

Statistical Mechanics

Toshiya Tanaka

April 22, 2022

1 物理で確率を使うこと

1.1 測定精度と確率

Theorem 1.1 (Chebyshev 不等式)

確率分布 \vec{p} , 物理量 f とする. 任意の $\varepsilon > 0$ に対し, 次の不等式が成り立つ.

$$\text{Prob}(|f - \langle f \rangle_{\vec{p}}| \geq \varepsilon) \leq \left(\frac{\sigma_{\vec{p}}[f]}{\varepsilon} \right)^2 \quad (1.1)$$

ここで, $\langle \bullet \rangle$ は期待値で $\sigma[\bullet]$ はゆらぎ (標準偏差) である.

Derivation. まず, 次の量を定める.

$$\theta := \begin{cases} 1, & (|f_i - \langle f \rangle_{\vec{p}}| \geq \varepsilon) \\ 0, & (|f_i - \langle f \rangle_{\vec{p}}| < \varepsilon) \end{cases} \quad (1.2)$$

これは, 物理量の期待値からのズレが, ε より大きいとき 1, そうでないとき 0 を返す関数で, θ の期待値は Eq.(1.1) の左辺の確率に等しい.

ところで, その期待値は

$$\sum_i \theta_i p_i \leq \sum_i \left(\frac{f_i - \langle f \rangle_{\vec{p}}}{\varepsilon} \right)^2 \quad (1.3)$$

$$= \left(\frac{\sigma_{\vec{p}}[f]}{\varepsilon} \right)^2 \quad (1.4)$$

と評価でき, 不等式が示せる. \square

Chebyshev 不等式 (1.1) は次のように解釈することができる. 物理量 f のゆらぎ $\sigma_{\vec{p}}[f]$ が測定精度より十分小さければ, すなわち $\sigma_{\text{vecp}}[f]/\varepsilon \ll 1$ ならば, 測定値 f の期待値 $\langle f \rangle_{\vec{p}}$ からのずれが有意に現れるⁱ. 確率は a.s.ⁱⁱ ゼロである.

1.2 試行回数と確率

Theorem 1.2 (大数の法則)

f を物理量, \vec{p} を一つの系の確率分布とし, 同じ系を N 個考える. 全系の確率分布が $\tilde{\vec{p}}$ とする. このとき, 任意の $\varepsilon > 0$ に対し,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \text{Prob}_{\tilde{\vec{p}}} \left(\left| \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i - \langle f \rangle_{\vec{p}} \right| \geq \varepsilon \right) = 0 \quad (1.5)$$

が成り立つ. すなわち, a.s. で平均値が出ること.

Derivation. 一つの系の物理量 f の期待値を μ , f^2 の期待値を σ^2 とする. このとき, ゆらぎは $\sigma = \sqrt{\nu - \mu^2}$ である. 今, 平均値という物理量を

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i \quad (1.6)$$

ⁱ. 測定の分解能 ε より大きく現れる.

ⁱⁱ. almost surely

とし、この期待値は

$$\langle m \rangle_{\vec{p}} = \mu \quad (1.7)$$

m^2 の期待値は

$$\langle m^2 \rangle_{\vec{p}} = \frac{1}{N^2} \sum_i \sum_j \langle f_i f_j \rangle_{(\vec{p}_i, \vec{p}_j)}. \quad (1.8)$$

これは独立性より、 $i \neq j$ については

$$\langle f_i f_j \rangle = \langle f_i \rangle_{\vec{p}} \langle f_j \rangle_{\vec{p}} \quad (1.9)$$

$$= \mu^2, \quad (1.10)$$

$i = j$ については

$$\langle f_i f_i \rangle = \langle f_i^2 \rangle = \nu \quad (1.11)$$

と計算できて、

$$\langle m^2 \rangle_{\vec{p}} = \frac{1}{N^2} ((N^2 - N)\mu^2 + N\nu) \quad (1.12)$$

となる.ⁱⁱⁱ 全体のゆらぎは

$$\sigma_{\vec{p}}[f] = \sqrt{\frac{\nu - \mu^2}{N}} \quad (1.13)$$

$$= \frac{\sigma_{\vec{p}}[f]}{\sqrt{N}} \quad (1.14)$$

となる. ここで Chebyshev 不等式 (1.1) を用いると、

$$\text{Prob}_{\vec{p}} \left(\left| \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i - \langle f \rangle_{\vec{p}} \right| > \varepsilon \right) = \left(\frac{\sigma_{\vec{p}}[f]}{\sqrt{N}} \right)^2 \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 \quad (1.15)$$

と示せる. □

具体例を一つ.

Example 1.3

$N \sim 10^{24}$ 個のサイコロを振ることを考える. 測定精度を $\varepsilon \sim 10^{-8}$ とすると、平均値

$$m := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i \quad (1.16)$$

が期待値 3.5000000 に一致しない確率は、 $\langle m \rangle = 7/2$, $\langle m^2 \rangle = 35/(12N) + (7/2)^2$, $\sigma[m] = \sqrt{35/12N}$ なので^{iv} Chebyshev 不等式 (1.1) より

$$\text{Prob}(|m - 7/2| > 10^{-8}) < \left(\frac{\sigma}{\varepsilon} \right)^2 \sim \left(\frac{10^{-12}}{10^{-8}} \right)^2 = 10^{-8} \quad (1.17)$$

となる. □

今、 χ をある事象 A が起きたとき 1, そうでないとき 0 を返す関数として、 A が起こる確率は、 $p = \langle \chi \rangle$ である. このとき、大数の法則で $f = \chi$ と置くと、次が成り立つ.

Corollary 1.4

N 回の試行で事象 A が起こる回数を N_A とする. このとき、

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \text{Prob} \left(\left| \frac{N_A}{N} - p \right| \geq \varepsilon \right) = 0 \quad (1.18)$$

が成り立つ.

この系は、 N が大きいとき、 N_A/N の比という物理的なものが、確率 p と a.s. で等しいと解釈できる.

ⁱⁱⁱ. めんどくて添字抜かしたので、考えて.

^{iv}. 大数の法則の導出と同様にできる.

1.3 結論

- Chebyshev 不等式 (1.1) より, 測定値が期待値からずれる確率を具体的に評価できる.
- 大数の法則およびその系より, たくさんあれば物理量の比と確率が a.s. で等しい.

2 Legendre 変換について

2.1 Legendre 変換について

導出として, 凸関数 f に対して, 傾き α の線を引いたとき, f との交点を持った状態で直線の切片を最小にすることを考える. $x = x^*$ を通る直線を引くとき, 直線の方程式は

$$y = \alpha x + f(x^*) - \alpha x^* \quad (2.1)$$

となり, 各 α に対し, 切片の最小値を対応させることを考えると次の定義に至る.

Definition 2.1 (Legendre 変換)

凸関数 $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ に対し, この Legendre 変換 f^* を

$$f^*(\alpha) = -\min_{x \in \mathbb{R}} (f(x) - \alpha x) \quad (2.2)$$

$$= \max_{x \in \mathbb{R}} (\alpha x - f(x)) \quad (2.3)$$

と定める.

このとき, 素直に考えると負符号はつかないように思うが, 凸関数を凸関数に移す対称性を持たせるためにはこれが必要である.

Example 2.2

関数

$$f(x) = \begin{cases} \frac{x^3 + x}{4}, & (0 \leq x \leq 1) \\ x - \frac{1}{2}, & (1 \leq x \leq 2) \\ \frac{x^2}{2} - x + \frac{3}{2}, & (2 \leq x) \end{cases} \quad (2.4)$$

の Legendre 変換は

$$f^*(p) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(\frac{4p-1}{3} \right)^{3/2}, & (1/4 < p < 1) \\ \frac{1}{2} (p^2 + 2p - 2), & (1 \leq p) \end{cases} \quad (2.5)$$

となる.

v.

3 磁性体の統計力学

3.1 方針

大まかな流れは, 次のようである.

1. 分配関数の計算
2. エネルギー, 磁化, 磁化率の期待値の計算
3. 温度, 磁場に対する振る舞いを考察

この方針は変えず, 個々の系に対し様々なテクニックを使う.

v. この例は <https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%83%AB%E3%82%B8%E3%83%A3%E3%83%B3%E3%83%89%E3%83%AB%E5%A4%89%E6%8F%9B> による.

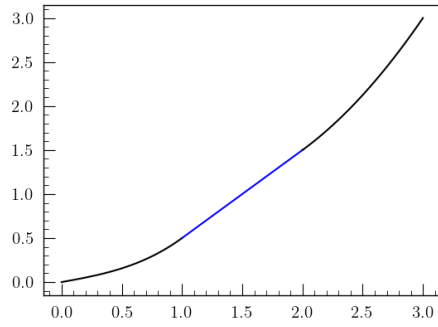


Fig. 1: Legendre 変換前の関数 f .

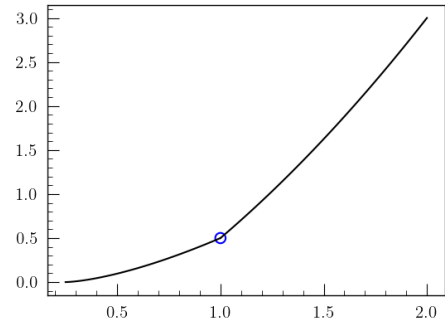


Fig. 2: f を Legendre 変換した関数 f^*

Figure. 1 の青い線部分が, Figure. 2 の一点に潰れていて, 微分不可能点になっている. 熱力学関数にこのようなことが起こるとき, 相転移が起きていることがわかる.

3.2 すべての spin が独立にある場合

N 粒子系を考える. 粒子 j の spin を $\sigma_j = \pm 1$ で指定し, スピン角運動量の固有値は $\pm\mu_0$ とする. 磁場 H 中にある系のエネルギー固有値は

$$E = - \sum_{j=1}^N \mu_0 \sigma_j H \quad (3.1)$$

で, 一つの粒子だけに注目したとき

$$E_j = -\mu_0 \sigma_j H \quad (3.2)$$

である. spin1 つの期待値は期待値の定義から

$$\langle \sigma_j \rangle = \frac{1}{Z_j(\beta)} (\mu_0 e^{\beta \mu_0 H} - \mu_0 e^{-\beta \mu_0 H}) \quad (3.3)$$

$$= \mu_0 \tanh(\beta \mu_0 H) \quad (3.4)$$

である.

独立なので, 一粒子の情報がわかれば十分で, 一粒子の分配関数は

$$Z_j(\beta) = e^{\beta \mu_0 H} + e^{-\beta \mu_0 H} \quad (3.5)$$

$$= 2 \cosh(\beta \mu_0 H) \quad (3.6)$$

である. よって, N 粒子あったとき, 分配関数は

$$Z(\beta) = (2 \cosh(\beta \mu_0 H))^N \quad (3.7)$$

となる. エネルギー期待値は

$$\langle H \rangle = - \frac{\partial}{\partial \beta} \log(2 \cosh(\beta \mu_0 H)) \quad (3.8)$$

$$= -N \mu_0 H \tanh(\beta \mu_0 H) \quad (3.9)$$

である.

Definition 3.1 (磁化)

磁化を

$$m = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \mu_0 \sigma_j \quad (3.10)$$

と定める. スピンの平均値と思ってよい.

Table 1: Eq. (3.19) のスピンを含む箇所の計算結果.

(σ_1, σ_2)	$(1, 1)$	$(1, -1)$	$(-1, 1)$	$(-1, -1)$
$\sigma_1 \sigma_2$	1	-1	-1	1
$\sigma_1 + \sigma_2$	2	0	0	-2
$E_{N=2}$	$-J - 2\mu_0 H$	J	J	$-J + 2\mu_0 H$

磁化の期待値は, Eq. (3.4) と期待値の線形性から

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \mu_0 \langle \sigma_j \rangle \quad (3.11)$$

$$= \mu_0 \tanh(\beta \mu_0 H) \quad (3.12)$$

である.

Definition 3.2 ($H = 0$ での磁化率)

磁化率 χ を

$$\chi = \left. \frac{\partial m}{\partial H} \right|_{H=0} \quad (3.13)$$

と定める. 磁場 H を揺すったときの磁石になりやすさと解釈できる.

磁化率も計算する.

$$\chi = \frac{\mu_0^2}{k_B T} \quad (3.14)$$

となる.

本筋とは外れるが, エントロピーを計算する. そのためにまず, Helmholtz free energy の計算をする.

$$F(\beta, H, N) = -\frac{1}{\beta} \log Z(\beta) \quad (3.15)$$

$$= -N k_B T \log \left(2 \cosh \left(\frac{\mu_0 H}{k_B T} \right) \right) \quad (3.16)$$

ここから, エントロピーが計算できて,

$$S(\beta, H, N) = -\frac{\partial}{\partial T} F(\beta, H, N) \quad (3.17)$$

$$= N k_B \frac{\mu_0 H}{k_B T} \left(\cosh \left(\frac{\mu_0 H}{k_B T} \right) - \log \left(2 \cosh \left(\frac{\mu_0 H}{k_B T} \right) \right) \right) \quad (3.18)$$

となり, H/k_B 単位で現れる. これを用いて, $(T_1, H_1) \rightarrow (T_2, H_2)$ の断熱準静操作を行うとき, エントロピーが不変なので, この単位も不変である. 磁場 H をゆっくり変えることで温度を変えることが^{vi}できる. これを断熱消磁と呼ぶ.

3.3 ペアを形成し, ペア同士は独立な場合

次に, 二つの粒子が相互作用しペアを形成していて, ペア同士は相互作用していない状況を考える. 粒子数 N はわかりやすく. 偶数としておく.

このときのエネルギー固有値は

$$E_\sigma = -J \sum_{j=1}^{N/2} \sigma_{2j-1} \sigma_{2j} - \mu_0 H \sum_{k=1}^N \sigma_k \quad (3.19)$$

とする. 第一項が相互作用による項で Heisenberg 交換相互作用とよばれる.

J は物質による定数で, J が正の場合ペアのスピンは揃いやすく, 負の場合, 反対を向きやすい.

以上の設定で考える.

まず, ペアたちは独立なので, (σ_1, σ_2) だけ選んで考える. Eq. (3.19) にでてくる量を計算し, Table 1 にまとめておく. これで, 分配関数が計算できる.

$$Z(\beta) = e^{-\beta(-J-2\mu_0 H)} + 2e^{-\beta J} + e^{-\beta(-J+2\mu_0 H)} \quad (3.20)$$

$$= 2e^{\beta J} (\cosh(2\beta \mu_0 H) + e^{-2\beta J}). \quad (3.21)$$

^{vi}. 主に低温を作る.

エネルギー期待値は

$$\langle H \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(\beta) \quad (3.22)$$

$$= -\frac{N}{2} \frac{J(e^{-2\beta J} - \cosh(2\beta\mu_0 H)) - 2\mu_0 H \sinh(2\beta\mu_0 H)}{\cosh(2\beta\mu_0 H) + e^{-2\beta J}} \quad (3.23)$$

となる。ここで、 $H = 0$ とすると、

$$\langle H \rangle = -\frac{N}{2} \tanh \beta J \quad (3.24)$$

である。

spin のペアの期待値は

$$\langle \sigma_1 + \sigma_2 \rangle = \frac{1}{Z(\beta)} \left(2e^{\beta(J+2\mu_0 H)} - e^{-\beta(J-2\mu_0 H)} \right) \quad (3.25)$$

$$= \frac{2 \sinh(2\beta\mu_0 H)}{\cosh(2\beta\mu_0 H) + e^{-2\beta J}} \quad (3.26)$$

磁化は

$$\langle m \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_j \right\rangle \quad (3.27)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N/2} \langle \sigma_{2j-1} \sigma_{2j} \rangle \quad (3.28)$$

$$= \frac{\sinh(2\beta\mu_0 H)}{\cosh(2\beta\mu_0 H) + e^{-2\beta J}} \quad (3.29)$$

$$= \frac{2\beta\mu_0^2 H + \mathcal{O}((\beta\mu_0 H)^3)}{1 + \mathcal{O}((\beta\mu_0 H)^2) + e^{-2\beta\mu_0 H}} \quad (3.30)$$

となる。最後は磁化率を求めるために H を含む幕で展開した。

磁化率は H で微分して $H = 0$ とするので、二次以上の項は消えて、

$$\chi(\beta) = \left. \frac{\partial \langle m \rangle}{\partial H} \right|_{H=0} \quad (3.31)$$

$$= \frac{2\beta\mu_0^2}{1 + e^{2\beta J}} \quad (3.32)$$

となる。

3.4 1-d Ising model

エネルギー固有値は

$$E_\sigma = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \mu_0 H \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (3.33)$$

とする。ここで、 $\langle i, j \rangle$ は隣り合う i, j に関して和をとることを表し、周期的境界条件 $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ を入れると、

$$E_\sigma = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - \mu_0 H \sum_{i=1}^N \left(\frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2} \right) \quad (3.34)$$

と書き換えることができる。

分配関数は

$$Z(\beta) = \sum_{\sigma} e^{E_{\sigma}} \quad (3.35)$$

$$= \sum_{\sigma} e^{\sum_{i=1}^N (\beta J \sigma_i \sigma_{i+1} + \beta \mu_0 H (\sigma_i + \sigma_{i+1})/2)} \quad (3.36)$$

$$= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N e^{\beta J \sigma_i \sigma_{i+1} + \beta \mu_0 H (\sigma_i + \sigma_{i+1})/2} \quad (3.37)$$

$$= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N M_{\sigma_i, \sigma_{i+1}} \quad (3.38)$$

となる。行列 M は転送行列とよばれ、

$$M = \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta \mu_0 H} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta \mu_0 H} \end{pmatrix} \quad (3.39)$$

である。さらに分配関数は計算できて、

$$Z(\beta) = \text{Tr} (M^N) \quad (3.40)$$

$$= \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (3.41)$$

で、 λ_{\pm} は転送行列の固有値で

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \cosh \beta \mu_0 H \pm \sqrt{e^{2\beta J} \cosh^2 \beta \mu_0 H - 2 \sinh \beta J} \quad (3.42)$$

である。

これを用いて、各物理量を求める。自由エネルギー密度は

$$f_N(\beta) = -\frac{1}{\beta N} \log Z(\beta) \quad (3.43)$$

$$= -\frac{1}{\beta} \log \lambda_+ - \frac{1}{\beta N} \log \left(1 + \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right) \quad (3.44)$$

なので、 $N \rightarrow \infty$ で $f(\beta) = -\log \lambda_+ / \beta$ となる。

磁化は

$$m(\beta, H) = \frac{\mu_0 \sinh \beta \mu_0 H}{\sqrt{\sinh^2 \beta \mu_0 H + e^{-4\beta J}}} \quad (3.45)$$

で、磁化率は

$$\chi(\beta) = \beta \mu_0^2 e^{2\beta J} \quad (3.46)$$

である。

これらは連続関数で 1-d Ising model は相転移を起こさないこと^{vii}がわかる。

3.5 2-d Ising model

二次元では相転移を起こす。しかし、直接解くのは大変である^{viii}。

他の状況でも使える、かなり雑だが有用な近似である平均場近似の方法と相転移温度を正しく導出できる Kramers–Wannier 双対性を用いた議論^{ix}を行うことにする。

3.5.1 平均場近似

d 次元の Ising 模型を考える。任意に格子点を選び、その上のスピン変数を σ_0 と呼ぶことにする。このスピンの最近接の点は $2d$ 個ある。これらを σ_i , $i = 1, \dots, 2d$ と呼び、 σ_0 に着目したエネルギーを考えると

$$E_{\sigma_0} = \left(-J \sum_{i=1}^{2d} \sigma_i - \mu_0 H \right) \sigma_0 \quad (3.47)$$

vii. 強いていえば、 $\beta \rightarrow \infty$ で発散するので、絶対零度が相転移点ということもできる。

viii. 2022/04/19 時点では私は解けていない。

ix. 元ネタは 2020 年度現代物理学第 9 回。 <https://member.ipmu.jp/yuji.tachikawa/lectures/2020-komaba/>

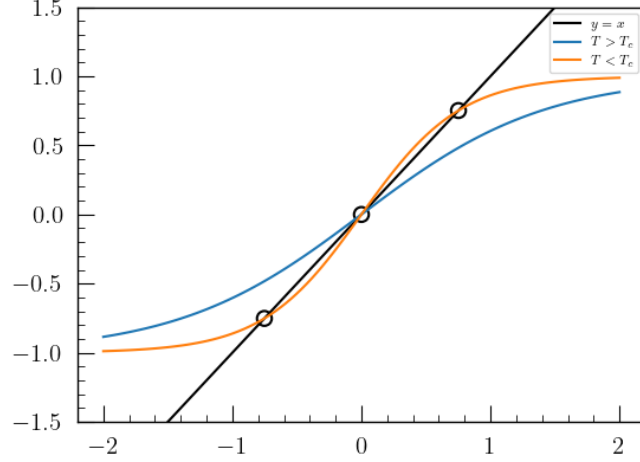


Fig. 3: bootstrap 方程式 (3.51) の左辺と右辺の概形。白丸が解で、パラメータ β によって解の振る舞いが変わることがわかる。対称性があるにもかかわらず、低温領域では $\psi = 0$ ではない部分に non trivial な解をもつ。このような状況を SSB(Spontaneous Symmetry Breaking) という。

である。ここで、 $\sum_{i=1}^{2d} \sigma_i \rightarrow 2d\psi$ と置き換える。 $\psi = \sum_{i=1}^{2d} \sigma_i / (2d)$ でスピンの期待値である。ゆらぎのある確率変数を定数で置き換えたもので、これが平均場近似の第一ステップである。

この分配関数は

$$Z_{\sigma_0}(\beta) = 2 \cosh(2d\beta J\psi + \beta\mu_0 H) \quad (3.48)$$

であり、 σ_0 の期待値は

$$\langle \sigma_0 \rangle = \tanh(2d\beta J\psi + \beta\mu_0 H) \quad (3.49)$$

である。ところが、 σ_0 は任意に取ったので、期待値は $\langle \sigma_0 \rangle = \psi$ のように思える。これが平均場近似の第二ステップである。

結局、平均場近似では

$$\psi = \tanh(2d\beta J\psi) \quad (3.50)$$

を ψ について解くことに帰着する。このような方程式を bootstrap 方程式^{*}という。

特に、 $H = 0, d = 2$ の状況を考える。bootstrap 方程式は

$$\psi = \tanh(4\beta J\psi) \quad (3.51)$$

である。この解は Figure 3.51 のようにパラメータ β によって振る舞いかわり、 \tanh の原点での傾き $4\beta_{\text{mf}}J = 1$ が分岐点になっている。すなわち、平均場近似での臨界点は

$$\beta_{\text{mf}}J = \frac{1}{4} = 0.25 \quad (3.52)$$

であり、後述する正しい値 (Eq. (3.65)) とは異なる。

3.5.2 Kramers–Wannier 双対性

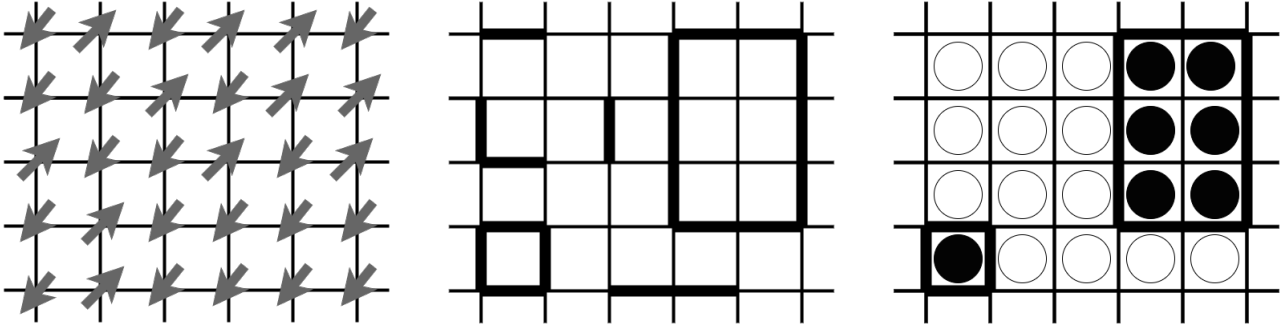
ここでは見やすさの都合上、分配関数を $\beta J =: K$ の関数と見て考えることにする。また、外部磁場 $H = 0$ とする。

ひたすら分配関数を書き換えてゆく。Figure 4 に操作の手順をまとめた。まず、

$$e^{K\sigma_i\sigma_j} = \cosh K \sum_{t \in \{0,1\}} (\sigma_i\sigma_j \tanh K)^t \quad (3.53)$$

と書き換える。よくわからないが、正しいことは少し計算すればわかる。これは各スピンのペアに対して定まり、ペアに関して積をとることはそれらを結ぶ辺について積をとることと同じであることに注意すると、次のように書き換えることができる。

^{*} self-consistent 方程式というほうが多い気もするが、bootstrap のほうがおしやれで好き。沼に落ちたとき自分で自分の靴紐を引っ張って脱出することが語原らしい。



(a) 2次元 Ising 模型. 格子「点」上にスピンの並んでいる.
 (b) 各辺に 0, 1 を割り当てる (Eq. (3.56)). この図においては太線が 1 と思うことにする.
 (c) 寄与があるのは太い閉曲線のみ (Eq. (3.60)). 閉曲線の中と外という二つの状態があるので, 格子の「中」に黒丸と白丸の新しいスピンがあると思える (Eq. (3.63)).

Fig. 4: Kramers-Wannier 双対性の分配関数の操作の概略.

$$Z(K) = \sum_{\sigma} e^{K \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j} \quad (3.54)$$

$$= \sum_{\sigma} \prod_{\langle i,j \rangle} e^{K \sigma_i \sigma_j} \quad (3.55)$$

$$= (\cosh K)^{2N} \sum_{\sigma} \sum_{\{t\}} \prod_{\text{辺}} (\sigma_i \sigma_j \tanh K)^t \quad (3.56)$$

$\sum_{\{t\}}$ は, 各辺に 0, 1 を割り当てるすべての配位に関する和で, $\prod_{\text{辺}}$ は一つ選んだ配位に関して積をとる操作である. この積について, $t=0$ が与えられた辺は 1 で寄与する. $t=1$ が与えられた配位について考える. 先に σ についての和をとることを考える. これは有限和なので, 文句なしに可能である. このとき, 各 σ_i でくくると, $n \in \mathbb{Z}$ とすると

$$\sum_{\sigma_i = \pm 1} \sigma_i^{2n-1} = 0, \quad (3.57)$$

$$\sum_{\sigma_i = \pm 1} \sigma_i^{2n} = 2 \quad (3.58)$$

であるので, $t=1$ が偶数個集まる点からは $2 \tanh K$ で寄与する. 模型に対応付けると, $t=1$ の線が一つだけ集まることは線の端があることに対応して, 一つでもこれがあると積はゼロになるので, 閉曲線になっているところだけが積に寄与することになる.

結局, 分配関数は

$$Z(K) = (\cosh K)^{2N} \sum_{\{\text{閉曲線}\}} (2 \tanh K)^{\text{閉曲線の長さ}} \quad (3.59)$$

$$= (2 \cosh K)^{2N} \sum_{\{\text{閉曲線}\}} (2 \tanh K)^{\text{閉曲線の長さ}} \quad (3.60)$$

となる. ここで, 格子には閉曲線の中と外という二つの状態ができる. これをスピンの上下に対応させることを考える. このスピン配位を μ と書くことにする.

今, 閉曲線に関して和を取っているが, これはスピンの配位 μ に関して和を取っているとおもってもよい. また, 閉曲線周りでは隣接するスピンは逆向きで, $\mu_i \mu_j = -1$ になるので, $(1 - \mu_i \mu_j)/2$ で隣接する i, j について和をとると閉曲線で 1, そうでない場所で 0 と区別ができる. さて, 分配関数は

$$Z(K) = (2 \cosh K)^{2N} \sum_{\{\mu\}} \prod_{\text{辺}} (\tanh K)^{(1 - \mu_i \mu_j)/2} \quad (3.61)$$

$$= (2 \cosh K)^{2N} (\tanh K)^N \sum_{\mu} \prod_{\langle i,j \rangle} (\tanh K)^{\mu_i \mu_j / 2} \quad (3.62)$$

$$= (\sinh 2K)^{N/2} Z(K') \quad (3.63)$$

と変形できる. ここで, $e^{K'} = \tanh^{-1/2} K$ とおいた. つまり, パラメータ K の二次元イジングモデルは K' の二次元イジングモデルと関係していることがわかる. この関係を Kramers-Wannier 双対性 [KW41] という.

さて、この変換を二回行くと

$$Z(K) = (\sinh K \sinh K')^N Z(K) \quad (3.64)$$

となるので、 $\sinh 2K \sinh 2K' = 1$ でないといけない。sinh は単調関数なので、変なことが起こるとすれば $K = K'$ と予想できる。これを解くと、

$$K_c = \frac{1}{2} \log(1 + \sqrt{2}) \sim 0.4407 \quad (3.65)$$

となる。この解は正しい臨界温度を与えることが知られている。

References

- [KW41] H. A. Kramers and G. H. Wannier, *Statistics of the two-dimensional ferromagnet. part i*, **Phys. Rev.** **60** (1941) 252–262.