

2次元及び3次元格子のIsing系の伝送行列とfinite-size scaling

東京工大 理 小口武彦、田口善弘、西森秀穂

§1. はじめに

Ising スピン系において、物理量が相転移点で異常を示すのは、スピン数 N が無限大の場合である。 N が有限の場合には修正が必要である。この修正を理論的に求めておけば、実際は有限系を扱って、無限系の臨界現象を予測出来ることになる。これが finite-size scaling の思想である。¹⁻⁴⁾

§2 では幅 $l \leq 10$ 、長さ ∞ の正方格子上的スピン系を伝送行列 (transfer matrix) を用いて、分配函数、比熱、磁化率などを計算する。2次元格子 ($d=2$) の場合に伝送行列を用いることは既に多くの試みがあるが、よく用いられる伝送行列は、スピンの1列ごつとをひとまとめで伝送してゆく場合である。この論文はその方法を用いずに、Kramers と Wannier⁵⁾ によって与えられた正方格子を screw lattice とみなしてゆく方法を用いる。今後この方法を簡単のため screw method と呼びことにする。この方法の利点は §2 で述べる。我々の主な目的は3次元格子 ($d=3$) であるが、screw method の有効性を確認し、かつ screw method に到れるために、まず $d=2$ を扱う。

§3 では $d=3$ の $l \times l \times \infty$ の単純立方格子を扱う。 $d=3$ の伝送行列を実際に作って適用は著者の知る限りではないと思う。その原因の1つは、伝送行列を $l \times l$ の1面ごつとをまとめて伝送する方法は非常に面倒になるからである。そのためこの場合も screw method を用いる。幸に $d=3$ の screw method による伝送行列は、約30年前に Oguchi⁶⁾ によって求められている。当時はこれを用いて摂動法によって、固有値、固有函数が計算された。

§4 は伝送行列によって得られた有限系の物理量に finite-size scaling を適用して無限系の臨界現象を扱う。 §5 は今後の問題についてである。

§2. 2次元正方格子 ($d=2$: 強磁性 Ising モデル)

幅 l 、長さ ∞ の正方格子の場合の screw method は、図1図に示すように、1次元の鎖 (実線) を円筒に巻きつけたものを想像すれば容易に理解出来る。実線は x 方向の相互作用、破線は y 方向の相互作用である。1次元の鎖の $n-l-1$ 以前のスピン状態は何れもよいが、最後の l 個のスピンが $\sigma_{n-1}, \sigma_{n-2}, \dots, \sigma_{n-l}$ ($\sigma_i = \pm 1$ の値をとり得る) である確率を $A(\sigma_{n-1}, \sigma_{n-2}, \dots, \sigma_{n-l})$ とする。次に n 番目の位置に (図1黒丸) スピン σ_n をつけ加えると、 $-\frac{J}{2} \sigma_n (\sigma_{n-1} + \sigma_{n-l}) - H \sigma_n$ の相互作用が加わる。ただし、この系は磁場 H を受けているものとし、スピンの磁気モーメントは簡単のため1とした。すると今度は最後の l 個のスピンは $\sigma_n, \sigma_{n-1}, \dots, \sigma_{n-l+1}$ となるので、こ

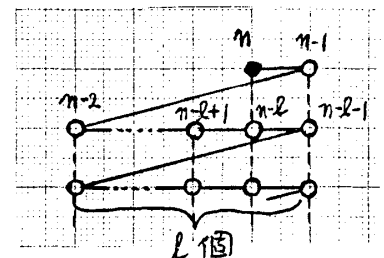


図1図

研究会報告

の確率は $A(\sigma_n, \sigma_{n-1}, \dots, \sigma_{n-l+1})$ になる。前者の A から後者の A に変わるのは、 σ_n を付加したことによる Boltzmann 因子によるから、我々は次の固有値方程式を得る。

$$\sum_{\sigma_{n-l} = \pm 1} e^{K\sigma_n(\sigma_{n-1} + \sigma_{n-2}) + L\sigma_n} A(\sigma_{n-1}, \sigma_{n-2}, \dots, \sigma_{n-l}) = \lambda A(\sigma_n, \sigma_{n-1}, \dots, \sigma_{n-l+1}) \quad (1)$$

ただし

$$K \equiv J/2k_B T, \quad L \equiv H/k_B T \quad (2)$$

(1) の左辺の演算子が伝送行列である。この行列の最大固有値 λ_1 がスピンの個あたりの分配関数 Z になる。したがって 2 比熱 C 及び磁化率 χ はそれぞれ

$$C = k_B K^2 \frac{\partial^2}{\partial K^2} \log \lambda_1 \Big|_{L=0}, \quad \chi = \frac{1}{k_B T} \frac{\partial^2}{\partial L^2} \log \lambda_1 \Big|_{L=0} \quad (3)$$

により計算される。

伝送行列を M とする。 M を行列表示にするためには、まず $-$ スピンを 0 に、 $+$ スピンを 1 に対応させ、 l 個のスピン配置列を 2 進法の数とみなす。この数を 10 進法で表わしたものを配置列の位数と呼ぶことにする。これから例として $l=3$ の場合を具体的に述べよう。

配置列の位数	0	1	2	3	7	6	5	4
配置列の位数	0	1	2	3	7	6	5	4
配置列の位数	0	1	2	3	7	6	5	4
配置列の位数	0	1	2	3	7	6	5	4
配置列の位数	0	1	2	3	7	6	5	4
配置列の位数	0	1	2	3	7	6	5	4
配置列の位数	0	1	2	3	7	6	5	4
配置列の位数	0	1	2	3	7	6	5	4

$$M = \begin{pmatrix} e^{2K-L} & e^{-L} & & & & & & \\ & e^{2K-L} & e^{-L} & & & & & \\ & & e^{2K-L} & e^{-L} & & & & \\ & & & e^{2K-L} & e^{-L} & & & \\ e^{-2K-L} & e^{-L} & & & & & & \\ e^{2K+L} & e^L & & & & & & \\ & & e^{-2K+L} & e^L & & & & \\ e^{-2K+L} & e^L & & & & & & \end{pmatrix} \quad (4)$$

表

χ を計算するには (4) の最大固有値を求め、それから (3) を用いる。

比熱を求めるときは $L=0$ としてよい。そのときは行列

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (5)$$

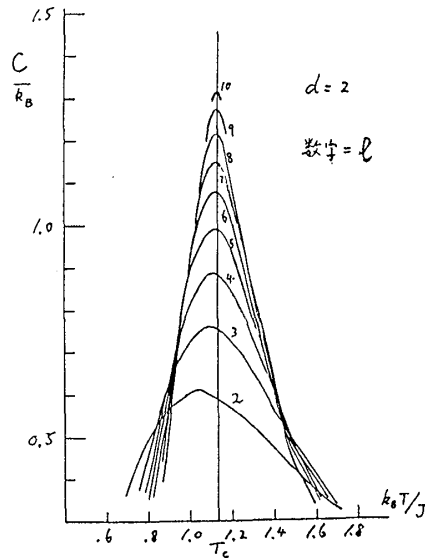
を用いて変換する。ただし、 ± 1 は 4 行 4 列の $\pm$ の単位行列を表わす。これによって

$$UMU^{-1} = \begin{pmatrix} M_+ & 0 \\ 0 & M_- \end{pmatrix} \quad (6) \quad M_{\pm} = \begin{pmatrix} e^{2K} & 1 \\ & e^{2K} \\ \pm e^{-2K} & \pm 1 \end{pmatrix} \quad (7)$$

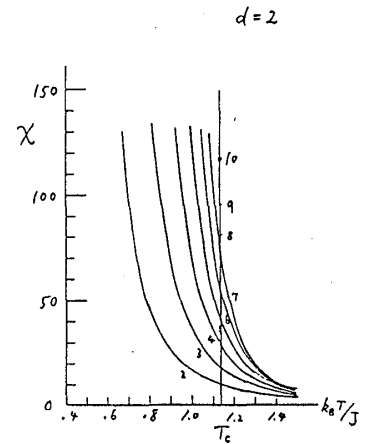
と簡約される。ただし $M_{\pm}$ は (7) のように $2^2 \times 2^2$ の行列になる。したがってこの簡約は非常に有益である。最大固有値 λ_1 は M_+ の最大固有値であり、 λ_2 は M_- の最大固有値である。

任意の l の値の場合の伝送行列を作ることも全く容易に機械的に入る、しかもこの伝送行列は各行、各列に 0 でない要素は 2 個しかない非常に sparse な行列であるから、固有値をコンピューターで求める際には好都合である、これは a screw method の利点である、しかし、この伝送行列は非対称行列であるという欠点もある、

このようにして計算された $l \leq 10$ の結果をカ 2、3 図に示す、 $k_B T_c / J = 1.135$ は $l = \infty$ の厳密解の値である、比熱の特徴的なことは、そのピークが T_c 以下にある、 $l \rightarrow \infty$ になるにつれて下から T_c へ近づいてゆく、Ferdinand と Fisher⁸⁾ の有限系 $l \times l$ の比熱のピークは逆に上から T_c へ近づいてゆく、この理由はその論文に述べられて



カ 2 図



カ 3 図

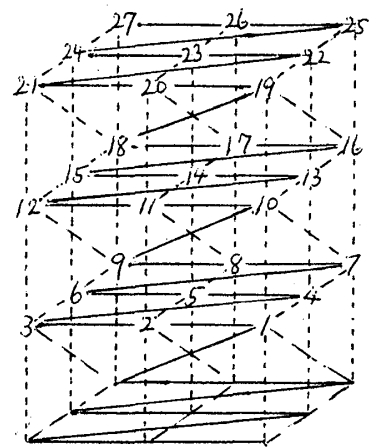
いるように、有限系の短い一辺と、長い一辺の比を r とすると、 $r \approx 0.32$ だと下から T_c へ、 $r \approx 0.32$ だと上から T_c へ近づくと、我々の場合は $r = 0$ 、彼らの場合は $r = 1$ である、

§ 3. 3次元単純立方格子 ($d=3$: 強磁性 Ising モデル)

3次元単純立方格子に screw method を適用して、伝送行列を求めることは、原理的には $d=2$ の場合と全く同様である、⁶⁾ 一丁考えると 3 次元的なスピンの配列を 1 次元的な鎖で表わすことは出来ないように思われるかも知れないが、これは可能であつて (一般の d 次元でも可能)、カ 4 図に例として $l \times l \times \infty$ の $l=3$ の場合のスピンの配列の番号を示す、図中実線のボンドは x 軸方向、破線は y 軸方向、点線は z 軸方向の相互作用を示す、 $d=2$ の場合と同様に、 n 番目の位置にスピン σ_n を置くと、カ 5 図に示すように、相互作用は $-\frac{J}{2} \sigma_n (\sigma_{n-1} + \sigma_{n-l} + \sigma_{n-l^2}) - H \sigma_n$ が加わる、したがって固有値方程式は

$$\sum_{\sigma_{n-l^2} = \pm 1} e^{K \sigma_n (\sigma_{n-1} + \sigma_{n-l} + \sigma_{n-l^2}) + L \sigma_n} A(\sigma_{n-1}, \sigma_{n-l}, \dots, \sigma_{n-l^2}) = \lambda A(\sigma_n, \sigma_{n-1}, \dots, \sigma_{n-l^2+1}) \quad (8)$$

$d=2$ の場合と同様な配列の序数を用い、(4) と同様に配列の序数の後半は逆の順序に並べて、伝送行列を表わすと



カ 4 図

A hand-drawn diagram of a 3D coordinate system with three axes. The vertical axis is labeled $M =$. The horizontal axis has a point labeled R_- . The diagonal axis has points labeled S_- , R_- , and S_- . In the upper right octant, there is a cluster of points labeled P_+ , Q_+ , R_+ , and Q_+ . In the lower right octant, there is a cluster of points labeled R_+ , S_+ , R_+ , S_+ , P_+ , Q_+ , and Q_+ . Dashed lines extend from the points on the axes into the octants.

$$P_{\pm} = \begin{vmatrix} e^{ik_{\pm}L} & e^{k_{\pm}L} \\ & e^{ik_{\pm}L} & e^{k_{\pm}L} \\ & & \ddots \end{vmatrix}, \quad Q_{\pm} = \begin{vmatrix} e^{k_{\pm}L} & e^{-k_{\pm}L} \\ & e^{k_{\pm}L} & e^{-k_{\pm}L} \\ & & \ddots \end{vmatrix}$$

M は 2^{ℓ^2} 行, 2^{ℓ^2} 列の行列であり, P_i, Q_i, R_i, S_i はそれぞれ $2^{\ell^2-\ell-1}$ 行, $2^{\ell^2-\ell}$ 列の長方形の行列であり, それらの各々は M の中に $2^{\ell-2}$ 個存在する.

$d = 2$ の場合と同様に M の最大固有値 λ_1 を求めて (3) を用いて X を計算する必要がある。一方、 C を計算するため:

は $L = 0$ とおいて, (5) と同様
変換行列 U (3 次元は $2^{\ell^2} \times 2^{\ell^2}$)

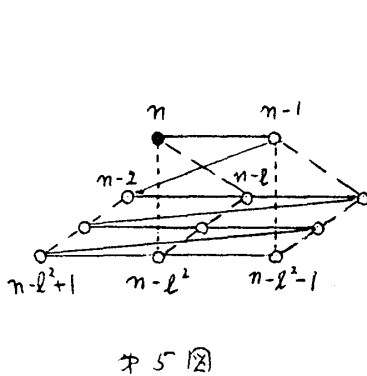
定義し, (6) と同様の変換を
すると (7) と同じ形の行列を得る.

ただし、今度の M_E は (1) と違う
2 各要素は行列 P, Q, R, S から
成る 213 (111 参照). 二れらは

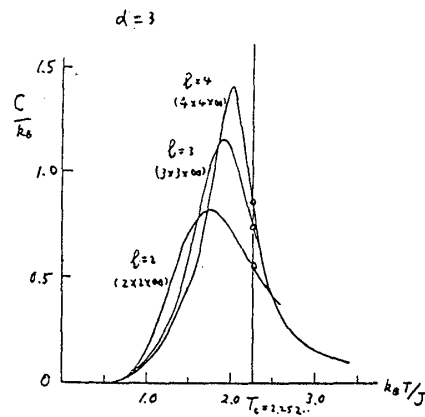
$$P_{\pm}, Q_{\pm}, R_{\pm}, S_{\pm} \quad \therefore L = 0 \text{ と 仮定}$$

(11)

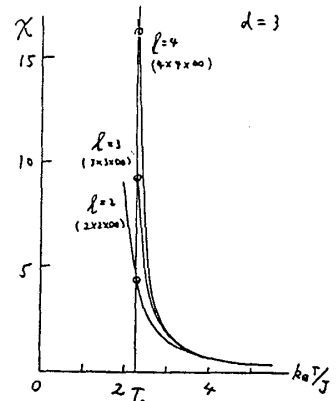
たものがある。(11)の最大固有値は M_+ の最大固有値, M_2 の最大固有値は M_- の最大固有値である。コンピュータの記憶容量の制限のため, 計算は $l=2, 3, 4$ の場合までしか可能でない。お6, 7図に比熱と磁化率を示す。



お5図



お6図



お7図

§4. finite-size scaling

$d=2$ 及び 3 の有限な size の Ising 系の比熱, 磁化率を計算したので, これから finite-size scaling 則を用いて無限系の諸量を求めてみよう。

温度を $t \equiv |T - T_c|/T_c$ (T_c は $l=\infty$ の系に対する臨界温度), 磁場を H としなると, d 次元の Ising モデルを l の格子の幅として $l \times l \times \dots \times l \times \infty$ (l の数は $d-1$ 個) の格子におけるスピン 1 個あたりの自由エネルギー F は

$$F(t, H, l) = l^{-d} f(t l^{y_T}, H l^{y_H}) \quad (12)$$

と書ける。これが示していることは, f はスケール関数, y_T, y_H は $l=\infty$ の格子の場合における温度場と磁場の臨界指数である。(12)より T_c における C, χ は

$$C(T_c, l) = a_d l^{2y_T-d}, \quad \chi(T_c, l) = b_d l^{2y_H-d} \quad (13)$$

が導かれる。ただし, a_d, b_d は d 次元の場合の $f_{tt}(0,0), f_{HH}(0,0)$ を表す定数である。 $d=2$ の場合は厳密に $y_T=1$ であることが知られているから $2y_T-d=0$ となる。

$$C(T_c, l) = a_2 \log l + C_2 \quad (d=2) \quad (14)$$

を用いる。お2図のデータから解析すると

$$C(T_c, l) = 0.21 + 0.485 \log l \quad (15)$$

となつて (14) の関係式を満たしている。(お8図)。これは $y_T=1/2=1$ であることと意味している。Ferdinand と Fisher⁸⁾ の場合は screw method を用いて, $l \times l$ の格子の自由境界条件であるが, 彼らが解析的に得た結果は (15) とかなりよく一致している。

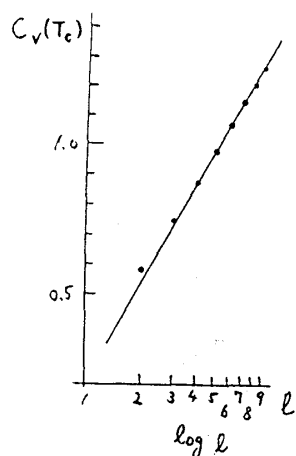


図8

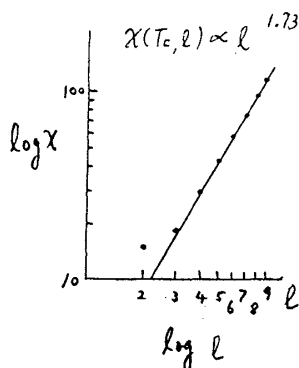


図9

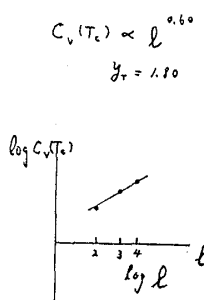


図10

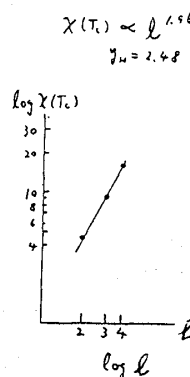


図11

$$C(T_c, l) = 0.188 + 0.494 \log l \quad (16)$$

と仮定している。⁸⁾

size l の場合の比熱のピークの温度を $T_m(l)$ とすると

$$(T_m(l) - T_c) / T_c \propto l^{-\lambda} \quad (17)$$

という関係があって、 λ をシフト指数という。²⁾ $\lambda = 1/2$ であるといわれているが、我々のデータでは $T_m(l)$ の精度が上がらず、(17) をきれいに示すことはできなかった。

$d = 2$ の場合は厳密に $y_H = 15/8$ であるから (13) によると $X(T_c, l) \propto l^{1.75}$ であるが、図9に示すように l のべきは 1.73 である。しかし、 $d = 2$ の場合は y_T も y_H もともに finite-size scaling を満足しているといえるであろう。

$d = 3$ の場合の解析は $d = 2$ の場合と同様であるが、 $l = 2, 3, 4$ のデータしかない。信頼できる値として知られているのは^{9,10)} $k_B T_c / J = 2.256$, $y_T = 1.59$, $y_H = 2.48$ であるが、我々の図6, 7図から求めた値は、図10, 11図に示すように $y_T = 1.80$, $y_H = 2.41 \sim 2.48$ である。 y_H はよい値であるが、 y_T の値はよくない。

y_T を求めるもう一つの方法は Roumany-Wyld 近似^{11,4)} である。これは無限系の相間距離 $\xi(t)$ とすると $\beta(t) = -\xi(t) / \xi'(t)$ と定義されている β 関数に対する近似である。いつう $\xi(t) \propto t^{-\nu}$ であるから $\beta(t) = t/\nu$ となつて $\beta(t)$ がその関数として求まれば、その零点は T_c 、その直線の勾配から $1/\nu$ が決まる。Roumany-Wyld 近似は β 関数と

$$\beta_{2',2}(t) = \frac{\log(\xi_2'/\xi_2) / \log(l'/l) - 1}{\sqrt{(\xi_2' \xi_2') / (\xi_2' \xi_2)}} \quad (18)$$

を近似するものである。ここには ξ_2 は size l の格子の場合の相間距離を表す。これを求めるには、size l の格子における伝送行列の λ_1 , λ_2 最大固有値と λ_1, λ_2 としなす

$$\beta_2(t)^{-1} = l^{d-1} \log \frac{\lambda_1(t, l)}{\lambda_2(t, l)} \quad (19)$$

と与えられる^(12,13) 右辺の l^{d-1} の因子は screw method の時は λ_2 はスピンの個数 $2l$ の量であるために必要である。

Roomany-Wyld 近似 (14) より					Roomany-Wyld 近似 (14) より				
l	l'	T_c	g_T	g_H	l	l'	T_c	g_T	g_H
2	3	0.984	0.85	1.706	2	3	2.140	1.56	2.41
3	4	1.082	0.96	1.796	3	4	2.231	1.60~1.61	2.48
4	5	1.113	0.99	1.836					
5	6	1.124		1.853	信頼する値		2.2558	1.589~1.595	2.481
6	7	1.129		1.863	表 4 (d=3)				
7	8	1.131		1.865					
8	9	1.132		1.866					
.....									
厳密値		1.1346	1	1.875					

表 3 (d=2)

近似 (18) を用いた結果は表 3, 4 表に示すように, T_c も $g_T = 1/2$ も極めてよい結果を与える。

§5. 今後の問題

$d=2, 3$ の Ising モデルについては, 既によく研究されている, 結果は新しいものはない. 我々の真の目的は, エジモデルやランダム磁場効果, frustrated 系などにある. とくに $d=3$ の場合をくわしく研究したい. そのためには screw method が一番よさそうなので, この論文はその準備をしたわけである. 基礎的研究会ではエジモデルの $d=2, 3$ の場合の比熱だけを示したが, ランダム系は目下研究途中なので, まとめて別の機会に報告したい。

謝辞

桂重俊教授と中野藤生教授及び小口が本年 3 月に停年を大学を退職するので, そのために研究会を開いていただいた. 研究会のお世話として下さった都福仁, 猪苗代盛, 鈴木増雄, 小野晃郎, 本間重雄, 高山一, 目片守の諸氏に厚く御礼を申し上げます. また今年の初め, 研究会のグループに属して一緒に研究や討論をして下さった諸兄に, こゝで改めて感謝の意を表したい。

研究会報告

文献

- 1) M. E. Fisher : Proc. 51 at Enrico Fermi Summer School, Varenna, Italy, Ed. M. S. Green (Academic Press, New York 1971) p. 1.
- 2) M. E. Fisher and M. N. Barber : Phys. Rev. Lett. 28 (1972) 1516.
- 3) M. Suzuki : Prog. Theor. Phys. 58 (1977) 1142.
- 4) M. N. Barber : Phase Transition and Critical Phenomena, vol. 8, Ed. C. Domb and J. L. Lebowitz (Academic Press, London 1983) p. 145.
- 5) H. A. Kramers and G. H. Wannier : Phys. Rev. 60 (1941) 1.
- 6) T. Oguchi : J. Phys. Soc. Jpn. 5 (1950) 75.
- 7) J. Ashkin and W. E. Lamb, Jr : Phys. Rev. 64 (1943) 159.
- 8) A. E. Ferdinand and M. E. Fisher : Phys. Rev. 185 (1969) 832.
- 9) M. E. Fisher : Rept. Prog. Phys. 30 (1967) 615.
- 10) R. Pearson : Phys. Rep. 103 (1984) 185.
- 11) H. H. Roomany and H. W. Wyld : Phys. Rev. D 21 (1980) 3341.
- 12) C. Domb : Adv. in Phys. 9 (1960) 149.
- 13) M. P. Nightingale : Physica 83A (1976) 561.