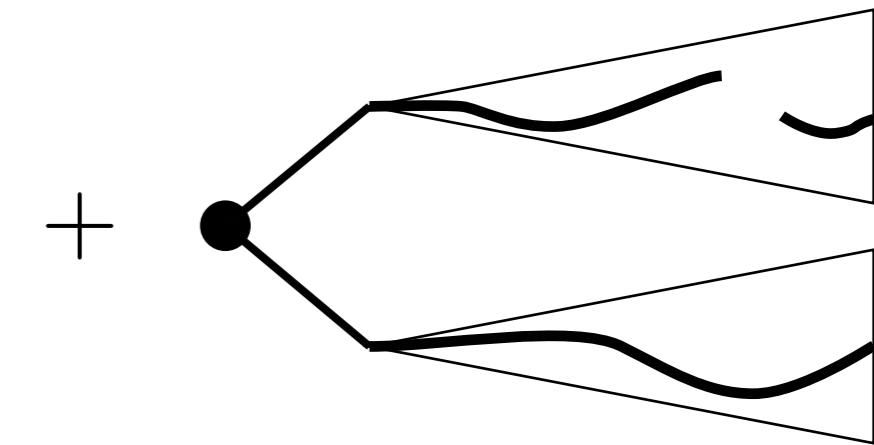


+

$$p \Psi_n(p) \Psi_n(p)$$

$$p \Psi_n(p) \{1 - \Psi_n(p)\}$$

+



+

$$p \{1 - \Psi_n(p)\} \Psi_n(p)$$

確率 $\Psi_n(p)$ の漸化式

$\Psi_n(p)$ 根を含むクラスターがレベル n に達する確率

$$\Psi_{n+1}(p)$$

$$= p \Psi_n(p) \Psi_n(p) + p \Psi_n(p) \{1 - \Psi_n(p)\} + p \{1 - \Psi_n(p)\} \Psi_n(p)$$

$$= p (2\Psi_n(p) - \{\Psi_n(p)\}^2)$$

$$\begin{cases} \Psi_1(p) = p \\ \Psi_{n+1}(p) = p (2\Psi_n(p) - \{\Psi_n(p)\}^2) \end{cases}$$

を解けばよい

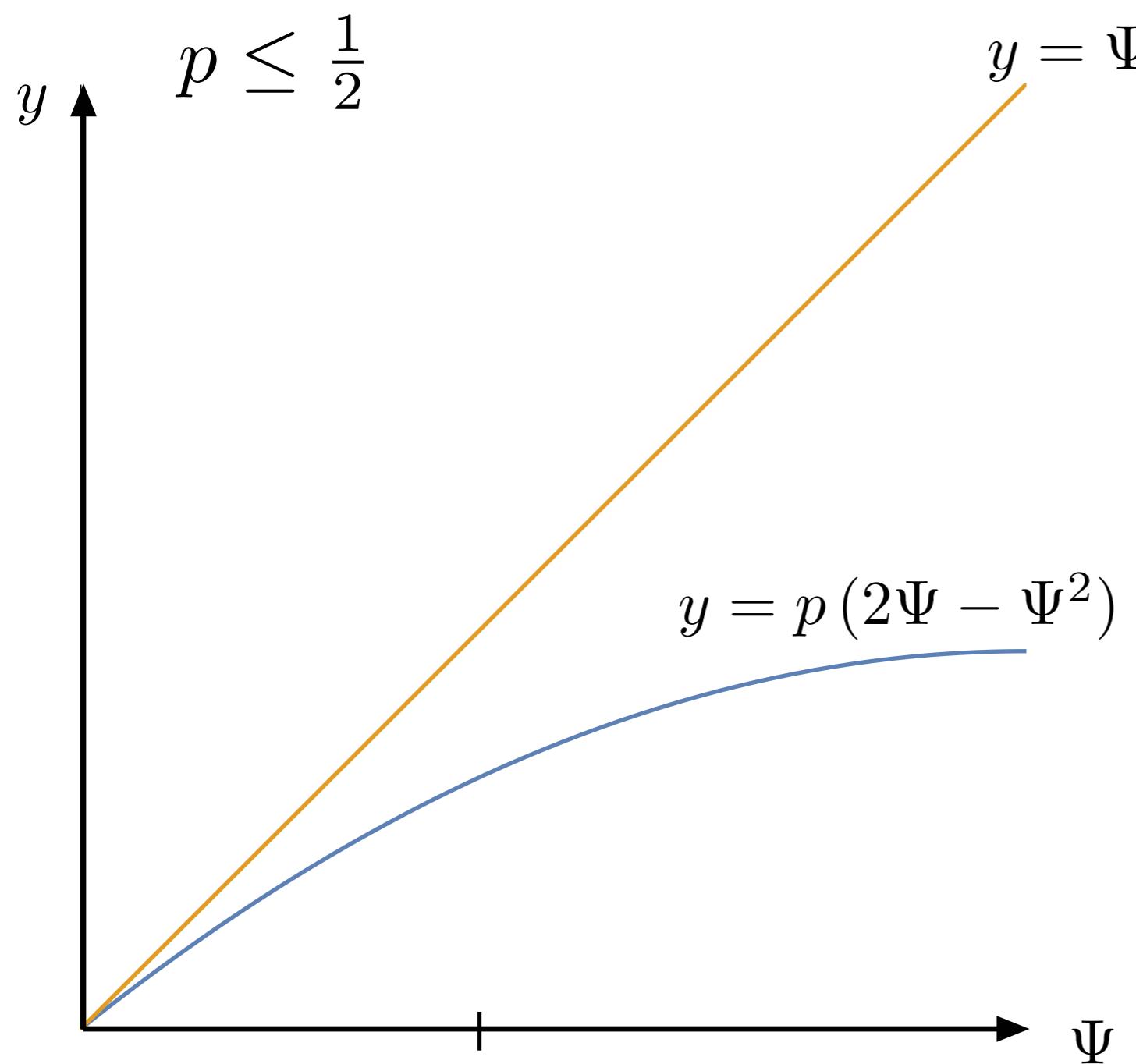
$$\Psi_2(p) = p (2p - p^2) = 2p^2 - p^3$$

$$\Psi_3(p) = p \{2(2p^2 - p^3) - (2p^2 - p^3)^2\} = \dots$$

一般的の $\Psi_n(p)$ は求めようがないが、グラフから基本的な性質は（厳密に）わかる

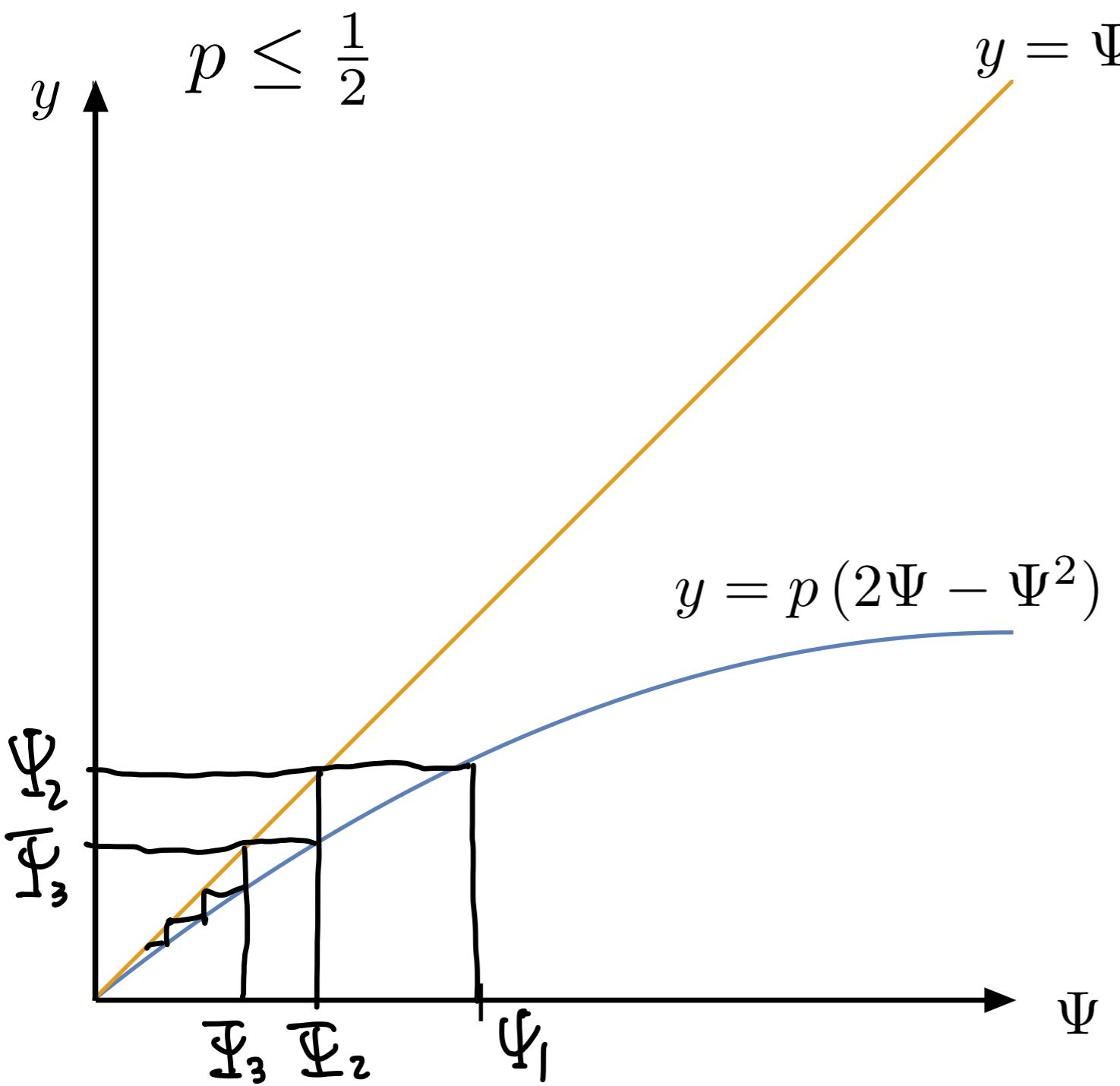
グラフによる $\Psi_n(p)$ の解析

$$\begin{cases} \Psi_1(p) = p \\ \Psi_{n+1}(p) = p(2\Psi_n(p) - \{\Psi_n(p)\}^2) \end{cases}$$



グラフによる $\Psi_n(p)$ の解析

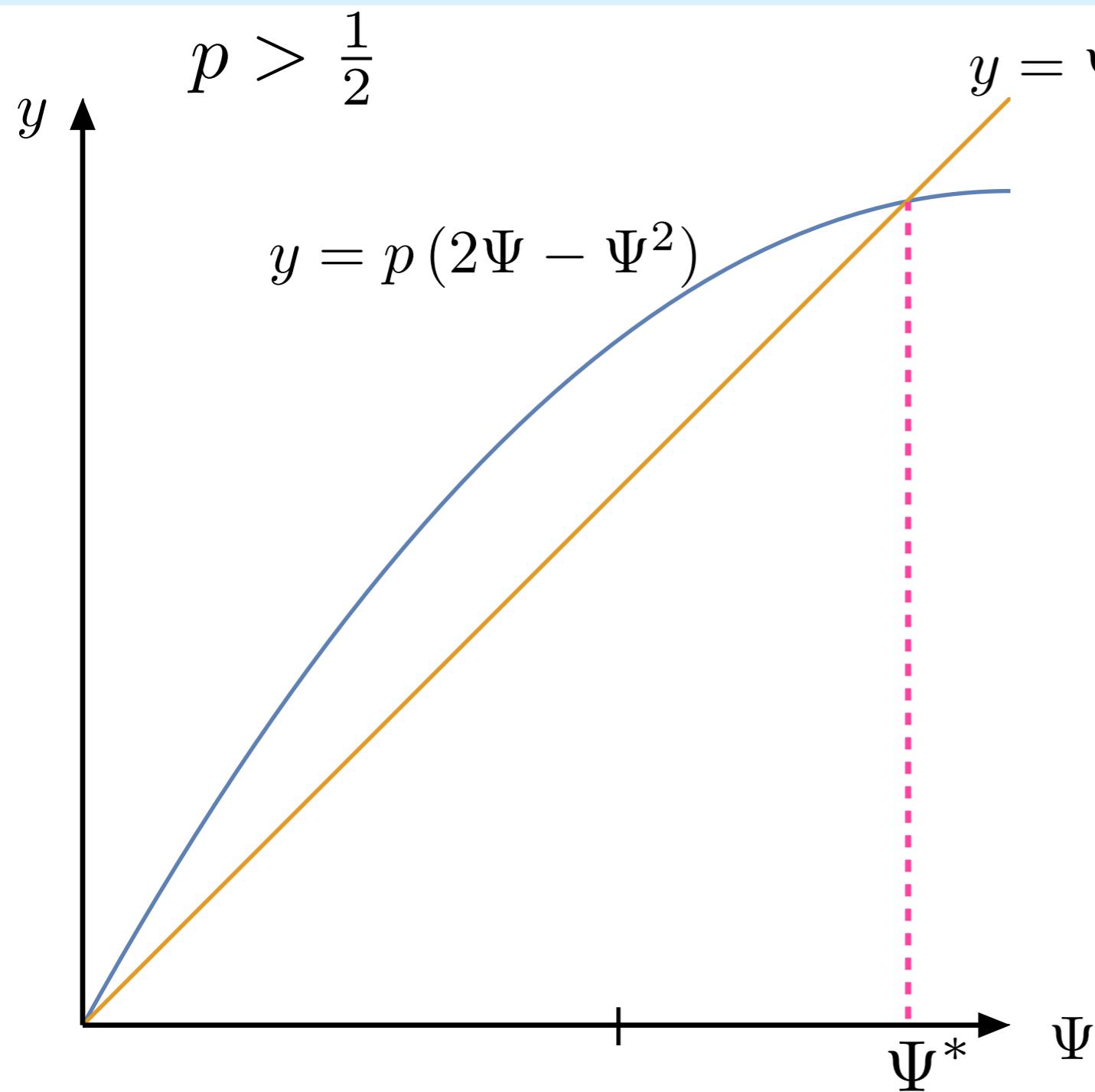
$$\begin{cases} \Psi_1(p) = p \\ \Psi_{n+1}(p) = p(2\Psi_n(p) - \{\Psi_n(p)\}^2) \end{cases}$$



$\Psi_n(p)$ は $n \rightarrow \infty$ で
0 に収束

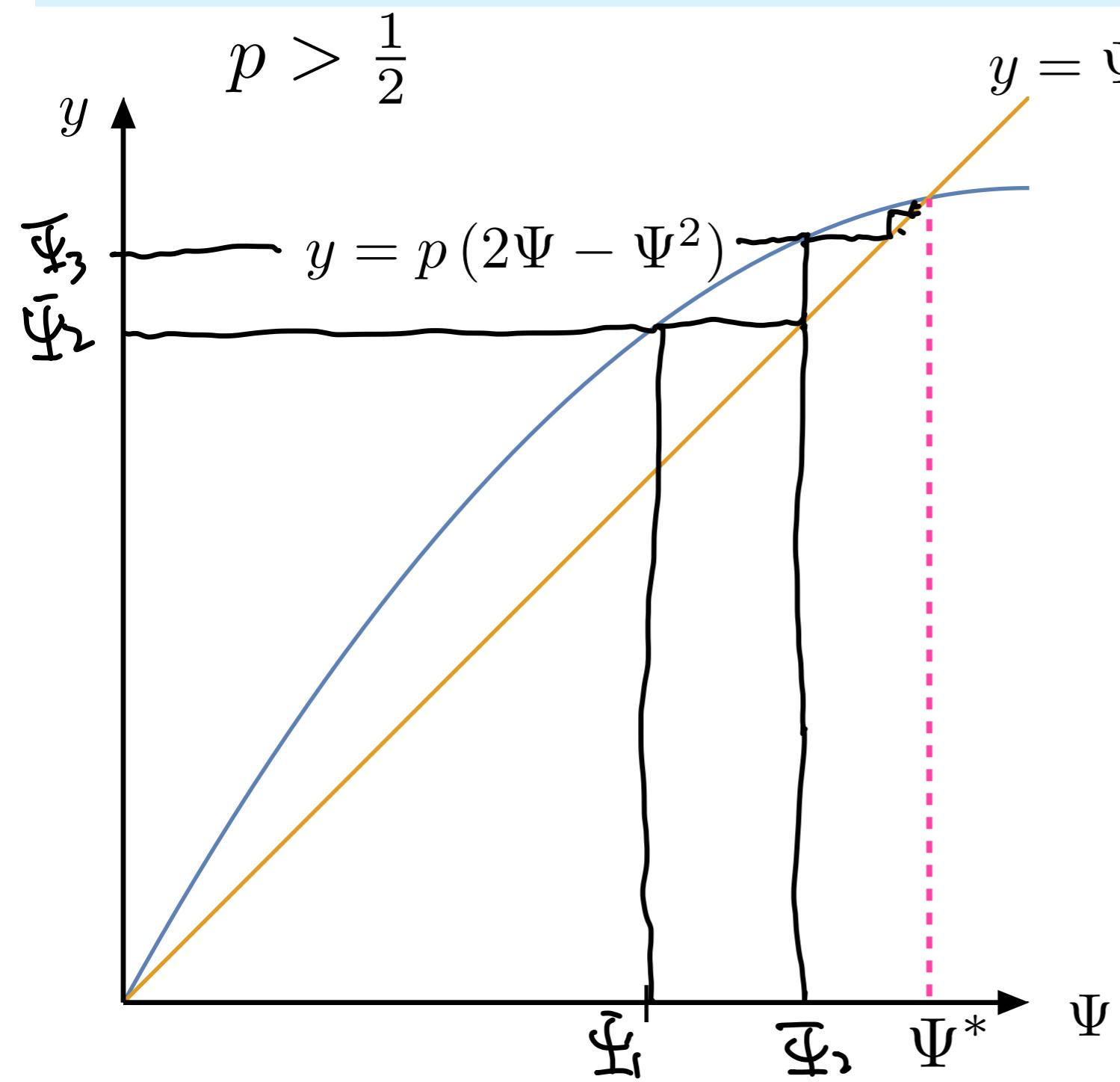
グラフによる $\Psi_n(p)$ の解析

$$\begin{cases} \Psi_1(p) = p \\ \Psi_{n+1}(p) = p(2\Psi_n(p) - \{\Psi_n(p)\}^2) \end{cases}$$



グラフによる $\Psi_n(p)$ の解析

$$\begin{cases} \Psi_1(p) = p \\ \Psi_{n+1}(p) = p(2\Psi_n(p) - \{\Psi_n(p)\}^2) \end{cases}$$



$\Psi_n(p)$ は $n \rightarrow \infty$ で
グラフの交点に収束

$\Psi = p(2\Psi - \Psi^2)$
を Ψ についての
方程式として見て解く

$$\Psi^* = 2 - \frac{1}{p} > 0$$

二分木上のパーコレーションの相転移

$\Psi_n(p)$ 根を含むクラスターがレベル n に達する確率

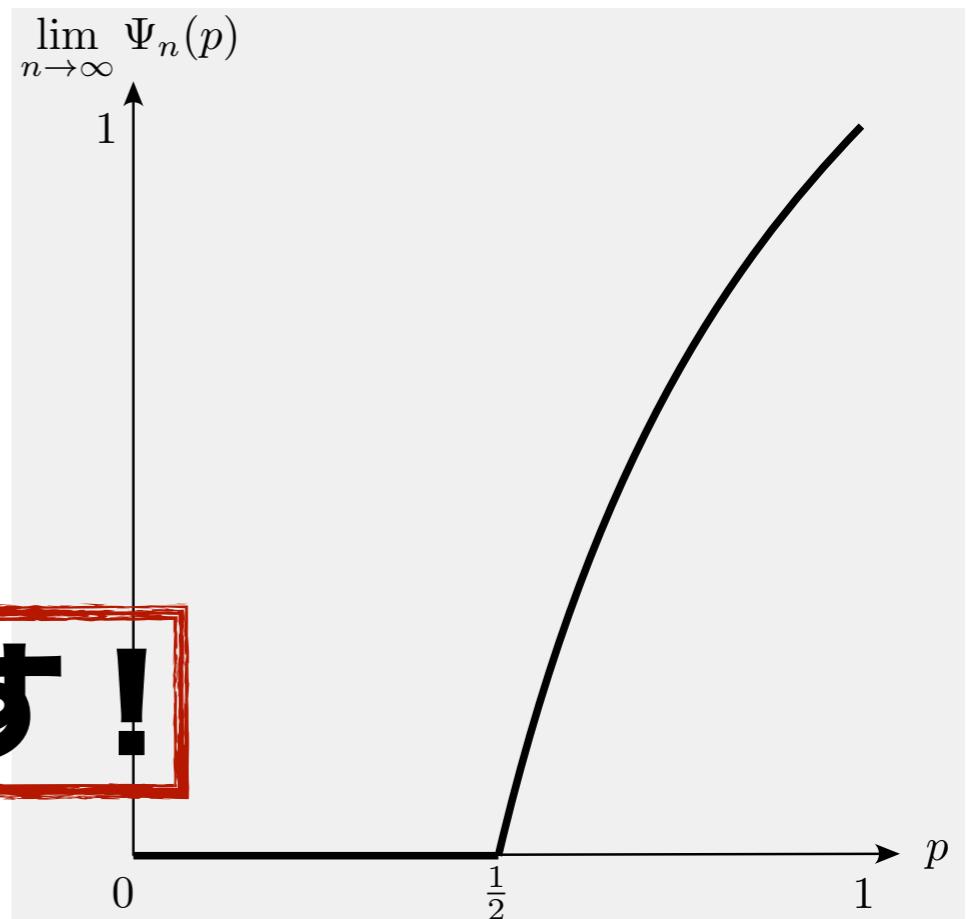
$$\lim_{n \rightarrow \infty} \Psi_n(p) = \begin{cases} 0 & 0 \leq p \leq \frac{1}{2} \\ 2 - \frac{1}{p} & \frac{1}{2} < p \leq 1 \end{cases}$$

$p = \frac{1}{2}$ を境にふるまいが本質的に変わる

$p \leq \frac{1}{2}$ ではクラスターは有限

$p > \frac{1}{2}$ ではクラスターは無限

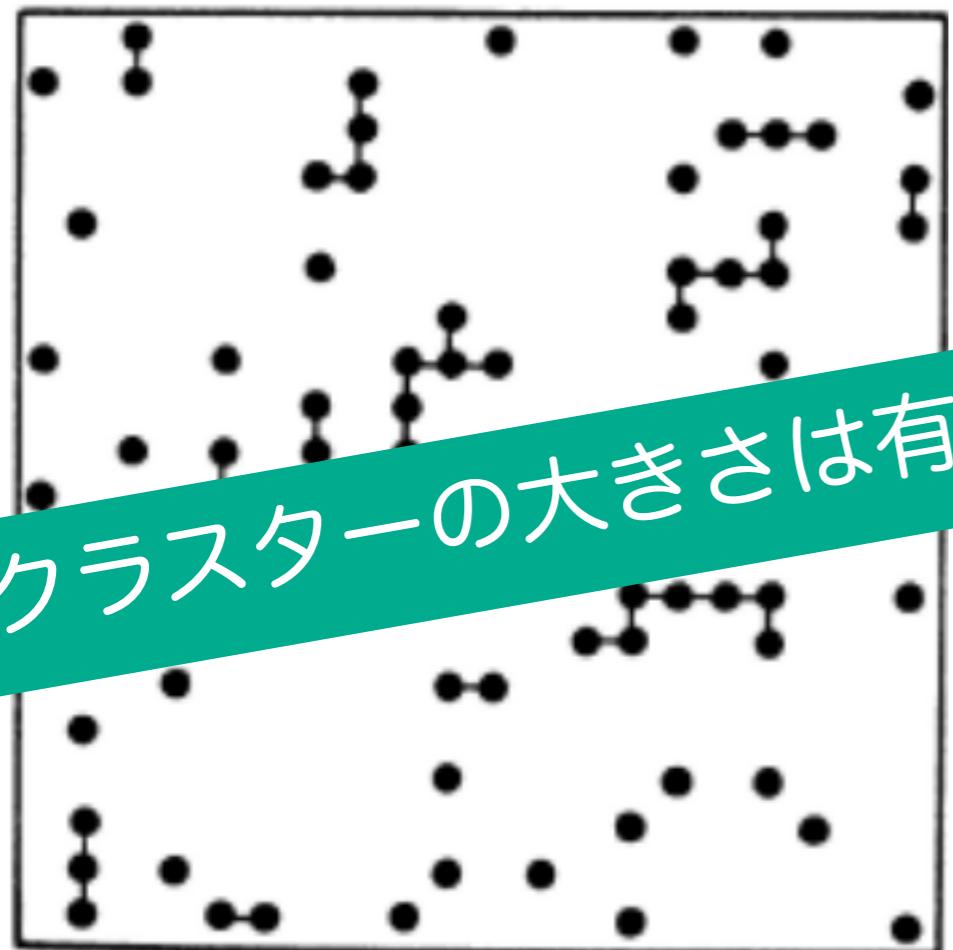
簡単なモデルが相転移を示す！



パーコレーションの相転移

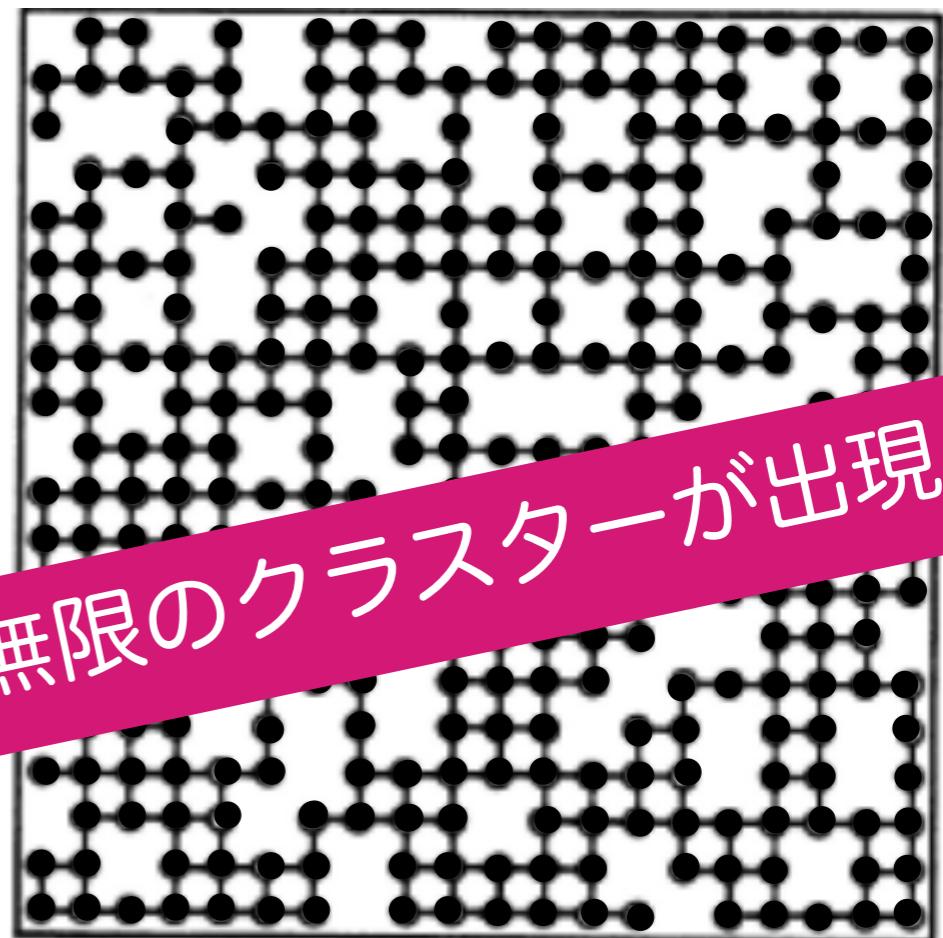
二次元以上の格子上のパーコレーションは、ある臨界確率 p_c で相転移をおこす

$$p < p_c$$



$$p = 0.2$$

$$p > p_c$$



$$p = 0.8$$

クラスターの大きさは有限

無限のクラスターが出現

$$p_c \simeq 0.5927$$

簡単なモデルが相転移を示す！

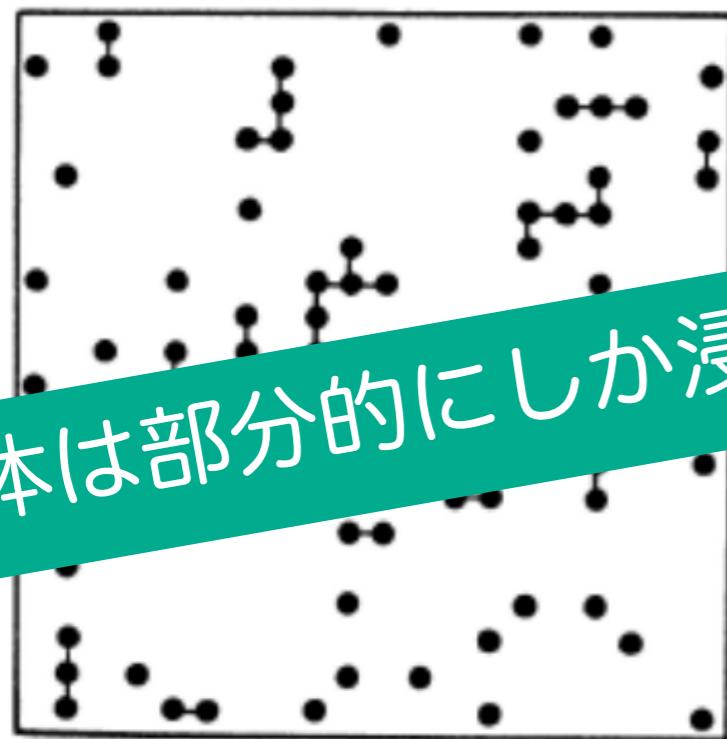
パーコレーション相転移の応用 1

各々の頂点は独立に確率 p で・ 確率 $1 - p$ で・
辺で結ばれた2つの・は繋がっている

液体の浸透 (percolation) の問題

- 液体をとおさない

$$p < p_c$$



- 液体をとおす

$$p > p_c$$



液体は部分的にしか浸透しない

液体は全体に浸透

岩石への水の浸透、地中の石油の分布、…

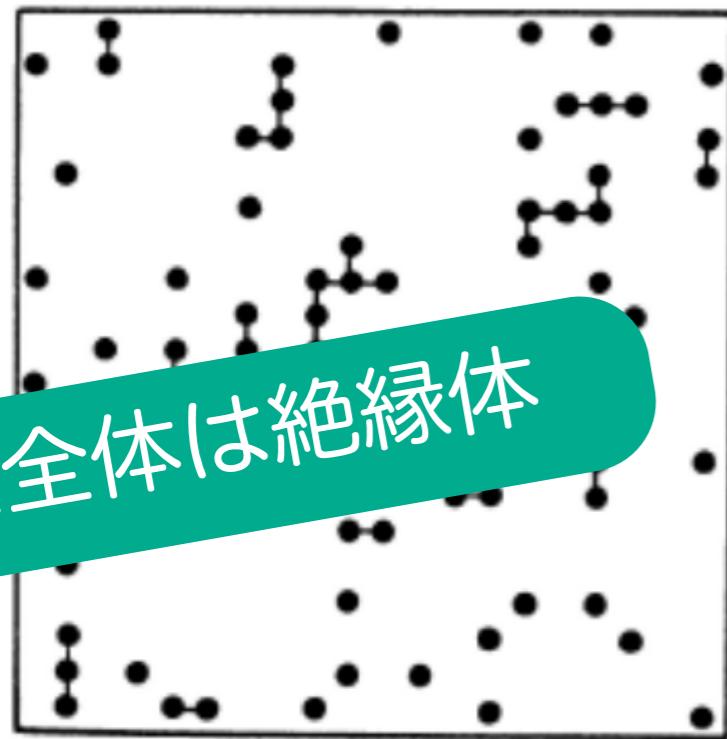
パーコレーション相転移の応用 2

各々の頂点は独立に確率 p で・確率 $1 - p$ で・
辺で結ばれた2つの・は繋がっている

電気伝導のネットワークの問題

- 電流をとおさない

$$p < p_c$$



- 電流をとおす

$$p > p_c$$

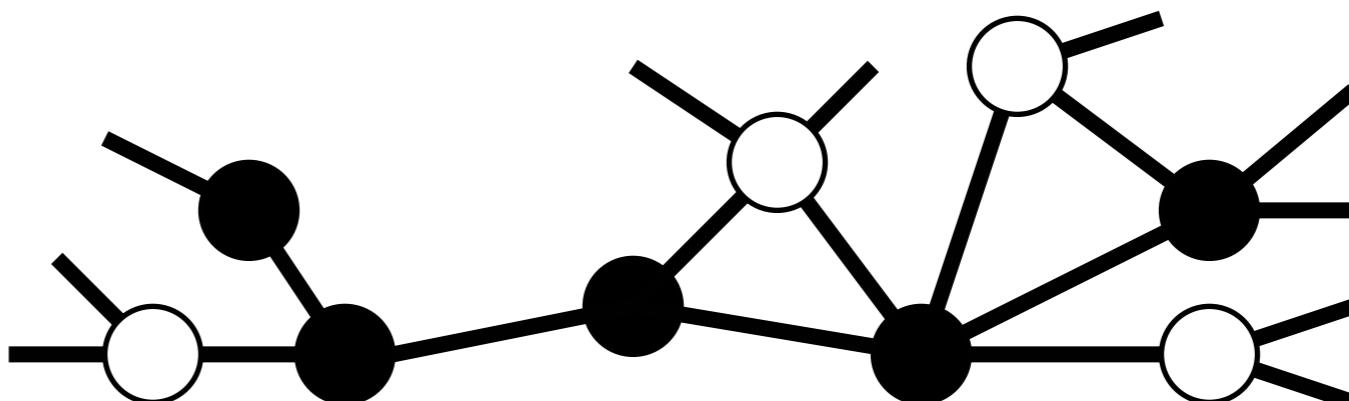


ランダムな合金、破損したネットワーク、…

パーコレーション相転移の応用 3

感染症の伝搬

- 一人(一つの頂点)が感染
- 感染者と接している人(頂点)は、確率 p で感染、確率 $1 - p$ で不感染 (その後も感染しない)
- これをくり返す

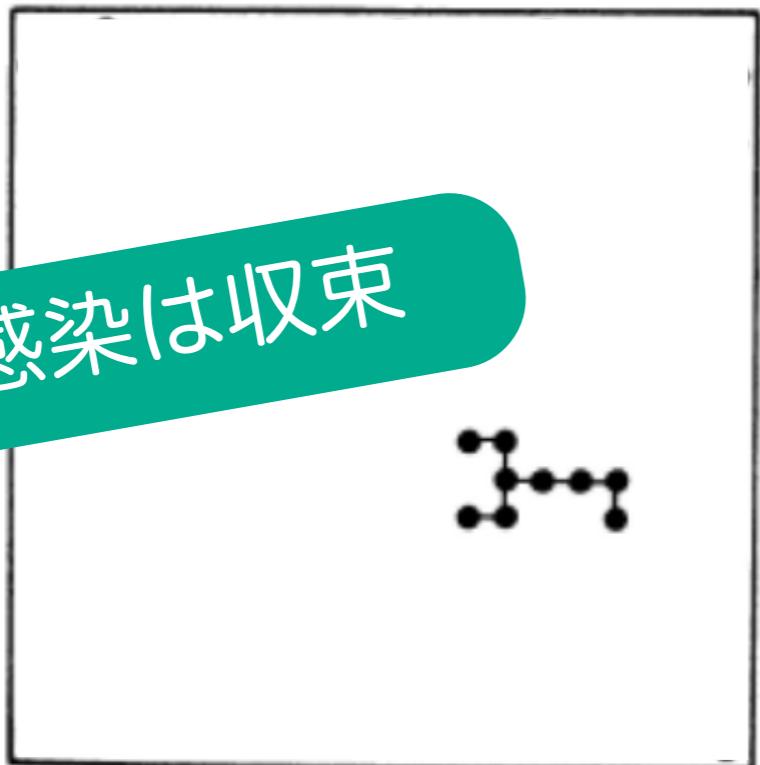


最終的に得られる感染者のクラスターは、元の点を含むパーコレーションのクラスター

パーコレーション相転移の応用 3

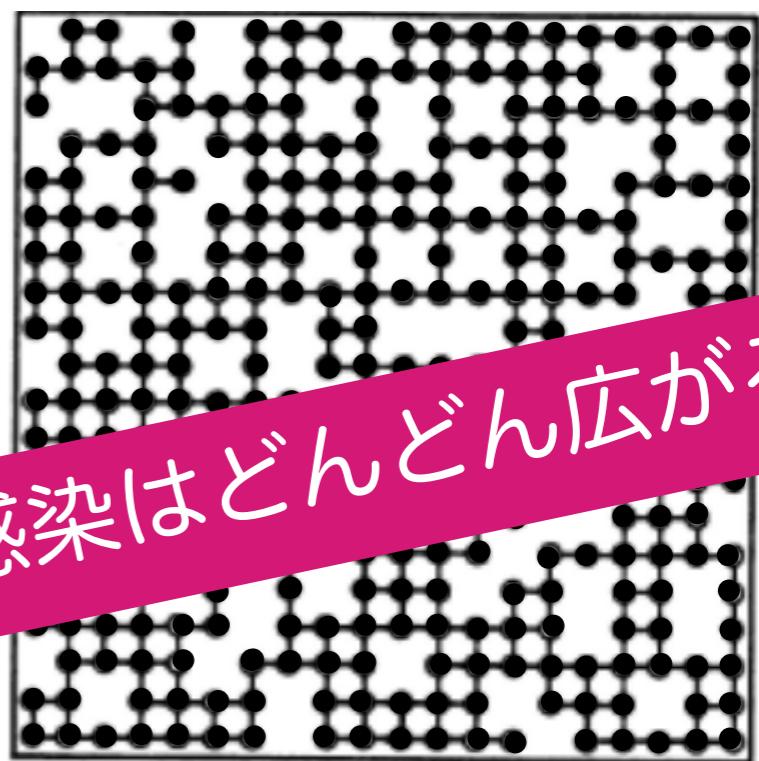
感染症の伝搬

$$p < p_c$$



感染は収束

$$p > p_c$$



感染はどんどん広がる

- この場合にグラフは人の繋がりのネットワーク
- 実際は感染する確率 p は一定ではない
- SIR モデルなど感染症の標準的なモデルでは社会的ネットワークの構造は考慮しない

パーコレーションの臨界現象

臨界確率の近辺で何が起きるか？

二分木上のパーコレーションの臨界現象 1

$p < \frac{1}{2}$ の場合 $n \rightarrow \infty$ とすると $\Psi_n(p) \rightarrow 0$

$\Psi_n(p) \ll 1$ なら

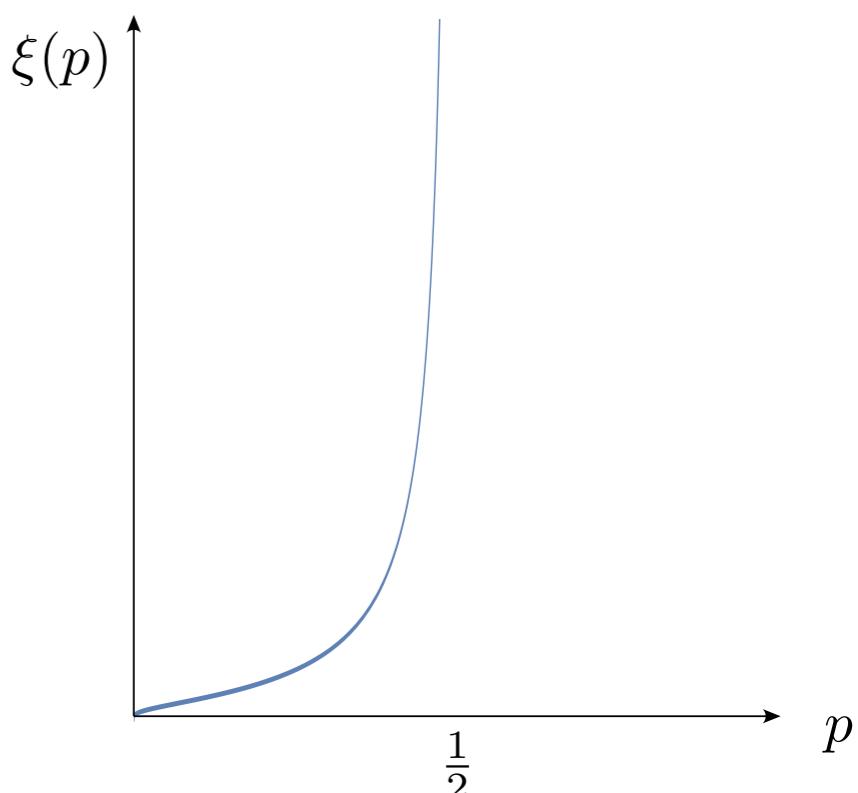
$$\Psi_{n+1}(p) = p(2\Psi_n(p) - \{\Psi_n(p)\}^2) \simeq 2p\Psi_n(p)$$

$$\Psi_n(p) \simeq C_p (2p)^n = C_p e^{-n/\xi(p)}$$

クラスターはおよそレベル $\xi(p)$ まで到達する

$$\begin{aligned}\xi(p) &= -\frac{1}{\log 2p} = -\frac{1}{\log(1+(2p-1))} \\ &\simeq \frac{1}{2} \frac{1}{\frac{1}{2}-p}\end{aligned}$$

p が $\frac{1}{2}$ に近づくと、特徴的な長さ $\xi(p)$ は無限大に発散！



二分木上のパーコレーションの臨界現象 2

$p = \frac{1}{2}$ の場合の漸化式

$$\Psi_{n+1}\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} (2\Psi_n\left(\frac{1}{2}\right) - \{\Psi_n\left(\frac{1}{2}\right)\}^2)$$

$$\Psi_{n+1} - \Psi_n = -\frac{1}{2}(\Psi_n)^2$$

$n \gg 1$ での振る舞いは微分方程式で近似できる

$$\frac{d}{dn} \Psi_n \simeq -\frac{1}{2}(\Psi_n)^2 \quad \longrightarrow \quad \Psi_n \simeq \frac{2}{n}$$

$p < \frac{1}{2}$ では $\Psi_n(p) \simeq C_p e^{-n/\xi(p)}$

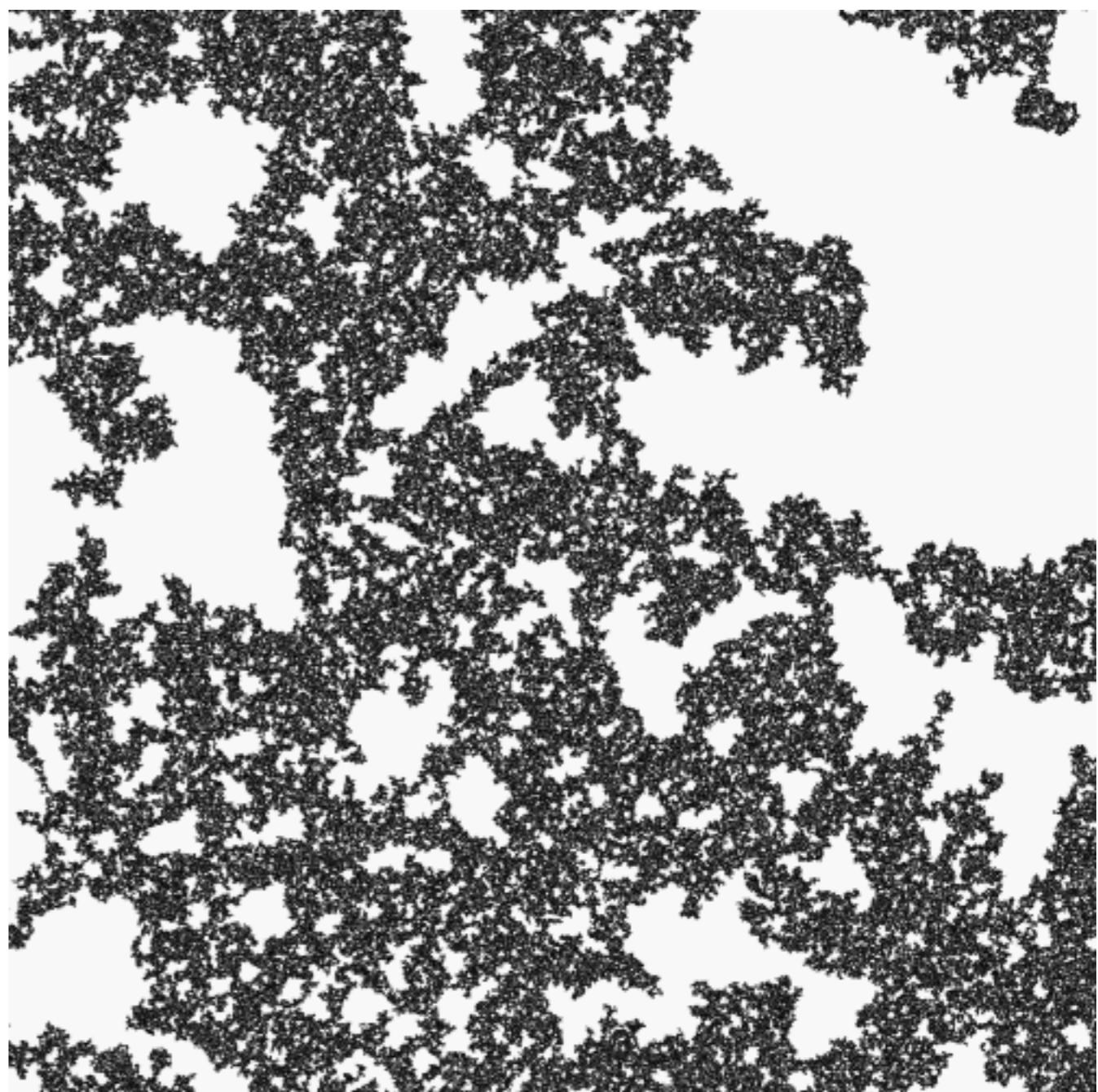
$\xi(p)$ のような特徴的な長さのない
スケール不变な振る舞い！



2次元格子上のパーコレーションの臨界現象

$p = p_c$ での無限クラスターはスケール不变な図形

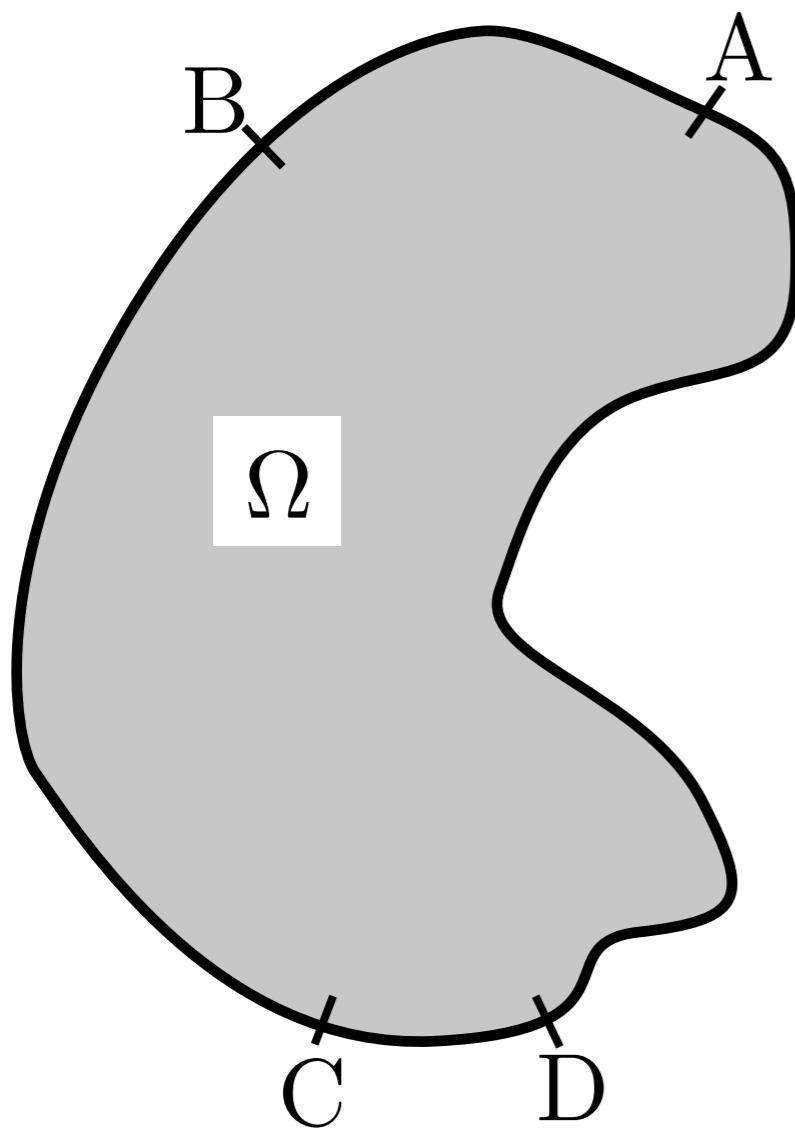
次元 $D = \frac{91}{48} \simeq 1.8958$
のフラクタル



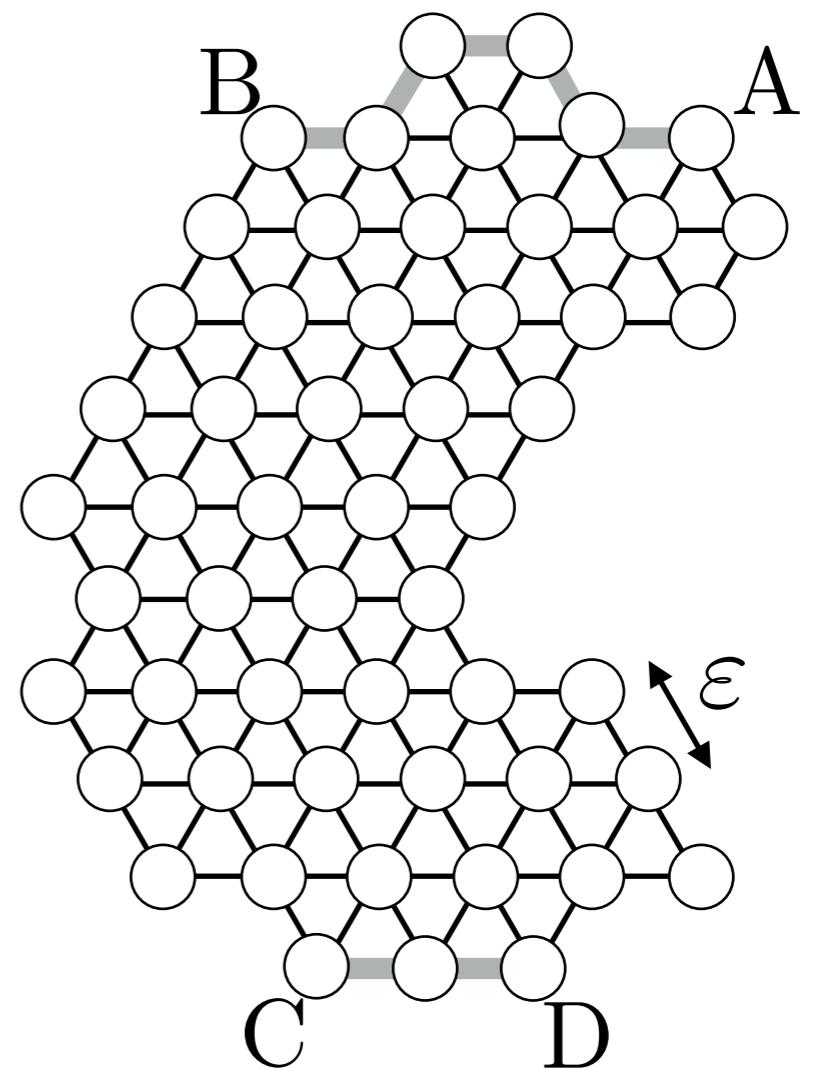
2次元パーコレーションの共形不变性

Ω 複素平面 \mathbb{C} 上の任意の有界で単連結な開集合

A, B, C, D 領域 Ω の境界上の点



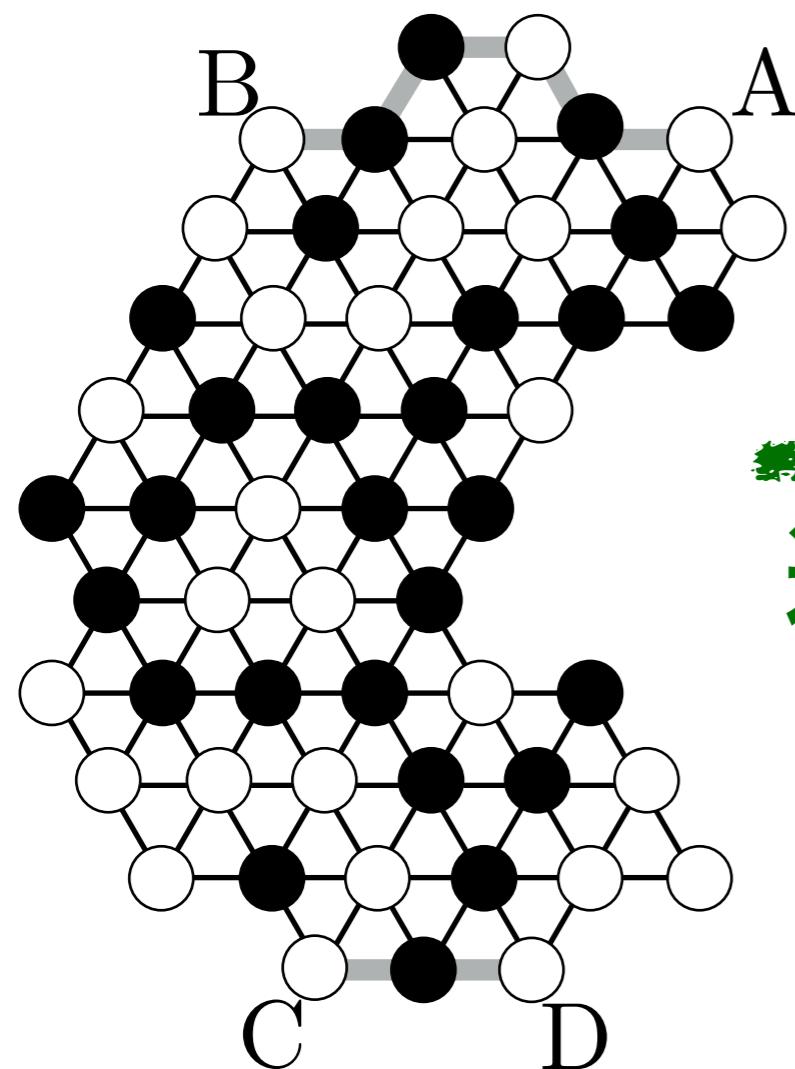
Ω を格子間隔 ε の三角格子
で近似



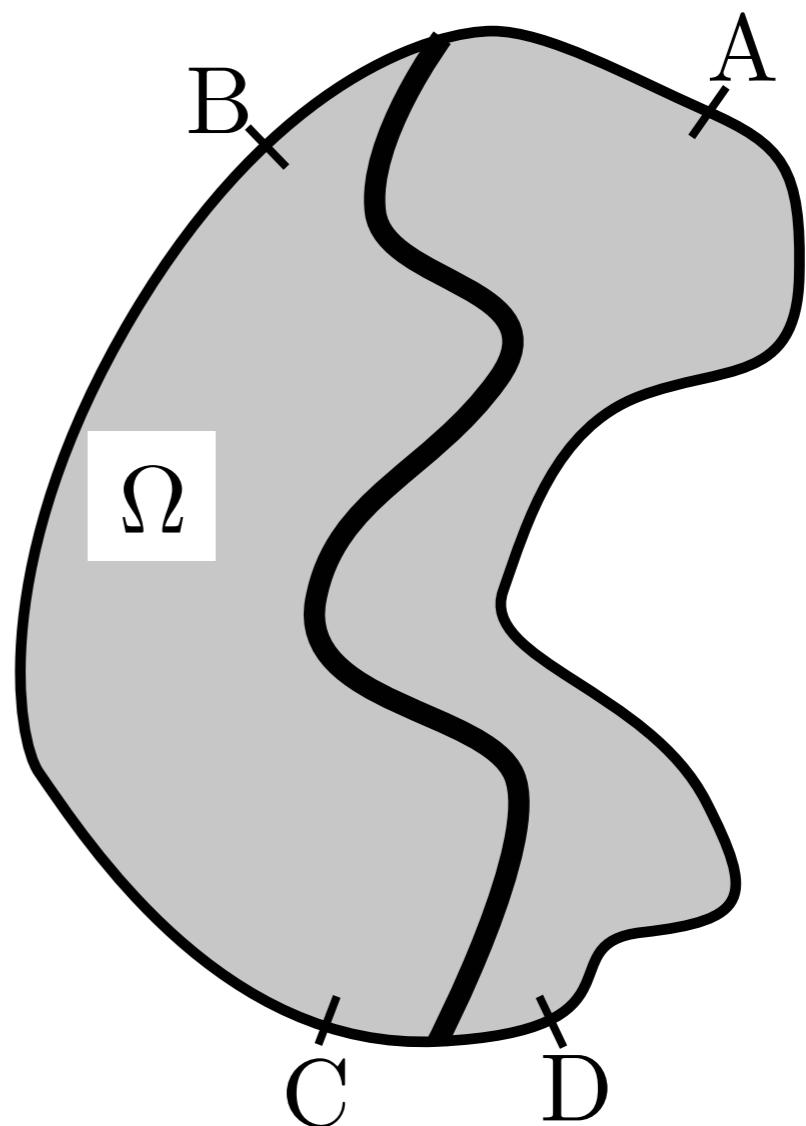
2次元パーコレーションの共形不变性

三角格子上の $p = 1/2$ のパーコレーション

$\Phi_\varepsilon(\Omega; A, B, C, D)$ 弧 AB と弧 CD が繋がっている確率



連続極限
 $\varepsilon \downarrow 0$



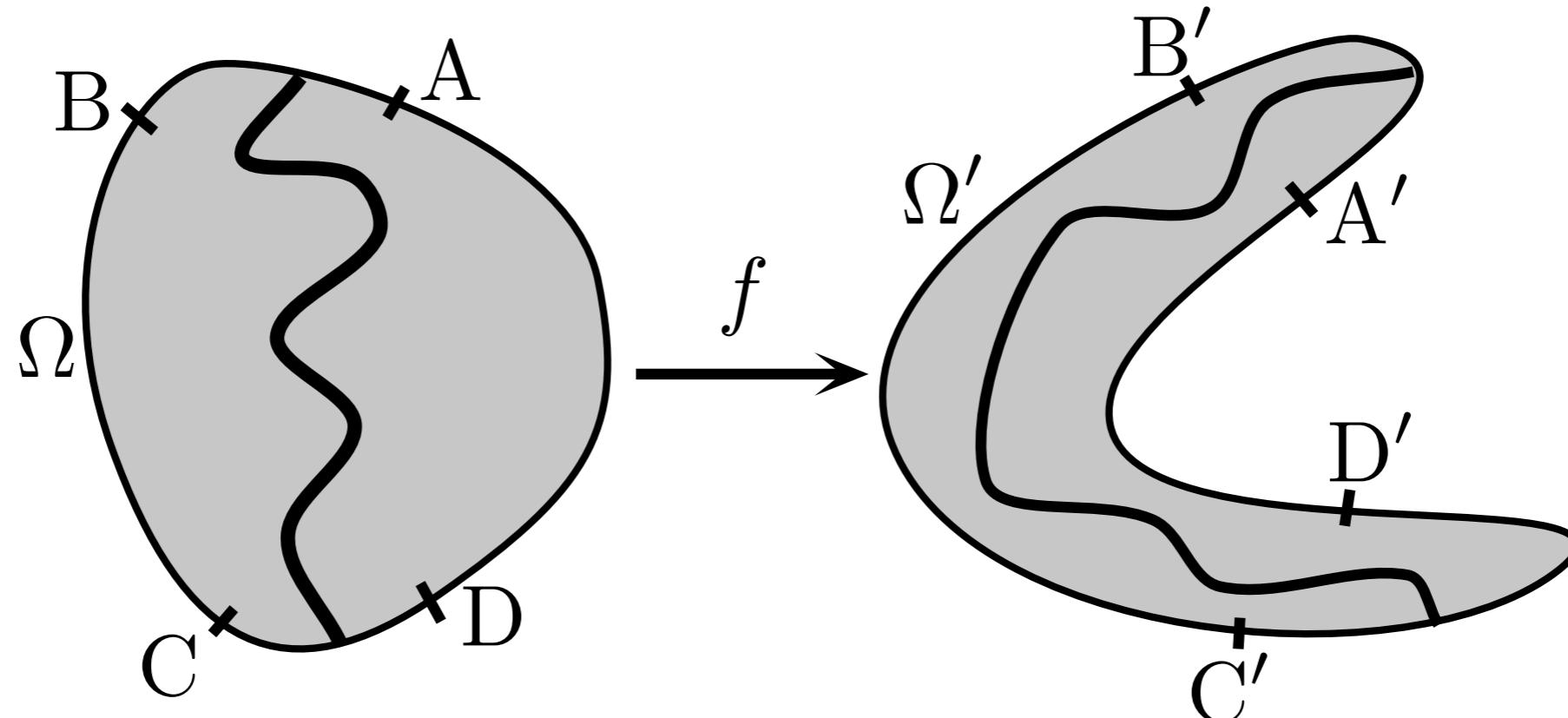
$$\Phi(\Omega; A, B, C, D) = \lim_{\varepsilon \downarrow 0} \Phi_\varepsilon(\Omega; A, B, C, D)$$

2次元パーコレーションの共形不变性

Ω' 複素平面 \mathbb{C} 上の任意の有界で単連結な開集合

$f(\Omega) = \Omega'$ となる任意の共形変換（正則写像） f

$$A' = f(A), B' = f(B), C' = f(C), D' = f(D)$$



定理 (Smirnov, 2001)

$$\Phi(\Omega; A, B, C, D) = \Phi(\Omega'; A', B', C', D')$$

2次元パーコレーションの共形不变性

Ω' 複素平面 \mathbb{C} 上の任意の有界で単連結な開集合

$f(\Omega) = \Omega'$ となる任意の共形変換（正則写像） f

$$A' = f(A), B' = f(B), C' = f(C), D' = f(D)$$

三角格子上のパーコレーション
は臨界点で自然に共形不变性を
獲得する

(数学的奇跡？！)



定理 (Smirnov, 2001)

$$\Phi(\Omega; A, B, C, D) = \Phi(\Omega'; A', B', C', D')$$

相転移と長距離秩序

相転移の本質？

相転移と長距離秩序

✓相転移は長距離の秩序の有無の移り変わり

パーコレーション

$p < p_c$ クラスター有限 全体としてバラバラ
 $p > p_c$ 格子全体が繋がっている（長距離秩序）

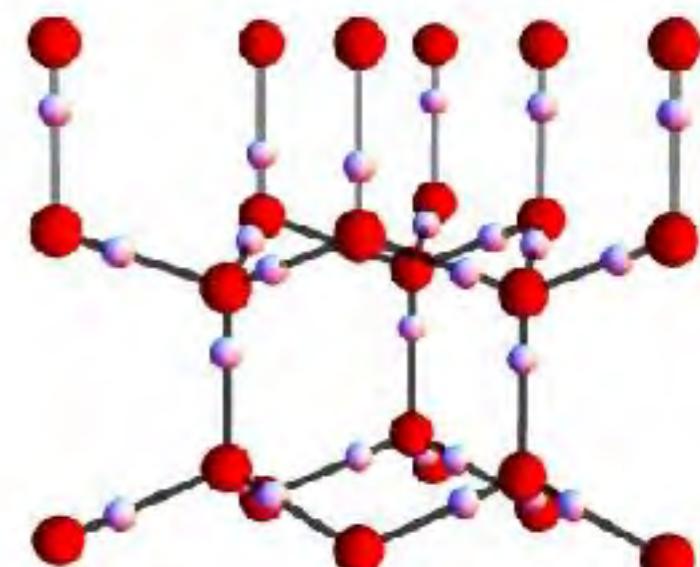
水と氷の相転移

水 分子たちはバラバラに運動

氷 分子たちは整然とした結晶を構成（長距離秩序）



水の結晶（六方晶）

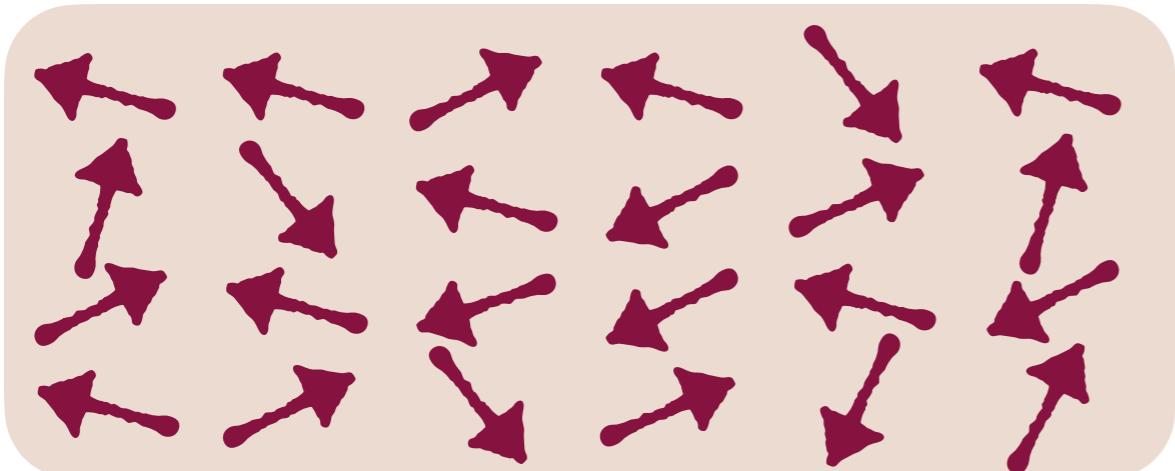


相転移と長距離秩序

✓ 相転移は長距離の秩序が生まれるときに生じる
強磁性体（磁石）の相転移

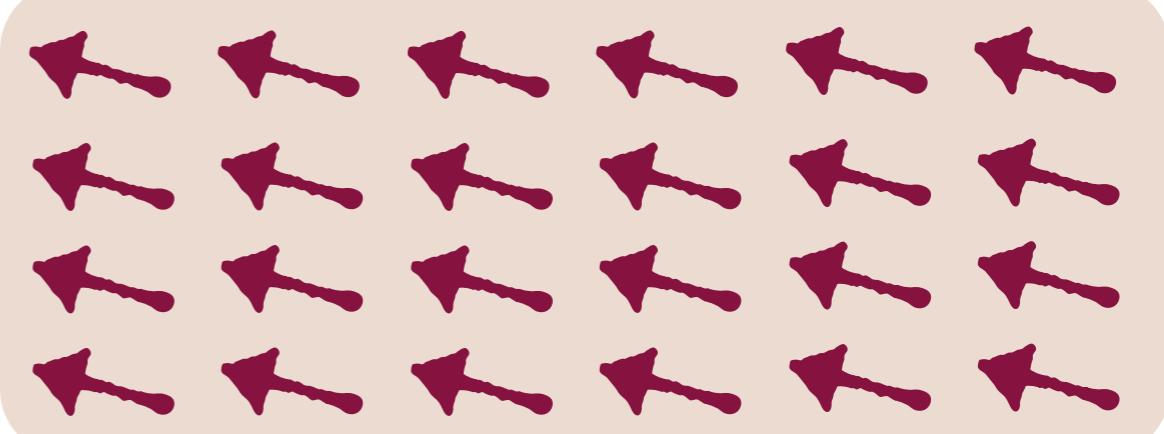
数多くのスピン（=小さな磁石）の集まり

高温 スピンの向きはバラバラ



全体としては磁石ではない

全体として磁石！



低温 スピンの向きがそろう（長距離秩序）

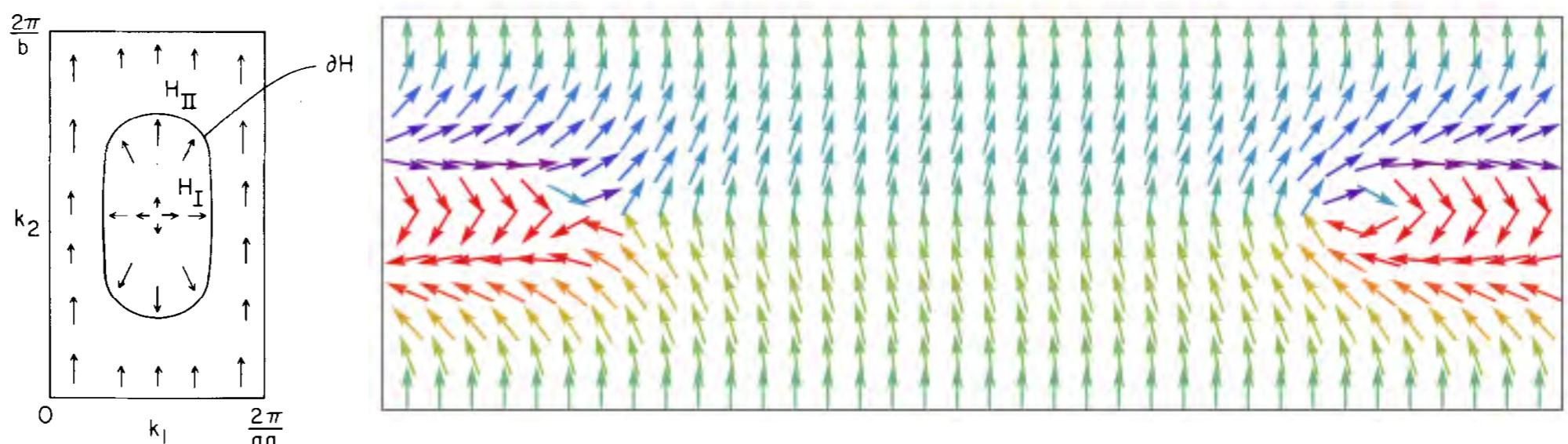
長距離秩序は相転移の本質か？

二十世紀終盤までに理解されていた相転移はすべてなんらかの長距離秩序と関連していた

対称性とその自発的破れによる相転移と相の分類

今世紀になって長距離秩序や対称性の破れとは無関係な相転移現象が認識される

トポロジカル相の間のトポロジカルな相転移

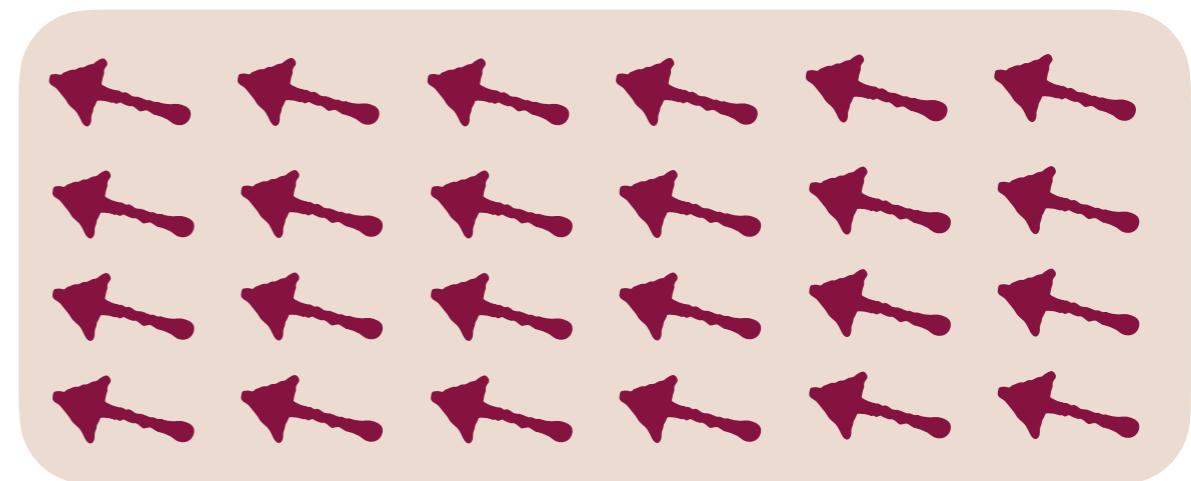


量子スピン系の奇妙なふるまい トポロジカルな相転移

1 次元の反強磁性体

磁性体 = 磁石

数多くのスピン(=小さな磁石)の集まり



1 次元の反強磁性体

$$E = \sum_{j=1}^L S_j \cdot S_{j+1}$$
 古典ハイゼンベルク模型

スピンが一列に並んだ磁性体

隣り合うスピンはなるべく逆を向きたい

基底状態 (絶対零度で実現する状態)



1 次元の量子反強磁性体

1 次元の量子反強磁性体

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^L \hat{\mathbf{S}}_j \cdot \hat{\mathbf{S}}_{j+1}$$
 ハイゼンベルク模型

スピンが一列に並んだ磁性体

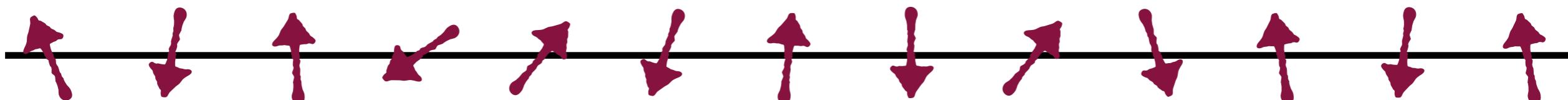
隣り合うスピンはなるべく逆を向きたい

スピンは量子力学の法則に従う

基底状態 (絶対零度で実現する状態)



量子効果によってスピンは乱れる



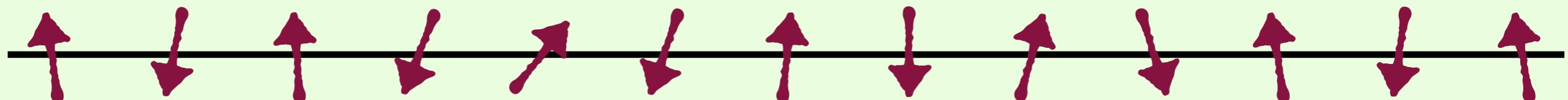
1 次元の量子反強磁性体

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^L \hat{S}_j \cdot \hat{S}_{j+1}$$
 ハイゼンベルク模型

量子効果を取り入れた基底状態(絶対零度の状態)

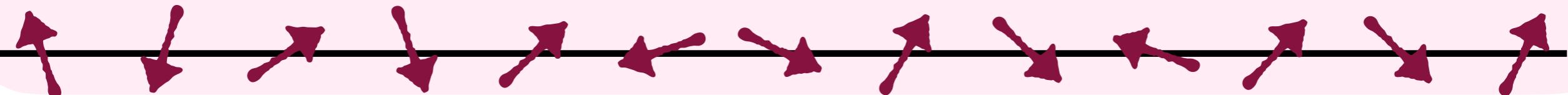
Bethe (1931)

スピンの「大きさ」 S が最小の $\frac{1}{2}$ のとき
スピンはほとんど逆向きにそろい、乱れは小さい



Haldane (1983)

スピンの「大きさ」 S が 1 のとき
スピンは激しく乱れている



一般の S についての Haldane の結論

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^L \hat{\mathbf{S}}_j \cdot \hat{\mathbf{S}}_{j+1}$$
 ハイゼンベルク模型

量子効果を取り入れた基底状態(絶対零度の状態)

スピンが半奇数 $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$ の場合

絶対零度でスピンはゆるやかにそろっている

スpinが整数 $S = 1, 2, \dots$ の場合

絶対零度でもスpinは激しく乱れている
(まるで高温状態)

基底状態の性質は、スpinが半奇数 $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$
か整数 $S = 1, 2, \dots$ かで質的に異なる！

一般の S についての Haldane の結論

基底状態の性質は、スピンが半奇数 $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$

か整数 $S = 1, 2, \dots$ かで質的に異なる！

☑ 長年にわたって研究されていた標準的な模型についての常識破りの驚くべき結論

1981 年の論文の査読レポート

"This is in manifest contradiction to fundamental principles of physics"

☑ その後の様々な研究（実験、数値計算、理論、厳密に解ける模型…）の結果は Haldane の主張が正しいことを裏付けた

一般のCについての結論

基底
か整

☑長
いて

19

"T
pr

☑そ
密に角
正しし



The Nobel Prize in Physics 2016

David J. Thouless, F. Duncan M. Haldane, J. Michael Kosterlitz

Share this: 1.9K

The Nobel Prize in Physics 2016



Photo: A. Mahmoud
David J. Thouless
Prize share: 1/2



Photo: A. Mahmoud
F. Duncan M.
Haldane
Prize share: 1/4



Photo: A. Mahmoud
J. Michael Kosterlitz
Prize share: 1/4

$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$

型につ

emental

倫、巖
張が



KUNGL.
VETENSKAPS-
AKADEMIEN
THE ROYAL SWEDISH ACADEMY OF SCIENCES

4 OCTOBER 2016



ノーベル財団による 2016年物理学賞の公式解説

Scientific Background on the Nobel Prize in Physics 2016

TOPOLOGICAL PHASE TRANSITIONS AND
TOPOLOGICAL PHASES OF MATTER

compiled by the Class for Physics of the Royal Swedish Academy of Sciences

4 OCTOBER 2016



ノーベル財団による 2016年物理学賞の公式解説

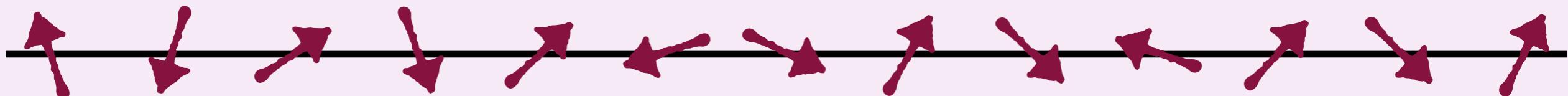
We now complement the above rather abstract argument, which also relied on the assumption of large S , with a description of a very instructive and exactly solvable model for $S = 1$, which is a close cousin of the Heisenberg model in Eq. (1). The Hamiltonian for this AKLT chain, named after its inventors Ian Affleck, Tom Kennedy, Elliott Lieb and Hal Tasaki, is [1]

$$H_{AKLT} = \sum_i \left[\frac{1}{2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + \frac{1}{6} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \right)^2 + \frac{1}{3} \right] = \sum_i P_2(\vec{S}_i + \vec{S}_{i+1}) \quad (18)$$

where \vec{S}_i is a spin 1 operator at the lattice site i , and P_2 projects on the subspace corresponding to spin 2 on two adjacent lattice sites. To find the ground state, we imagine that each link in the chain hosts two auxiliary spin 1/2 that are projected to a spin 1. As explained in Fig. 8, forming a spin singlet at each link in the chain gives an eigenstate of the Hamiltonian with zero energy. Since the Hamiltonian is a sum of projectors, the ground state energy

AKLT 模型

Haldane が予想した、スピンの大きさが 1 で
激しく乱れた基底状態の数学的に厳密なモデル



$$\hat{H}_{\text{AKLT}} = \sum_{j=1}^L \left\{ \hat{\mathbf{S}}_j \cdot \hat{\mathbf{S}}_{j+1} + \frac{1}{3} (\hat{\mathbf{S}}_j \cdot \hat{\mathbf{S}}_{j+1})^2 \right\}$$

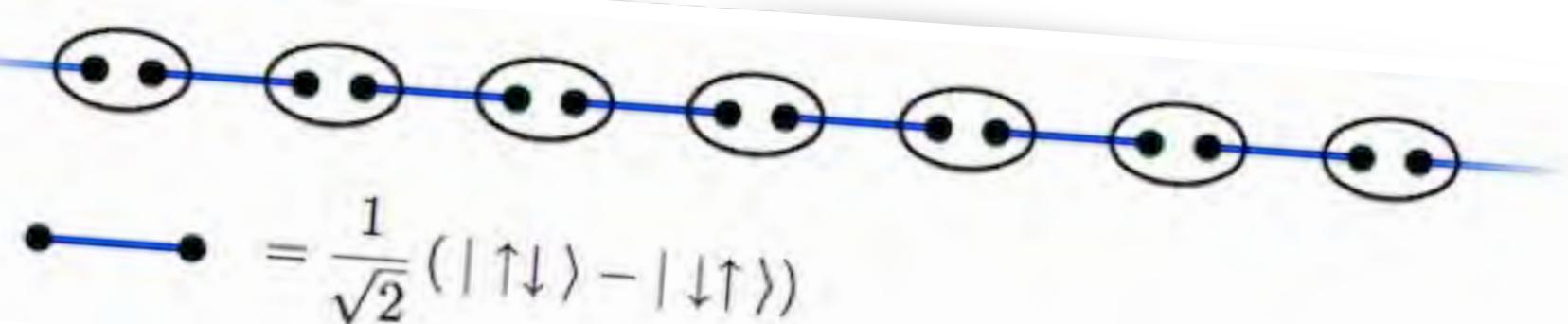
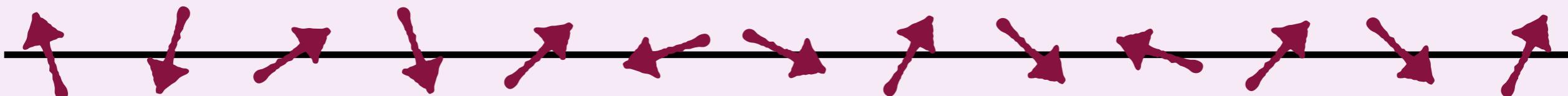


Figure 8: Graphical representation of the AKLT ground state. The black dots denote auxiliary spin 1/2 “particles”, the ovals project on spin 1, and the lines mean that two spins 1/2 form a singlet state. Since two of the four spin 1/2 on two adjacent sites form a singlet, the maximal total spin is 1, so the projection on spin 2 gives zero. Since this is true for all pairs, this state is clearly an eigenstate of \hat{H}_{AKLT} . Also note the unpaired spins at the end of the chain, which are the fractionalized edge modes. (Figure taken from the Wikipedia article: AKLT model.)

乱れた基底状態を持つ模型

AKLT 模型

Haldane が予想した、激しく乱れた基底状態を持つモデル



$$\hat{H}_{\text{AKLT}} = \sum_{j=1}^L \left\{ \hat{\mathbf{S}}_j \cdot \hat{\mathbf{S}}_{j+1} + \frac{1}{3} (\hat{\mathbf{S}}_j \cdot \hat{\mathbf{S}}_{j+1})^2 \right\}$$

自明な模型

当たり前前の理由で、激しく乱れた基底状態を持つモデル



$$\hat{H}_{\text{trivial}} = \sum_{j=1}^L (\hat{S}_j^{(z)})^2$$

どちらもスピンの大きさは 1

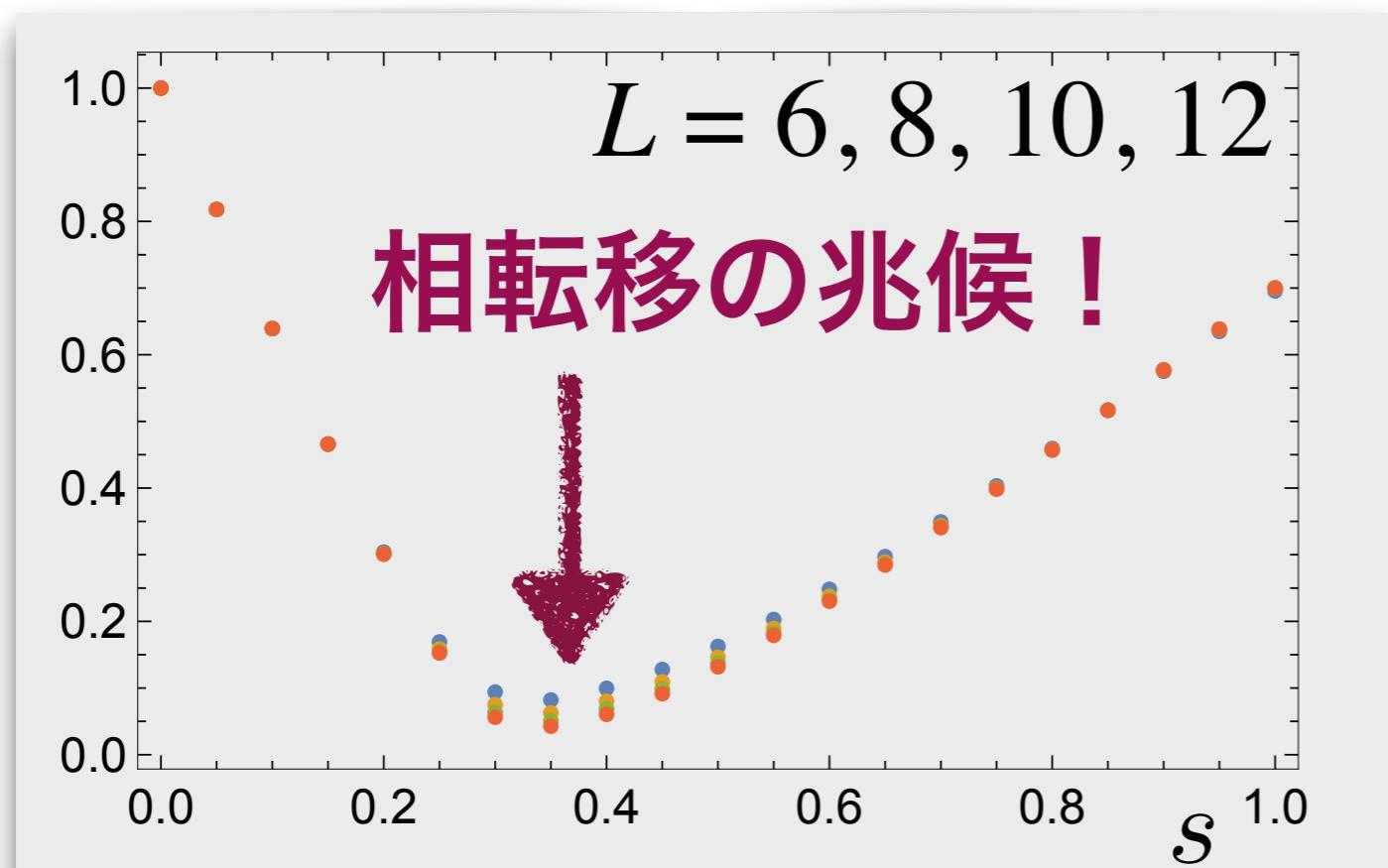
二つの模型をつなぐ

$$\hat{H}_{\text{AKLT}} = \sum_{j=1}^L \left\{ \hat{\mathbf{S}}_j \cdot \hat{\mathbf{S}}_{j+1} + \frac{1}{3} (\hat{\mathbf{S}}_j \cdot \hat{\mathbf{S}}_{j+1})^2 \right\}$$

$$\hat{H}_{\text{trivial}} = \sum_{j=1}^L (\hat{S}_j^{(z)})^2$$

$$\hat{H}_s = s \hat{H}_{\text{AKLT}} + (1 - s) \hat{H}_{\text{trivial}} \quad 0 \leq s \leq 1$$

\hat{H}_s の基底エネルギー直上のエネルギーギャップ

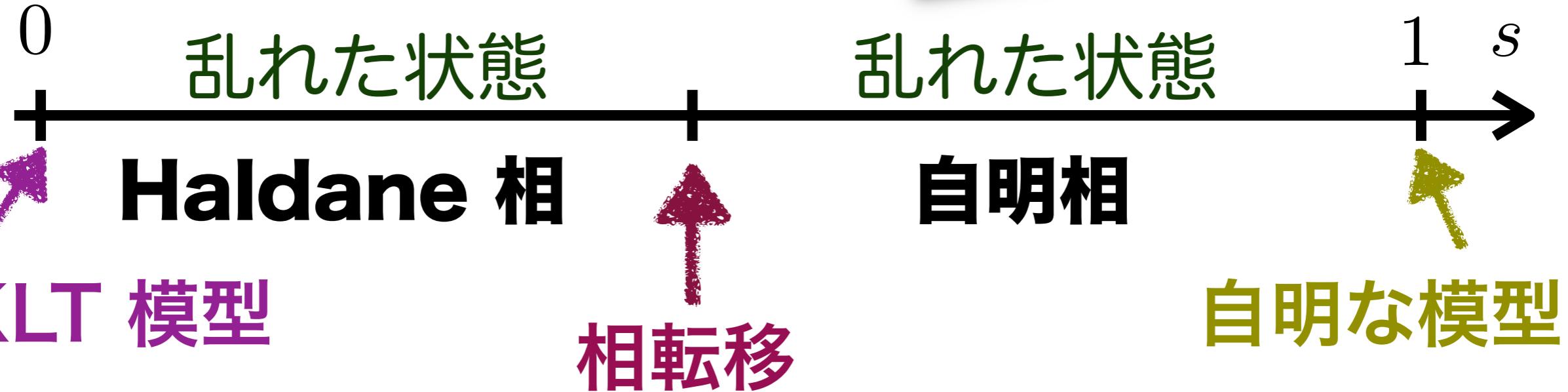


$\propto (\text{特徴的な長さ})^{-1}$

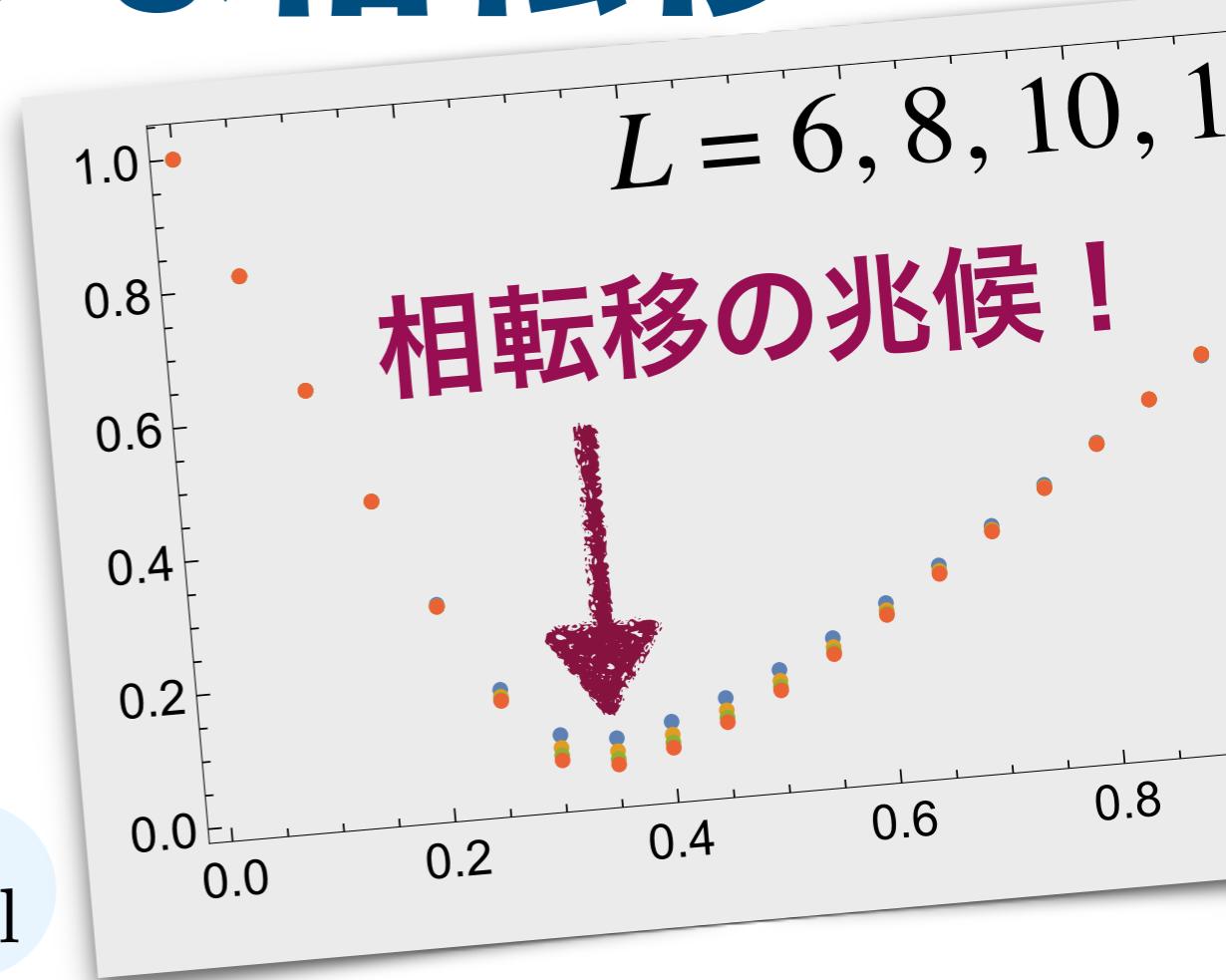
数値計算は桂法称氏による

トポロジカルな相転移

$$\hat{H}_s = s\hat{H}_{\text{AKLT}} + (1 - s)\hat{H}_{\text{trivial}}$$



「乱れた状態」と「乱れた状態」の間の相転移？！



トポロジカルな相転移

自明相

- 基底状態は一意的でエネルギーギャップを伴う
- 基底状態は長距離秩序を示さず、磁化もゼロ
- 端のある格子でももちろん磁化はゼロ

Haldane 相

- 基底状態は一意的でエネルギーギャップを伴う
- 基底状態は長距離秩序を示さず、磁化もゼロ
- 端のある格子では、端点（切り口）に実効的なスピンの自由度が出現！



トポロジカルな相転移

自明相

- 基底状態は一意的でエネルギーギャップを伴う
- 基底状態は長距離秩序を示さず、磁化もゼロ
- 端のある格子でももちろん磁化はゼロ

Haldane 相

- 基底状態は一不純物を含む擬 1 次元を伴う
- 基底状態は長 $S = 1$ 反強磁性鎖の実験でも確認！ ゼロ
- 端のある格子では、端点（切り口）に実効的なスピンの自由度が出現！



トポロジカル相と端状態

- 端のある格子では、端点（切り口）に実効的な спинの自由度が出現！

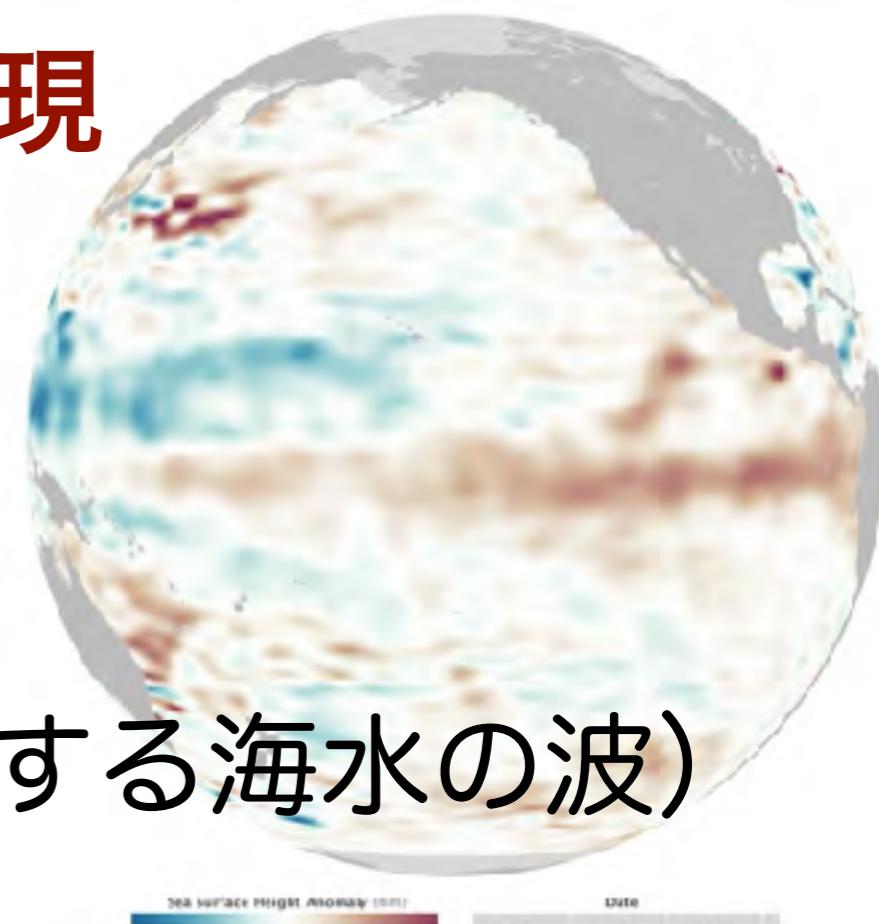


元の спинの大きさは 1 だが端スピニンの大きさは $\frac{1}{2}$

- 端に安定した新しい自由度が出現するのがトポロジカル相の特徴

トポロジカル絶縁体、
量子ホール効果の端電流

ケルビン波（赤道付近を伝播する海水の波）



まとめ

- 相転移は無数の要素が集まって全体として生み出される「協力現象」の一種
- パーコレーションのような単純なモデルでさえ、様々な応用があり、未だ解明しきれないほど豊かで非自明な相転移と臨界現象を示す
- 前世紀までは相転移は長距離秩序と「対称性の破れ」の観点で理解できると考えられていた
- 近年は「無秩序状態の間の相転移」であるトポロジカルな相転移が注目を浴びて研究されている