可解模型

須賀勇貴

最終更新日：2023 年 11 月 28 日

西森先生の本の 6 章をまとめた

1　2 次元イジング模型の高温展開

次に，二次元イジング模型を扱う．二次元イジング模型は Onsager によって厳密解が求められた．Onsager は，転送行列を対角化することで磁場のないときの自由エネルギーを求め，比熱がある温度で発散することを示した．いくつかの解法が知られているが，ここでは，高温展開を用いた解法を扱う．高温展開は，温度が高いとして自由エネルギーを βJ のべきで展開する方法である．十分高温であれば，その展開を数項で打ち切って自由エネルギーの近似値とする．計算が比較的簡単なため，汎用的な手法として用いられているが，近似の正当性に十分注意する必要がある．この近似のみを用いて相転移を調べることはできない．有限項の和から特異性が生じることはないからである．本節では，無限和を計算することにより厳密解を求め，特異性が生じることを示す．

なお，

1.1　高温展開

$H = 0$ の場合に高温展開を行う．二次元イジング模型の分配関数は，

$$Z = \mathrm{Tr} \prod_{\langle i,j \rangle} \exp\left(\beta J S_i S_j\right) \tag{1}$$

と書ける．積はスピンの最近接対についてとる．スピン変数が $S_i^2 = 1$ であることを用いると，

$$\begin{aligned} Z &= \mathrm{Tr} \prod \langle i,j \rangle (\cosh \beta J + S_i S_j \tanh \beta J) \\ &= (\cosh \beta J)^{N_B} \mathrm{Tr} \prod \langle i,j \rangle (1 + S_i S_j \tanh \beta J) \end{aligned} \tag{2}$$

と書ける．$N_B = Nz/2 = 2N$ は最近接対の数を表す．$v = \tanh \beta J$ は有限温度で 1 より小さい非負の量なので，(2) を v について次のように展開してみる．

$$\prod \langle i,j \rangle (1 + v S_i S_j) = 1 + v \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + v^2 \sum_{\langle i,j \rangle, \langle k,l \rangle} S_i S_j S_k S_l + \cdots \tag{3}$$

この展開の項数は膨大であるが，スピン和をとると $\mathrm{Tr}S_i = 0$ のため多くが 0 になる．有限に残るのは各変数 S_i が偶数べきに練っている項である．各項は図 (??) のようにスピンを結ぶボンドをつなぐ線が閉じている (ループになっている) ときのみである．すべてのスピン変数についての和は 2^N 個あるので $\mathrm{Tr}1 = 2^N$ であり，l 本のボンドで作ることができるループの数を $g(l)$ とすると，

$$Z = 2^N (\cosh\beta J)^{N_B} \sum_{l=0}^{\infty} g(l) v_l \tag{4}$$

と書ける．ただし，$g(0) = 1$, $l > N_B$ のとき，$g(l) = 0$ とする．この $g(l)$ を求めて和をとることができれば解が得られる．v は高温では小さいから，展開を低次の項で打ち切って近似値を得ることができる．これが高温展開の方法である．

一次元と二次元のイジング模型では，この無限和を厳密に計算することができる．一次元の場合，周期的境界条件をとるとループを作ることができるのは $l = N$ のときの一つだけである．よって

$$Z = 2^N (\cosh\beta J)^N (1 + v^N) \to (2\cosh\beta J)^N \tag{5}$$

となり，前節の結果と一致する．二次元の場合，ループの計算は非常に複雑である．

1.2 二次元イジング模型の解

$N \to \infty$ のときのエネルギー密度は

$$-\beta f = \ln\left[2\cosh\beta J\right] + \frac{1}{2}\int_0^{2\pi} \frac{d^2\boldsymbol{k}}{(2\pi)^2} \ln\left[1 - \frac{t}{2}(\cos k_1 + \cos k_2)\right] \tag{6}$$

と書ける．ここでパラメータ t を次のように導入した．

$$t = \frac{2\sinh 2\beta J}{\cosh^2(2\beta J)} \tag{7}$$

このパラメータのとりうる値は $0 \leq t \leq 1$ である．$T = 0$ で 0 であり，温度を上げると最大 1 になるまで単調増加し，その点を境に単調減少に転じる．以下で見るように，$t = 1$ となる温度が相転移店を表す．

特異性が生じていることを見るために比熱を計算する．まず内部エネルギーを計算すると，

$$\epsilon = -\frac{J}{\tanh(2\beta J)}\left\{1 - \left[1 - 2\tanh^2 2\beta J\right]\frac{2}{\pi}K(t)\right\} \tag{8}$$

となる．$K(t)$ は第一種完全楕円積分を表しており，次のようにして出てくる．

$$\int_0^{2\pi} \frac{d^2\boldsymbol{k}}{(2\pi)^2} \frac{1}{1 - \frac{t}{2}(\cos k_1 + \cos k_2)} = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi/2} \frac{\theta}{\sqrt{1 - t^2\sin^2\theta}} = \frac{2}{\pi}K(t) \tag{9}$$

内部エネルギーを微分することで比熱が得られる．次の楕円積分の微分を用いる．

$$\frac{dK(t)}{dt} = \frac{E(t)}{t(1-t^2)} - \frac{K(t)}{t} \tag{10}$$

$$E(t)=\int_0^{2\pi} d\theta\sqrt{1-t^2\sin^2\theta} \tag{11}$$

$E(t)$ は第二種完全楕円積分である．こうして，比熱は次のように求められる．

$$c=\frac{4}{\pi}\left[\frac{\beta J}{\tanh{(2\beta J)}}\right]^2\left(K(t)-E(t)-\frac{1}{\cosh^2{(2\beta J)}}\left\{\frac{\pi}{2}-[1-2\tanh^2{(2\beta J)}]K(t)\right\}\right) \tag{12}$$

比熱の特異性は楕円積分の特異性を見ることでわかる．$0\leq t\leq 1$ の範囲において，$K(t)$ は $t=1$ で発散し，$E(t)$ で有限値をとる．よって比熱は $t=1$ で発散する．これが二次元イジング模型の相転移である．このときの温度は

$$\sinh(2\beta J)=1 \tag{13}$$

より，

$$\beta_c J=\frac{1}{2}\ln(1+\sqrt{2})\approx 0.4407,\quad \frac{T_c}{J}\approx 2.269 \tag{14}$$

と求められる．なお，内部エネルギーは (**??**) も楕円積分を含むが，発散は生じない．それは楕円積分にかかる係数 $1-2\tanh^2(2\beta J)$ が $T=T_c$ で 0 となり，発散を打ち消すからである．