

多様な系に現れる臨界点の性質を系統的に決定する新手法を開発

—リーヤンゼロを用いた一般的手法—

概要

臨界点は、宇宙から素粒子まで様々なスケールの相転移現象に現れる普遍的な概念です。臨界点近傍では、系のミクロな性質によらないスケーリング則や臨界指数が現れることが知られており、これらの現象は統計物理学をはじめとした物理学全体を貫く研究対象として幅広く研究されてきました。

京都大学基礎物理学研究所 和田辰也 博士課程学生、北澤正清 同講師らの研究グループは、様々な系の相図上に現れる臨界点の位置を求めるための新しい一般的な手法を開発しました。この手法は、複素パラメータ空間における分配関数のゼロ点である Lee-Yang ゼロの比を使うという画期的なアイデアに基づいており、臨界点の位置などの情報を系統的な手順で決定することができます。また、この手法を 3 次元 3 状態 Potts 模型の数値計算に適用して、その有効性を確認しました。この手法の適用範囲は系の詳細には依存しないため、物性物理学のみならず、有限温度有限密度 QCD の相図に存在が予想される臨界点の位置決定など、幅広い系の臨界現象への適用が期待されます。

本成果は、2025 年 4 月 24 日に米国の国際学術誌「*Physical Review Letters*」にオンライン掲載され、同誌の「Editor's Suggestion」に選ばれました。

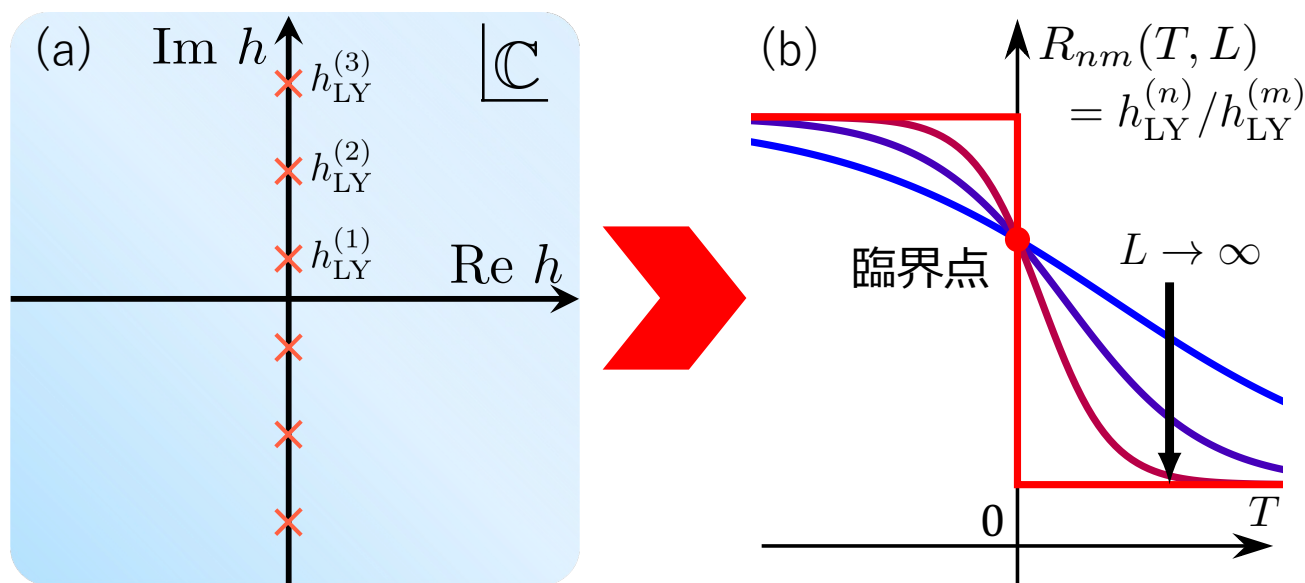


図 1 (a) 分配関数がゼロとなる点をリーヤンゼロ (Lee-Yang zeros: LYZ) と呼びます。イジング模型において、複素磁場平面上の LYZ は虚軸上に分布することが知られています。実軸に近いリーヤンゼロから順に 1, 2, 3...とラベルをつけます。(b) 異なる LYZ の実軸との距離の比 $R_{nm}(T) = h_{\text{LY}}^{(n)} / h_{\text{LY}}^{(m)}$ を LYZ 比と定義します。本研究では、様々な体積で計算された LYZ 比が系の温度 T を変化させたときに臨界温度 T_c で一点で交わることを証明しました。この性質を利用することで、臨界点の位置を系統的に調べる新手法を開発しました。

1. 背景

水の温度を上昇させていくと、大気圧下では 100 度で沸騰が起こり、液体から気体へと状態変化します。このように物質の性質が不連続的に変化する現象を、一次相転移とよびます。一方、圧力を上げていくと水の一次相転移は約 220 気圧で消失し、液体から気体に連続的に変化ようになります (図 2 (a))。このとき現れる一次相転移の端点を、臨界点とよびます。一次相転移や臨界点は、図 2 (a) の水の相図のみならず、磁性体(図 2 (b))など様々な物質に現れることが知られており、宇宙論から素粒子論まで幅広いスケールと研究分野を貫く共通概念として広く研究されてきました。

臨界点は、普遍性 (ユニバーサリティ) という興味深い物理的性質を持っています。ある系に臨界点が現れる場合、その周辺における物質の性質はスケーリング則とよばれる単純な法則で支配されるうえ、スケーリング則に現れる臨界指数という定数は全く異なる系でも共通の値を持つという驚くべき性質があります。このような臨界点の性質を普遍性、同じ臨界指数を持つ臨界点の集合を普遍類 (ユニバーサリティクラス) とよびます。例として、上で紹介した水と磁性体の臨界点は同じ普遍類に属します。臨界点の普遍性は、未知の系に現れる臨界点を理解するうえで極めて強力な役割を果たします。しかし、普遍性だけでは臨界点の存在自体や位置を予言することはできないため、実験や数値シミュレーションを用いた研究が必要になります。

臨界点や相転移を理解するうえで重要な概念に、リーヤンゼロ (Lee-Yang zeros: LYZ) があります。LYZ とは、統計力学の基本量である分配関数がゼロとなる点のことです。分配関数は、温度などのパラメータが実数の場合には正の値を取りゼロにならないため、LYZ はこれらのパラメータを複素数にすることで初めて現れます (図 1 (a))。複素数の温度などという無意味な概念に思えますが、実は複素空間上の LYZ のふるまいが相転移と密接に関係していることが知られています。たとえば、一次相転移が存在する場合、有限体積系で計算された LYZ は図 1 (a) のように一次相転移点付近に線状に分布し、体積無限大極限で稠密化するとともにこの線が一次相転移点で実数軸と交わります。このように、物質の相転移現象は LYZ を通して理解することができるのです。

このような LYZ のふるまいは、数値シミュレーションで一次相転移や臨界点の位置を決定する際にも活用できます。しかし、従来の手法では臨界点の位置決定のために行う無限体積への外挿などの過程において、複雑な解析手順を経る必要がありました。そこで私たちは、有限体積系の数値シミュレーションで得られた LYZ の情報を使って、より単純で簡素かつ直接的な方法で臨界点の位置や臨界指数を引き出す新しい方法を提案しました。

2. 研究手法・成果

本研究が提案した新手法は、異なる二つの LYZ の実軸からの距離の比 (以下、LYZ 比と呼びます) というシンプルな量を活用します。私たちは、スケーリング則を活用することで、臨界点直上では LYZ 比が系の体積に依存せず一定の値を取ることを証明しました。この性質を使うと、LYZ 比を複数の体積で温度の関数として計算して図示すると、図 1 (b) のように臨界点で交差することがただちに示せます。本研究では、この LYZ 比の性質を使うと臨界点の位置がただちに決定できることを指摘しました。さらに、交点での LYZ 比の値が普遍類に固有であることや、交点付近でのふるまいから臨界指数などの更なる情報が抽出できることを示しました。

このような議論を行うために、本研究では、磁性体を単純化したイジング模型という模型を出発点として議論を開始しました。イジング模型は温度 T と外部磁場 h の 2 つのパラメータで記述されますが、空間次元が 2

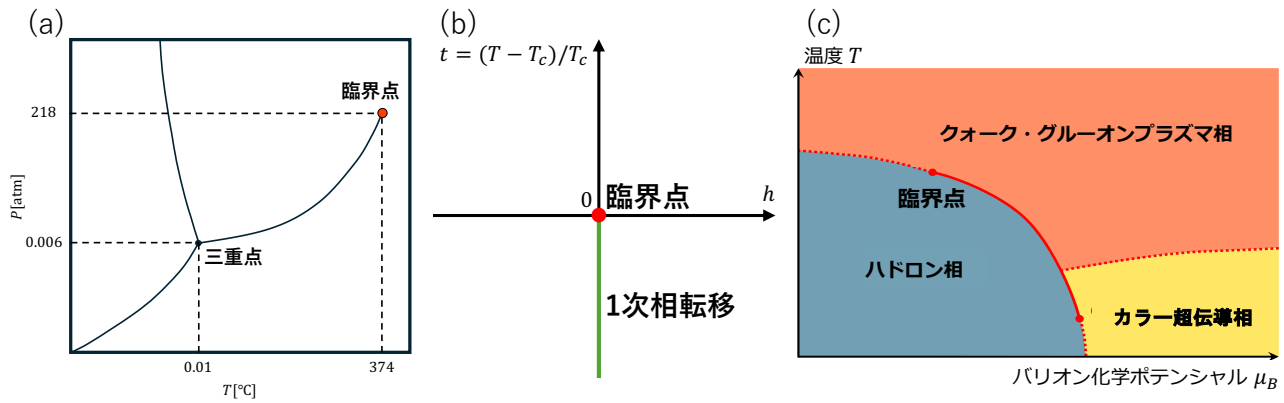


図 2 さまざまな系の相図と臨界点 (a) 水の相図。水は固体、液体、気体と状態変化します。1 気圧では状態変化に伴い、一次相転移をすることが知られています。しかし、218 気圧以上では液体と気体の区別はつかず、連続的に変化します。この境界が臨界点です。(b) 磁性体のモデルであるイジング模型の相図。低温では外部磁場の変化に対して磁化は不連続に振る舞います。一方で、高温では外部磁場に対して磁化は連続的に変化します。この境界も臨界点です。(c) 量子色力学 (QCD) の相図。縦軸は温度、横軸はバリオン化学ポテンシャルという密度に相当する量です。ゼロ密度ではハドロン相とクォーク・グルーオンプラズマ相と呼ばれる 2 つの相の変化は連続的であることが知られています。一方で、有限密度では 2 つの相は一次相転移で、不連続に変化する領域が存在することが予想されています。この境界が QCD 臨界点です。これら 3 つの相図は全く異なる系のものですが、臨界点は同じ普遍類に属すると考えられています。

以上の場合、図 2 (b) のようにある臨界温度 T_c に臨界点を持ちます。図 1 (a) は、イジング模型の一次相転移付近における複素外部磁場平面上の LYZ 分布の概念図です。本研究では、これらの LYZ の性質を調べることで、上記の LYZ 比の性質を示しました。そのうえで、普遍類を通したイジング模型との対応関係を使うことにより、より複雑な系に現れる臨界点に対しても同様の議論が適用できることを一般的に証明しました。本研究では、この手法の妥当性と実用的優位性を検証するための数値シミュレーションも行いました。非自明な臨界点が存在するモデルとして空間 3 次元 3 状態ポッツ模型を採用し、この模型の臨界点周辺の LYZ 比を数値的に計算することで、LYZ 比法の有用性を実証しました。

実は、私たちが開発した LYZ 比法の手続きは、臨界点探索手法として古くから知られるビンダーキュムラント法とよく似ています。実際、私たちの研究はビンダーキュムラント法から一部着想を得ています。一方、LYZ 比法をビンダーキュムラント法と比較すると、有限体積効果の抑制などにおいて LYZ 比法がより優れた性質を持つことが分かりました。このため、LYZ 比法は強力な手法として今後様々な系に現れる臨界点の解析に適用されることが期待されます。

3. 波及効果、今後の予定

本研究では、臨界点の位置の決定に対する LYZ を用いた新手法「LYZ 比法」を提唱・検証しました。LYZ と相転移の関係は古くから様々な視点で研究されてきましたが、LYZ の比を臨界点探索に使うという着想は本研究が初めてたどり着いた研究成果であり、今後様々な研究の展開が期待されます。特に、LYZ 比法はあらゆる系の臨界点に対して適用可能であることから、応用範囲は広範です。

今後の応用課題の中でも私たちが現在もっとも注目しているのは、温度が約 10^{12} °C、密度が 10^{15} g/cm³ という超高温・高密度の物質中での発現が理論的に予想されている「QCD 臨界点」の探索への LYZ 比法の応用です。現代の物理学では、物質の最小構成要素はクォークとグルーオンとよばれる素粒子であり、これら素粒子の相互作用は量子色力学 (QCD) とよばれる理論によって記述されることが知られています。この理論

に基づく研究により、超高温・高密度物質中では図 2c のように一次相転移が存在することが予想されており、その端点が QCD 臨界点です。さらにこの臨界点は、もし本当に存在するならば上で紹介した水や磁性体の臨界点と同じ普遍性に属することまで分かっています。しかし、QCD 臨界点は具体的な臨界温度はおろか、本当に存在するのかどうかすら今のところ分かっていません。

QCD 臨界点の存在確認に向け、QCD の第一原理数値計算である格子 QCD を用いた研究が活発に行われています。しかし、格子 QCD は高密度領域の解析が不得手で、現在のところ明快な結論は得られていません。数年前から、この解析に LYZ を使う提案がなされ、世界の幾つかのグループが解析を始めました。実は、本研究はこれら格子 QCD 数値計算分野の発展に触発されて開始されたものです。今後、本研究の成果である LYZ 比法という強力な武器をこの分野に適用することで、QCD 臨界点に関する研究が大幅に進展することが期待されます。

4. 研究プロジェクトについて

本研究は下記の助成金と研究機関による支援を受けて行われました。

- (1) JSPS 科研費(No. JP19H05598, No. JP22K03593, No. JP22K03619, No. JP23H04507, No. JP24K07049)
- (2) 京都大学基礎物理学研究所 重力量子情報研究センター
- (3) 大阪大学 D3 センター
- (4) 筑波大学計算科学研究センター

<用語解説>

[1] リーヤンゼロ (Lee-Yang zeros: LYZ)

統計力学では、物質の熱力学的性質を記述するうえで分配関数が極めて重要な役割を果たします。リーヤンゼロとは、温度などのパラメーターの空間において、分配関数がゼロとなる点のことです。リーとヤンが執筆した 1952 年の論文で初めてその重要性が指摘されたため、このようによばれます。分配関数は実数パラメータではゼロになることがないため、リーヤンゼロは複素パラメータ平面上に現れます。相転移と関連した様々な興味深い性質を持っており、多様な視点から研究されてきました。

[2] 相転移と臨界点

水が気相・液相・固相を持つように、物質の温度や密度を変化させると相が移り変わる現象がおきます。この現象を相転移と呼び、水の沸騰のように密度（より一般には示量変数）が不連続に変化する相転移を一次相転移と呼びます。水の液相と気相を隔てる一次相転移は高圧下では消失し、両相の区別はなくなります。このとき現れる一次相転移の端点は臨界点と呼ばれます。臨界点は、水の相図以外にも様々な系に現れることが知られています。臨界点周辺の物質の性質はスケーリング則に従うほか、全く異なる物質の臨界点でも普遍類が同一であれば同じ性質を持つことなどの興味深い性質を持っています。

[3] スケーリング則と普遍類

臨界点上では様々な物理量が発散することが知られています。さらに、例えば温度を変化させながら臨界点に近づくときの物理量のふるまいは、温度差のべき乗に従います。つまり、臨界点の温度を T_c とすると、物理量は $|T - T_c|^{-\alpha}$ に比例します。このような振る舞いをスケーリング則、スケーリング則に現れる指数 α を臨界指数と呼びます。臨界指数は全く異なる系でも普遍類が同じであれば同じ値となります。スケーリング

則が成立する理由や普遍類は、くりこみ群によって示されています。スケーリング則はもともと無限体積系に対する法則ですが、本研究ではこれを有限体積系に拡張した有限サイズスケーリングを使って LYZ 比が持つ性質を発見しました。

[4] 量子色力学 (QCD) と格子 QCD

量子色力学 (Quantum Chromodynamics) とは、素粒子であるクォークとグルーオンの相互作用を記述する理論です。クォークは強い総合作用を通じて陽子や中性子などのハドロンを構成します。このハドロンから原子核、さらに原子が構成されます。また、グルーオンは強い相互作用を媒介する粒子です。これらの粒子の性質を解明することが、初期宇宙の状態や中性子星と呼ばれる天体の構造の解明につながるため、重要な研究対象となっています。QCD の特徴として、高エネルギーで結合定数が小さくなり、低エネルギーでは結合定数が大きくなるという漸近的自由性という性質があります。結合定数が小さい場合には、摂動論と呼ばれる解析的な手法が有効です。一方で、結合定数が大きい場合には摂動論が機能せず、解析的な手法を用いることが困難となっています。そこで時空間を格子に分割し、格子点と辺上にクォークとグルーオンの自由度を配置することで、QCD を非摂動的に扱う格子 QCD と呼ばれる方法があります。この手法の最大の利点はモンテカルロ法と呼ばれる方法を合わせて用いることで、数値的に QCD を解析することが可能となる点です。

<研究者のコメント>

「リーヤンゼロを用いた QCD 臨界点の探索は近年注目を受けている研究です。しかし、先行研究では有限体積であることを無視しており、私たちのグループではこの解析は臨界点の位置を大きく変化させうるという点で深刻な問題であると考えていました。有限体積のリーヤンゼロの比というシンプルな量から臨界点を特定することが可能であると示せました。今後当初の目的であった QCD だけでなく、様々な理論へ応用が可能であり、幅広い応用を進めていきたいと考えています。」(和田辰也)

<論文タイトルと著者>

タイトル: Locating Critical Points Using Ratios of Lee-Yang Zeros (リーヤンゼロを用いた臨界点探索)

著者: Tatsuya Wada, Masakiyo Kitazawa and Kazuyuki Kanaya

掲載誌: *Physical review Letters* (*Phys. Rev. Lett.* **134**, 162302, (2025))

DOI: 10.1103/PhysRevLett.134.162302