

4.2 磁性体の相転移

相転移によって系の対称性が変化し、自発的に秩序状態が生まれる相転移を調べよう。話を具体的にするために、ここでは格子上に並んだイジングスピン系を扱う。

4.2.1 イジングスピン系の相転移

[イジングスピン系]

イジング模型 (Ising model) は磁性体の最も簡単なモデルであり、2次元以上の次元で相転移を起こす。このモデルは強磁性体や反強磁性体のモデルとなるだけでなく、気体の凝集、合金の相分離をはじめ広範な現象の最も簡単なモデルとなる。イジング模型では格子点に、上下二つの状態をとる「スピン」を配置する。 i 番目の格子点のスピン S_i のそれぞれの状態での値を

$$S_i \begin{cases} = 1 & (\text{up spin : } \uparrow) \\ = -1 & (\text{down spin : } \downarrow) \end{cases} \quad (4.38)$$

とする。電子スピンの $s_z = \pm 1$ の状態と思ってもよいが、ここでは古典的なスカラー変数である。

ハミルトニアン⁴は

$$\mathcal{H}_0 = -J \sum_{\langle i,j \rangle}^{zN/2} S_i S_j \quad (4.39)$$

である。 $\langle i,j \rangle$ は隣同士の組をあらわし、 z はある格子点のまわりの最近接格子点の数を表す⁵。たとえば、2次元正方格子ならば $z = 4$ 、三角格子なら $z = 6$ 、3次元の単純立方格子なら $z = 6$ 、体心立方格子なら $z = 8$ である。次の二つの和は同じことを表すことに注意しよう。

$$\sum_{\langle i,j \rangle}^{zN/2} \leftrightarrow \frac{1}{2} \sum_i^N \sum_{j=1}^{z \text{ nearest neighbors of } i} \quad (4.40)$$

強磁性体のモデルでは $J > 0$ で、スピンのそろおうとエネルギーが低下する。

⁴ハミルトニアンといっても系のダイナミクスを問題にしなければ、統計力学では系のエネルギーを与える関数に過ぎない。量子力学的なダイナミクスを考えるのならば運動は $\dot{S}_i = (i/\hbar)[\mathcal{H}, S_i]$ に従う。非平衡系の統計力学では、スピンの時間変化に対し適当な確率的時間発展を仮定することもある。

⁵端の問題を避けるために、系は周期的であると考える。

一般には，このスピン間相互作用エネルギーに外部磁場 h によるゼーマンエネルギーが加わった系を考える．

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{ext}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (4.41)$$

[熱平衡状態と相転移]

外部磁場がない $h = 0$ のとき，この系の基底状態はスピンのすべてが上か下にそろった強磁性状態である．強磁性状態はエネルギー的には2重に縮退しているが，巨視的な磁性体は二つの状態のうちどちらかしか取れない．逆に高温 ($k_B T \gg J$) の状態は，スピンの熱運動によってランダムに上下に向いた平均的には磁化のない常磁性 (paramagnetism) 状態であろう．磁場をかければ，その強さに比例して，エネルギー的に有利な向きが多数派となり外場に比例した磁化が現れるからだ．高温では系は上下の反転に対して対称であり，低温では基底状態に似た上か下のどちらかのスピンの多数派となる非対称な強磁性 (ferromagnetism) 状態が実現される．いったんどちらかの状態が実現すると，巨視的な系では磁化が反転した状態は実現されないと考えてよい．このことを対称性の自発的破れ (spontaneous symmetry breaking) と呼ぶ．対称性の破れの程度，あるいはスピン秩序化の程度を特徴づけるのが秩序変数 (order parameter) である．今の場合は磁化 (magnetization) がそれだ⁶．

$$M = \langle \sum_i S_i \rangle. \quad (4.42)$$

ここで $\langle \dots \rangle$ は熱平衡分布についての平均である⁷．だが，秩序変数としてむしろ1スピンあたりの平均磁化

$$m = \frac{M}{N} = \langle S_i \rangle \quad (4.43)$$

を使った方が，体系の大きさによらないので便利だ．一様な系ではこの平均は場所 i にはよらない．

熱力学的に見れば，熱平衡で実現されるのは自由エネルギー

$$F = E - TS \quad (4.44)$$

を最小にする状態である．高温では，エントロピーが大きい配置が有利で，上向き下向き同数のスピンのランダムに並んだ $M = 0$ の状態が実現する⁸．低温 ($k_B T \ll J$) ではスピンの向きがそろったエネルギーの低い状態が実

⁶ 本当の意味の磁化にするにはこれに磁気モーメントをかけなくてはいけない．

⁷ 具体的な定義は (4.48) 式．

⁸ m の関数としてエントロピーの具体的な表式は (4.64)

現される．外場がなくてもほとんどのスピンはどちらかのそろった方向を向いており，

$$|\langle M \rangle| \approx N \quad \text{or} \quad m \approx 1 \quad (4.45)$$

の強磁性状態である．(4.74) 式のハミルトニアンは上下の反転に対する対称性を持っているので，対称性からは $\langle M \rangle = 0$ が期待されるが，強磁性状態ではこの対称性は自発的に破れている．(もっとも現実の系では，はじめから環境に何らかの対称性の破れが避けられないので(磁性体では地磁気の影響など) 厳密な意味での自発的対称性の破れを実現することは難しい．) 温度を変えていったときに，どこかで系の対称性が低下し， M が零から有限の状態に変わる．これを相転移 (phase transition) と呼ぶ．

[Ising スピン系の平均場近似]

相転移がいつどのように起こるかは，統計力学の立場からは自由エネルギーが求められれば分かる．イジングモデルでは 1 次元系の場合には自由エネルギーが厳密に計算でき，相転移がないことが示される (演習問題参照)．2 次元系の場合もオンサガー (Onsager) によって厳密解が求められ，相転移の存在が証明されたが，3 次元系で厳密な結果を得ることは絶望的である．一般に相互作用のある系の分配関数や自由エネルギーを求めることは非常に困難で，何らかの近似計算に頼らざるを得ない．ここでは Ising 強磁性体モデルの平均場近似で自由エネルギーの計算をやってみよう．平均場近似はいろいろな形でほとんどあらゆる系に対して適用することができるので，この考え方を理解することは重要だ．

系のハミルトニアンは (4.74) 式である．分配関数は温度と外場の関数として与えられ

$$\begin{aligned} Z(T, h) &= \sum_n e^{-\beta E_n} \\ &= \sum_n \langle n | e^{-\beta \mathcal{H}} | n \rangle \\ &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} e^{-\beta \mathcal{H}(\{S_i\})} \end{aligned} \quad (4.46)$$

である．系の微視的状态 n は，それぞれがスピンの向きのひとつの配置に対応する: $|n\rangle = |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle$ など．この配置は 2^N 通りあり，最後の行は各格子点の二つのスピン配置についての和として表してある．

平均場近似 (mean field approximation) では，相互作用ハミルトニアンの中の S_i を平均値 $\langle S_i \rangle$ とゆらぎ $\delta S_i = S_i - \langle S_i \rangle$ に分離して

$$\mathcal{H}_0 = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$$

$$= -J \sum_{\langle i,j \rangle} [(S_i - \langle S_i \rangle)(S_j - \langle S_j \rangle) + S_i \langle S_j \rangle + \langle S_i \rangle S_j - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle] \quad (4.47)$$

と書き，ゆらぎ δS について 2 次になっている第 1 項を無視する．ここでの平均は

$$\langle S_i \rangle = \frac{\sum_n \langle n | S_i e^{-\beta \mathcal{H}} | n \rangle}{\sum_n \langle n | e^{-\beta \mathcal{H}} | n \rangle} \quad (4.48)$$

という意味だ．その結果，平均場相互作用ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 \Rightarrow \mathcal{H}_{\text{mf}} &= -J \sum_i S_i \sum_j^{\text{n.n. of } i} \langle S_j \rangle + \frac{1}{2} J \sum_i \sum_j^{\text{n.n. of } i} \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \\ &= -z J m \sum_i S_i + \frac{1}{2} N z J m^2 \end{aligned} \quad (4.49)$$

と表すことができる．このハミルトニアンを使うと，分配関数は相互作用のないときのものと同じ形なので

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{S_1=\pm 1} \dots \sum_{S_N=\pm 1} e^{\beta h_{\text{eff}}(S_1+S_2+\dots+S_N)} e^{-\frac{1}{2}\beta N z J m^2} \\ &= \left(\sum_{S_1=\pm 1} e^{\beta h_{\text{eff}} S_1} \right) \dots \left(\sum_{S_N=\pm 1} e^{\beta h_{\text{eff}} S_N} \right) e^{-\frac{1}{2}\beta N z J m^2} \\ &= \left(e^{\beta h_{\text{eff}}} + e^{-\beta h_{\text{eff}}} \right)^N e^{-\frac{1}{2}\beta N z J m^2} \\ &= \left[e^{-\frac{1}{2}\beta z J m^2} 2 \cosh(\beta h_{\text{eff}}) \right]^N \end{aligned} \quad (4.50)$$

となる．ただし有効磁場を

$$h_{\text{eff}} = h + z J m \quad (4.51)$$

と定義した．よって自由エネルギーは

$$F(V, T, h) = N \left[\frac{1}{2} z J m^2 - \frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh(\beta h_{\text{eff}})] \right] \quad (4.52)$$

となる．これを外場で微分すれば磁化を求めることができる⁹．つまり

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h} = \tanh(\beta h_{\text{eff}}) \quad (4.55)$$

⁹ イジングスピン系に限らず，一般に外場の関数としての自由エネルギーが分かっているならば，磁化を求めることができる．ここではベクトルスピン系で，仮想的に各格子点ごとに違う磁場 h_i がかかっているとしよう．こうすると形式的には各格子点ごとの磁化の計算ができる．分配関数と自由エネルギーは

$$Z(\beta, \{\mathbf{h}_i\}) = \sum_n \langle n | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_0 - \sum_i \mathbf{h}_i \cdot \mathbf{S}_i} | n \rangle, \quad F(\beta, \{\mathbf{h}_i\}) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(\beta, \{\mathbf{h}_i\}) \quad (4.53)$$

である．これをベクトル \mathbf{h}_i の各成分 h_i^α で微分すれば各格子点での磁化の各成分 m_i^α を求める

であるこれが (4.49) 式で導入した $m = \langle S_i \rangle$ と同じになっていなければならない。つまり m は

$$m = \tanh [\beta(h + zJm)] \quad (4.56)$$

という自己無撞着方程式 (self-consistency equation) の解である。

(4.56) 式を解けば各温度での磁化がわかる。ここで興味があるのは外場のない $h = 0$ の場合である。このとき

$$T_c \equiv \frac{zJ}{k_B} \quad (4.57)$$

と書くと

$$m = \tanh \left(\frac{T_c}{T} m \right) \quad (4.58)$$

となる。 $x = (T_c/T)m$ として、 $y = \tanh(x)$ と $y = (T/T_c)x$ のグラフを書けば、両者の交点として自己無撞着 (self-consistent) な解が求められる (図 4.5(a))。それは

$$m \begin{cases} = 0 & \text{for } T > zJ/k_B, \\ = 0, \pm m_s(T) & \text{for } T < zJ/k_B \end{cases} \quad (4.59)$$

となる。 $T \geq T_c$ では解は $x = 0$ だけであり、秩序変数 (磁化) の値は零である。 $T \leq T_c$ では3つの解がある。次節で見ると $m = 0$ は不安定な解で、ふたつの $m = \pm m_s$ が平衡状態を表す。この二つの可能な平衡状態は等しい自由エネルギーを持ち縮退している。現実の系では系の対称性が破れて片方の状態が出現する。この相転移の起こる温度 T_c は臨界温度 (critical temperature) と呼ばれる。

$h = 0$ での自由エネルギーは

$$F = -\frac{N}{\beta} \ln [2 \cosh (\beta z J m_s(T))] + \frac{1}{2} z N J m_s(T)^2 \quad (4.60)$$

ことができる。(一様磁場 $h_i = h$ とすれば、全磁化が求められる。)

$$\begin{aligned} m_i^\alpha = \langle S_i^\alpha \rangle &= \frac{\sum_n \langle n | S_i^\alpha e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 - \sum_i \mathbf{h}_i \cdot \mathbf{S}_i)} | n \rangle}{\sum_n \langle n | e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 - \sum_i \mathbf{h}_i \cdot \mathbf{S}_i)} | n \rangle} \\ &= \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial (\beta h_i^\alpha)} \sum_n \langle n | e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}}_0 - \sum_i \mathbf{h}_i \cdot \mathbf{S}_i)} | n \rangle \\ &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial (h_i^\alpha)} \ln Z(\beta, \{\mathbf{h}_i\}) \\ &= -\frac{\partial}{\partial h_i^\alpha} F(\beta, \{\mathbf{h}_i\}). \end{aligned} \quad (4.54)$$

(4.55) 式はこれを1成分にして、 $h_i = h$ としたものである。

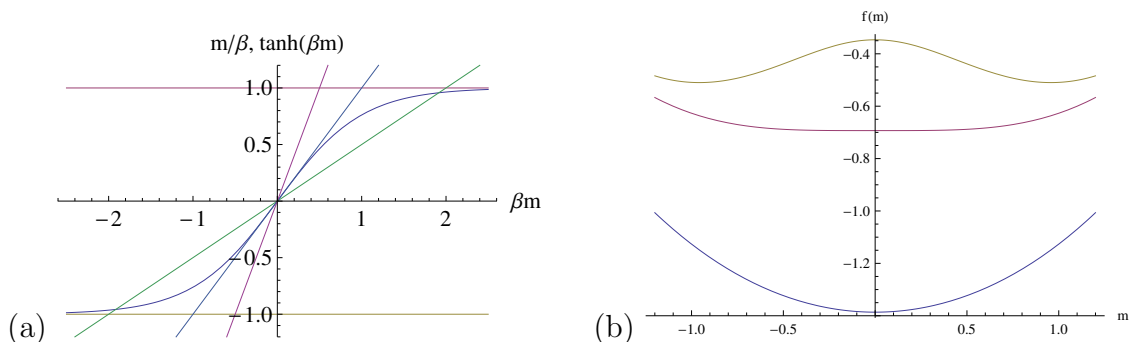


図 4.5: (a) 自己無撞着方程式 (4.56) のグラフによる解法．直線は，パラメタの値は， $zJ = 1$ ， $\beta = 0.5, 1, 2$ ．(b) Ising モデルの平均場近似での計算に現れる $f(T, m)$ の形．自由エネルギーの値は (a) の交点に相当する，極大，極小の点でのみ意味を持つ．

である． m_s を独立変数と見なして (4.60) 式のグラフを書けば図 4.5(b) のようになっている．このグラフで物理的に意味のあるのは (4.56) 式の解となる点 (微分して分かるように (4.60) 式の極値を与える点) だけである．高温では $m = 0$ が，低温では $m = \pm m_s$ が自由エネルギーの最小値をあたえる．

(4.56) 式の解 $m_s(T)$ を使って，エネルギーを求めれば

$$\begin{aligned}
 E = \frac{d(\beta F)}{d\beta} &= -N \tanh(\beta z J m_s) z J m_s + \frac{1}{2} z N J m_s^2 \\
 &\quad + (-N \beta z J \tanh(\beta z J m_s) + \beta z N J m_s) \frac{dm_s}{d\beta} \\
 &= -\frac{1}{2} z N J m_s^2 \tag{4.61}
 \end{aligned}$$

となり ($\tanh(\beta z J m_s) = m_s$ に注意)，(4.49) 式の期待値と一致する．このモデルではハミルトニアンに運動エネルギーがないので，磁化のない高温相では平均場近似でのエネルギーは常に $E = 0$ である．

4.2.2 秩序変数と自由エネルギー

ここでは，イジングスピン系の相転移を，系の自由エネルギーが秩序変数とともにどう変わるかを見ることによって考える．

[磁化の関数としての自由エネルギー]

外場がかかっていない系でどのような状態が実現されるかを考えるのに，系の磁化の関数としての自由エネルギー $F(\beta, M)$ を考えることは有用である．これが分かれば，最も小さい F の状態を探せば実現される磁化の状態がわかる．形式的には，分配関数の計算で和をとるときに，ある磁化を持った微視的状态

に限った和をとればよい．

$$F(\beta, M) \equiv -\frac{1}{\beta} \ln \left[\sum_{\text{states of given } M} \langle n | e^{-\beta \mathcal{H}_0} | n \rangle \right] \quad (4.62)$$

全磁化が $M (= Nm)$ の状態では， $N_+ = (N + M)/2$ 個のスピンの上を向き $N_- = (N - M)/2$ 個のスピンの下を向いている．このようなスピン配置の数は

$$W(N, M) = {}_N C_{N_+} = \frac{N!}{N_+! N_-!} = \frac{N!}{N_+! (N - N_+)!} \quad (4.63)$$

だから，エントロピーは

$$\begin{aligned} \frac{S}{k_B} &= \ln W \\ &= N \ln \frac{N}{e} - N_+ \ln \frac{N_+}{e} - (N - N_+) \ln \frac{N - N_+}{e} \\ &= -N_+ \ln \frac{N_+}{N} - (N - N_+) \ln \frac{N - N_+}{N} \\ &= -N \left(\frac{N_+}{N} \ln \frac{N_+}{N} + \frac{N - N_+}{N} \ln \frac{N - N_+}{N} \right) \\ &= -N \left(\frac{1+m}{2} \ln \frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2} \ln \frac{1-m}{2} \right) \end{aligned} \quad (4.64)$$

である．対応するエネルギーは，スピン配置によって一つ一つの微視的状态によって違っており，それらを実現確率の重みつきで加えなくてはならない．これを遂行することは困難なので，スピン対エネルギーを

$$\langle -J S_i S_j \rangle_M = -J \langle S_i \rangle_M \langle S_j \rangle_M = -J m^2 \quad (4.65)$$

と積の平均値をスピン間の相関がないとして平均値の積で近似する¹⁰．ここで $\langle \dots \rangle_M$ は磁化が M となるという制限付きの平均である．最近接スピン対の数は $zN/2$ だから

$$E(m) = -\frac{1}{2} z N J m^2 \quad (4.66)$$

である．

よって自由エネルギー $E - TS$ は

$$F(\beta, m) = -\frac{1}{2} z N J m^2 + \frac{N}{\beta} \left(\frac{1+m}{2} \ln \frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2} \ln \frac{1-m}{2} \right) \quad (4.67)$$

となる．このグラフは図 4.6(b) のようになっている．こうして磁化の関数としての自由エネルギーが得られた．

[相転移と自由エネルギー]

¹⁰隣同士のスピンの配置に全く相関がないとして，スピンの対が平行，あるいは反平行になる確率を計算すれば同じ結果がすぐに得られる．このような平均場近似はブラッグ-ウィリアムズ (Bragg-Williams) 近似と呼ばれる．

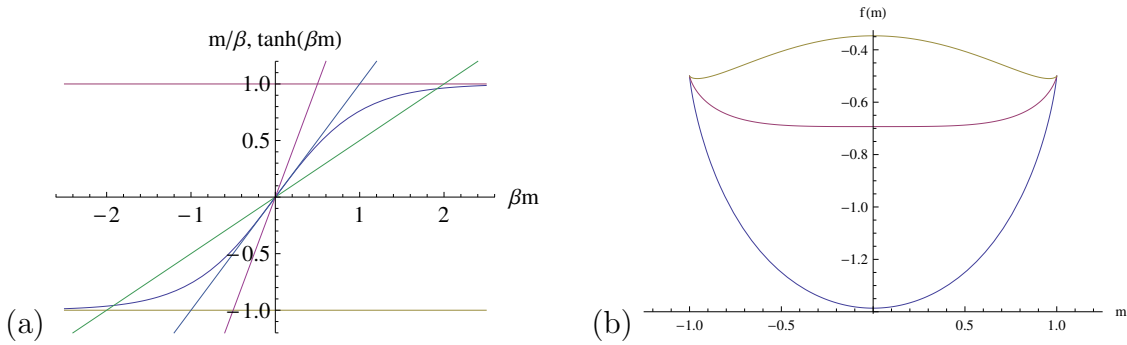


図 4.6: (a) 自己無撞着方程式 (4.56) のグラフによる解法 (図 4.5 と同じ) . 直線は, パラメタの値は, $zJ = 1, \beta = 0.5, 1, 2$. (b) 平均場近似 (ブラッグ-ウィリアムズ近似) での磁化の関数としての自由エネルギー $f(T, m)$. 自由エネルギーの値は (a) の交点に相当する極大, 極小の点は図 4.5 と同じである .

平衡状態で実現されるのは F , あるいは 1 スピンあたりの自由エネルギー $f = F/N$ が最小となるものである .

$$\frac{\partial}{\partial m} f = -zJm + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{1+m}{1-m} = 0 \quad (4.68)$$

より

$$\beta zJm = \frac{1}{2} \ln \frac{1+m}{1-m} \quad (4.69)$$

の解となる m の状態である . よって

$$\begin{aligned} \frac{1+m}{1-m} &= e^{2\beta zJm} \\ e^{-\beta zJm}(1+m) &= e^{\beta zJm}(1-m) \\ m &= \tanh(\beta zJm) \end{aligned} \quad (4.70)$$

と平均場近似の (4.58) 式と全く同じ式である .

[相転移と磁化の温度変化]

図 4.6(b) の自由エネルギー $f(T, m)$ を見れば温度変化の様子が良くわかる . 高温ではエントロピーの項が優勢でエントロピーが最大になる $m = 1/2$ の状態が自由エネルギーの最小値を与える . エネルギーは逆に $m = 0$ の状態が最大なので, 温度の低下とともに両者が競合し, $T = T_c$ で $f''(0) > 0$ から $f''(0) < 0$ に変わり, $f(T, m)$ が最小になる点が両側に分かれていく . $m = 0$ の点は極小から極大に変わるので, $T < T_c$ でこの点は不安定点であることがわかる . 温度と磁化の関数として自由エネルギーを 3 次元的に書いたのが図 4.7(a) , その等高線を描いたのが (b) である . 図 4.7(c) は $f(T, m)$ の極値の位置を表示してある . 高温ではひとつだった極値が $T = T_c$ で 3 つに分岐する .

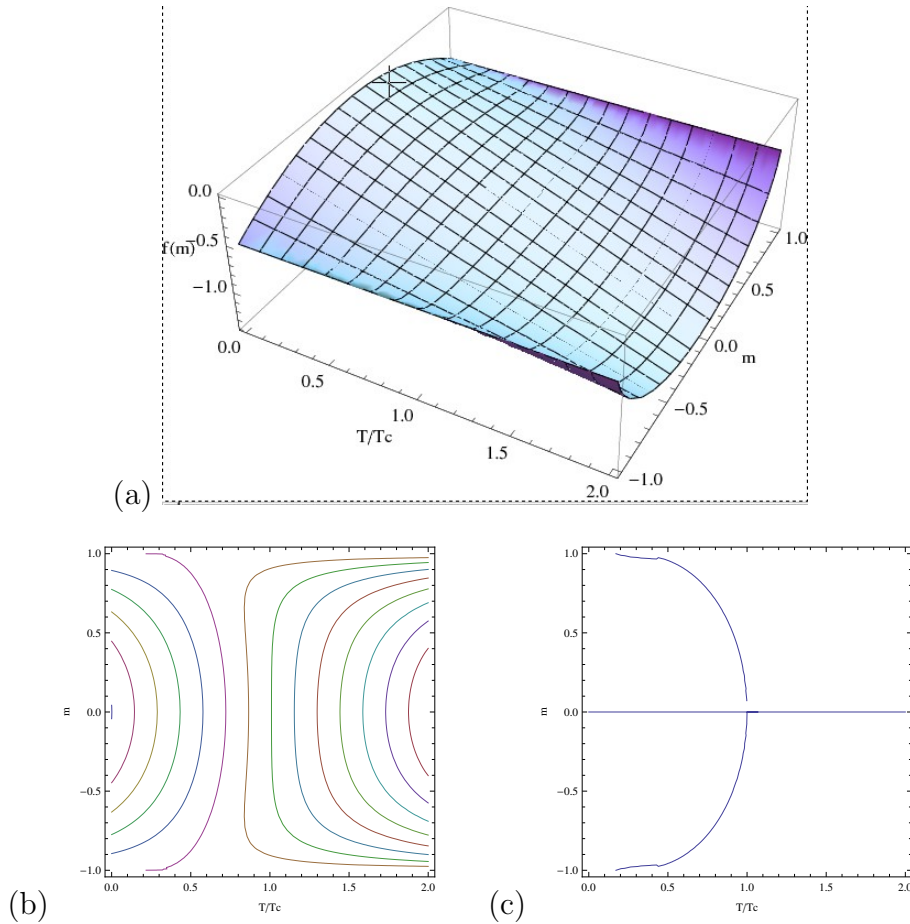


図 4.7: (a) 温度と磁化の関数としての自由エネルギー $f(T, m)$. (b) 自由エネルギー $f(T, m)$ の等エネルギー曲線 . (c) 自由エネルギー $f(T, m)$ の極値を表す () 式の解曲線 . $m = \pm 1$ 付近でがたついているのは計算精度が悪いため、なめらかに $m = \pm 1$ に近づいていく .

なお相転移が起きるのは外場がない場合だけであることに注意しよう . 弱くても外場がかかっているならば、常に外場の向きによって正または負の磁化が現れ対称性は常に破れている .

4.2.3 関連した系

[スピン空間での回転対称性]

Ising スピンではなく、ベクトルスピンの相互作用がハイゼンベルグハミルトニアン

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = -J \sum_{\langle i, j \rangle}^{\text{n.n.}} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (4.71)$$

で表されるような場合は、スピン空間で回転対称性がある . このとき自由エネ

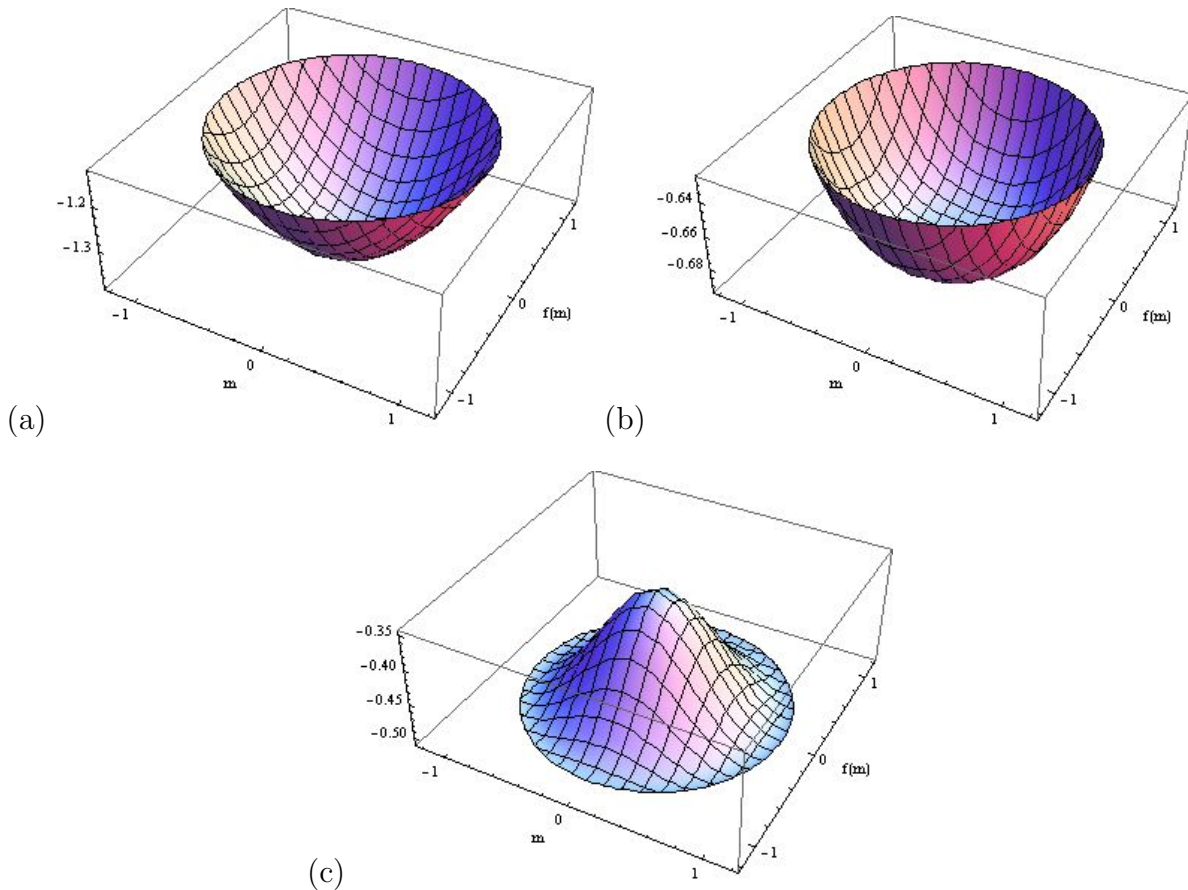


図 4.8: 磁化の関数としての自由エネルギー $F(T, m)$ の形 . (a) $T > T_c$, (b) $T = T_c$, (c) $T < T_c$.

ルギー F は磁化の絶対値のみの関数となる . 分かりやすいようにスピンベクトルの次元を落として , 2次元スピンの場合 (XY モデルと呼ばれる) , (m_x, m_y) の関数として自由エネルギー $F(T, m)$ を図示すると , 相転移温度 T_c より高温では図 4.8 のような回転放物面になる . 最低エネルギーの状態は $m = 0$ である . 低温 $T < T_c$ での自由エネルギーの形は図 4.8(c) のようなワインボトル型である . ピンの形は転位温度近くでは底の平らな Bourgogne 型で , 低温になると溝の深い Bordeaux 型に変わる . $m = 0$ の状態はエネルギーが極大になっている . 最低エネルギーの状態は , ハミルトニアン の対称性を反映してワインボトルの底の $|m| = m_0$ の状態で連続的縮退を持っている . 非常に小さな系ではいろいろな磁化の状態の量子力学的重ねあわせで $m = 0$ となることもありうるが , 現実のマクロな系はひとつの磁化しかとり得ず (状態を表す Hilbert 空間が巨視的な磁化が異なる場合には別物になる) , スピン空間の回転対称性がやぶれた特定の $\langle m \rangle (\neq 0)$ の状態となる .

平均場近似による計算では , スピン空間の対称性 (上下の反転対称性しかない Ising スピンか , 回転対称性を持つ Heisenberg スピンか , 2次元回転対称性を

持つXY スピンかなど) や、スピンの配置されている空間の次元によらず2次相転移を示す。これはスピンのゆらぎが無視された結果であり、ゆらぎを考慮すれば低次元では相転移がなくなる場合もある。ゆらぎはスピン空間の対称性が高くなるほど、空間の次元が低くなるほど大きい。Ising スピンでは、1次元では相転移がなく、2次元以上では2次相転移である。XY モデルでは2次元の場合、有限温度で相転移があるが、 $T < T_c$ でも自発磁化はなく、相転移の次数もBerezinskii-Kosterlitz-Thouless(BKT) 転移と呼ばれる「滑らか」なものになる。

[問題] 「ゆらぎはスピン空間の対称性が高くなるほど、空間の次元が低くなるほど大きい」理由を考えよ。

[反強磁性イジング模型]

単純立方格子や2次元正方格子の上のイジング模型に立ち戻ろう。これらの格子は隣同士の格子点をAとBの二種に分けることができる。正方格子ならばAとBの格子点はそれぞれ一辺の長さが $\sqrt{2}a$ の正方格子を作る。単純立方格子ならば格子定数 $2a$ の二つの面心立方格子を作る。以下、このような二つの副格子(sublattice)に分割できる格子を考える。今まではイジングスピンの結合定数 J を正としたが、今度は $J < 0$ とする。この場合相互作用をする最近接対は一方がA格子、他方がB格子の上にある。 $J > 0$ の場合は隣どおしのスピンの向きがそろったが今度は逆向きがエネルギー的に有利となる。実際、(4.74)式のハミルトニアンで $J < 0$ としたものは

$$\hat{\mathcal{H}}_0^{\text{AF}} = |J| \sum_{\langle i,j \rangle}^{zN/2} S_i^A S_j^B \quad (4.72)$$

と書けるが、ここで次のようにして新しいスピン変数を導入すると

$$\sigma_i = S_i^A, \quad \sigma_j = -S_j^B, \quad J' = -J (> 0) \quad (4.73)$$

ハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}}_0^{\text{AF}} = J' \sum_{\langle i,j \rangle}^{zN/2} \sigma_i (-\sigma_j) = -J' \sum_{\langle i,j \rangle}^{zN/2} \sigma_i \sigma_j \quad (4.74)$$

となる。これは強磁性のハミルトニアンに他ならない。よって $J > 0$ の S_j^B の向きをすべて逆転させればそれが $J < 0$ に対応する。基底状態は明らかにA格子とB格子のスピンの向きが逆を向いた反強磁性(antiferromagnetism)の状態である。この場合の秩序変数は副格子の磁化

$$m^A = \frac{2}{N} \langle N_+^A - N_-^A \rangle, \quad m^B = \frac{2}{N} \langle N_+^B - N_-^B \rangle. \quad (4.75)$$

外部磁場がなければ対称性から $m^A = m^B \equiv m$ である。である。強磁性体での結果から、 $m = 0$ から $m \neq 0$ への相転移は、平均場近似では

$$T_N = \frac{1}{k_B} z|J| \quad (4.76)$$

で起きる。この反強磁性体の相転移温度はネール (Neel) 温度と呼ばれる。

以上の話は格子が二つのお互いに隣同士の子格子に分割できる場合のみ成り立つ。たとえば三角格子はこのようなことは不可能で基底状態はフラストレーションのため大きな縮退がある。

[格子気体]

イジングスピン系はさまざまな系の最も簡単なモデルになる。そのひとつ、格子気体模型 (lattice gas model) を見てみよう。連続的な空間を離散化し、格子点 i からなる空間を考える、各点での粒子の有無を区別する変数 n_i は、粒子が存在すれば $n_i = 1$ 、不在であれば $n_i = 0$ とする。粒子間には近距離で引力が働き、二つの粒子が隣接する格子点にあると $-\phi$ (< 0) のエネルギーを持つとする。この系のポテンシャルエネルギーは

$$\mathcal{H} = -\phi \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j \quad (4.77)$$

である。平衡状態の空間配置だけを問題にするなら、運動エネルギーは考える必要がない (それでもスピン系と同様、ハミルトニアンと呼んでおこう)¹¹。考える状態は、粒子数が一定

$$\sum_i n_i = N \quad (4.78)$$

のものだけである。引力があるので、基底状態は粒子がある領域に集合し残りの空間は空である。有限温度では、この粒子の集合体の中に空孔が混ざりこみ、逆に空の部分に粒子がてんざいする。粒子が集合した部分がこのモデルでの液体であり (固体と思ってもよい)、粒子が点在する領域が気体である。温度が高くなれば、液体中の空孔密度が増し、気体中の粒子密度も増す。温度が十分高くなれば両相の粒子密度は接近し、ついには2相の区別はなくなる。これは本物の気体-液体の系では臨界温度を変えたことに対応する。

平衡状態を調べるときは、グランドカノニカル分布を使うのが便利なので、 $-\mu N$ の項をつけておき

$$\mathcal{H} = -\phi \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j - \mu \sum_i n_i \quad (4.79)$$

¹¹系の時間変化を問題にするときは、粒子のどのような位置変化が許されるのが重要になる。通常は隣接格子点への飛び移りのみが許される。

をハミルトニアンとして、可能なあらゆる粒子数 N の配置を考えることにする。これをイジングスピン系に対応させる。

$$S_i = 2n_i - 1 \quad \Leftrightarrow \quad n_i = \frac{1 + S_i}{2} \quad (4.80)$$

つまり、粒子のある状態を上向きスピン、ない状態を下向きスピンに対応させる。(4.80) 式の n_i をハミルトニアンに入れて S_i で表すと

$$\mathcal{H} = -\frac{\phi}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \left(\frac{z\phi}{4} + \frac{\mu}{2} \right) \sum_i S_i - \frac{\mu N}{2} \quad (4.81)$$

となる。この式はグランドカノニカル分布で考えれば、格子気体の系と

$$J = \frac{\phi}{4}, \quad h = \frac{z\phi}{4} + \frac{\mu}{2} \quad (4.82)$$

のイジングスピン系が等価であることを示している。

よく使われる公式

[ガウス (Gauss) 積分]

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (4.83)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (4.84)$$

一般に

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \frac{(2n-1)!!}{2^n a^n} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (4.85)$$

[スターリング (Stirling) の公式]

$n \gg 1$ で

$$\ln n! \approx n \ln \frac{n}{e} \quad (4.86)$$

または, もう少し精度よく

$$n! \approx \sqrt{2\pi n} \left(\frac{n}{e}\right)^n \left(1 + \frac{1}{12n} + \dots\right) \quad (4.87)$$

[ガンマ関数]

積分表示

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} t^{z-1} e^{-t} dt \quad (4.88)$$

n が零または自然数のとき

$$\Gamma(n+1) = n! \quad (4.89)$$

$$\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{(2n)!}{2^{2n} n!} \sqrt{\pi} \quad (4.90)$$

[d 次元球の体積]

$$V_d(R) = \frac{\pi^{d/2}}{(d/2)\Gamma(d/2)} R^d \quad (4.91)$$

[3 次元理想気体の状態密度]

$$D(\varepsilon) = \frac{gV m^{3/2}}{2^{1/2} \pi^2 \hbar^3} \varepsilon^{1/2} \quad (4.92)$$

[熱ドゥブロイ波長]

$$\lambda_T = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T}\right)^{1/2} = \frac{h}{\sqrt{2\pi mk_B T}} \quad (4.93)$$

低温でのフェルミ分布に関する Sommerfeld の公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} F(\varepsilon) \left(-\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right) d\varepsilon = F(\mu) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} C_{2n} (k_B T)^{2n} \left. \frac{d^{2n} F(\varepsilon)}{d\varepsilon^{2n}} \right|_{\varepsilon=\mu} \quad (4.94)$$

ただし $f(\varepsilon) = 1/[\exp\{(\varepsilon - \mu)/k_B T\} + 1]$

$$C_{2n} \equiv \frac{1}{\Gamma(2n)} \int_0^{\infty} \frac{x^{2n-1}}{e^x + 1} dx \quad (4.95)$$

$$= (1 - 2^{1-2n}) \zeta(2n) \quad (4.96)$$

Riemann のツェータ関数

$$\zeta(m) \equiv \sum_{r=1}^{\infty} \frac{1}{r^m} \quad (4.97)$$

(4.94) 式の初めの数項

$$-\int_{-\infty}^{\infty} F(\varepsilon) f'(\varepsilon) d\varepsilon = F(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 F''(\mu) + \frac{7\pi^4}{360} (k_B T)^4 F''''(\mu) + \dots \quad (4.98)$$

また, $F'(\varepsilon) = \phi(\varepsilon)$ として

$$\int_0^{\infty} \phi(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^{\mu} \phi(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \phi'(\mu) + \frac{7\pi^4}{360} (k_B T)^4 \phi'''(\mu) + \dots \quad (4.99)$$

ボース統計に関係した積分公式

$$\int_0^{\infty} \frac{x^{n-1}}{z^{-1}e^x - 1} dx = \Gamma(n) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^n} \equiv \Gamma(n) g_n(z) \quad (4.100)$$

$g_n(1) = \zeta(n)$ である. ガンマ関数, ツェータ関数のいくつかの値は

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \quad \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}, \quad (4.101)$$

$$\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6} = 1.645, \quad \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90} = 1.082, \quad \zeta(6) = \frac{\pi^6}{945} = 1.017,$$

$$\zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2.612, \quad \zeta\left(\frac{5}{2}\right) = 1.341, \quad \zeta(3) = 1.202,$$

$$\zeta\left(\frac{7}{2}\right) = 1.127, \quad \zeta(5) = 1.037. \quad (4.102)$$