

相転移と臨界現象～Ising 模型を題材に～

Physics Lab. 2021 物性班 石井敬直

2021 年 5 月 12 日

目次

1	相転移の不思議さ	2
2	統計力学とは	2
3	強磁性体の相転移	3
3.1	磁性体の分類	3
3.2	強磁性体の相転移	3
3.3	磁性の仕組み～スピン～	5
4	Ising 模型	6
4.1	Ising 模型の定義	6
4.2	統計力学による計算手法	7
4.3	1 次元 Ising 模型	8
4.4	2 次元 Ising 模型	10
4.5	高次の Ising 模型	19
4.6	Ising 模型のシミュレーション	19
5	おわりに	21

1 相転移の不思議さ

相転移は私たちの生活とも縁の深い物理現象です。例えば、水 (H_2O) の 3 体である固体 (氷)、液体 (水)、気体 (水蒸気) の間の相転移は、氷の融解、水の蒸発、降雨や降雪などの形で日々目にしています。また、ドライアイスは二酸化炭素 (CO_2) の固体で常温常圧で固体から直接気体に変化しますが、この相転移を「昇華」と呼びます。ドライアイスからもくもくと立ち上る白い煙を見たことがあると思いますが、ここでは実は 2 種類の相転移が起こっています。二酸化炭素の昇華と同時に、ドライアイスで空気が冷やされることによって水蒸気の凝集も起こっており、この水蒸気が白い煙の正体です。

身の回りで当たり前のように知っている相転移ですが、立ち止まって考えると実に不思議な現象です。水が 3 体の間を状態変化するとき、水分子の構造は全く変化していません。それにも関わらず、1 気圧ではいつも 0 度で氷から水へとがらっと性質が変わります。より物理的に記述すると、相転移の際には密度や比熱などの物理量が不連続に変化します。物質を構成している原子や分子自体は変わっていないにも関わらずマクロな物理量に不連続な変化が相図の中の決まった点で起こるのはどうしてでしょうか？統計力学という学問分野では、このような相転移の非自明さを理論的に説明しようと試みます。

2 統計力学とは

物理では大別してミクロな視点とマクロな視点の 2 種類があります。(もちろんメゾスコピック系などの中間領域もありますが) ミクロな視点では、物質を原子・分子、さらには電子と原子核へと分割していきます。ミクロな領域は主に量子力学の法則で記述できます。ミクロな領域で成り立つ法則が分かっているならば、物質はそれらの法則に従う原子・分子の集まりに過ぎないのだから、物質の性質も理論的に説明できると思うかもしれません。しかし、現実はその甘くはありません。量子力学の基礎方程式であるシュレディンガー方程式は、一般に多粒子系では解析的に解くことができず、粒子が 3 つの場合ですら一般解は求められません。物質は原子・分子がだいたいアボガドロ数 (約 6.0×10^{23}) 個集まったものですから、解析的に解くことはもはや絶望的です。

では、マクロな物質の性質は何もわからないかと言えば、そうではありません。興味深いことに、温度、体積、圧力、粒子数などのマクロな物理量の間には関係式や法則が存在することが知られています。これらの知識を体系的にまとめたものが熱力学です。

ただし、熱力学の法則に従っている物質も、ミクロに見るとあくまで量子力学に従う粒子の集まりで、この二つの学問には何等かの関係性があるはずで、このように、量子力学と熱力学の橋渡しをしようとするのが「統計力学」と呼ばれる分野なのです。しかし、先ほどもいったように量子

力学の方程式を愚直に解くといったアプローチはできないので、確率的な考え方をを用います。これが「統計」力学と呼ばれる所以です。

本記事では、線形代数や偏微分のみを前提知識として統計力学を用いた相転移の議論の一端を紹介いたします。ただ、統計力学による相転移の理論的研究は未だ発展の途上であり、未解明の部分が多く残されています。例えば、冒頭で述べた水の状態変化さえ未だに満足に説明できておらず、水の相図は未だに実験的にも理論的にも研究が続けられています。(固体の中にもいくつもの相があることが知られています。) よって、ここでは最も単純な系である強磁性体の相転移を取り扱います。

3 強磁性体の相転移

3.1 磁性体の分類

磁性体には反磁性体、常磁性体、強磁性体の3種類があります。磁性体に外部から磁場をかけると磁氣的に分極しますが、このことを「磁化」といいます。

- 反磁性体 (ビスマス、銅、水など)
外部磁場が無いときには磁化を持たず、磁場をかけたときに逆向きに磁化される物質 (負の磁化率を持つ)
- 常磁性体 (マグネシウム、アルミニウムなど)
外部磁場が無いときには磁化を持たず、磁場をかけたときにその方向に磁化される物質 (正の磁化率を持つ)
- 強磁性体 (鉄、ニッケル、フェライト磁石など)
磁場をかけたときに非常に大きい正の磁化率を持つ。外部磁場を0に戻しても磁化を保持することができる。(鉄くぎを永久磁石にくっつけると、永久磁石から離れたあともしばらく磁力を持つことがあるのを思い出してみてください)

強磁性体はキュリー温度と呼ばれる転移温度/臨界温度を超えると常磁性体へ相転移を起こします。強い磁力を持つ永久磁石も、キュリー温度以上に加熱してしまうと途端に磁力を失います。今回は強磁性体から常磁性体への相転移に着目して話を進めます。

3.2 強磁性体の相転移

強磁性体と常磁性体の違いをもう少し詳しく見てみましょう。図1は、強磁性体にかけられる磁場 H と磁化 M の関係を表したものです。これを $M-H$ 曲線と呼びます。強磁性体は非常に大きい正の磁化率を持ち、また正の磁場をかけたのちに0に戻しても、正の磁化を保持します (図の赤線部分)。一方で負の磁場をかけたあとに0に戻すと、負の磁化を保持します (図の青線部分)。そして、磁場の向きが変わるときに磁化が非連続的に変化します (理想的には磁場が0の点で磁化の正負が変わりますが、実際には磁場の向きが変わってもすぐに磁化が反転するとは限りません)。

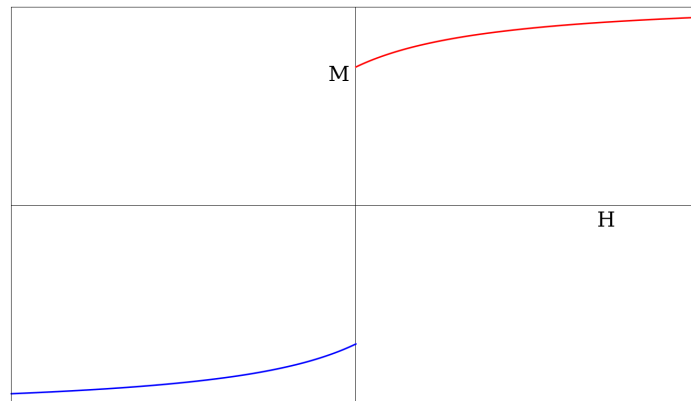


図1 強磁性体の $M - H$ 曲線

一方で常磁性体の場合は、図2のように同じ大きさの磁場であっても磁化は強磁性体よりはるかに小さく、また磁場が0の点で磁化も0になり、非連続的な磁化の変化は起きません。

よって強磁性体と常磁性体を区別するには、磁場を変化させたときに磁化が不連続になる点の有無を見ればよいこととなります（もちろん磁化の大きさとで区別する方法も考えられますが、強磁性体と常磁性体の境界をどう定義するのが少々恣意的になるので、不連続点の有無での区別の方が自然です）。

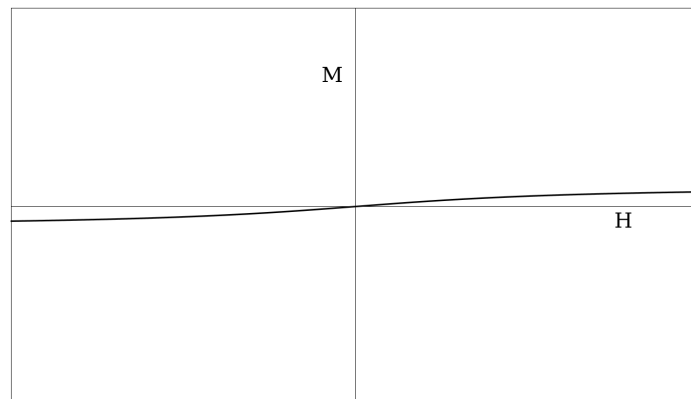


図2 常磁性体の $M - H$ 曲線

さて、前節で述べたように強磁性体はキュリー温度と呼ばれる温度を超えると常磁性体へ相転移を起こします。例えば、磁場 $H = 0$ の際に温度 T と磁化 M の関係を見ると、以下の図3のようになります。まず低温領域では、磁場 $H = 0$ のとき正の磁場をかけてから0に近づけたのか、負の磁場をかけてから0に近づけたのかで2通りの値が存在しました。一方で、高温領域では $H = 0$ で $M = 0$ となるので、図3は低温領域では強磁性体で高温領域では常磁性体であることを表しています。

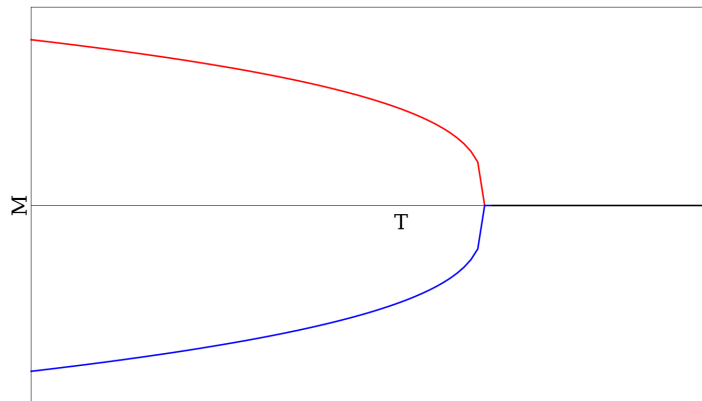


図3 強磁性体の $H = 0$ のときの温度と磁化の関係

3.3 磁性の仕組み～スピン～

さて、物質が磁化を持つとき、ミクロには何が起きているのでしょうか？電子はスピンと呼ばれる量を持っており、磁場を形成しています。原子にはいくつかの電子が含まれているので、原子は全体としてスピンを持つ場合があります。常磁性体では、物質中で原子のスピンはランダムな方向を向いており、全体として磁化は0になっています。ただし、外部磁場をかけていくと、やはりスピンは整列しないものの、磁場の方向にむいているものが増え、平均して正の磁化を持ちます。反磁性体ではこれと逆のことが起きています。

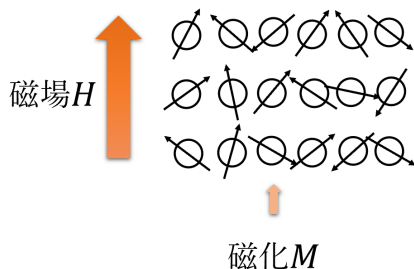


図4 常磁性体中のスピン

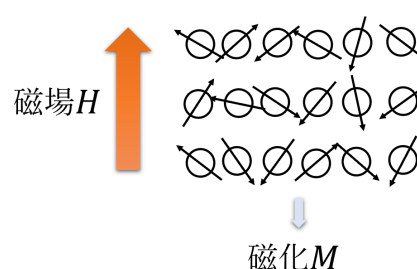


図5 反磁性体中のスピン

一方、強磁性体の内部では原子のスピンが揃っていた方がエネルギーが安定化します。これを交換相互作用といいます。これにより、常磁性体や反磁性体より遥かに大きな磁化率を示します。また、外部磁場を0に戻しても磁化が維持されるのも、交換相互作用によってスピンの向きが保たれるからです。

このように、ミクロに見るとスピンの向きが磁性の起源になっています。次の章では強磁性体をスピンをもった原子が規則正しく並んだものとしてモデル化し、統計力学的に強磁性体の相転移を説明できるか考察していきます。

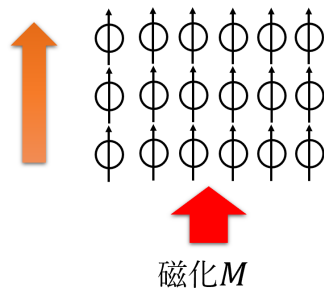


図6 強磁性体中のスピン

4 Ising 模型

4.1 Ising 模型の定義

物理ではしばしば本質的な部分を見落とさない範囲で物事を単純化して考えます。今回扱う Ising 模型は、絶縁性の強磁性体の振る舞いを見るために考案された模型の一つです。

具体的には、Ising 模型では結晶中の原子が 1 辺 L の d 次元立方格子の格子点上に並んでおり、それぞれの原子が ± 1 の 2 値を取るスピンを持っているとします。^{*1}また、原子の個数を $N = L^d$ として、 N 個の原子のスピンがそれぞれ (s_1, s_2, \dots, s_N) とすると、このスピン配置でのエネルギーは以下の式で表せると仮定します。

$$E_{(s_1, \dots, s_N)} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j - \mu_0 H \sum_{i=1}^N s_i \quad (1)$$

ただし、ここで $\langle i, j \rangle$ は隣り合う原子の組を表しており、 J は正の定数とします。右辺の第 1 項はスピンの交換相互作用を表しており、スピンの向きが同じであればエネルギーは低くなり（安定化）、逆向きであればエネルギーは高くなります（不安定化）。 J はこの交換相互作用の大きさを表す定数です。交換相互作用は隣り合った原子に限らず起こりますが、Ising 模型では隣り合った原子同士の寄与以外は無視します。また、右辺第 2 項は磁場 H によるエネルギーを表しています。 H が正であるとき、スピンの向きが $+1$ （磁場と同じ向き）であればエネルギーは低くなり、一方でスピンの向きが -1 であればエネルギーは高くなります。

^{*1} 本来スピンはスカラーではなく、ヒルベルト空間 \mathbb{C}^2 の元に作用する演算子として量子力学的に扱わなければいけません。今回は簡単のため古典的に扱います。勿論量子力学的に扱う Ising 模型やその他の模型も存在します。

4.2 統計力学による計算手法

統計力学では、エネルギーが E である状態を取る確率は $e^{-E/kT}$ に比例すると仮定します*2。ここで、 $k \equiv 1.38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ はボルツマン定数で、 T は絶対温度です。以下では、 $\beta = \frac{1}{kT}$ とします。*3この確率に従う分布のことを統計力学ではカノニカル分布、またはボルツマン分布と呼んでおり、観測する物理量はカノニカル分布に従うとしたときの物理量の期待値として計算します。よって、ある系が n 通りの状態を取り得て、それぞれの状態におけるエネルギーを E_1, E_2, \dots, E_n 、物理量 g の値を g_1, g_2, \dots, g_n としたとき、物理量 g の期待値 $\langle g \rangle$ は以下の式で計算できます。

$$\langle g \rangle = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \exp(-\beta E_i)} \sum_{i=1}^n g_i \exp(-\beta E_i)$$

$\sum_{i=1}^n \exp(-\beta E_i)$ はよく出てくるので、これを $Z(\beta)$ とおき分配関数と呼びます。これを用いると、

$$\langle g \rangle = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_{i=1}^n g_i \exp(-\beta E_i) \quad (2)$$

と書けます。また、スピン配置が (s_1, s_2, \dots, s_N) である状態での磁化（1原子あたり）は以下の式で計算されます。

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mu_0 s_i$$

Ising 模型の分配関数は (1) 式より、

$$Z_L(\beta, H) = \sum_{(s_1, \dots, s_N)} \exp(-\beta E_{(s_1, \dots, s_N)})$$

また、磁化の期待値は

$$m_L(\beta, H) = \frac{1}{Z_L(\beta, H)} \sum_{(s_1, \dots, s_N)} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mu_0 s_i \exp(-\beta E_{(s_1, \dots, s_N)})$$

となります。ここで、 $f_L(\beta, H) = -\frac{1}{\beta N} \log Z_L(\beta, H)$ という物理量を定義すると*4、

$$m_L(\beta, H) = -\frac{\partial}{\partial H} f_L(\beta, H) \quad (3)$$

*2 正確には、系が十分大きな熱浴と熱平衡状態にあり、そのときの温度が T である場合に上記のカノニカル分布が適用できます。

*3 β は逆温度と呼ばれます。

*4 $f_L(\beta, H)$ は原子 1 つあたりの自由エネルギーです

が成立します。実際に右辺の偏微分を計算すると、

$$\begin{aligned}
-\frac{\partial}{\partial H} f_L(\beta, H) &= \frac{1}{\beta N Z_L(\beta, H)} \frac{\partial}{\partial H} Z_L(\beta, H) \\
&= \frac{1}{\beta N Z_L(\beta, H)} \frac{\partial}{\partial H} \sum_{(s_1, \dots, s_N)} \exp(-\beta E_{(s_1, \dots, s_N)}) \\
&= \frac{1}{\beta N Z_L(\beta, H)} \frac{\partial}{\partial H} \sum_{(s_1, \dots, s_N)} \beta \mu_0 \sum_{i=1}^N s_i \exp(-\beta E_{(s_1, \dots, s_N)}) \\
&= \frac{1}{Z_L(\beta, H)} \sum_{(s_1, \dots, s_N)} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mu_0 s_i \exp(-\beta E_{(s_1, \dots, s_N)}) \\
&= m_L(\beta, H)
\end{aligned}$$

となり、(3) 式が正しいことが確認できます。

4.3 1次元 Ising 模型



図7 1次元模型

まずは最も単純な 1次元 Ising 模型を見ていきましょう。1次元なので、 $L = N$ であり、

$$E_{(s_1, \dots, s_L)} = -J \sum_{i=1}^L s_i s_{i+1} - \mu_0 H \sum_{i=1}^L s_i \quad (4)$$

ここで数式の扱いを簡単にするため、右辺第 1 項には $s_L s_{L+1}$ という項を加え、周期的境界条件 $s_{L+1} = s_1$ を適用しています。(4) 式による分配関数を求めると、

$$\begin{aligned}
Z_L(\beta, H) &= \sum_{(s_1, \dots, s_N)} \exp \left(\beta J \sum_{i=1}^L s_i s_{i+1} + \beta \mu_0 H \sum_{i=1}^L s_i \right) \\
&= \sum_{(s_1, \dots, s_N)} \exp \left(\beta J \sum_{i=1}^L s_i s_{i+1} + \beta \mu_0 H \sum_{i=1}^L \frac{s_i + s_{i+1}}{2} \right) \\
&= \sum_{(s_1, \dots, s_N)} \prod_{i=1}^L \exp \left(\beta J s_i s_{i+1} + \beta \mu_0 H \frac{s_i + s_{i+1}}{2} \right) \\
&= \sum_{s_1 = \pm 1} \cdots \sum_{s_L = \pm 1} \prod_{i=1}^L M_{s_i, s_{i+1}}
\end{aligned}$$

ここで、 $s, s' = \pm 1$ について、 $M_{s,s'} = \exp\left(\beta J s s' + \beta \mu_0 H \frac{s + s'}{2}\right)$ と定義しました。また、行列 M を以下のように定義します。

$$M = \begin{pmatrix} M_{1,1} & M_{1,-1} \\ M_{-1,1} & M_{-1,-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(\beta J + \beta \mu_0 H) & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp(\beta J - \beta \mu_0 H) \end{pmatrix} \quad (5)$$

このとき、 $\sum_{s_2=\pm 1} M_{s_1,s_2} M_{s_2,s_3} = M_{s_1,s_3}^2$ が成立することがわかります。ただし、 M_{s_1,s_3}^2 は M^2 の (s_1, s_3) 成分です。この式を繰り返し用いると、以下のように分配関数を計算できます。

$$\begin{aligned} Z_L(\beta, H) &= \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_3=\pm 1} \cdots \sum_{s_L=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} M_{s_1,s_2} M_{s_2,s_3} \prod_{i=3}^L M_{s_i,s_{i+1}} \\ &= \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_3=\pm 1} \cdots \sum_{s_L=\pm 1} M_{s_1,s_3}^2 \prod_{i=3}^L M_{s_i,s_{i+1}} \\ &\cdots \\ &= \sum_{s_1=\pm 1} (M^L)_{s_1,s_1} \\ &= \text{Tr}(M^L) \end{aligned}$$

M は対称行列なので、ある直交行列 O を用いて $M = {}^t O \Lambda O$ と対角化でき、 $M^L = {}^t O \Lambda^L O$ で $\text{Tr}(M^L) = \text{Tr}(\Lambda^L)$ と書けます。よって、 M の固有値を λ_+, λ_- とすると、 $\text{Tr}(M^L) = \lambda_+^L + \lambda_-^L$ 。さて、 M の固有値を求めると、

$$\begin{aligned} \|M - \lambda I\| &= 0 \\ \det \begin{pmatrix} \exp(\beta J + \beta \mu_0 H) - \lambda & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp(\beta J - \beta \mu_0 H) - \lambda \end{pmatrix} &= 0 \\ \lambda^2 - 2\lambda e^{\beta J} \cosh(\beta \mu_0 H) + e^{2\beta J} - e^{-2\beta J} &= 0 \\ \lambda_{\pm} &= e^{\beta J} \left\{ \cosh(\beta \mu_0 H) \pm \sqrt{(\sinh(\beta \mu_0 H))^2 + e^{-4\beta J}} \right\} \end{aligned}$$

$f_L(\beta, H)$ を計算すると、

$$\begin{aligned} f_L(\beta, H) &= -\frac{1}{\beta L} \log(\lambda_+^L + \lambda_-^L) \\ &= -\frac{1}{\beta L} \log \left(\lambda_+^L \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^L \right) \right) \\ &= -\frac{\log \lambda_+}{\beta} - \frac{1}{\beta L} \log \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^L \right) \end{aligned}$$

となります。ここで、 $L \rightarrow \infty$ の極限を取ると、

$$\begin{aligned} f(\beta, H) &= \lim_{L \rightarrow \infty} f_L(\beta, H) \\ &= -\frac{\log \lambda_+}{\beta} \\ &= -J - \frac{1}{\beta} \log \left(\cosh(\beta\mu_0 H) + \sqrt{(\sinh(\beta\mu_0 H))^2 + e^{-4\beta J}} \right) \end{aligned}$$

と計算できます。最後に、(3) 式を用いて磁化を計算すると、

$$\begin{aligned} m(\beta, H) &= -\frac{\partial}{\partial H} f(\beta, H) \\ &= \frac{\mu_0 \sinh(\beta\mu_0 H)}{\sqrt{(\sinh(\beta\mu_0 H))^2 + e^{-4\beta J}}} \end{aligned}$$

この式は逆温度 β 、磁場 H に対して連続なので、相転移は起こっていません。また、 $m(\beta, 0) = 0$ が簡単に確認でき、磁場 $H = 0$ で磁化が不連続となる強磁性体特有の振る舞いも見られません。

ただし、 $T = 0$ の場合だけ特異な振る舞いが見られます。 $T \searrow 0$ の極限で $\beta \rightarrow \infty$ であることと、 H の符号で結果が変わることに注意すると、

i) $H > 0$ のとき

$$\lim_{T \searrow 0} m(\beta, H) = \mu_0$$

ii) $H < 0$ のとき

$$\lim_{T \searrow 0} m(\beta, H) = -\mu_0$$

よって、 $T = 0$ の場合のみ $H = 0$ で磁化が非連続的に変化することがわかります。

4.4 2次元 Ising 模型

次に、2次元の Ising 模型を考えます。ただし、2次元模型は1次元よりも難しく、磁場 H が0の場合などでしか厳密解が求められていません。以下 $H = 0$ として議論します。磁場 $H = 0$ の場合は分配関数や相転移点の厳密解を求めることができますが、実際の導出はかなり長いです。よってこの記事では Kramers-Wannier 双対という性質を示し、そこから相転移点を予測するという方針で進めます。

図8のように大きさ $M \times N$ の二次元格子に xy 座標を定義し、格子点 (i, j) ($1 \leq i \leq M, 1 \leq j \leq N$) 上の原子のスピンを $s_{i,j}$ と表します。また、 x 方向のスピン交換相互作用と y 方向のスピン交換相互作用の定数がそれぞれ J, J' であるとします。このときあるスピン配置 $\{s_{i,j}\}$ におけるエネルギーは、

$$E_{\{s_{i,j}\}} = -\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N (J s_{i,j} s_{i+1,j} + J' s_{i,j} s_{i,j+1}) \quad (6)$$

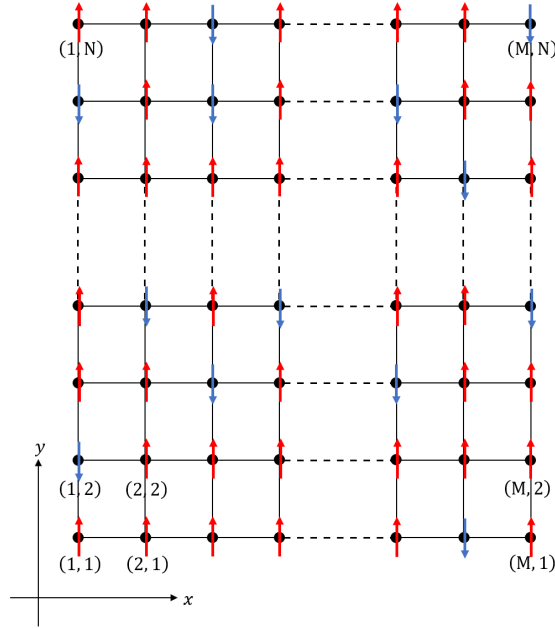


図8 2次元 Ising 模型

という形で表せます。ただし、 $s_{M+1,j} = s_{1,j}$, $s_{i,N+1} = s_{i,1}$ ($1 \leq i \leq M, 1 \leq j \leq N$) という周期的境界条件を課します。このときに、 MN 個の格子点上のあらゆるスピン配置について足し合わせた分配関数 $Z(J, J')$ は以下の式で求められます。

$$Z(J, J') = \sum_{\{s_{i,j}\}} \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^N e^{\beta J s_{i,j} s_{i+1,j}} e^{\beta J' s_{i,j} s_{i,j+1}}$$

$$Z(K, K') = \sum_{\{s_{i,j}\}} \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^N e^{K s_{i,j} s_{i+1,j}} e^{K' s_{i,j} s_{i,j+1}} \quad (7)$$

ここで、 $\{s_{i,j}\}$ は全てのスピン配置の集合を表しています。また、今後のために $\beta J = K$, $\beta J' = K'$ と文字を置きなおしました。 $s_{i,j} s_{i+1,j} = \pm 1$ であることを考慮すると、以下の式が成立します。

$$e^{K s_{i,j} s_{i+1,j}} = \cosh K \sum_{t=0,1} (s_{i,j} s_{i+1,j} \tanh K)^t \quad (8)$$

実際に右辺を計算してみると、

$$\begin{aligned} (\text{右辺}) &= \cosh K (1 + s_{i,j} s_{i+1,j} \tanh K) \\ &= \cosh K + s_{i,j} s_{i+1,j} \sinh K \end{aligned}$$

となり、 $s_{i,j} s_{i+1,j} = 1$ ならば e^K 、 $s_{i,j} s_{i+1,j} = -1$ ならば e^{-K} となることが確かめられます。(8)

式と同様にして、以下が成立します。

$$e^{K' s_{i,j} s_{i,j+1}} = \cosh K' \sum_{t=0,1} (s_{i,j} s_{i,j+1} \tanh K')^t \quad (9)$$

(8) 式と (9) 式を (7) 式に代入すると、以下のようになります。

$$Z(K, K') = (\cosh K \cosh K')^{MN} \sum_{\{\{s_{i,j}\}\}} \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^N \left(\sum_{t=0,1} (s_{i,j} s_{i+1,j} \tanh K)^t \right) \left(\sum_{t=0,1} (s_{i,j} s_{i,j+1} \tanh K')^t \right) \quad (10)$$

ここで、 $\prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^N \left(\sum_{t=0,1} (s_{i,j} s_{i+1,j} \tanh K)^t \right) \left(\sum_{t=0,1} (s_{i,j} s_{i,j+1} \tanh K')^t \right)$ を展開することを考えると、各項は格子の辺 $(i, j, x), (i, j, y)$ に対する $t_{i,j,x}, t_{i,j,y} = 0$ or 1 の一つの割り振り方に対して

$$\prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^N (s_{i,j} s_{i+1,j} \tanh K)^{t_{i,j,x}} (s_{i,j} s_{i,j+1} \tanh K')^{t_{i,j,y}}$$

を計算したものになっていることがわかります。ただし、辺 (i, j, x) とは点 (i, j) と $(i+1, j)$ を結ぶ辺で、辺 (i, j, y) とは点 (i, j) と点 $(i, j+1)$ を結ぶ辺であると約束します。

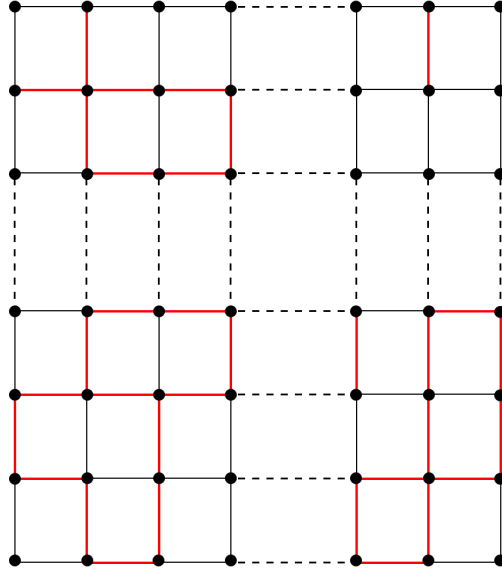


図9 各辺に対する t の割り振りの一例。 $t = 0$ の辺を黒色で、 $t = 1$ の辺を赤色で示した。

このことを踏まえると、(10) 式は次のように書き換えられます。

$$\begin{aligned}
Z(K, K') &= (\cosh K \cosh K')^{MN} \sum_{\{\{s_{i,j}\}\}} \sum_{\{\{t_{i,j,x}, t_{i,j,y}\}\}} \\
&\prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^N (s_{i,j} s_{i+1,j} \tanh K)^{t_{i,j,x}} (s_{i,j} s_{i,j+1} \tanh K')^{t_{i,j,y}} \\
&= (\cosh K \cosh K')^{MN} \sum_{\{\{t_{i,j,x}, t_{i,j,y}\}\}} \sum_{\{\{s_{i,j}\}\}} \\
&\prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^N (s_{i,j} s_{i+1,j} \tanh K)^{t_{i,j,x}} (s_{i,j} s_{i,j+1} \tanh K')^{t_{i,j,y}} \tag{11}
\end{aligned}$$

$\{\{t_{i,j,x}, t_{i,j,y}\}\}$ はあらゆる各辺への $t = 0, 1$ の割り振り方を表しています。ここで k を任意の整数とすると、以下の式が成立することに注意します。

$$\begin{aligned}
\sum_{s=\pm 1} s^{2k+1} &= 0 \\
\sum_{s=\pm 1} s^{2k} &= 2
\end{aligned}$$

つまり、各 (i, j) について (11) 式の最右辺では $s_{i,j}$ の累乗が出てきますが、あらゆるスピン配置について和を取る時に冪が奇数ならば 0、偶数ならば 1 となることが分かります。さらによく見ると最右辺はあらゆる $s_{i,j}$ の累乗の積となっているため、少なくとも一つ $s_{i,j}$ の冪が奇数であるような (i, j) があれば 0 となります。また、 $s_{i,j}$ の冪が偶数であるというのは、点 (i, j) を端点とする辺のうち t が 1 のものが偶数本であることを意味します。以上より、各辺に対する t の割り振り方のうち、各格子点からのびる辺のうち $t = 1$ であるような辺の本数が偶数本の割り振り方のみ考慮すべきだということが分かります。

「各格子点からのびる辺のうち $t = 1$ であるような辺の本数が偶数本」である場合、 $t = 1$ の辺のみを見ると図 10 のように閉曲線を成していることが分かります。一方で、格子中の閉曲線は全て上記の条件を満たすことが分かります。よって条件は「 $t = 1$ の辺が閉曲線を成す」と言い換えられます。これを満たす割り振りの集合を $\{\{t_{i,j,x}, t_{i,j,y}\}\}_{\text{閉曲線}}$ と書くことにします。すると (11) 式は以下のように書き換えられます。

$$\begin{aligned}
Z(K, K') &= (2 \cosh K \cosh K')^{MN} \sum_{\{\{t_{i,j,x}, t_{i,j,y}\}\}_{\text{閉曲線}}} \\
&\prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^N (\tanh K)^{t_{i,j,x}} (\tanh K')^{t_{i,j,y}} \tag{12}
\end{aligned}$$

$s_{i,j}$ などのスピンの項は、あらゆるスピン配置での和を取る段階で 2 となって消えています。また、(12) 式の $\prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^N (\tanh K)^{t_{i,j,x}} (\tanh K')^{t_{i,j,y}}$ は、 x 軸に平行な辺のうち $t = 1$ であるものの

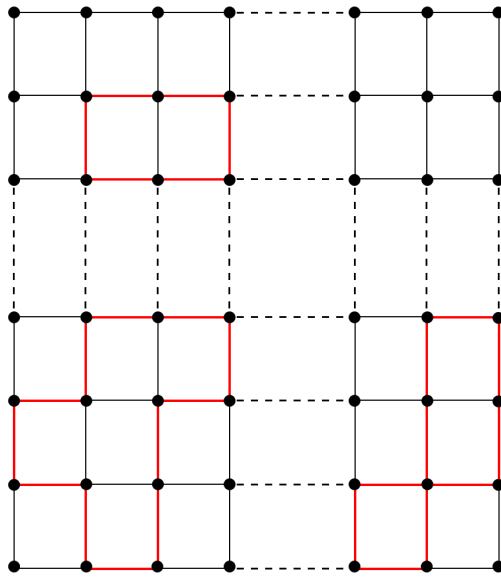


図 10 $t = 1$ の辺が閉曲線を成す場合の例。 $t = 0$ の辺を黒色で、 $t = 1$ の辺を赤色で示した。

本数を L_x 、 y 軸に平行な辺のうち $t = 1$ であるものの本数を L_y と置くと $(\tanh K)^{L_x} (\tanh K')^{L_y}$ に等しいことがわかります。

さらに (12) 式を変形するため、二次元格子に区切られた各セルに対し、新たに μ という変数を割り振ることを考えます。セルを囲む 4 点のうち最も左下にあるものが点 (i, j) であるセルをセル (i, j) と呼び、割り振る値を $\mu_{i,j} = \pm 1$ とします。 $t = 1$ である辺が閉曲線を成しているとき、以下の規則で $\mu_{i,j}$ を定めることにします。

1. セル $(1,1)$ に対し、 $\mu_{1,1} = 1$ と定める。
2. 閉曲線を跨ぐたびに、 μ の符号を変える。

このような規則を用いると、一つの閉曲線に対して一つの μ の割り振りが定まることがわかります。例えば図 10 の場合に上の規則を適用すると、 μ の値は図 11 のように定まります。

一方で、ある μ の割り振りが与えられたとき、 μ の符号が変化する部分の辺に対して $t = 1$ と定め、それ以外の辺で $t = 0$ と定めると、 $t = 1$ の成す辺の集合は閉曲線になります。また、一つの閉曲線を与える μ の割り振りが何通りあるかを考えると、 $\mu_{1,1} = 1$ のものと $\mu_{1,1} = -1$ のものがあるので、2 通りあることがわかります。

さて、この t と μ の対応を用いて (12) 式を書き換えます。今、 $t = 1$ の部分が閉曲線をなす t の

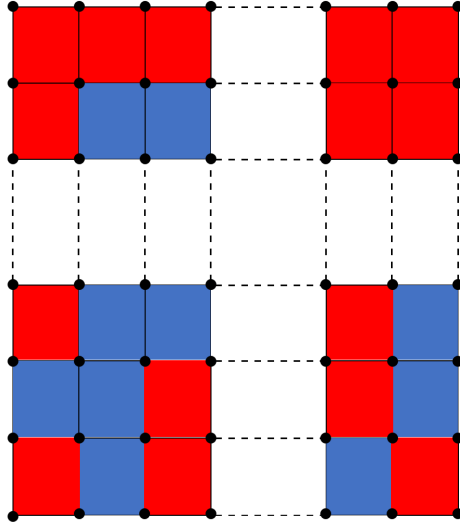


図 11 図 10 に対して各セルに μ を定めたもの。 $\mu = 1$ を赤で、 $\mu = -1$ を青で示した。

割り振りを $\{t_{i,j,x}, t_{i,j,y}\}$ としてそれと対応する μ の割り振りを $\mu_{i,j}$ とします。このとき、以下の関係が成立します。

$$\begin{aligned} t_{i,j,x} &= \frac{1 - \mu_{i,j-1}\mu_{i,j}}{2} \\ t_{i,j,y} &= \frac{1 - \mu_{i-1,j}\mu_{i,j}}{2} \end{aligned} \quad (13)$$

ここで、 $1 \leq i \leq M$, $1 \leq j \leq N$ で、 $\mu_{0,j} = \mu_{M,j}$, $\mu_{i,0} = \mu_{i,N}$ としています。実際 $t_{i,j,x} = 1$ であるとき、辺 (i, j, x) を挟む二つのセル $(i, j - 1)$, (i, j) は符号が変わるので、 $\mu_{i,j-1}\mu_{i,j} = -1$ で右辺も 1 となります。一方で $t_{i,j,x} = 0$ であるときは二つのセルの符号は等しいので $\mu_{i,j-1}\mu_{i,j} = 1$ であり、右辺も 0 となります。 $t_{i,j,y}$ についても同様です。

これを (12) 式に代入すると、

$$\begin{aligned}
Z(K, K') &= (2 \cosh K \cosh K')^{MN} \sum_{\{\{t_{i,j,x}, t_{i,j,y}\}\}_{\text{閉曲線}}} \\
&= \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^N (\tanh K)^{\frac{1-\mu_{i,j}-1^{\mu_{i,j}}}{2}} (\tanh K')^{\frac{1-\mu_{i-1,j}^{\mu_{i,j}}}{2}} \\
&= \frac{1}{2} (2 \cosh K \cosh K')^{MN} \sum_{\{\{\mu_{i,j}\}\}} \\
&= \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^N (\tanh K)^{\frac{1-\mu_{i,j}-1^{\mu_{i,j}}}{2}} (\tanh K')^{\frac{1-\mu_{i-1,j}^{\mu_{i,j}}}{2}} \\
&= \frac{1}{2} (4 \sinh K \cosh K \sinh K' \cosh K')^{\frac{MN}{2}} \sum_{\{\{\mu_{i,j}\}\}} \\
&= \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^N (\tanh K)^{-\frac{\mu_{i,j}-1^{\mu_{i,j}}}{2}} (\tanh K')^{-\frac{\mu_{i-1,j}^{\mu_{i,j}}}{2}} \\
&= \frac{1}{2} (\sinh(2K) \sinh(2K'))^{\frac{MN}{2}} \sum_{\{\{\mu_{i,j}\}\}} \\
&= \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^N (\tanh K)^{-\frac{\mu_{i,j}^{\mu_{i,j}+1}}{2}} (\tanh K')^{-\frac{\mu_{i,j}^{\mu_{i,j}+1}}{2}} \tag{14}
\end{aligned}$$

最初の変形では t の割り振りで和を μ の割り振りで和に書き換えています。 $\frac{1}{2}$ をかけているのは、一つの閉曲線に対して 2 つの μ の割り振りが対応しているからです。さて、以下のように \tilde{K}, \tilde{K}' を定めます。

$$\begin{aligned}
\tanh K &= e^{-2\tilde{K}'} \\
\tanh K' &= e^{-2\tilde{K}} \tag{15}
\end{aligned}$$

あるいは、この K と \tilde{K}' 、 K' と \tilde{K} の関係を変形すると、

$$\begin{aligned}
\sinh(2\tilde{K}') &= \frac{1}{2} (e^{2\tilde{K}'} - e^{-2\tilde{K}'}) \\
&= \frac{1}{2} \left(\frac{\cosh K}{\sinh K} - \frac{\sinh K}{\cosh K} \right) \\
&= \frac{\cosh^2 K - \sinh^2 K}{2 \sinh K \cosh K} \\
&= \frac{1}{\sinh(2K)}
\end{aligned}$$

となります。よって、(15) 式は以下のような対称的な形に変換できます。

$$\begin{aligned}
\sinh(2K) \sinh(2\tilde{K}') &= 1 \\
\sinh(2K') \sinh(2\tilde{K}) &= 1 \tag{16}
\end{aligned}$$

さて、(15) 式を (14) 式に代入すると、以下のように変形できます。

$$Z(K, K') = \frac{1}{2} (\sinh(2K) \sinh(2K'))^{\frac{MN}{2}} \sum_{\{\{\mu_{i,j}\}\}} \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^N e^{\tilde{K} \mu_{i,j} \mu_{i+1,j}} e^{\tilde{K}' \mu_{i,j} \mu_{i,j+1}}$$

ここで、 $\sum_{\{\{\mu_{i,j}\}\}} \prod_{i=1}^M \prod_{j=1}^N e^{\tilde{K} \mu_{i,j} \mu_{i+1,j}} e^{\tilde{K}' \mu_{i,j} \mu_{i,j+1}}$ の部分を見てみると、(7) 式の s が μ に変わり、 K, K' が \tilde{K}, \tilde{K}' に変わったただけであることがわかります。よって、

$$Z(K, K') = \frac{1}{2} (\sinh(2K) \sinh(2K'))^{\frac{MN}{2}} Z(\tilde{K}, \tilde{K}') \quad (17)$$

この式は $Z(K, K')$ を $Z(\tilde{K}, \tilde{K}')$ と対応付けており、この対称性のことを Kramers-Wannier 双対性と呼びます。

さて、 $K = \beta J$ 、 $K = \beta J'$ で J と J' は定数だったので、温度を変化させると β が変化し、 K と K' が動きます。それと同時に、(16) 式に基づいて \tilde{K}' と \tilde{K} も変化します。このとき、 $K = \tilde{K}$ と $K' = \tilde{K}'$ は同じ逆温度において成立します。実際、 $K = \tilde{K}$ が成立するとき、

$$\begin{aligned} \sinh(2K') &= \frac{1}{\sinh(2\tilde{K})} \\ &= \frac{1}{\sinh(2K)} \\ &= \sinh(2\tilde{K}') \end{aligned}$$

が成立します。 $\sinh(x)$ は狭義単調増加関数なので、 $K' = \tilde{K}'$ が成り立ちます。逆もまた然りです。

式変形では示せましたが、視覚的に $K = \tilde{K}$ と $K' = \tilde{K}'$ が同時に起こることを示すため、図 12 を作成しました。今、定数 J' が J の a 倍、つまり $J' = aJ$ であるとします。すると、

$$\begin{aligned} K &= K \\ K' &= aK \\ \tilde{K} &= -\frac{1}{2} \log \tanh aK \\ \tilde{K}' &= -\frac{1}{2} \log \tanh K \end{aligned}$$

と 4 変数が K の関数で表せます。よって横軸に K を取り、縦軸に 4 変数の値を取っています。 $K = \tilde{K}$ と $K' = \tilde{K}'$ が同じ K の値、つまり同じ温度で起こることがグラフの交点の K 座標が等しいことからわかります。また、以下のグラフを GeoGebra というオンラインでグラフなどが描画できるサービスで共有しました。<https://www.geogebra.org/calculator/pvtyzphk> から見れると思います。図 12 では $a = 2$ としていますが、このリンクにアクセスしてスライダーを動かすこ

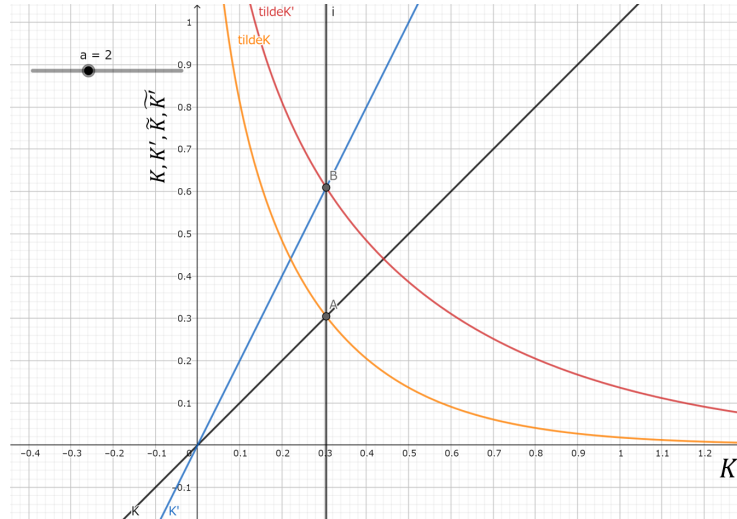


図 12 $K, K', \tilde{K}, \tilde{K}'$ の K に対するグラフ ($a = 2$)

とで a の値を変化させても交点の x 座標が等しくなることが確かめられます。

以上のことから、 $K = \tilde{K}$ と $K' = \tilde{K}'$ が同時に成立する温度 T^* というのは、特別な温度、つまり相転移温度ではないかと予想できます。実際に T^* を求めてみると、 $K = \tilde{K}$ より

$$\begin{aligned} \sinh(2K) &= \sinh(2\tilde{K}) = \frac{1}{\sinh(2K')} \\ \sinh(2K) \sinh(2K') &= 1 \\ \sinh(2\beta J) \sinh(2\beta J') &= 1 \end{aligned}$$

と変形できるので、最後の式に定数 J, J' を代入して β について解き、 $\beta = \frac{1}{kT}$ を用いることで T^* が求まります。特別に $J = J'$ が成立している場合（等方的）に計算すると、

$$\sinh(2\beta J)^2 = 1$$

$\beta J > 0$ より $\sinh(2\beta J) > 0$ なので、

$$\begin{aligned} \sinh(2\beta J) &= 1 \\ e^{2\beta J} - e^{-2\beta J} &= 2 \\ (e^{2\beta J})^2 - 2e^{2\beta J} - 1 &= 0 \\ e^{2\beta J} &= 1 \pm \sqrt{2} \end{aligned}$$

$e^{2\beta J} > 0$ より、

$$\begin{aligned} e^{2\beta J} &= \sqrt{2} + 1 \\ \beta J &= \frac{1}{2} \log(\sqrt{2} + 1) \\ \frac{J}{kT^*} &= \frac{1}{2} \log(\sqrt{2} + 1) \\ T^* &= \frac{2J}{k \log(\sqrt{2} + 1)} \end{aligned} \tag{18}$$

よって、 T^* が計算できました。実はこの相転移温度の予測は 2 次元 Ising 模型を厳密に求めてきた相転移温度と一致しており、さらに実験値 T_c ともよく一致することが知られています。

今回は詳しくは紹介できませんが、磁場が無い場合の 2 次元 Ising 模型の厳密解は様々な方法で解かれてきました。例えば 1944 年の Onsager による Lie 代数を用いる方法、1949 年の Kaufman や南部陽一郎によるスピノルを用いる方法、1964 年の Schultz、Mattis、Lieb による第 2 量子化によるフォック空間を用いる方法などが知られています。これらについては [4] や [8] で詳しく解説されているので、意欲のある読者は参照してください。

4.5 高次の Ising 模型

3 次以上の Ising 模型の厳密解はまだ求められていません。ただ、近年 conformal bootstrap という理論的手法が発展するなどの進展が見られているので今後の研究の発展に期待が持てそうです。

4.6 Ising 模型のシミュレーション

2 次元であっても計算で相転移を導くのは十分難しく、2 次元で磁場がある場合や 3 次元以上では厳密解が求められていない Ising 模型ですが、計算機によるシミュレーションで相転移を観察することができます^{*5}。実はこのシミュレーションはスーパーコンピューターが無いとできないようなものではなく、皆さんのパソコンで動かすことができます。例えば、<https://mattbierbaum.github.io/ising.js/> ではブラウザ上でシミュレーションを行うことができます。

Ising 模型のシミュレーションには様々なアルゴリズムが存在しますが、上記のウェブサイトで用いられているのはメトロポリス法とウォルフ法です。メトロポリス法は非常に直感的で、以下の操作を順に行っています。

^{*5} 実のところ相転移は無限系特有の現象であることが知られています。ところが、コンピュータでシミュレートできるのはあくまで有限系です。よって厳密にはシミュレーションで相転移を観察できるわけではありませんが、有限サイズスケール理論などで有限系の情報から無限系の振る舞いを推定できる場合があり、シミュレーションもある程度有効であることが分かっています。

1. はじめにランダムにスピンの初期値 $\{s_{i,j}\}$ を定めます。
2. ランダムに一点 (x, y) を選び、もとのスピン配置を $\{s_{i,j}\}$ 、スピン $s_{x,y}$ のみを反転させたスピン配置を $\{s'_{i,j}\}$ としたときに、以下の確率比 R を計算します。

$$R = \frac{\exp(-\beta E[\{s'_{i,j}\}])}{\exp(-\beta E[\{s_{i,j}\}])} = \exp(-2\beta s_{x,y}(Js_{x-1,y} + Js_{x+1,y} + J's_{x,y-1} + J's_{x,y+1}))$$

ここで、スピン配置 $\{s_{i,j}\}$ におけるエネルギーを $E[\{s_{i,j}\}]$ と表しており、最右辺では (6) 式でエネルギーが計算される場合の値を求めています (磁場 $H = 0$)。

3. $R < 1$ のとき、確率 R で状態 $\{s_{i,j}\}$ を状態 $\{s'_{i,j}\}$ に変換するため、一様乱数 $t \in [0, 1]$ を生成し、 $t < R$ ならば $s_{x,y}$ の符号を反転、そうでなければ元の配置に保ちます。一方、 $R \geq 1$ であれば必ず $s_{x,y}$ の符号を反転させます。
4. 2番と3番を繰り返します。

この方法を用いると、スピン配置が1個の点でのみ異なる二つの配置 $\{s_{i,j}\}$ と $\{s'_{i,j}\}$ の存在確率を p, q とするとき、その比 $\frac{q}{p}$ がカノニカル分布に従うことが示されます。実際、この方法を用いて二つのスピン配置の存在確率 p, q が一定値に落ち着いたとすると、 $\{s_{i,j}\}$ から $\{s'_{i,j}\}$ へ変化する確率と $\{s'_{i,j}\}$ から $\{s_{i,j}\}$ へ変化する確率が等しくなければいけません。このことから、 $R < 1$ と仮定すると、 $\{s_{i,j}\}$ から $\{s'_{i,j}\}$ へ変化する確率は R 、 $\{s'_{i,j}\}$ から $\{s_{i,j}\}$ へ変化する確率は1なので、

$$\begin{aligned} pR &= q \\ \frac{q}{p} &= R \end{aligned}$$

が成立しており、カノニカル分布に一致します。逆に $R \geq 1$ の場合は $\{s_{i,j}\}$ から $\{s'_{i,j}\}$ へ変化する確率は1、 $\{s'_{i,j}\}$ から $\{s_{i,j}\}$ へ変化する確率は $\frac{1}{R}$ なので、

$$\begin{aligned} p &= q\frac{1}{R} \\ \frac{q}{p} &= R \end{aligned}$$

が成立しており、やはりカノニカル分布に一致します。

ウォルフ法もメトロポリス法と似ていますが、一つのスピンを選んで配置を変えるか決めるのではなく、クラスターを選んで配置を変えるか決めるという違いがあります。

さて、実際に上記のウェブサイトを開いてみると、スピンの+1の点を白、-1の点を黒として視覚的に表現しています。主なパラメータに Temperature(温度) と Field(磁場) があります。このシミュレーションでは $\frac{J}{k} = 1$ としており、スピン交換相互作用も等方的で $J = J'$ としています。よって (18) 式より、磁場が0のときの相転移点は $\frac{2}{\log(\sqrt{2}+1)} \approx 2.269$ となります。実際に温度を動かして相転移点とその前後での様子を見ると、図 13 から図 15 のようになりました。低

温ではスピンの揃っている領域が大きく、高温ではスピンはバラバラになっていることがわかります。また、相転移点では大小様々な大きさのスピンの揃った領域があることが見れます。皆さんも温度と磁場を色々変化させ、遊んでみてください。



図 13 低温相
($T = 1.00$, $H = 0.00$)

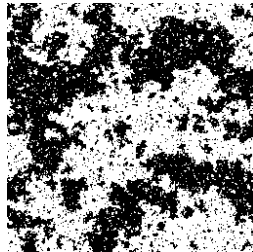


図 14 相転移点
($T = 2.27$, $H = 0.00$)

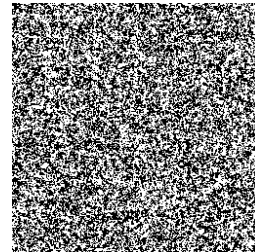


図 15 高温相
($T = 5.00$, $H = 0.00$)

5 おわりに

この記事では、如何に統計力学を用いて相転移という現象が数式で説明できるかを見てきました。今回紹介した強磁性体の Ising 模型をきっかけに、相転移を物理で扱うことの難しさや面白さが伝われば幸いです。

参考文献

- [1] 田崎晴明、統計力学 II、培風館、2008
- [2] 立川裕二、現代物理学 (2020) 講義ページ、
(<https://member.ipmu.jp/yuji.tachikawa/lectures/2020-komaba/>)
- [3] Ising Simulation (<https://mattbierbaum.github.io/ising.js/>)
- [4] 田村亮、2次元 Ising モデルの厳密解 (2006)、
(https://www.nims.go.jp/cmssc/fps1/ryo_tamura/tamura-thesis.pdf)
- [5] 白石清、模型入門 (1998)、
(<https://ha2.seikyoku.ne.jp/home/Kiyoshi.Shiraishi/pdfec/ising.pdf>)
- [6] Schultz, T. D., Mattis, D. C., & Lieb, E. H. (1964). Two-dimensional Ising model as a soluble problem of many fermions. *Reviews of Modern Physics*, 36(3), 856.
- [7] Yoichiro Nambu (1950). A Note on the Eigenvalue Problem in Crystal Statistics, *Prog. Theor. Phys.* 5, 1
- [8] 鈴木実、南部陽一郎の 2次元イジングモデル厳密解 (固有値問題解) の論文を読む (2018)、
(http://totoha.net/fc2_mirror2/Nambu_paper1.pdf)