新奇揺らぎの導入による相転移現象の制御

東京大学 物性研究所　田村 亮 [1,2]
東京大学 理学系研究科 化学専攻　田中 宗 [3]

本原稿では，相転移の次数制御に関する統計力学的研究について紹介する．具体的には，二次相転移（連続転移）が起こることが知られている二つの相転移現象に着目する．一つ目は二次元格子模型における 2, 3, 4 回対称性の破れを伴う平衡相転移であり，二つ目はネットワーク成長模型における動的パーコレーション転移である．それぞれの模型に新しい種類の揺らぎを付け加えることによって，これらの相転移現象の様相を変化させることができる．

1 緒言

相転移は，例えば H_2O が氷・水・水蒸気といった異なる性質を持つ相へ状態が変化する現象であり，統計力学研究における最も重要な研究対象の一つである．一般に，系の状態はいくつかの熱力学的変数によって表わすことができ，相転移点においてこの熱力学的変数は特異性を示す．この特異性から相転移を分類することができ，例えば自由エネルギーの一階微分が特異的となる一次相転移（不連続転移）や，二階微分が特異的となる二次相転移（連続転移）がある．一般的な理解では，系の基底状態の対称性や秩序パラメタの対称性，さらには空間次元によって相転移の性質は決まるため，これらを変化させると，起こる相転移現象も同時に変化する．そこで我々は，基底状態や秩序変数の性質および空間次元といった系の本質を変化させることなく相転移の様相を変化させることはできるのか？ という問題に興味を持ち，以下に述べる二つの研究を行った．

2 二次元格子模型における 2, 3, 4 回対称性の破れを伴う相転移[4]

離散的対称性の破れを伴う熱平衡相転移は q 状態強磁性 Potts 模型を用いて詳しく研究が行われている [1]．二次元格子上では，$q \leq 4$ で二次相転移，$q > 4$ で一次相転移が起こることが知られている．この Potts 模型に，エネルギーに寄与しない余分な状態（透明状態）を付け加えた模型を考察した [2–6]．この模型のハミルトニアンは以下のように書かれる．

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{s_i,s_j} \sum_{\alpha=1}^{q} \delta_{s_i,\alpha}, \qquad s_i = 1, \cdots, q, q+1, \cdots, q+r \qquad (J < 0). \tag{1}$$

[1]現所属：(独) 物質・材料研究機構　若手国際研究センター
[2]E-mail: tamura.ryo@nims.go.jp
[3]E-mail: shu-t@chem.u-tokyo.ac.jp
[4]本研究は東京大学物性研究所川島直輝教授との共同研究である．

(q,r)	$T_\mathrm{c}/\lvert J\rvert$	$l/\lvert J\rvert$	破れる対称性	文献
(2,0)	1.13459	0	2 回	[1]
(2,30)	0.57837(1)	1.02(2)	2 回	[2]
(2,32)	0.56857(1)	1.23(2)	2 回	[3]
(3,0)	0.994973	0	3 回	[1]
(3,25)	0.59630(1)	0.81(2)	3 回	[2]
(3,27)	0.58513(1)	1.05(2)	3 回	[3]
(4,0)	0.910239	0	4 回	[1]
(4,20)	0.61683(1)	0.68(2)	4 回	[2]
(4,22)	0.60396(1)	0.87(2)	4 回	[3]

表 1: 透明状態を r 個加えた際の，二次元格子上強磁性 q 状態 Potts 模型の相転移温度 $T_\mathrm{c}/|J|$ および潜熱 $l/|J|$．$(q,r)=(2,0),(3,0),(4,0)$ の場合は二次相転移が起こる．

ここで，$q+1 \leq s_i \leq q+r$ の状態が透明状態であり，r は透明状態の個数を表わしている．この透明状態の導入により，各スピンの取り得る状態の数は $q+r$ 個となっており，透明状態を加えることは状態に関する揺らぎを導入したことに対応する．このハミルトニアンから分かるように，$1 \leq s_i = s_j \leq q$ のときに相互作用 J が働き，それ以外では相互作用は働かない．つまり，透明状態 $(q+1 \leq s_i \leq q+r)$ はエネルギーに寄与しないため，透明状態を系に加えても基底状態は変化しない．したがって，この模型は有限温度において q 回対称性の破れを伴った相転移が起こる模型である．

通常なら二次相転移が起こる二次元格子上 $q=2,3,4$ 状態強磁性 Potts 模型に透明状態を複数付け加えた場合，相転移がどのように変化するかについて数値計算を行った．その結果，いくつかのパラメタセット (q,r) において有限温度一次相転移の存在が確認された．数値計算によって得られた一次相転移温度および潜熱について表 1 にまとめた．この結果から，透明状態の数を増やすと，相転移温度は減少し，潜熱は増大することが分かる．このように，エネルギーに寄与しない状態を付け加えることによって，相転移の次数を変化させることが可能であることを示した．さらに，透明状態によって潜熱も変化することから，同じ対称性の破れを伴う相転移でも透明状態の数を変化させることによって潜熱の大きさを制御することができる．以上の結果は平均場近似 (Bragg-Williams 近似) においても確認している．この研究は，模型の本質を変化させることなく，相転移の次数をコントロールすることができる一つの可能性を提示している．

3 ネットワーク成長模型における動的パーコレーション転移

正方格子上のネットワーク成長模型における動的パーコレーション転移に着目する．パーコレーション転移は格子の端から端までを繋ぐネットワークが形成された時間で定義される．一般的な理解では，このパーコレーション転移は連続転移であり，要素同士をランダムに繋いでいく最もシンプルなネットワーク成長模型は連続転移を示す．しかし，特別なルールを採用したネットワー

ク成長模型では，パーコレーション転移が不連続転移になることが Achlioptas らによって報告されている [7]．そこで，我々はこれらのネットワーク成長過程を繋ぐことのできるネットワーク成長ルールを導入し，動的パーコレーション転移の様相がどのように変化するかを調べた．

我々が導入したネットワーク成長ルールは以下の通りである．

Step 1 全ての要素は孤立している．

Step 2 2つの異なる辺をランダムに選ぶ (i と j および k と l)．

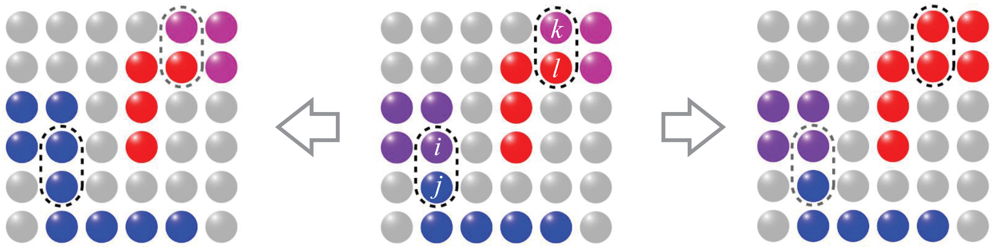
Step 3 選んだ辺のうち片方の辺（i と j を結ぶ辺）を，以下の確率で繋げる．

$$\omega_{ij} = \frac{e^{-q(n(\sigma_i)+n(\sigma_j))}}{e^{-q(n(\sigma_i)+n(\sigma_j))} + e^{-q(n(\sigma_k)+n(\sigma_l))}}. \tag{2}$$

ただし，$n(\sigma_i)$ は i 番目のサイトが属するクラスターが含むサイト数を意味している．また，一度結合された辺は切断されることはない．

Step 4 Step 2 と Step 3 を繰り返し，全ての要素が 1 つのクラスタに属したら終了．

このルールにおける成長過程の例を図 1 に示した．このルールにおいて $q = 0$ は要素同士をランダムに繋いでいくシンプルなルールとなり，$q = +\infty$ は必ず小さいクラスターができるように要素を繋いでいく Achlioptas らによって導入されたルールとなる．つまり，q はこれらのルールを繋ぐパラメタになっていることが分かる．いくつかの q を用いた数値計算を行ったところ，$q \simeq 10^{-4}$ 付近でパーコレーション転移の臨界性が変化することを示す結果を得た [8]．また，パーコレーション転移点直上におけるフラクタル次元も，同様の q の値を境に変化していることが分かった．このパラメタ q は，成長過程を選ぶ際の選択確率（選択に関する揺らぎ）になっており，このような選択に関する揺らぎによって動的パーコレーション転移の臨界性を制御できることが分かった．



$$\omega_{ij} = \frac{\mathrm{e}^{-q(4+5)}}{\mathrm{e}^{-q(4+5)} + \mathrm{e}^{-q(3+4)}} \qquad \omega_{kl} = \frac{\mathrm{e}^{-q(3+4)}}{\mathrm{e}^{-q(4+5)} + \mathrm{e}^{-q(3+4)}}$$

図 1: ネットワークの成長過程の一例．左図は確率 ω_{ij} で i と j を結ぶ辺が結合された場合，右図は確率 ω_{kl} で k と l を結ぶ辺が結合された場合をそれぞれ表している．

4　結言

本原稿では，相転移現象の様相を制御することのできる揺らぎの導入方法について，二種類の相転移に着目することによって紹介した．一つ目は二次元格子上 Potts 模型における 2, 3, 4 回対

称性の破れを伴う平衡相転移であり，状態に関する余分な揺らぎを導入することによって，相転移の次数が二次から一次に変化する振る舞いが観測された．二つ目は，ネットワーク成長模型における動的パーコレーション転移であり，ネットワークの成長過程で生じる選択確率（選択に関する揺らぎ）を導入することによって，相転移の臨界性の変化が観測された．このように，基底状態や秩序変数といった系の本質を変化させない新しいタイプの揺らぎを導入することによって，相転移の様相を制御することが可能である．このような相転移現象の制御という観点は，情報統計力学の分野でも重要であると考えている．この分野で扱われる最適化問題では，相転移の存在が問題の困難さを左右する一因になり得る．例えば，一次相転移点近傍において状態が準安定状態にトラップされてしまうことや，二次相転移点における臨界減速が要因となる．そのため，新奇揺らぎの導入による相転移現象の制御は最適化問題における困難を解消する有用な方法になると期待している．

謝辞

本研究を遂行するにあたって，田村は東京大学 GCOE「未来を拓く物理科学結集教育研究拠点」の支援を，田中は日本学術振興会科学研究費助成事業（21840021 および 23-7601）の支援を受けて実施いたしました．また，数値計算の一部は，東京大学物性研究所の共同利用スーパーコンピュータを利用いたしました．ここに感謝申し上げます．

参考文献

[1] F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54** (1982) 235.

[2] R. Tamura, S. Tanaka, and N. Kawashima, Prog. Theor. Phys. **124** (2010) 381.

[3] S. Tanaka, R. Tamura, and N. Kawashima, J. Phys.: Conf. Ser. **297** (2011) 012022.

[4] S. Tanaka and R. Tamura, J. Phys.: Conf. Ser. **320** (2011) 012025.

[5] S. Tanaka, R. Tamura, I. Sato, and K. Kurihara, To appear in the proceedings of Kinki University Quantum Computing Series: ”Summer School on Diversities in Quantum Computation/Information”.

[6] R. Tamura, S. Tanaka, and N. Kawashima, To appear in the proceedings of Kinki University Quantum Computing Series: ”Symposium on Interface between Quantum Information and Statistical Physics”.

[7] D. Achlioptas, R. M. D’Souza, and J. Spencer, Science **323** (2009) 1453.

[8] S. Tanaka and R. Tamura, arXiv:1111.2005.