

物性理論特論Ⅱ 第4回

Ising 模型の相転移・臨界現象

川崎猛史

大阪大学 D3 センター/ 大学大学院理学研究科物理学専攻

Last update : May 13, 2025

第4回講義資料目次

1 講義のスケジュール

2 今回の内容

3 Ising 模型の相転移・臨界現象

- 磁性体と Ising 模型
- 平均場近似（分子場近似）
- 平均場近似化における平衡条件
- 自己無撞着方程式の解と相転移
- 磁化展開による臨界指数の導出
- 磁化の安定性

4 Landau 自由エネルギー

- Landau 自由エネルギーの導出
- Landau 自由エネルギーの温度依存性
- 臨界指数 β の再導出

5 まとめ

第4回講義資料目次

1 講義のスケジュール

2 今回の内容

3 Ising 模型の相転移・臨界現象

- 磁性体と Ising 模型
- 平均場近似（分子場近似）
- 平均場近似化における平衡条件
- 自己無撞着方程式の解と相転移
- 磁化展開による臨界指数の導出
- 磁化の安定性

4 Landau 自由エネルギー

- Landau 自由エネルギーの導出
- Landau 自由エネルギーの温度依存性
- 臨界指数 β の再導出

5 まとめ

1. 講義のスケジュール

- 1 4/15 : 第 1 回
- 2 4/22 : 第 2 回
- 3 5/07 : 第 3 回
- 4 5/13 : 第 4 回
- 5 5/20 : 第 5 回
- 6 5/27 : 第 6 回
- 7 6/03 : 第 7 回
- 8 6/10 : 第 8 回
- 9 6/17 : 第 9 回
- 10 6/24 : 第 10 回
- 11 7/01 : 第 11 回
- 12 7/08 : 第 12 回
- 13 7/15 : 第 13 回 7/22 は休講
- 14 7/29 : 第 14 回
- 15 8/5 予備 第 15 回

第4回講義資料目次

1 講義のスケジュール

2 今回の内容

3 Ising 模型の相転移・臨界現象

- 磁性体と Ising 模型
- 平均場近似（分子場近似）
- 平均場近似化における平衡条件
- 自己無撞着方程式の解と相転移
- 磁化展開による臨界指数の導出
- 磁化の安定性

4 Landau 自由エネルギー

- Landau 自由エネルギーの導出
- Landau 自由エネルギーの温度依存性
- 臨界指数 β の再導出

5 まとめ

2. 今回の内容

今回は、磁性体における相転移現象を扱う。

- 磁性体の最も基本的な統計力学モデルである **Ising** 模型 を取り上げる。
- Ising 模型は、磁性体における相転移の本質的特徴を抽出した単純模型である。
- Ising 模型は、二元合金の相分離を記述する Bragg-Williams 模型や、気液転移を記述する格子気体模型と数理的に等価であり、これらの結果には普遍性がある。
- Ising 模型は 1 次元および 2 次元では厳密解が知られているが、3 次元の場合はいまだに未解決である。
- 今回は、相転移模型の近似解法として広く用いられる 平均場理論（分子場近似）を導入する。

第4回講義資料目次

1 講義のスケジュール

2 今回の内容

3 Ising 模型の相転移・臨界現象

- 磁性体と Ising 模型
- 平均場近似（分子場近似）
- 平均場近似化における平衡条件
- 自己無撞着方程式の解と相転移
- 磁化展開による臨界指数の導出
- 磁化の安定性

4 Landau 自由エネルギー

- Landau 自由エネルギーの導出
- Landau 自由エネルギーの温度依存性
- 臨界指数 β の再導出

5 まとめ

3.1. 磁性体と Ising 模型

♣ 磁性体と Ising 模型

- Ising 模型は、常磁性体から強磁性体への相転移を表現する最も基本的な模型である。
- 格子上の各格子点 i にスピン $S_i = \pm 1$ を配置し、隣接スピン j との相互作用エネルギーを

$$-JS_iS_j \quad (1)$$

で与える。 J は交換相互作用定数であり、格子歪み・体積変化は考えないものとする。

- ここで $J > 0$ ならば強磁性秩序、 $J < 0$ ならば反強磁性秩序が低温で形成される。
- 全サイト数を N とすると、微弱な外部磁場 h を含めたハミルトニアンは

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j - h \sum_{i=1}^N S_i \quad (2)$$

と書かれる。ここで $\langle i, j \rangle$ は隣接格子点 i, j に関する重複なしの対を表す。以下 $J > 0$ の場合 を考える。

3.2. 平均場近似 (分子場近似)

♣ 平均場近似 (分子場近似)

- 前節で導入した Ising 模型に対して、平均場近似 (分子場近似) を適用する。
- 平均場近似とは、各自由度のゆらぎが小さいと仮定し、2 次以上のゆらぎ項を無視する近似である。
- ゆらぎを無視する近似操作を行うために、各スピン S_i を平均値 m とゆらぎ δS_i に分解する：

$$S_i = m + \delta S_i \quad (3)$$

3.2. 平均場近似 (分子場近似) (2)

- これをハミルトニアンに代入すると：

$$\begin{aligned}
 H &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} (m + \delta S_i)(m + \delta S_j) - h \sum_{i=1}^N S_i \\
 &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(m^2 + m\delta S_i + m\delta S_j + \delta S_i \delta S_j \right) - h \sum_{i=1}^N S_i \quad (4)
 \end{aligned}$$

- ここで、 $\delta S_i \delta S_j$ は 2 次の微小量であり、**平均場近似ではこれを無視し**、 $\sum_{\langle i,j \rangle}$ が i, j の交換が可能であることに注目すると

3.2. 平均場近似 (分子場近似) (3)

$$\begin{aligned}
 H &\sim H_{\text{MF}} := -J \sum_{\langle i,j \rangle} (m^2 + \underbrace{m\delta S_i + m\delta S_j}_{(*)}) - h \sum_{i=1}^N S_i \\
 &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} (m^2 + \underbrace{2m\delta S_i}_{(*) \text{ の } j \text{ を } i \text{ に交換}}) - h \sum_{i=1}^N S_i \\
 &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \{m^2 + 2m(S_i - m)\} - h \sum_{i=1}^N S_i \\
 &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} (2mS_i - m^2) - h \sum_{i=1}^N S_i \tag{5}
 \end{aligned}$$

3.2. 平均場近似 (分子場近似) (4)

- ここで隣接サイト和の取扱いは隣接数 z を用いて

$$\sum_{\langle i,j \rangle} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \in \partial_i}^z \quad (6)$$

- これにより、ハミルトニアンは：

$$\begin{aligned} H_{\text{MF}} &= -\frac{J}{2} z \sum_{i=1}^N (2mS_i - m^2) - h \sum_{i=1}^N S_i \\ &= -Jzm \sum_{i=1}^N S_i - h \sum_{i=1}^N S_i + \frac{J}{2} zNm^2 \\ &= - \underbrace{(Jzm + h)}_{\text{有効場 (分子場)}} \sum_{i=1}^N S_i + \frac{J}{2} zNm^2 \end{aligned} \quad (7)$$

3.2. 平均場近似 (分子場近似) (5)

となる。

- 以上より、平均場近似により 1 体スピン S_i ごとの独立な問題に帰着できる。
- 有効場 (分子場) が $Jzm + h$ として現れる。

3.3. 平均場近似下における平衡条件

♣ 平均場近似下における平衡条件

■ 平均場ハミルトニアンは

$$H_{\text{MF}} = -(Jzm + h) \sum_i S_i + \frac{1}{2} N z J m^2 \quad (8)$$

であった。

■ このとき、分配関数 Z_{MF} は

$$\begin{aligned} Z_{\text{MF}} &= \sum_{\{S_1=\pm 1\}} \sum_{\{S_2=\pm 1\}} \sum_{\{S_3=\pm 1\}} \cdots e^{-\beta H_{\text{MF}}} \\ &= e^{-\frac{\beta}{2} N z J m^2} \prod_{i=1}^N \sum_{S_i=\pm 1} e^{\beta (Jzm+h) S_i} \\ &= e^{-\frac{\beta}{2} N z J m^2} (2 \cosh \beta (Jzm + h))^N \end{aligned} \quad (9)$$

3.3. 平均場近似下における平衡条件 (2)

- Helmholtz 自由エネルギー F_{MF} は

$$\begin{aligned} F_{\text{MF}} &= -k_{\text{B}}T \log Z_{\text{MF}} \\ &= \frac{1}{2}NzJm^2 - Nk_{\text{B}}T \log (2 \cosh \beta(Jzm + h)) \end{aligned} \quad (10)$$

- 現状では m は外から適当に置いたものであるので熱平衡状態を保証しない。したがって以下の制約条件を科して平衡状態を求める。
- 実際、スピン 1 つあたりの磁化の熱平均は

$$\begin{aligned} \langle S_i \rangle &= \frac{1}{N} \left(\frac{\partial \log Z_{\text{MF}}}{\partial (\beta h)} \right)_T \\ &= \frac{-1}{N} \left(\frac{\partial F_{\text{MF}}}{\partial h} \right)_T \\ &= \frac{-1}{N} (-Nk_{\text{B}}T\beta) \frac{2 \sinh \beta(Jzm + h)}{2 \cosh \beta(Jzm + h)} \\ &= \tanh \beta(Jzm + h) \end{aligned} \quad (11)$$

3.3. 平均場近似下における平衡条件 (3)

である。

- $\langle S_i \rangle = m$ であるので、以下の通り m が満たすべき制約条件に相当する自己無撞着方程式

$$m = \tanh \beta(Jzm + h) \quad (12)$$

をえる。

- 上の自己無撞着方程式は、 F_{MF} の変分問題を解き、この最小を取る m の関係式としても求まる（後半で同様の議論を行う）。

3.4. 自己無撞着方程式の解と相転移

♣ 自己無撞着方程式の解と相転移

ここでは、 $h = 0$ における、温度変化による相転移を考える。

- 自己無撞着方程式の解 $m = m^*$ のうち最も安定な解が平衡状態を特徴づける磁化の値である。
- 解の個数とその安定性は温度に依存して変化する（図 1）：
 - (i) $T > T_c$: $m^* = 0$ のみが解であるのでこれが実現される。
 - (ii) $T < T_c$: $m^* = 0$ および $m^* = \pm m_0$ が解。特に、 $m^* = \pm m_0$ は自発磁化を表し、これが平衡状態として実現される（複数の候補がある場合は安定性の議論が必要）。
 - (iii) $T = T_c$: $m^* = 0$ のみが解であるが、 $y = m$ と $y = \tanh(\beta J z m)$ が接する（臨界点）。

3.4. 自己無撞着方程式の解と相転移 (2)

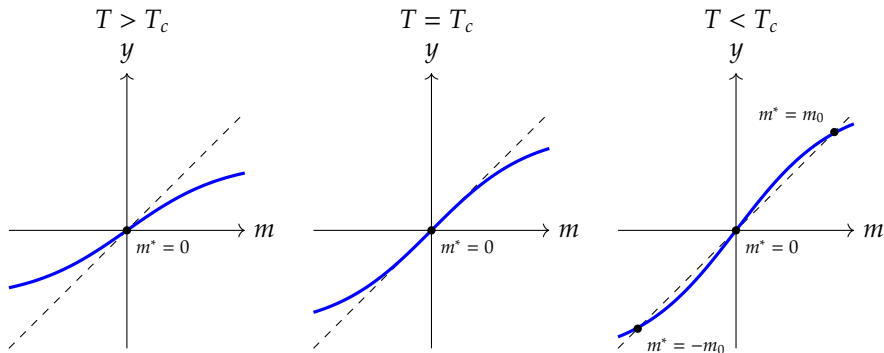


図 1: 温度による秩序変数 m の固定点の変化

3.4. 自己無撞着方程式の解と相転移 (3)

♣ 臨界温度の算出

- 臨界温度 $T = T_c$ では、 $y = m$ と $y = \tanh(\beta J z m)$ が接するので、 $y = \tanh(\beta_c J z m)$ の $m = 0$ における傾きが 1 である。よって

$$\left. \frac{d}{dm} \tanh(\beta_c J z m) \right|_{m=0} = \left. \frac{\beta_c J z}{\cosh(\beta_c J z m)} \right|_{m=0} = \beta_c J z = 1 \quad (13)$$

となるので

$$\boxed{\beta_c = \frac{1}{Jz}} \quad \text{または} \quad \boxed{T_c = \frac{Jz}{k_B}} \quad (14)$$

を得る。

3.5. 磁化展開による臨界指数の導出

♣ 磁化展開による臨界指数の導出

- 臨界点近傍では自発磁化は小さい。したがって m が小さい範囲 ($m \ll 1$) を考えればよく、 \tanh を Maclaurin 展開し

$$\tanh(\beta J z m) \sim \beta J z m - \frac{(\beta J z m)^3}{3} \quad (15)$$

と近似する。ここで m の 1 次までの展開だと以下の議論で自発磁化が見られないため 3 次まで展開する。

- これより自己無撞着方程式は

$$m = \tanh(\beta J z m) \sim \beta J z m - \frac{(\beta J z m)^3}{3} \quad (16)$$

これを m の冪に関する方程式とみなし両辺を整理すると

$$(1 - \beta J z) m + \frac{(\beta J z)^3}{3} m^3 = 0 \quad (17)$$

3.5. 磁化展開による臨界指数の導出 (2)

まず、解 $m = 0$ が見つかる。非自明な解 ($m = m_0 \neq 0$) に対しては

$$(1 - \beta Jz) + \frac{(\beta Jz)^3}{3} m_0^2 = 0 \quad (18)$$

となる。したがって、

$$\begin{aligned} m_0^2 &= \frac{3(\beta Jz - 1)}{(\beta Jz)^3} \\ &= \frac{3(\beta Jz - \beta_c Jz)}{(\beta Jz)^3} \\ &= \frac{3}{(\beta Jz)^2} \left(1 - \frac{\beta_c}{\beta} \right) \\ &= \frac{3}{(\beta Jz)^2} \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right) \end{aligned} \quad (19)$$

3.5. 磁化展開による臨界指数の導出 (3)

これを用いると

$$m_0 \propto \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{\beta_{\text{MF}}=1/2} \quad (20)$$

したがって、自発磁化 m_0 の臨界指数 β_{MF} は

$$\boxed{\beta_{\text{MF}} = \frac{1}{2}} \quad (21)$$

となる。

3.6. 磁化の安定性

♣ 磁化の安定性

- $T < T_c$ における自己無撞着方程式の解に関する相としての安定性を議論する。
- m に関する自己無撞着方程式の解を平均場自由エネルギー

$$F_{\text{MF}}(m) = \frac{1}{2}NzJm^2 - Nk_{\text{B}}T \log(2 \cosh(\beta Jzm)) \quad (22)$$

に代入して、最小を示すものが平衡状態として実現される。

- まず, $m = 0$ に関しては,

$$F_{\text{MF}}(0) = -Nk_{\text{B}}T \log 2 \quad (23)$$

3.6. 磁化の安定性 (2)

- 次に自発磁化に関しては $|m| \ll 1$ に注目するため, \cosh を展開して近似する。さきほどは F_{MF} の微分関数に対して m の 3 次まで評価したので, F_{MF} 自体に対しては m の 4 次まで評価すると

$$\begin{aligned}
 F_{\text{MF}}(m) &\sim \frac{1}{2}NzJm^2 - Nk_{\text{B}}T \log 2 \left(1 + \frac{1}{2}(\beta Jzm)^2 + \frac{1}{24}(\beta Jzm)^4 \right) \\
 &\sim \frac{1}{2}NzJm^2 - \underbrace{\frac{N\beta(Jzm)^2}{2}}_{\text{log の 1 次}} - \underbrace{\frac{N\beta^3}{24}(Jzm)^4 + \frac{N\beta^3}{8}(Jzm)^4}_{\text{log の 2 次}} - Nk_{\text{B}}T \log 2 \\
 &= \underbrace{\frac{N\beta_c(Jzm)^2}{2}}_{1=\beta_c Jz} - \frac{N\beta(Jzm)^2}{2} + \frac{N\beta^3}{12}(Jzm)^4 - Nk_{\text{B}}T \log 2 \\
 &= \frac{N(Jzm)^2}{2}(\beta_c - \beta) + \frac{N\beta^3}{12}(Jzm)^4 - Nk_{\text{B}}T \log 2 \tag{24}
 \end{aligned}$$

3.6. 磁化の安定性 (3)

である。これより、先ほど臨界指数を求めた自発磁化に関して $t := \frac{T_c - T}{T_c} = \frac{(\beta J z m_0)^2}{3}$ を用いて整理すると

$$F_{\text{MF}}(|m_0|) = -\frac{3Nt^2}{4\beta} - Nk_B T \log 2 \quad (25)$$

となるので、 $F_{\text{MF}}(|m_0|) < F_{\text{MF}}(0)$ である。したがって、自発磁化 $m = |m_0|$ が $m = 0$ より安定となる。

表 1: (まとめ) 各温度において得られる秩序

温度範囲	平衡状態	相
$T > T_c$	$m^* = 0$ (無秩序)	常磁性相
$T = T_c$	$m^* = 0$ (無秩序)	臨界点
$T < T_c$	$m^* = \pm m_0$ (秩序)	強磁性相

第4回講義資料目次

1 講義のスケジュール

2 今回の内容

3 Ising 模型の相転移・臨界現象

- 磁性体と Ising 模型
- 平均場近似（分子場近似）
- 平均場近似化における平衡条件
- 自己無撞着方程式の解と相転移
- 磁化展開による臨界指数の導出
- 磁化の安定性

4 Landau 自由エネルギー

- Landau 自由エネルギーの導出
- Landau 自由エネルギーの温度依存性
- 臨界指数 β の再導出

5 まとめ

4.1. Landau 自由エネルギーの導出

♣ Landau 自由エネルギーの導出

- ここでは臨界点近傍における，自由エネルギーの変化に注目する。先ほどと同様に，磁化 m が小さいと仮定することができ，平均場自由エネルギー

$$F_{\text{MF}}(m) = \frac{1}{2}NzJm^2 - Nk_{\text{B}}T \log(2 \cosh(\beta Jzm)) \quad (26)$$

を m について冪級数に展開する。

$$\begin{aligned} F_{\text{MF}}(m) &= \frac{1}{2}NzJm^2 - Nk_{\text{B}}T \left(\log 2 + \frac{(\beta Jzm)^2}{2} - \frac{(\beta Jzm)^4}{12} \right) + O(m^6) \\ &= N \left(\beta_c \frac{(Jzm)^2}{2} - \beta \frac{(Jzm)^2}{2} + k_{\text{B}}T \frac{(\beta Jzm)^4}{12} \right) + \text{const.} + O(m^6) \\ &=: Nf_{\text{L}}(m) \end{aligned} \quad (27)$$

4.1. Landau 自由エネルギーの導出 (2)

- ここで、係数を整理すると

$$f_L(m) = f_L(0) + \frac{a(T)}{2}m^2 + \frac{b(T)}{4}m^4 + O(m^6) \quad (28)$$

という形 (Landau 自由エネルギー) が得られる。

- それぞれの係数は

$$a(T) = (zJ)^2 (\beta_c - \beta) = -(zJ)^2 \frac{T_c - T}{T_c} = -(zJ)^2 t =: a_0 t \quad (29)$$

$$b(T) = \frac{1}{3} (Jz)^4 \beta^3 =: b_0 \quad (30)$$

$a_0 < 0$, $b_0 > 0$ と表される。

- Landau 自由エネルギーは系の対称性に関する現象論的議論からも直ちに得られるが、次回に議論する。

4.2. Landau 自由エネルギーの温度依存性

♣ Landau 自由エネルギーの温度依存性

- ここでは, Landau 自由エネルギー $f_L(m)$ の温度依存性を見る。
- 平衡状態は m に関する最小化を考えればよく, 各温度における相の振る舞いがよくわかる (図 2)。

4.2. Landau 自由エネルギーの温度依存性 (2)

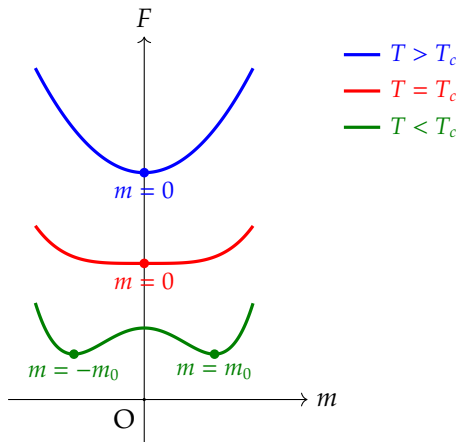


図 2: 各温度領域における自由エネルギーランドスケープと安定な磁化 (点で表した)

4.3. 臨界指数 β の再導出

♣ 臨界指数 β の再導出

- 最後に, Landau 理論を用いて, 臨界指数 β を求めよう。
- 平衡状態は自由エネルギー最小化条件より:

$$\frac{dF}{dm} = a(T)m + b(T)m^3 = 0 \quad (31)$$

非自明解 $m = m_0 \neq 0$ に対して

$$a(T) + b(T)m_0^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad m_0^2 = -\frac{a(T)}{b(T)} \quad (32)$$

が成立する。

4.3. 臨界指数 β の再導出 (2)

- これは $a(T) = a_0 t (a_0 < 0, t = \frac{T_c - T}{T_c})$, $b(T) = b_0 (b_0 > 0$ かつ t 依存性なし) であるから $T < T_c$ において解をもち,

$$m_0 \propto (T_c - T)^{1/2} \quad (33)$$

をえる。すなわち、Landau 理論でも

$$\boxed{\beta_{\text{MF}} = \frac{1}{2}} \quad (34)$$

が得られる。

- また、この極値に対応する状態の安定性に関しては、 $a(T) < 0$ であることを用いると

$$\left. \frac{d^2 F}{dm^2} \right|_{m=m_0} = a(T) + 2b(T)m_0^2 = a(T) + 2b(T)\left(-\frac{a(T)}{b(T)}\right) = -a(T) > 0 \quad (35)$$

であり下に凸で最小をとることから安定である！

第4回講義資料目次

1 講義のスケジュール

2 今回の内容

3 Ising 模型の相転移・臨界現象

- 磁性体と Ising 模型
- 平均場近似（分子場近似）
- 平均場近似化における平衡条件
- 自己無撞着方程式の解と相転移
- 磁化展開による臨界指数の導出
- 磁化の安定性

4 Landau 自由エネルギー

- Landau 自由エネルギーの導出
- Landau 自由エネルギーの温度依存性
- 臨界指数 β の再導出

5 まとめ

5. まとめ

- 磁性体の相転移の簡便模型である Ising 模型を扱った。
- 平均場近似を用いることで、臨界現象を解析し、磁化の臨界指数を計算した。
- さらに自由エネルギーに対する磁化展開を行うことで Landau 自由エネルギーを導出した。

次回：Landau 理論による臨界現象の解析