2023年度 物理工学基礎演習 (統計力学第一)
第5回 解答例

担当; 水田 郁 (mizuta@qi.t.u-tokyo.ac.jp, 工学部 9 号館 325 号室)

提出日; 6/26 13:00 (前半クラス), 6/19 13:00 (後半クラス)

I　1次元 Ising 模型の厳密解

L 個のスピンからなる 1 次元 (強磁性) Ising 模型を考える。この系の状態は L 個のスピン変数の配位 $\{\sigma_i\}$ ($\sigma_i = \pm 1$) で指定され、 Hamiltonian は以下で与えられる。

$$H(\{\sigma_i\}) = -\sum_{i=1}^{L} \left(J\sigma_i\sigma_{i+1} + \mu_0 H \frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2} \right).$$

ただし、$J > 0$ とし、周期境界条件 $\sigma_{L+1} = \sigma_1$ を課す。

> (1) 添字 $\sigma, \sigma' = \pm 1$ を持つ 2×2 行列 $\hat{T}$ を
>
> $$[\hat{T}]_{\sigma,\sigma'} = \exp\left(\beta J \sigma\sigma' + \beta\mu_0 H \frac{\sigma + \sigma'}{2} \right)$$
>
> で定める (転送行列と呼ばれる)。この時、分配関数 $Z_L(\beta, H)$ が $Z_L(\beta, H) = \mathrm{Tr}\left[\hat{T}^L\right]$ と書けることを示せ。

解答.—

$$\begin{aligned}
Z_L(\beta, H) &= \sum_{\{\sigma_i=\pm1\}_{i=1}^L} e^{-\beta H(\{\sigma_i\})} \\
&= \sum_{\{\sigma_i=\pm1\}_{i=1}^L} \exp\left(\sum_{i=1}^{L} \left(\beta J\sigma_i\sigma_{i+1} + \beta\mu_0 H \frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2} \right) \right) \\
&= \sum_{\{\sigma_i=\pm1\}_{i=1}^L} \prod_{i=1}^{L} [\hat{T}]_{\sigma_i,\sigma_{i+1}} \\
&= \sum_{\sigma_1=\pm1} \left[\hat{T}^L\right]_{\sigma_1,\sigma_1} \\
&= \mathrm{Tr}\left[\hat{T}^L\right]
\end{aligned}$$

である。

> (2) (1) の結果に従って、分配関数 $Z_L(\beta, H)$ を具体的に求めよ。また、熱力学極限における自由エネルギー密度
>
> $$f(\beta, H) = \lim_{L\to\infty} \frac{1}{L} \left(-\frac{1}{\beta} \ln Z_L(\beta, H) \right)$$
>
> を計算せよ。

解答.— まず $\hat{T}^L$ を計算するために 2×2 行列

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+\mu_0 H)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-\mu_0 H)} \end{pmatrix}$$

の固有値を計算する。

$$\begin{aligned} \det\left(\lambda\hat{I} - \hat{T}\right) &= (\lambda - e^{\beta(J+\mu_0 H)})(\lambda - e^{\beta(J-\mu_0 H)}) - e^{-2\beta J} \\ &= \lambda^2 - 2\lambda e^{\beta J}\cosh\beta\mu_0 H + 2\sinh 2\beta J \end{aligned}$$

より、固有値は

$$\begin{aligned} \lambda_\pm &= e^{\beta J}\cosh\beta\mu_0 H \pm \sqrt{e^{2\beta J}\cosh^2\beta\mu_0 H - 2\sinh 2\beta J} \\ &= e^{\beta J}\cosh\beta\mu_0 H \pm \sqrt{e^{2\beta J}\sinh^2\beta\mu_0 H + e^{-2\beta J}} \end{aligned}$$

である。$\hat{T}$ は実対称行列であるので、直交行列 $\hat{P}$ を用いて

$$\hat{T} = \hat{P}^{-1}\begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}\hat{P}$$

と対角化されるので、分配関数は

$$\begin{aligned} Z_L(\beta, H) &= \mathrm{Tr}\left[\hat{T}^L\right] \\ &= \mathrm{Tr}\left[\hat{P}^{-1}\begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}^n \hat{P}\right] \\ &= \lambda_+^L + \lambda_-^L \\ &= \left(e^{\beta J}\cosh\beta\mu_0 H + \sqrt{e^{2\beta J}\sinh^2\beta\mu_0 H + e^{-2\beta J}}\right)^L \\ &\quad + \left(e^{\beta J}\cosh\beta\mu_0 H - \sqrt{e^{2\beta J}\sinh^2\beta\mu_0 H + e^{-2\beta J}}\right)^L \end{aligned}$$

となる。

また、自由エネルギー密度 $f(\beta, H)$ は $|\lambda_-| < |\lambda_+|$ であることを利用すると、

$$\begin{aligned} f(\beta, H) &= \lim_{L\to\infty}\frac{1}{L}\left(-\frac{1}{\beta}\ln Z_L(\beta, H)\right) \\ &= \lim_{L\to\infty}\frac{1}{L}\left(-\frac{1}{\beta}\ln\bigl(\lambda_+^L + \lambda_-^L\bigr)\right) \\ &= \lim_{L\to\infty}\left(-\frac{1}{\beta}\ln\lambda_+ + \frac{1}{L}\left(-\frac{1}{\beta}\right)\ln\left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^L\right)\right) \\ &= -\frac{1}{\beta}\ln\lambda_+ \\ &= -\frac{1}{\beta}\ln\left(e^{\beta J}\cosh\beta\mu_0 H + \sqrt{e^{2\beta J}\sinh^2\beta\mu_0 H + e^{-2\beta J}}\right) \end{aligned}$$

で与えられる。

(3) 磁化の期待値 $m(\beta, H) = -\frac{\partial f(\beta,H)}{\partial H}$ およびゼロ磁場極限での磁化率 $\chi(\beta) = \left.\frac{\partial m(\beta,H)}{\partial H}\right|_{H=0}$ を計算し、有限温度において $m(\beta, 0) = 0$ であることを示せ。また $T\to 0$ における $\chi(\beta)$ の発散の程度を相互作用がないスピン系と比較せよ。

解答.—

$$
\begin{aligned}
m(\beta, H) &= -\frac{\partial f(\beta, H)}{\partial H} \\
&= \frac{1}{\beta}\frac{e^{\beta J}\beta\mu_0 \sinh\beta\mu_0 H + \frac{e^{2\beta J}\beta\mu_0\cosh\beta\mu_0 H \sinh\beta\mu_0 H}{\sqrt{e^{2\beta J}\sinh^2\beta\mu_0 H + e^{-2\beta J}}}}{e^{\beta J}\cosh\beta\mu_0 H + \sqrt{e^{2\beta J}\sinh^2\beta\mu_0 H + e^{-2\beta J}}} \\
&= \frac{\mu_0 e^{\beta J}\sinh\beta\mu_0 H}{\sqrt{e^{2\beta J}\sinh^2\beta\mu_0 H + e^{-2\beta J}}}
\end{aligned}
$$

である。有限温度 $\beta < \infty$ において $H = 0$ では、$\sinh(\beta\mu_0 H) = 0$ より $m(\beta, 0) = 0$ である。

次に $H \to 0$ における磁化率 $\chi(\beta)$ を評価する。$\sinh(\beta\mu_0 H) = \beta\mu_0 H + \mathcal{O}(H^2)$ を用いると、

$$
\begin{aligned}
m(\beta, H) &= \frac{\mu_0 e^{\beta J}\beta\mu_0 H}{\sqrt{e^{-2\beta J}}} + \mathcal{O}(H^2) \\
&= \beta\mu_0^2 e^{2\beta J} H + \mathcal{O}(H^2)
\end{aligned}
$$

より、

$$
\chi(\beta) = \left.\frac{\partial m(\beta, H)}{\partial H}\right|_{H=0} = \beta\mu_0^2 e^{2\beta J}
$$

である。$T \to 0$ ($\beta \to \infty$) における発散の度合いを見てみると、相互作用がない場合 ($J = 0$) では磁化率 $\chi(\beta)$ が逆温度 β について線形に増加する。一方で、強磁性的な相互作用 $J > 0$ がある場合では $\chi(\beta) \sim \beta e^{2\beta J}$ と逆温度 β について指数的に増大する。これは、スピンの向きが互いに揃うような相互作用があるとき、磁場 H をほんの少しでも印加すると磁場方向へ急激に揃うことを意味する。

II　相転移と平均場近似

2 次元以上の Ising 模型を厳密に解くことは一般に困難である。以下では平均場近似と呼ばれる手法で d 次元立方格子上の Ising 模型を議論しよう。この系の Hamiltonian は以下で与えられる。

$$
H(\{\sigma_i\}) = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j - \mu_0 H\sum_{i=1}^{N}\sigma_i.
$$

ここで、第 1 項の $\sum_{\langle i,j\rangle}$ は隣接するサイト i, j 間についての和を意味する。また、$J > 0$ および周期境界条件を仮定し、全スピン数 $N = L^d$、あるスピンと隣接するスピン数 (配位数) $z = 2d$ とおく。

(1) Hamiltonian $H(\{\sigma_i\})$ のもとで実現される熱平衡状態において、スピン変数 σ_i の期待値からのずれ $\delta\sigma_i = \sigma_i - \langle\sigma_i\rangle$ が十分に小さく、$\sum_{\langle i,j\rangle}\delta\sigma_i\delta\sigma_j$ の項が無視できると仮定する。この仮定のもとで Hamiltonian $H(\{\sigma_i\})$ は次で与えられる平均場 (Mean field) Hamiltonian $H_{\mathrm{MF}}(\{\sigma_i\})$ で近似されることを示せ。

$$
H_{\mathrm{MF}}(\{\sigma_i\}) = -\sum_{i=1}^{N}(Jz\langle\sigma\rangle + \mu_0 H)\sigma_i + \frac{NJz\langle\sigma\rangle^2}{2}.
$$

ただし、系が並進対称で $\langle\sigma_i\rangle$ がサイト i に依存しないため $\langle\sigma\rangle = \langle\sigma_i\rangle$ と書いている。

解答.— $\sigma_i = \delta\sigma_i + \langle\sigma_i\rangle = \delta\sigma_i + \langle\sigma\rangle$ より、

$$\begin{aligned}
H(\{\sigma_i\}) &= -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j - \mu_0 H\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \\
&= -J\sum_{\langle i,j\rangle}(\delta\sigma_i + \langle\sigma\rangle)(\delta\sigma_j + \langle\sigma\rangle) - \mu_0 H\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \\
&= -J\sum_{\langle i,j\rangle}(\delta\sigma_i\delta\sigma_j + \langle\sigma\rangle\delta\sigma_i + \langle\sigma\rangle\delta\sigma_j + \langle\sigma\rangle^2) - \mu_0 H\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \\
&= -J\sum_{\langle i,j\rangle}\delta\sigma_i\delta\sigma_j - J\langle\sigma\rangle\sum_{\langle i,j\rangle}(\delta\sigma_i + \delta\sigma_j) - J\langle\sigma\rangle^2\frac{Nz}{2} - \mu_0 H\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \\
&= -J\sum_{\langle i,j\rangle}\delta\sigma_i\delta\sigma_j - Jz\sum_{i=1}^{N}(\sigma_i - \langle\sigma\rangle) - J\langle\sigma\rangle^2\frac{Nz}{2} - \mu_0 H\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \\
&= -J\sum_{\langle i,j\rangle}\delta\sigma_i\delta\sigma_j - (Jz\langle\sigma\rangle + \mu_0 H)\sum_{i=1}^{N}\sigma_i + J\langle\sigma\rangle^2\frac{Nz}{2}
\end{aligned}$$

となる。空間揺らぎ $\sum_{\langle i,j\rangle}\delta\sigma_i\delta\sigma_j$ が十分小さいと仮定して、それを切り落とすと

$$H_{\mathrm{MF}}(\{\sigma_i\}) = -\sum_{i=1}^{N}(Jz\langle\sigma\rangle + \mu_0 H)\sigma_i + \frac{NJz\langle\sigma\rangle^2}{2}$$

となる。

(2) 平均場 Hamiltonian $H_{\mathrm{MF}}(\{\sigma_i\})$ の下での平衡状態におけるスピン変数の期待値 $\langle\sigma_i\rangle$ を計算し、それが平均場 $\langle\sigma\rangle$ と一致するという要請から、

$$\langle\sigma\rangle = \tanh(\beta Jz\langle\sigma\rangle + \beta\mu_0 H) \tag{1}$$

(自己無撞着方程式) を得よ。また、$H = 0$ において自己無撞着方程式の解 $\langle\sigma\rangle$ を調べ、ある温度 T_c を境に定性的に異なる振る舞いを示すことを確認せよ。また、T_c も具体的に求めよ。

解答.— 平均場 Hamiltonian に対する分配関数は

$$\begin{aligned}
Z_{\mathrm{MF}}(\beta, H) &= \sum_{\{\sigma_i\}_i} e^{-\beta H_{\mathrm{MF}}(\{\sigma_i\})} \\
&= e^{-\beta NJz\langle\sigma\rangle^2/2}\prod_{i=1}^{N}\left(e^{\beta(Jz\langle\sigma\rangle + \mu_0 H)\sigma_i}\right) \\
&= \left(2e^{-\beta Jz\langle\sigma\rangle^2/2}\cosh\beta(Jz\langle\sigma\rangle + \mu_0 H)\right)^N
\end{aligned}$$

である。平均場 Hamiltonian の下でのスピン期待値は

$$\begin{aligned}
\langle\sigma\rangle &= \sum_{\{\sigma_i\}_i}\sigma_i\frac{e^{-\beta H_{\mathrm{MF}}(\{\sigma_i\})}}{Z_{\mathrm{MF}}(\beta, H)} \\
&= \frac{\sum_{\sigma_i=\pm1}\sigma_i e^{\beta(Jz\langle\sigma\rangle + \mu_0 H)\sigma_i}}{2\cosh\beta(Jz\langle\sigma\rangle + \mu_0 H)} \\
&= \tanh\beta(Jz\langle\sigma\rangle + \mu_0 H)
\end{aligned}$$

となり、これが自己無撞着方程式である。

また、$H=0$ においては方程式

$$x = \tanh \beta Jzx$$

の解 x が $\langle\sigma\rangle$ である。グラフ $y=x$ と $y=\tanh\beta Jzx$ が $x=0$ で接するときの温度 T_c (逆温度 β_c) とすると、これは $\beta_c Jz = 1$ を満たす時であるので、

$$T_c = Jz/k_B, \quad \beta_c = (Jz)^{-1}$$

である。グラフより $T > T_c$ ($\beta < \beta_c$) の時は、解 x は $x=0$ のみである。一方で、$T < T_c$ ($\beta > \beta_c$) の時は、$x=0$ の他に $x=\pm m$ ($m \neq 0$) の解が存在する。従って、上で求めた T_c を境に解の振る舞いが変化するため、$T_c = Jz/k_B$ が系の転移温度である。

注釈.— 2 次元での厳密な相転移は

$$T_c = \frac{2J}{k_B \log\left(\sqrt{2}+1\right)} \simeq 2.3J/k_B \tag{2}$$

である。平均場近似の $T_c = 4J/k_B$ とはずれている。

以降の小問では、ゼロ磁場 $H=0$ (あるいはその極限) を考える。
(1) 転移温度付近 $T \simeq T_c$ での振る舞いを調べよう。平均場 Hamiltonian $H_{\mathrm{MF}}(\{\sigma_i\})$ の下での平衡状態における自由エネルギー密度 $f(\beta;m)$ (ただし、磁化を $m = \mu_0 \langle\sigma\rangle$ で定義する) を考える。$T \simeq T_c$ では $m \simeq 0$ であることから、m は十分小さいとして 4 次までの級数展開を行うと

$$f(\beta;m) \simeq f_0(\beta) + a(\beta)m^2 + b(\beta)m^4$$

が得られる。この時の係数 $a(\beta), b(\beta)$ を求めよ。また、$T<T_c, T>T_c$ での自由エネルギー密度のグラフの概形から、$T<T_c$ で自発磁化 $m \neq 0$ が現れること (自発的対称性の破れ) を説明せよ。

解答.—

$$\begin{aligned}
f(\beta;m) &= \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N}\left(-\frac{1}{\beta}\ln Z_{\mathrm{ML}}(\beta,0)\right) \\
&= -\frac{1}{\beta}\ln\left(2e^{-\beta Jz\langle\sigma\rangle^2/2}\cosh\beta Jz\langle\sigma\rangle\right) \\
&= -\frac{1}{\beta}\ln 2 + \frac{1}{2}Jz\mu_0^{-2}m^2 - \frac{1}{\beta}\ln\cosh\beta Jz\mu_0^{-1}m
\end{aligned}$$

である。ここで、$x \to 0$ において

$$\ln\cosh x = \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{12}x^4 + \mathcal{O}\left(x^6\right)$$

より

$$f(\beta;m) = -\frac{1}{\beta}\ln 2 + \frac{1}{2}Jz(1-\beta Jz)\mu_0^{-2}m^2 + \frac{1}{12}\beta^3(Jz)^4\mu_0^{-4}m^4$$

となる。従って、係数 $a(\beta), b(\beta)$ は

$$a(\beta) = \frac{1}{2}Jz(1-\beta Jz)\mu_0^{-2}, \quad b(\beta) = \frac{1}{12}\beta^3(Jz)^4\mu_0^{-4} > 0$$

である。

この時、m についての 4 次関数 $f(\beta;m)$ の取りうる形は図のように、極値を 1 つ持つか 3 つ持つかの場合に分けられ、それらは $a(\beta)$ の符号によって決まる。すなわち $\beta_c = 1/(Jz)$ として [前段 (2) の

結果と一致] 、$\beta < \beta_c$ ($T > T_c = 1/(k_B\beta_c)$) では $a(\beta) > 0$ であるため、$f(\beta;m)$ は図のように $m = 0$ にのみ極小値を持つ。平衡状態では自由エネルギーの最も低い状態が実現されるため、この時は磁化が生じない。一方で、$\beta > \beta_c$ ($T < T_c = 1/(k_B\beta_c)$) では、$m = 0$ の他に $m \neq 0$ の極値が対称に 2 つ現れ、それらの自由エネルギーは $m = 0$ の時よりも低い。従って、安定な $m \neq 0$ のうち一方の状態が実現され自発磁化を生じる (自発的対称性の破れ)。

(2) 低温側から T を T_c に近づけたときの磁化 m 、および高温側から T を T_c に近づけたときの感受率 χ の温度依存性が

$$m \propto (T_c - T)^{\beta} \quad (\beta = 1/2), \quad \chi \propto (T - T_c)^{-\gamma} \quad (\gamma = 1)$$

となることを示せ。また、1 スピンあたりの比熱 c が転移点で発散せずに跳びを持つことを示せ (高温から近づいた時は $c \propto (T - T_c)^{\alpha}$, $\alpha = 0$)。これらの指数 α, β, γ は臨界指数と呼ばれる。

解答.— まず、磁化 m の振る舞いを考える。$T \to T_c - 0$ において、磁化 m は $f(\beta;m)$ の極小値を与える m である。

$$\begin{aligned}\frac{\partial f(\beta;m)}{\partial m} &= Jz(1-\beta Jz)\mu_0^{-2}m + \frac{1}{3}\beta^3(Jz)^4\mu_0^{-4}m^3 \\ &= \frac{1}{3}\beta^3(Jz)^4\mu_0^{-4}m\left(m^2 - 3\mu_0^2(Jz)^{-3}\beta^{-3}(\beta Jz - 1)\right)\end{aligned}$$

より、$\frac{\partial f(\beta;m)}{\partial m} = 0$ を与える $m > 0$ の解 (極小値を与える) は、温度依存性だけに着目すると

$$\begin{aligned} m &= \sqrt{3\mu_0^2(Jz)^{-3}\beta^{-3}(\beta Jz - 1)} \\ &\propto \sqrt{\beta^{-3}(\beta Jz - 1)} \\ &\propto \beta^{-2}\sqrt{Jz/k_B - 1/(\beta k_B)} \\ &\propto (T_c + (T - T_c))^2\sqrt{T_c - T}\end{aligned}$$

である。係数において $|T - T_c| \ll T_c$ より、$m \propto (T_c - T)^{\beta} \quad (\beta = 1/2)$ が導かれる。

次に感受率 χ を考えよう。$H \neq 0$ の時の自由エネルギーを計算する。分配関数

$$\begin{aligned} f(\beta, H; m) &= \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\left(-\frac{1}{\beta}\ln Z_{\mathrm{ML}}(\beta, H)\right) \\ &= -\frac{1}{\beta}\ln\left(2e^{-\beta Jz\langle\sigma\rangle^2/2}\cosh\beta(Jz\langle\sigma\rangle + \mu_0 H)\right) \\ &= -\frac{1}{\beta}\ln 2 + Jz\mu_0^{-2}m^2 - \frac{1}{\beta}\ln\cosh\beta(Jz\langle\sigma\rangle + \mu_0 H)\end{aligned}$$

について、同じように $\mathcal{O}(m^2, H)$ まで展開すると、

$$\begin{aligned} f(\beta, H; m) &= -\frac{1}{\beta}\ln 2 + Jz\mu_0^{-2}m^2 - \frac{1}{2}\beta(Jz\langle\sigma\rangle + \mu_0 H)^2 + o(m^2, H) \\ &= -\frac{1}{\beta}\ln 2 + \frac{1}{2}Jz(1-\beta Jz)\mu_0^{-2}m^2 - \beta JzmH + o(m^2, H)\end{aligned}$$

極小を与える m は再び $\frac{\partial f(\beta;m)}{\partial m} = 0$ を考えると、

$$m = \frac{\mu_0^2\beta JzH}{Jz(1-\beta Jz)} + \mathcal{O}(H^2)$$

である。従って、感受率 χ は

$$\begin{aligned}\chi &= \left.\frac{\partial m}{\partial H}\right|_{H=0} \\ &= \frac{\mu_0^2 \beta J z}{Jz(1-\beta Jz)} \\ &\propto (1-\beta Jz)^{-1} \\ &\propto \beta^{-1}(1/(k_B\beta) - Jz/k_B)^{-1} \\ &\propto (T_c + (T-T_c))(T-T_c)^{-1}\end{aligned}$$

$T - T_c$ に関して最も主要な項に着目すると、

$$\chi \propto (T-T_c)^{-\gamma} \quad (\gamma = 1)$$

となる。

最後に比熱 c を考える。$H=0$ におけるスピンあたりのエネルギー $e(\beta)$ は

$$\begin{aligned}e(\beta) &= -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_{\mathrm{MF}}(\beta,0) \\ &= -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\left(2e^{-\beta Jz\langle\sigma\rangle^2/2}\cosh\beta Jz\langle\sigma\rangle\right) \\ &= \frac{1}{2}Jz\mu_0^{-2}m^2 - Jz\mu_0^{-1}m\tanh\beta Jz\mu_0^{-1}m \\ &= \frac{1}{2}Jz\mu_0^{-2}m^2 - (Jz)^2\mu_0^{-2}m^2\beta \\ &= \frac{1}{2}\mu_0^{-2}Jzm^2(1-2\beta Jz)\end{aligned}$$

である。ここで、磁化 $m = m(\beta)$ は温度に依存することに留意する。$T > T_c$ の時 $m = 0$ より $e(\beta) = 0$ である。故に比熱 c は

$$c(T) = \frac{\mathrm{d}e(\beta)}{\mathrm{d}T} = 0 = \mathrm{Const.}$$

である。一方で、$T < T_c$ の時は $m^2 = 3\mu_0^2(\beta Jz)^{-3}(\beta Jz - 1)$ であるので、

$$\begin{aligned}e(\beta) &= \frac{3}{2}Jz(\beta Jz)^{-3}(1-2\beta Jz)(\beta Jz - 1) \\ &= \frac{3}{2}Jz(\beta Jz)^{-3}(1-2\beta Jz)\frac{T_c - T}{T}\end{aligned}$$

であるので、比熱 $c(T)$ は T_c 近傍で

$$\begin{aligned}c(T) &= \left.\frac{\mathrm{d}e(\beta)}{\mathrm{d}T}\right|_{T\to T_c-0} + \mathcal{O}(T_c - T) \\ &= \frac{3}{2}Jz(\beta_c Jz)^{-2}(1-2\beta_c Jz)Jz\left(-\frac{1}{T_c}\right) + \mathcal{O}(T_c - T) \\ &= \frac{3}{2}k_B\end{aligned}$$

で定数であり、$T > T_c$ の場合から有限のとび $3k_B/2$ を持つ。

注釈.— 平均場近似では

$$\alpha = 0, \quad \beta = 1/2, \quad \gamma = 1 \tag{3}$$

であり、次元によらない。2 次元厳密解では、

$$\alpha = 0, \quad \beta = 1/8, \quad \gamma = 7/4 \tag{4}$$

となっている。3 次元数値計算解では

$$\alpha \simeq 0.11, \quad \beta \simeq 0.33, \quad \gamma \simeq 1.24 \tag{5}$$

スケーリング不等式

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \tag{6}$$

(3) これまでの設問では強磁性的な場合 $(J > 0)$ を考えてきた。反強磁性的な場合 $(J < 0)$ も、同じように相転移は起きると言えるだろうか？理由も併せて答えよ。

解答.— 一辺の長さ L の d 次元立方格子上でスピン σ_i の位置を $(x_1^i, x_2^i, \ldots, x_d^i) \in \{0, 1, \ldots, L-1\}^d$ で指定する。この時、± 1 を取る新しいスピン変数 σ_i' を

$$\sigma_i' = (-1)^{x_1^i + x_2^i + \ldots + x_d^i} \sigma_i$$

とおくと、隣り合うスピン i, j に関して $\sigma_i \sigma_j = -\sigma_i' \sigma_j'$ を満たす。従って、$H \to 0$ における反強磁性的 $(J < 0)$ なハミルトニアンは

$$H(\{\sigma_i\}) = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j = |J| \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i' \sigma_j' \equiv H'(\{\sigma_i'\})$$

によって、強磁性的 $(|J| > 0)$ なハミルトニアン $H'(\{\sigma_i'\})$ によって記述できる。従って、反強磁性的なハミルトニアンにおいても相転移は起こると期待される。

注釈.— この議論は格子の形に強く依存していることに注意する。立方格子の場合においては $\sigma_i' = (-1)^{x_1^i + x_2^i + \ldots + x_d^i} \sigma_i$ という変換によって、全ての相互作用するスピンの組について符号を反転し、反強磁性的な相互作用を強磁性的なものに変換できた。一方で、どのような変換を施しても、一部の相互作用の係数が反転せず強磁性的なハミルトニアンに変換できないような格子も存在する (例; 三角格子)。このような場合を**フラストレート (frustrate) している**と呼び、スピンアイスなどの特有の物質相が現れることが知られている。

注釈 2.— 強磁性的なスピン系と反強磁性的なスピン系の対応関係は、古典スピン系ではなく量子スピン系を考えることによって破れうる (c.f. Heisenberg 模型, 第 6 回 設問 IV を参照)。

III Ising 模型に関連した模型

(1) 3 次元立方格子上の各サイトを 2 種類の金属原子 A, B のどちらかが必ず占めているような 2 元合金系を考えよう。隣接する原子間には、その種類に応じて 3 種類の相互作用 J_{AA}, J_{AB}, J_{BB} が働くものとする。この模型が定数項を除いて Ising 模型と等価であることを示し、J および $\mu_0 H$ を具体的に求めよ (簡単のため、各原子の総数は非保存であるとする)。

解答.— 各サイト i にスピン変数 $\sigma_i = \pm 1$ を導入し、金属原子 A が占有するとき $\sigma_i = +1$, 金属原子 B が占有するとき $\sigma_i = -1$ を取るものとする。隣り合うサイト i, j を金属原子 A, B のいずれ

かが占有している時のエネルギー h_{ij} は、

$$\begin{aligned} h_{ij} &= \begin{cases} J_{AA} & (\sigma_i = \sigma_j = +1) \\ J_{AB} & (\sigma_i = -\sigma_j = \pm 1) \\ J_{BB} & (\sigma_i = \sigma_j = -1) \end{cases} \\ &= J_{AA}\left(\frac{1+\sigma_i}{2}\right)\left(\frac{1+\sigma_j}{2}\right) + J_{AB}\left(\frac{1+\sigma_i}{2}\right)\left(\frac{1-\sigma_j}{2}\right) \\ &\quad + J_{AB}\left(\frac{1-\sigma_i}{2}\right)\left(\frac{1+\sigma_j}{2}\right) + J_{BB}\left(\frac{1-\sigma_i}{2}\right)\left(\frac{1-\sigma_j}{2}\right) \\ &= \frac{J_{AA}+2J_{AB}+J_{BB}}{4} + \frac{J_{AA}-J_{BB}}{4}(\sigma_i+\sigma_j) + \frac{J_{AA}-2J_{AB}+J_{BB}}{4}\sigma_i\sigma_j \end{aligned}$$

である。故に全系のハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H(\{\sigma_i\}) &= \sum_{\langle i,j \rangle} h_{ij} \\ &= \frac{J_{AA}+2J_{AB}+J_{BB}}{8}Nz + \frac{J_{AA}-J_{BB}}{4}z\sum_{i=1}^{N}\sigma_i + \frac{J_{AA}-2J_{AB}+J_{BB}}{4}\sum_{\langle i,j \rangle}\sigma_i\sigma_j \end{aligned}$$

となる。隣接数 $z = 2d = 6$ より、

$$J = -\frac{J_{AA}-2J_{AB}+J_{BB}}{4}, \quad \mu_0 H = -\frac{3(J_{AA}-J_{BB})}{2}$$

とする Ising 模型と等価である。

(2) 気体分子が 2 次元正方格子上の各サイト上に 1 分子まで吸着できるような状況を考えよう。気体分子の化学ポテンシャルを μ とし、隣り合った格子上の両方に分子が吸着すると $-\phi$ だけエネルギーが下がるとする。この模型が定数項を除いて Ising 模型と等価であることを示し、J および $\mu_0 H$ を具体的に求めよ。

解答.— 各サイト i にスピン変数 $\sigma_i = \pm 1$ を導入し、サイト i に分子が吸着している時を $\sigma_i = +1$, 吸着していない時を $\sigma_i = -1$ とすると、

$$\begin{aligned} H(\{\sigma_i\}) &= \sum_{i=1}^{N}(-\mu)\frac{1+\sigma_i}{2} + \sum_{\langle i,j \rangle}(-\phi)\left(\frac{1+\sigma_i}{2}\right)\left(\frac{1+\sigma_j}{2}\right) \\ &= -\frac{1}{2}N\mu - \frac{1}{8}Nz\phi - \left(\frac{1}{2}\mu + \frac{1}{4}z\phi\right)\sum_{i=1}^{N}\sigma_i - \frac{1}{4}\phi\sum_{\langle i,j \rangle}\sigma_i\sigma_j \end{aligned}$$

と表現できる。故に、

$$J = \frac{1}{4}\phi, \quad \mu_0 H = \frac{\mu + 2\phi}{2}$$

とする Ising 模型と等価である。

IV　相転移と熱力学極限

問題 II の Hamiltonian で記述される Ising 模型で磁場 $H = 0$ の場合を考えると、Hamiltonian $H(\{\sigma_i\})$ は全てのスピン変数を反転させる操作 $\sigma_i \to -\sigma_i$ に対して不変である、すなわち $H(\{-\sigma_i\}) = H(\{\sigma_i\})$ であることが分かる (大局的対称性)。一般に、

$$\hat{H}(\{\sigma_i\}, H) = \hat{H}_0(\{\sigma_i\}) - \mu_0 H \sum_{i=1}^{N} \sigma_i, \quad \hat{H}_0(\{-\sigma_i\}) = \hat{H}_0(\{\sigma_i\})$$

で表される、磁場がない時に大局的対称性を満たすハミルトニアン $\hat{H}(\{\sigma_i\}, H)$ において、有限体積・有限温度の場合に自由エネルギーが $F_N(\beta, H) = F_N(\beta, -H)$ であること、および磁化が $M_N(\beta, 0) = 0$ であることを示せ。

解答.— 分配関数は

$$\begin{aligned} Z_N(\beta, H) &= \sum_{\{\sigma_i\}_i} e^{-\beta H_0(\{\sigma_i\}) + \beta\mu_0 H \sum_i \sigma_i} \\ &= \sum_{\{\sigma_i'\}_i} e^{-\beta H_0(\{-\sigma_i'\}) + \beta\mu_0 H \sum_i (-\sigma_i')} \qquad (\leftarrow \sigma_i' = -\sigma_i) \\ &= \sum_{\{\sigma_i\}_i} e^{-\beta H_0(\{\sigma_i\}) - \beta\mu_0 H \sum_i \sigma_i} \\ &= Z_N(\beta, -H) \end{aligned}$$

を満たす。$F_N(\beta, H) = -(1/\beta) \ln Z_N(\beta, H)$ より、$F_N(\beta, H) = F_N(\beta, -H)$ である。

次に、磁化 $M_N(\beta, H) = \langle \sum_i \sigma_i \rangle$ を考える。

$$\begin{aligned} M_N(\beta, H) &= \sum_{\{\sigma_i\}} \left(\sum_i \sigma_i \right) \frac{e^{-\beta H_0(\{\sigma_i\}) + \beta\mu_0 H \sum_i \sigma_i}}{Z_N(\beta, H)} \\ &= (\beta\mu_0)^{-1} \frac{\partial \ln Z_N(\beta, H)}{\partial H} \end{aligned}$$

である。ここで、分配関数 $Z_N(\beta, H)$ は H に関して偶関数なので、その微分に比例する $M_N(\beta, H)$ は H の奇関数である ($M_N(\beta, H) = -M_N(\beta, -H)$)。従って、$H = 0$ を代入すると $M_N(\beta, 0) = 0$ が得られる。

注釈.— この問題は、有限サイズかつ有限温度の系では自発的対称性の破れが起きないことを意味している。設問 II では平均場近似をもとに有限温度での自発的対称性の破れを議論したが、そのような理論が正しくあるためには熱力学極限でないといけない。

また、現実の系は有限サイズではあるが自発的対称性の破れは実験的に観測される現象である。厳密に外部磁場 H がゼロであるときは確かに磁化がゼロとなり自発的対称性の破れは起きない。しかしながら、実際の実験系においては常に極微小な外場が存在する。系のサイズが無限ではないものの十分大きいとみなせるとき、自発的対称性の破れが起こるパラメータ領域ならば、磁場に対する感受率が十分に大きくなっている。すなわち、無視できるほどの小さな磁場下では、全方向にスピンが揃った状態のうち磁場方向に揃ったものだけがエネルギーが低くなり、その状態が選択されて実現する。これが、一見すると対称性がある有限系に対しても自発的対称性の破れが観測される起源の一つである。