

協力現象の統計物理

東大・理 鈴木 増 雄

1. はじめに

湯川先生、朝永先生が基研設立の準備をされた時から、物性基礎論・統計物理学の重要性を認識されて、物性理論の部門を一講座作られたことは大変大きな意義を持っていると思います。基研で毎年開催されてきた統計物理学関係の研究会は、この分野の日本での研究の大きな刺激となってきました。相転移の研究会及び非線形、非平衡系の研究会と共に育ってきた人達は、私を含めて多勢おります。湯川先生は日本の統計物理学の発展にも大きな貢献をされました。改めて敬意を表したいと思います。湯川先生から、生前、個人的にお話を伺う機会には、ほとんど恵まれませんでしたが、湯川先生の手記を愛読している一人として、私は、湯川先生の科学に対するフィロソフィー、特に、本質論的な問いかけといえますが、東洋的な思想が独創的な研究をする上でいかに重要かということに非常に感銘を受けております。また、湯川先生のヒューマニズムに強く心をひかれております。

本日は、協力現象の統計物理という題でお話することになっておりますが、その全体的な解説ということではなしに、湯川先生に因んで、その背後にある考え方、フィロソフィーを微留な者でございますが、私なりに探って、協力現象の統計物理¹⁾の特徴をお話したい。と思います。

2. 協力現象と力及び非線形性

最近、素粒子論では、力が統一されるようになってきた。物性では、力は、すでに既知のものとして、その集合体がどのような面白い現象を示すかに興味がある。気体、液体、固体のような巨視的な物質の性質を研究する場合には、電気的な力と磁気的な力で充分間に合う。しかし、統計物理学で得られた概念なり方法は、他の力で相互作用している系の現象をとり扱うのにも一般的に役立つことが多い。特に最近はその様相が強くなってきている。例えば、自発的対称の破れは、その良い例である。また、格子ゲージ理論は、その局所的な対称性に対して、物性の大域的 (global) 対称性との違いはあるが、相転移の統計物理の処法をフルに活用している。

さて、このように、力にはいろいろな種類があるが、その力によって引き起こされる協力現象の特徴は、非線形性 (nonlinearity) にある。多くは2体の相互作用をもとに議論するのであるが、その力は他の粒子に次から次へと波及していくので、結果的には、多体的になる。従って、その効果は、その物質の構成粒子の粒子数 N の大きさ、または粒子の密度に著しく依存することになる。すなわち、粒子数に関して、一般に加法的 (linear) でない。これが非線形性の一つの側面である。ところで、 N 個の粒子のすべての自由度を議論することは、不可能でもあり、たとえ超大型計算機を使って可能になってもそれは無意味であり、通常、我々には、適当にいくつかの数少ない巨視的な変数に着目して、それに関する漸近評価を行

い、自由度を消去して(くり込んで)その閉じた方程式を作る。それは一般に非線形になる。それは、self-consistent equation の形となる。それは、一つの bootstrap の形式をとるのである。ある一つの粒子の振舞いがそれ自身にフィードバックしてはね返ってくる。

このように協力現象は、まともに取りくむと大変な非線形の多体問題となり、とても手におえないしろものと思われるかもしれないが、古来先覚者達によっていろいろな工夫が行われ、協力現象、特に相転移・臨界現象の本質が、最近、それなりにわかってきた。

3. 非線形現象と線形化

— 線形モデルとその非線形化 —

そもそも、我々が自然現象を理解するとはどういうことか。それは非常に単純なメカニズムで因果関係を説明することではないだろうか。もっとも単純明快なメカニズムとは、比例関係すなわち線形の関係である。ニュートンの第2法則、Maxwell 電磁気学の基礎方程式、物性における線形の輸送方程式はその良い例である。線形の関係は理解しやすい。

ところで、前節で説明したように、相転移・臨界現象の本質は非線形性にある。それでは、これらの現象を理解するとはどういうことか。

さて、一般に、非線形の関係に対して、認識・理解しやすさには、いろいろな階層がある。例えば、ボイル・シャルルの法則によると、1モルの理想気体の圧力 P と体積 V の積は一定である。これを、圧力 P が、単位体積当りの粒子数 n に比例すると考えればもっとわかり易い。すなわち、粒子密度 n は体積 V に逆比例するから、 V の逆数に当たる物理変数をもとに、この現象を理解することが可能になる。逆比例という概念は、比例関係の次に理解し易い概念であり、逆数という物差し(座標系)で物を見ることによって、理解が容易になる。上の例では、単位表面積に及ぼす力積は、粒子密度 n に比例しており、圧力 P はその単位時間当りの力積に比例するから、当然、これによって、ボイル・シャルルの理解ができる訳である。

次に例えば、導体の電気伝導度 σ は、その導体の半径を r とすれば、 $\sigma \propto r^2$ である。この場合導体の断面積 $S = \pi r^2$ という概念を使えば、 $\sigma \propto S$ となり、 S に比例するというふうに直観的に理解される。(a) このような例は、あまり簡単すぎると思われるかもしれない。そこで約100年前(1873年)提案された有名な van der Waals の状態方程式を次にとり上げてみよう。それはよく知られているように、

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT \quad (1)$$

と表わされ、気相-液相転移をよく表わす状態方程式として非常に役立ち、van der Waals は、これで1910年度のノーベル賞を受賞している。これも $P' \equiv P + \frac{a}{V^2}$ $V' \equiv V - b$ という新しい変数でみれば、ボイル・シャルルの式に帰着され、線形化される。逆に線形の状態方程式を非線形化することによって役に立つ理論を作ったと言ってもよい。Maxwell は van der Waals に先立って、粒子の大きさを考慮して $V' = V - b$ という補正を入れると、 $P(V - b) = RT$ となり転移温度以上の現実の気体がよりよく記述できることを指摘している。van der Waals は粒子間の引力の部分も考慮に入れて、 a はアボガドロ数

の二乗に比例する物質定数と考えると、 a/V^2 は、単位体積当りの粒子数 n の二乗に比例して、圧力に補正が加わるとして、彼の状態方程式を導いた。この補正を入れる物理的操作が、とりも直さず、非線形現象の線形化である。 $P \rightarrow P'$ 、 $V \rightarrow V'$ の変換 (変数変換) が、この現象の本質を理解するのに大切であった。現在は、くり込み群の理論によって、もっと複雑で、もっと実験とよく合う scaling 則をみ出す状態方程式が導かれているが、気相-液相転移の本質は、van der Waals 方程式の非線形性すなわち、 $P \rightarrow P'$ 、 $V \rightarrow V'$ の非線形変換とその物理的なメカニズム (相互作用) にある。上の van der Waals の理論では、理想的な場合への補正が平均として入っているの、本質的に分子場近似である。

(b) そこで、次に強磁性に対する Weiss の分子場理論と線形化との関係を議論してみる。簡単のために、次の Ising Model を考える：

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j ; \sigma_j = \pm 1. \quad (2)$$

今、次のような変数変換

$$\sigma_i = \langle \sigma_i \rangle + \xi_i ; \xi_i = \sigma_i - \langle \sigma_i \rangle \quad (3)$$

を行うと、系のハミルトニアンは以下のように書き直せる。

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= - \sum_i \langle \sigma_i \rangle \left(\sum_{j \in i} J_{ij} \xi_j \right) - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle + O(\xi^2) \\ &= - \sum_i \langle \sigma_i \rangle \left(\sum_{j \in i} J_{ij} \xi_j \right) + \sum J_{ij} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle + O(\xi^2) \\ &\equiv \mathcal{H}_{MF} \end{aligned} \quad (4)$$

ここで、 ξ に関して線形化した。但し、 $\langle \sigma_i \rangle$ は \mathcal{H}_{MF} の統計分布で平均をとる。このように、ハミルトニアンで、平均値からのずれに関して線形化すると分子場理論になる。勿論、ゆらぎは入らない。平均値 $\langle \sigma_i \rangle$ に関しては、非線形方程式が得られる。この考え方は、最近、P. W. Andersonによって、スピングラスの研究に応用されている。

(c) 次に非線形ブラウン運動に基づく秩序形成と動的分子場理論²⁾を紹介する。まず、Einstein の線形ブラウン運動の理論³⁾の要点を復習する。粒子の速度 v に対する現象論的な方程式 (ランジュバン方程式)

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v + \eta(t) ; \langle \eta(t) \eta(t') \rangle = 2\epsilon \delta(t-t') \quad (5)$$

を考える。但し、 $\eta(t)$ は、粒子に働く乱れた力を表わす。解は、

$$v(t) = e^{-\gamma t} \left(\int_0^t e^{\gamma s} \eta(s) ds + v(0) \right) \quad (6)$$

と表わされるから、定常状態でのゆらぎは、 $\langle v^2 \rangle_{st} = \epsilon/\gamma$ となる。一方、粒子の質量を 1 と考えて、等分配則 $\langle v^2 \rangle_{st} = k_B T$ を用いると、

$$\epsilon = \gamma k_B T \quad (7)$$

という Einstein の関係式が導かれる。これは、散逸 γ と揺動の強さ ϵ との関与する基本式で、散逸揺動

定理の草分けである。Qnsager⁴⁾はこれを現象論的に一般化して、輸送係数の相反定理を導いた。Kubo⁵⁾は、密度行列に対する基礎方程式からミクロに輸送係数に対する一般公式を導き、散逸揺動定理の基礎づけを行った。Einsteinの理論では、系は、 $v=0$ が安定点になっている。

さて、相転移の起る非線形ブラウン運動

$$\frac{d}{dt} x = rx - gx^3 + \eta(t); r > 0, g > 0 \quad (8)$$

を考える。Einsteinの線形理論と違って、(8)では、 x の係数が正になっている。これは、 $x=0$ が不安定点になっていることに対応している。安定点は、 $x_{st} = \pm (r/g)^{1/2}$ であり、この系は、 $x=0$ の相から、 $x=x_{st} (\neq 0)$ の相への相転移を示す系になっている。この系は、非常に簡単な系に見えるが厳密に解くことは出来そうもないので、これを次のように線形化する²⁾ (i.e., 動的分子場理論) :

$$\frac{d}{dt} x(t) = r(t)x(t) + \eta(t); r(t) = r - g \langle x^2(t) \rangle. \quad (9)$$

これは、 $\langle x^2(t) \rangle \equiv f(t)$ に対する self-consistent な方程式

$$\frac{d}{dt} f(t) = 2(r - gf(t))f(t) + 2\varepsilon, \quad (10)$$

に書き直すことが出来る。これは厳密に解けるが、少し複雑でもあり、我々の目的は、定性的に普遍的な性質を抽出することであるから、 ε が小さい極限で漸近評価した式を求めてみると、

$$\langle x^2(t) \rangle \simeq \langle x^2 \rangle_{st} \cdot \frac{\tau}{1 + \tau}; \langle x^2 \rangle_{st} \equiv \frac{r}{g} \quad (11)$$

となる。但し、 τ は、スケーリング変数と呼ばれ、^{6),7)} 次式で与えられる。²⁾

$$\tau = \frac{g}{r} \left(\langle x^2(0) \rangle + \frac{\varepsilon}{r} \right) e^{2rt} \quad (12)$$

もともと、ゆらぎ $\langle x^2(t) \rangle$ は、時間 t 、系のパラメタ $\varepsilon, g, r, \langle x^2(0) \rangle$ などの多変数関数であるが、不安定点近傍での緩和は、漸近的には、(11)に示したように、たった一つの変数 τ で表現される。すなわち、スケーリングの性質がある。スケーリング関数は、後述するように、本当は、 $\tau/(1+\tau)$ ではなくもっと複雑であるが、スケーリング変数 τ は、正しいスケーリング理論^{6),7)}で評価しても同じ結果(12)になる。初期のゆらぎ $\langle x^2(0) \rangle$ は通常 $\langle x^2(0) \rangle = \varepsilon \sigma_0$ と非常に小さい。これが1のオーダーになる時刻で巨視的秩序の形成が始まるとみなすことができる。それは、(12)で $\tau \simeq 1$ とおいて、

$$t_0 = \frac{1}{2r} \log \left[\frac{r}{g} \left\{ \langle x^2(0) \rangle + \frac{\varepsilon}{r} \right\}^{-1} \right] \quad (13)$$

で与えられる。秩序形式に対する非線形性 g 、ランダムな力の強さ ε や初期のゆらぎ $\langle x^2(0) \rangle$ の効き方が(13)式によってよく理解される。

4. どの段階で線形化するか？

— 非線形問題も線形に帰着される —

統計物理学の多くの問題は何かの意味で線形化することによって解決されている。以下にいくつかの典型的な例を列挙してみる。

a) 2次 Ising model ($H=0$) は、その遷移行列が適当な表示によって自由フェルミ系に変換されることから厳密解が求められる。

b) 線形応答理論⁵⁾では、密度行列または分布関数に関して線形化して、一般的な応答の表式が求められている。

c) 非平衡系でのゆらぎと Ω -展開 (van Kampen⁸⁾-Kubo⁹⁾)。確率変数 $x(t)$ を決定論的な部分 $y(t)$ とゆらぎの部分 $\sqrt{\varepsilon} \xi(t)$ に分離する：

$$x(t) = y(t) + \sqrt{\varepsilon} \xi(t); \varepsilon = 1/V. \quad (14)$$

与えられた $x(t)$ に関する方程式を $\xi(t)$ の一次までで近似すると、 Ω -展開の公式が得られる。

d) 非平衡系における Kubo の示量性の仮設^{9),10)}

時刻 t に x という値をとる確率 $P(x, t)$ が $\varepsilon \equiv 1/V$ が小さい極限で

$$P(x, t) \sim \exp \left[\frac{1}{\varepsilon} \varphi_0(x, t) \right] \quad (15)$$

という漸近形をとることが非常に一般的な条件で示されている。¹⁰⁾ これは、 $\log P(x, t)$ の体積 V に関する線形化になっている。(15)の示量性は、量子力学のWKB法に対応しており、 $\varepsilon \rightarrow 0$ でのゆらぎを漸近的に評価するのに大変役に立つ。

e) カオス (chaos) と線形化。Poincaré-Carleman¹¹⁾ の方法により、非線形微分方程式は、無限次元の線形微分方程式に帰着される。

5. くり込み群の理論と摂動計算 (線形化)

分子場近似はゆらぎの効果が入らない零次近似であるから、これに、ゆらぎの効果をとり込んで、分子場近似からのずれを逐次計算することができる。これを ε -展開という。但し、 $\varepsilon = d - d_c$ 、 d は次元、 d_c は臨界次元である。詳しくは、Raf. 1 を参照。

くり込み群の基礎になっている相転移のスケーリング則は、変換に関する線形性の現れである。すなわち、 $\varepsilon \equiv (T - T_c)/T_c$ と磁場 $h \equiv \mu_B H/k_B T$ に関して

$$\varepsilon \rightarrow \varepsilon' = L^y \varepsilon, \quad h \rightarrow h' = L^x h \quad (15)$$

という変換に対して、状態方程式 $\langle \sigma \rangle = f(\varepsilon, h)$ が不変であるという性質

$$f(L^y \varepsilon, L^x h) = L^{x-d} f(\varepsilon, h) \quad (16)$$

より、スケーリング則

$$\text{磁化} \equiv \langle \sigma \rangle = \varepsilon^{(d-x)/y} f(\varepsilon/h y/x) \quad (17)$$

が導かれる。

6. 秩序形成に対するスケーリング理論^{6),7)}

3の(c)で少しふれたように、不安定点またはその近傍からの緩和に関しては、普遍的な法則が成立する可能性がある。ここでは、それを導く一般的な考え方、すなわち、スケーリング理論^{6),7)}について簡単に説明する。ある種の非線形変換に対する不変性があれば、その帰結として、ゆらぎ $\sigma(t) = \sigma(t, \varepsilon, g, \gamma \dots)$ が一つのスケーリング変数 $\tau = \varepsilon/\omega(t, g, \gamma, \dots)$ で書き表わされるであろう：

$$\sigma(t) = \sigma_{st} f^{(sc)}(\tau) = \sigma_{st} f^{(sc)}\left(\frac{\varepsilon}{\omega(t, g, \dots)}\right) \quad (18)$$

これを具体的に解析的に導くには、次のようにすればよい。^{6),7)} まず、第1図のように時間の領域を大きく3つの領域に定性的に分割し、それぞれの領域で、もとの方程式を漸近評価して解を求め、解析接続すると、(b)の非線形領域では、(18)のスケーリング解が求められ、普遍なスケーリング関数 $f^{(sc)}(\tau)$ も得られる。これは、非線形ランジュバン方程式

$$\frac{dx}{dt} = \alpha(x) + \eta(t) \quad (19)$$

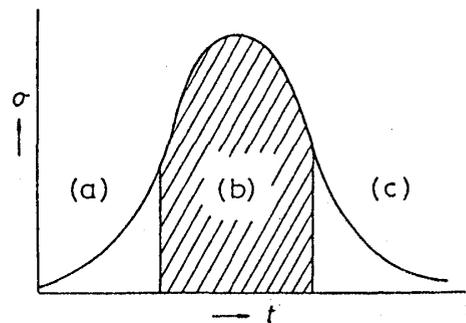
に対して、次の非線形変換^{6),7)}

$$\xi = F(x) \equiv \exp\left[\int_{a_0}^x \frac{1}{\alpha(y)} dy\right] \quad (20)$$

によっても漸近的に求められる。すなわち、この非線形変換によって得られた ξ に関する方程式を線形化することによって、その漸近解が求められ、それをもとの x 表示に戻してゆらぎを計算すれば、普遍なスケーリング関数 $f^{(sc)}(\tau)$ が求められる。例えば、(8)式で与えられる非線形のゆらぎ $\langle x^2(t) \rangle$ は漸的に

$$\langle x^2(t) \rangle \simeq \langle x^2 \rangle_{st} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2/2} \frac{\xi^2 \tau}{1 + \xi^2 \tau} d\xi \quad (21)$$

で与えられる。^{6),7)} スケーリング変数 τ は(12)式で与えられるものと全く同じである。これは、動的分子場理論で得られた近似的なスケーリング関数(11)と違って、スケーリング極限 ($\varepsilon \rightarrow 0$, $t \rightarrow \infty$, $\tau = \text{fixed}$) では、漸的に厳密な表式であり、非線形性のパラメタ g に関して展開してみると、 $t \rightarrow \infty$ で最強の発散項を無限次まで Borel 和としてまとめたものになっている。 $\tau \rightarrow \infty$ ($t \rightarrow \infty$) では、正しく $\langle x^2 \rangle_{st}$ に近づく。詳しくは、文献7)を参照して頂



第1図 時間の分割

- (a) 初期領域
- (b) 非線形(スケーリング)領域
- (c) 終領域

たい。

最近、上のスケーリング理論を、時間を含んだポテンシャルの問題に拡張して応用したり、終領域まで拡張する目的で、代数的に形式化することを試み、成功した¹²⁾ので、その要点を簡単に説明する。これは、一口に言うと、有限次元のLie群の性質をもとに、時間発展演算子を漸近評価する方法で、代数的な理論であるため大変見通しがよく拡張し易い。紙数の都合で全貌を述べることは出来ないので、主なアイデアだけ説明する。詳しくは筆者の論文を参照して頂きたい。

まず、始めに簡単のため、線形ブラウン運動 $dx/dt = rx + \eta(t)$ に等価な線形 Fokker-Planck 方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \left[-\frac{\partial}{\partial x} rx + \epsilon \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] P(x, t) \quad (22)$$

と考える。この解は、形式的に

$$P(x, t) = e^{A+B} P(x, 0); \quad A = -t \frac{\partial}{\partial x} rx, \quad B = t \epsilon \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (23)$$

と書き表わされる。ここで注目すべきことは、 A と B は互に非可換な演算子であるが、

$$[A, B] = \alpha B; \quad \alpha = 2rt \quad (24)$$

という交換関係を満たし、2次元 Lie群の要素になっていることである。したがって、この性質を利用すれば、ドリフト効果 A とランダムな力の効果 B を分離して(手順の線形化!)、取り扱うことが出来る。実際、次の公式が成立する。

公式 1: $[A, B] = \alpha B$ を満たす時、 $p(\alpha)$ を α の任意の関数として

$$e^{A+B} = e^{p(\alpha)\tilde{f}(\alpha)B} e^A e^{(1-p(\alpha))f(\alpha)B} \quad (25)$$

が成立する。但し、

$$f(\alpha) = \frac{1 - e^{-\alpha}}{\alpha}, \quad \tilde{f}(\alpha) = \frac{e^{\alpha} - 1}{\alpha} \quad (26)$$

特に、 $p(\alpha) \equiv 0$ とおくと、次の Sack-Wilcox の公式が導かれる:

$$e^{A+B} = e^A e^{f(\alpha)B} \quad (27)$$

これらの公式を用いると Fokker-Planck 方程式(22)の導出法が与えられる。何故なら、 $\exp\left[f(2rt)t\epsilon\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]$ は、ガウス積分で表現されるし、 $\exp A$ は単なるドリフト積分であるから容易にその表現が解析的に頭わに表わされる。詳細は省略する。¹²⁾ 大事なことは、 A と B の効果は、適当に $f(\alpha)$ として B に非可換性を“くり込ん”でやれば分離できることである。

これを、 A が非線形の場合に拡張する。勿論、 A と B は今度はLie群の要素には、一般にはならない。そこで、上の分離の考え方を漸近的に適用する。それには、次の分解公式¹²⁾が役に立つ。

分解公式: 一般の2つの演算子が $[A, B] = \alpha B + C$ という関係を満たすとする。但し、 C は、 B に比例

する部分を含まないとする。このとき

$$e^{\lambda(A+B)} = e^{\lambda A} e^{\lambda f(\lambda\alpha) B} e^{\lambda^2 D_2} e^{\lambda^3 D_3} \quad (28)$$

と展開できる。但し、 $f(x)$ は(26)で与えられる。ここで、 D_n の一般式が、 A, B, C を用いて表わされている¹²⁾がここでは省略する。不安定点近傍での緩和の問題では、拡散係数 ε が小さい極限では、(28)の公式で D_2, D_3, \dots が、非線形領域では、漸近的に無視できることが示せて

$$e^{A+B} \simeq e^A e^{f(\alpha)B} \quad (29)$$

となる。これは、 A が非線形の際にも漸近的に成立する。ここが新しいアイデアである。これらの議論の一般化と応用に関しては、文献12)を参照して頂きたい。

7. 終りに

協力現象の本質は非線形性にあるが、その現象を理解するには、何らかの形の線形化という操作なり見方が重要であることを強調した。

文献

- 1) 鈴木増雄, 「統計力学の進歩」, 久保亮五教授還暦記念会編 (裳華房, 1981年), 第7章参照。
- 2) M. Suzuki, Phys. Lett. **67A** (1978), 339.
- 3) A. Einstein, Ann. of Phys. **17** (1905), 549.
- 4) L. Onsager, Phys. Rev. **37** (1931), 405; **38** (1931), 2265.
- 5) R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan. **12** (1957), 570.
- 6) M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **56** (1976), 77.
- 7) M. Suzuki, Adv. Chem. Phys. **46** (1981), 195.
- 8) N. G. van Kampen, Can. J. Phys. **39** (1961), 551.
- 9) R. Kubo, K. Matsuo and K. Kitahara, J. Stat. Phys. **9** (1973), 51.
- 10) M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **53** (1975), 1657.
- 11) J. Carleman, Acta Mathematica **59** (1932), 63.
- 12) M. Suzuki, to be published