

一次元 Ising model と相転移

鈴木 増 雄 (東大理)

(3月22日受理)

スピン系の二次の相転移について、分子場近似の結果とは違った、実験事実や Padé の結果を説明出来るような半現象論的な理論を、前に提案した。¹⁾ ここでは Free energy を磁化 M で展開した時の展開係数を cumulant で表わす公式を作り、二体と四体の cumulant の singularity の相対的な強さによつて、 M の四次の係数が、Curie 点 T_c で零になる可能性のあることを指摘し、更に、cumulant が Curie 点の上・下で、same order の singularity を持つとして、帯磁率 χ 、自発磁化 M_s 、比熱 C 等の転移点近傍に於ける振舞を議論した。即ち、Free energy ϕ を M で展開して、その展開係数は、 $T \geq T_c$ で、

$$\phi = \phi_0 + AM^2 + BM^4 + CM^6 \dots - HM \quad (1)$$

$$A = \frac{kT}{2!} \frac{1}{\langle S^2 \rangle_c}, \quad B = -\frac{kT}{4!} \frac{\langle S^4 \rangle_c}{\langle S^2 \rangle_c^4},$$

$$C = -\frac{kT}{6!} \left[\frac{\langle S^6 \rangle_c}{\langle S^2 \rangle_c^6} - 10 \times \frac{\langle S^4 \rangle_c^2}{\langle S^2 \rangle_c^7} \right], \quad \dots \text{etc} \quad (2)$$

と与えられる。但し、

$$S = \sum_i \delta_i^z \quad (\text{total spin}).$$

帯磁率 $\chi = (\mu_B g)^2 \cdot \langle S^2 \rangle_c / kT$ 。これより、 M の四次の係数 $B(T)$ が、Curie 点 T_c で零になるかどうかを見るには、cumulant $\langle S^2 \rangle_c$ と $\langle S^4 \rangle_c$ の singularity の相対的な order を知ればよい。とは言つても、二次元三次元モデルで、それを調べるのは、一般に、個々の cumulant の singularity を調べるのと同程度に困難である。そこで、ここでは、厳密に解ける

鈴木増雄

一次元 Ising model を、上の新しい立場から、見直して、一般の場合に suggestive な結論を引き出して見たいと思う。

良く知られているように、一般に short range force で、一次元の classical system では、相転移は起らない。^{2,3,4)} この一般的な定理にあるように、一次元 Ising model では、相転移は起らない。もつと厳密に言うと、有限温度では、相転移は起らない。しかし、この系は、絶対零度で、相転移を起していると見ることが出来る。事実、 $T=0$ で、熱力学的関係は、singularity を持っている。又、exchange interaction ($-J$) が negative であれば、 $T=0$ では、Ferro になる。そこで、一次元 Ising model を、 $T_c=0$ なる系と見て、 $T \geq T_c$ での cumulant による表式(2)の singularity の様子をこの場合について調べて見るのは、有意義であると思う。

さて、一次元 Ising model では、磁場 H の存在する場合の Free energy ϕ は

$$\phi = -kT \log T_r \exp \left(K \sum_j \delta_j \delta_{j+1} + H' \sum_j \delta_j \right),$$

ここで、 $K=J/kT$, $H'=mH/kT=\mu_B gH/kT$. N (粒子数) $\rightarrow \infty$ の極限で、容易に、次式のように求まる。⁵⁾

$$\phi = -NkT \log \frac{\sqrt{Z}}{2\sqrt{\mu}} \left\{ 1 + \mu + \sqrt{(1-\mu)^2 + 4\mu Z^2} \right\} \quad (3)$$

ここで、

$$Z = \exp(-2J/kT), \quad \mu = \exp(-2mH/kT).$$

又、磁化 M は

$$M = NkT \frac{\partial}{\partial H} \log Z = Nm \left[1 - \frac{2\mu A_\mu}{A} \right] \quad (4)$$

ここで、

$$A = \frac{1}{2} \left\{ (1+\mu) + \sqrt{(1-\mu)^2 + 4\mu Z^2} \right\}$$

$$A_\mu = \frac{1}{2} + \frac{2Z^2 - (1-\mu)}{2\sqrt{(1-\mu)^2 + 4\mu Z^2}}$$

ϕ も M も、磁場 H に関しては、 $T=T_c(=0)$ では、singular な関数である。しかし、 H を二つの式(3)と(4)から消去して、 ϕ を M の関数と見たとき、 ϕ が M の singular な関数がどうかは、調べて見ないとわからない。即ち、 ϕ を M の級数で、展開できるかどうか調べて見ることは意義がある。それには形式的に展開した表式(1)の係数を調べてみればよい。

ここで問題にしたいのは、全ての order の cumulant $\langle S^{2n} \rangle_c$ ($n=1, 2, \dots$) の singularity である。それを求めるには、(3)式を形式的に H で展開して、その展開係数を調べればよい。けれども、この方法は、原理的に容易だが、実際の計算は、面倒で面白くない。しかも、singularity の様子を一般的に知る上でも、見通しが良くない。そこで、一般に、スピン系の localized model に於いて、correlation function 等を計算する最も易しい instructive な例として、直接 diagram を用いて、求めてみる。

(i) 二体の cumulant $\langle S^2 \rangle_c$ の計算。

$$\langle S^2 \rangle_c = \langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2 = \langle S^2 \rangle = \sum_{ij} \langle \delta_i \delta_j \rangle$$

ここで、一般に、

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr} A e^{-\beta \mathcal{H}_0}}{\text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_0}} .$$

$$\mathcal{H}_0 = -J \sum_{j=1}^N \delta_j \delta_{j+1} \quad (\delta_{N+1} \equiv \delta_1)$$

$$e^{-\beta \mathcal{H}_0} = (\cosh K)^N \prod_j (1 + a \delta_j \delta_{j+1}), \quad (4)$$

$$a = \tanh K .$$

故に

$$\begin{aligned} \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_0} &= (\cosh K)^N \{ \text{Tr} I + a^N \text{Tr} (\delta_1 \delta_2) \cdots (\delta_N, \delta_1) \} \\ &= 2^N (\cosh K)^N (1 + a^N) \end{aligned}$$

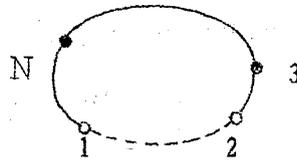
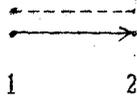
依つて

$$\langle S^2 \rangle_c = \text{Tr} \left(\sum_i \sum_{l=0}^{N-1} \delta_i \delta_{i+l} \right) \prod_j (1 + a \delta_j \delta_{j+1}) / \text{Tr} \prod_j (1 + a \delta_j \delta_{j+1})$$

鈴木増雄

$$= N \text{Tr} \left(\sum_{\iota=0}^{N-1} \delta_1 \delta_{1+\iota} \right) \pi(1+a\delta_j \delta_{j+1}) / 2^N (1+a^N).$$

そこで、 $\text{Tr}(\delta_1 \delta_2) \pi(1+a\delta_j \delta_{j+1})$ を調べると、下の二つの diagram だけが寄与する。

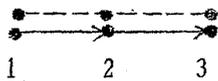


即ち

$$\begin{aligned} & \text{Tr}(\delta_1 \delta_2) \pi(1+a\delta_j \delta_{j+1}) \\ &= \text{Tr}(\delta_1 \delta_2) (a\delta_1 \delta_2) + \text{Tr}(\delta_1 \delta_2) (a\delta_2 \delta_3 \cdots a\delta_N \delta_1) \\ &= 2^N (a + a^{N-1}). \end{aligned}$$

$$\therefore \langle \delta_1 \delta_2 \rangle = \frac{a + a^{N-1}}{1 + a^N}.$$

同様に、 $\langle \delta_1 \delta_3 \rangle$ については



$$\begin{aligned} & \text{Tr}(\delta_1 \delta_3) \pi(1+a\delta_j \delta_{j+1}) \\ &= \text{Tr}(\delta_1 \delta_3) (a\delta_1 \delta_2 \cdot a\delta_2 \delta_3) \\ & \quad + \text{Tr}(\delta_1 \delta_3) (a\delta_3 \delta_4 \cdot a\delta_4 \delta_5 \cdots a\delta_N \delta_1) \\ &= 2^N (a^2 + a^{N-2}) \end{aligned}$$

同様にして、一般に、

$$\langle \delta_1 \delta_{1+\iota} \rangle = \frac{a^\iota + a^{N-\iota}}{1 + a^N}.$$

故に

$$\langle S^2 \rangle_c = N \sum_{i=0}^{N-1} \langle \delta_i \delta_{i+1} \rangle$$

$$\therefore \frac{\langle S^2 \rangle_c}{N} = \frac{1+a}{1+a^N} \cdot \sum_{i=0}^{N-1} a^i = \frac{1+a}{1-a} \cdot \frac{1-a^N}{1+a^N} \quad (6)$$

$$\therefore \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\langle S^2 \rangle_c}{N} = \frac{1+a}{1-a} = e^{2K} \quad (7)$$

故に、 $T \rightarrow T_c (=0)$ で $\langle S^2 \rangle_c$ は激しく発散する。帯磁率 x は

$$x = \frac{(\mu_B g)^2}{kT} \cdot \langle S^2 \rangle_c = \frac{N(\mu_B g)^2}{kT} \cdot \exp\left(\frac{2J}{kT}\right) \quad (8)$$

これは、勿論(4)から、得られているものと、一致する。

(ii) 四体の cumulant

$$\langle S^4 \rangle_c = \langle S^4 \rangle - 3 \langle S^2 \rangle^2$$

ここで

$$\langle S^4 \rangle = O(N) + O(N^2)。$$

order (N^2) の項は、 $3 \langle S^2 \rangle^2$ と cancel して、 $\langle S^4 \rangle_c$ は N の order となる。即ち、 $\langle S^4 \rangle$ の中で、 N の order の寄与をする項のみ集めればよい。⁶⁾

$$\langle S^4 \rangle = \sum_i \sum_j \sum_k \sum_l \langle \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l \rangle = \frac{\text{Tr}(\sum_j \delta_j) \pi (1+a \delta_j \delta_{j+1})}{\text{Tr} \pi (1+a \delta_j \delta_{j+1})}$$

以下で便宜上、次の記号を用いることにする。

$$\langle A \rangle = \text{Tr} A \pi (1+a \delta_j \delta_{j+1})$$

$$\therefore \langle S^4 \rangle = \sum_{i,j,k,l} \langle \delta_i \delta_j \delta_k \delta_l \rangle / \langle 1 \rangle \quad (9)$$

$$= N \sum_{i,j,k} \langle \delta_i \delta_i \delta_j \delta_k \rangle / \langle 1 \rangle \quad (9')$$

そこで、 $\langle \delta_i \delta_i \delta_j \delta_k \rangle$ を計算するには、 i, j, k の相対的な関係によつて、

$$+6 \sum_{1 \leq i < j < k \leq N} \langle \delta_i \delta_j \delta_k \rangle$$

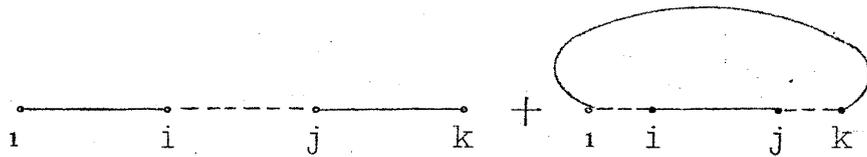
ここで、

$$\sum_{i=2}^{N-1} \langle \delta_i \delta_j \rangle = \sum_{\ell=1}^{N-1} (a^\ell + a^{N-\ell})$$

$$= \frac{2a}{1-a} + \frac{-2a^N}{1-a}$$

$$\Rightarrow \frac{2a}{1-a} \quad (N \rightarrow \infty)$$

又、 $\langle \delta_i \delta_j \delta_k \rangle$ には、次の二つの graph が対応する。



しかし、二つの graph は、 i, j, k について和をとつた後には、全く同じ寄与をする。

$$\sum_{1 \leq i < j < k \leq N} \langle \delta_i \delta_j \delta_k \rangle = 2 \sum_{1 \leq i < j < k \leq N-1} \langle \delta_i \delta_{i+1} \delta_{j+1} \delta_{k+1} \rangle \quad \left(\begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \circ \quad \circ \quad \circ \quad \circ \\ \text{1} \quad \text{1+i} \quad \text{1+j} \quad \text{1+k} \end{array} \right)$$

$$= 2 \sum_{1 \leq i < j < k \leq N-1} a^{i-j+k} = 2 \sum_{k=3}^{N-1} \left(\sum_{1 \leq i < j < k} a^{i-j} \right) a^k$$

ここで、

$$\sum_{1 \leq i < j < k} a^{i-j} = \left(\frac{1}{a}\right)^{k-2} \sum_{\ell=1}^{k-2} \ell a^{\ell-1}$$

$$= \left(\frac{1}{a}\right)^{k-2} \times \frac{1 + a^{k-2} - 2a^{k-1} - ka^{k-2}(1-a)}{(1-a)^2}$$

$$\therefore \sum_{1 \leq i < j < k \leq N} \langle \delta_i \delta_j \delta_k \rangle = 2 \sum_{k=3}^{N-1} \frac{a^2}{(1-a)^2} - \frac{2a^2}{(1-a)^2} \times$$

$$\times \left[\sum_{k=0}^{N-1} \{a^k + k(1-a)a^k\} \right]$$

鈴木増雄

$$\Rightarrow \frac{2Na^2}{(1-a)^2} - \frac{6a^2}{(1-a)^2} - \frac{2a(1+a^2)}{(1-a)^3} + \frac{2a^3}{(1-a)^2} \circ (N \rightarrow \infty)$$

故に、結局求める四体の cumulant は

$$\frac{\langle S^4 \rangle_c}{N} = - \frac{12a(1+a^2)}{(1-a)^3} + \frac{12a^2(a-3)}{(1-a)^2} - \frac{16}{1-a} + 14 \quad (10)$$

特に、 $T_c (=0)$ の近傍では、 $a \rightarrow 1$ 、故に、

$$\frac{\langle S^4 \rangle_c}{N} \cong - \frac{24}{(1-a)^3} \cong -3(e^{2k})^3 \quad (11)$$

以上の計算からもわかるように、highest order singularity のみを調べるには、次の項を計算すればよい。

$$\begin{aligned} \frac{\langle S^4 \rangle_c}{N} &\cong 3! \left[\sum_{1 \leq i \leq j \leq k \leq N} \langle \delta_i \delta_j \delta_k \rangle \right] \quad (N \rightarrow \infty \text{で finite になる part}) \\ &= 2 \times 3! \left[\sum_{1 \leq i \leq j \leq k \leq N} a^{i-1+k-j} \right] \quad (〃) \\ &= 2 \times 3! a \left[\sum_{1 \leq i \leq j \leq k \leq N} a^i \cdot \left(\frac{1}{a}\right)^j \cdot a^k \right] \quad (〃) \end{aligned}$$

(iii) 一般に $2n$ 体の cumulant は highest singularity に関しては、

$$\begin{aligned} \frac{\langle S^{2n} \rangle_c}{N} &\cong (2n-1)! \times 2a \left[\sum_{1 \leq k_1 \leq k_2 \leq \dots \leq k_{2n-1}} a^{k_1} \left\{ \left(\frac{1}{a}\right)^{k_2} \cdot a^{k_3} \right\} \dots \right. \\ &\quad \left. \dots \left\{ \left(\frac{1}{a}\right)^{k_{2n-2}} \cdot a^{k_{2n-1}} \right\} \right] \quad (N \rightarrow \infty \text{で finite になる part}) \end{aligned} \quad (12)$$

一般にこの singularity の様子を調べてみよう。上式の括弧の中を $f_n(a, k_{2n-1})$ とおくと、次の漸化式が成り立つ。

$$f_n(a, m) = \sum_{l=1}^m \sum_{k=1}^l a^{l-k} \cdot f_{n-1}(a, k) \quad (13)$$

$$f_1(a, k) = \frac{a}{1-a} \cdot (1-a^k) \quad (14)$$

便宜上、次の operator を導入しよう。

$$\mathcal{L} \cdot f(a, k) \equiv \sum_{l=1}^k \sum_{k=1}^l a^{l-k} f(a, k) \quad (15)$$

即ち、

$$\begin{aligned} f_n(a, k) &= \mathcal{L} \cdot f_{n-1}(a, k) \\ &= \dots = \mathcal{L}^{n-1} f_1(a, k) \end{aligned}$$

次に、一般項 $f_n(a, m)$ を見つけるのに必要な \mathcal{L} に関する公式を作っておこう。証明を略して結果のみを書くことにする。

$$[\text{公式 1}] \quad \mathcal{L}(1-a^k) = \frac{-2a}{(1-a)^2} (1-a^k) + \frac{k(1+a^{k+1})}{1-a} \quad (16)$$

$$[\text{公式 2}] \quad \mathcal{L}(k) = \frac{a^2(1-a^k)}{(1-a)^3} - \frac{ak}{(1-a)^2} + \frac{1}{1-a} \cdot \frac{k(k+1)}{2} \quad (17)$$

$$[\text{公式 3}] \quad \mathcal{L}(ka^k) = \frac{a(1-a^k)}{(1-a)^3} - \frac{k(3-a)a^{k+1}}{2(1-a)^2} - \frac{k^2 a^{k+1}}{2(1-a)} \quad (18)$$

$$[\text{公式 4}] \quad \begin{aligned} \mathcal{L}(k^2) &= -\frac{a^2(1+a)}{(1-a)^4} (1-a^k) + \frac{a(1+a)}{(1-a)^3} \cdot k \\ &\quad - \frac{a}{(1-a)^2} \cdot k(k+1) + \frac{1}{(1-a)} \times \frac{k(k+1)(2k+1)}{6} \end{aligned} \quad (19)$$

[公式 5] (公式 4 を一般化して)

$$\mathcal{L}(k^n) = A_{n0} \cdot \frac{1-a^k}{(1-a)^{n+2}} + \sum_{p=1}^{n+1} \frac{A_{np} \cdot k^p}{(1-a)^{n-p+2}} \quad (20)$$

[公式 6] (公式 3 を一般化して)

鈴木増雄

$$\mathcal{L}(k^N a^k) = B_{n0} \cdot \frac{1-a^k}{(1-a)^{n+2}} + \sum_{p=1}^{n+1} B_{np} \cdot \frac{k^{n-p+2} \cdot a^k}{(1-a)^p} \quad (21)$$

ここに、 A_{np} , B_{np} は a の多項式。

以上の項式を用いると、数学的帰納法によつて、一般式 $f_n(a, N)$ の形が次のようになることが証明される。

$$f_n(a, N) = C_{n0} \frac{1-a^N}{(1-a)^{2n-1}} + \sum_{p=1}^{n-1} C_{np} \frac{N^p}{(1-a)^{2n-1-p}} + \sum_{p=1}^{n-1} D_{np} \cdot \frac{N^p \cdot a^N}{(1-a)^{2n-p-1}} \quad (22)$$

ここに、 C_{np} , D_{np} は a の多項式である。依つて、 $\langle S^{2n} \rangle_c$ に寄与する部分、即ち、 $f_n(a, N)$ の中で、 $N \rightarrow \infty$ に於いて、finite になる部分は、

$$C_{n0}(a) \cdot \frac{1}{(1-a)^{2n-1}}$$

である。故に、

$$\begin{aligned} \frac{\langle S^{2n} \rangle_c}{N} &\cong 2a \cdot (2n-1)! \cdot C_{n0}(a) \times \frac{1}{(1-a)^{2n-1}} \\ &\cong \frac{C_n}{(1-a)^{2n-1}} \end{aligned} \quad (23)$$

ここに、

$$C_n = 2(2n-1)! C_{n0}(1)$$

更に、 $a = \tanh k = \tanh (J/kT)$ より、

$$\frac{\langle S^{2n} \rangle_c}{N} \cong \frac{C_n}{2^{2n-1}} \cdot (e^{2K})^{2n-1} \quad (24)$$

結局、数 factor を別にすると、highest order singularity に関しては、

$$\boxed{\langle S^{2n} \rangle_c / N \cong (e^{2K})^{2n-1}} \quad (25)$$

となる。

さて、以上のことから、すべての cumulant は $T_c (=0)$ で、発散している。しかも、higher order の cumulant になるにつれ、益々激しい singularity を持っている。又、これらの発散は、単なる統計の factor $1/kT$ に依るものではなく、粒子数 $N \rightarrow \infty$ にしたときの cooperative な結果として、現われているのである。例えば、2 体の cumulant $\langle S^2 \rangle / N$ について、見るならば、(6)より、

$$\frac{\langle S^2 \rangle}{N} (T=T_c=0) = \lim_{a \rightarrow 1} \frac{1+a}{1-a} \frac{1-a^N}{1+a^N} = N$$

$$\therefore \frac{\langle S^2 \rangle}{N} (T=0) = N \text{ (finite)} \quad (26)$$

$N \rightarrow \infty$ にして、始めて、 $\langle S^2 \rangle / N$ は N の order で発散する。この結果は二次元 Ising model の比熱の発散の仕方が、

$$C_V / N \propto \log N \quad (\text{at } T_c)$$

であること⁵⁾と比較すると面白い。

以上で、すべての cumulant の highest order singularity がわかったから、前に求めた公式(2)によつて、Free energy の展開係数の $T_c (=0)$ に於ける singularity の様子を調べることができる。数 factor は別にして、

$$A = \frac{kT}{2} \frac{1}{\langle S^2 \rangle_c} \cong kT \cdot e^{-2K} \rightarrow 0 \quad (T \rightarrow T_c = 0)$$

$$B \cong \frac{kT \langle S^4 \rangle_c}{\langle S^2 \rangle_c^4} \cong kT e^{-2K} \rightarrow 0$$

同様にして、公式(2)より

$$C \cong D \cong \dots \cong kT e^{-2K} \rightarrow 0 \quad (\text{at } T_c)$$

即ち、一次元 Ising model では、すべての係数 A, B, C, D, \dots が T_c で零になる。依つて T_c の近くでは Free energy は M に関して、 $M=0$ のまわりに展開出来、しかも絶対収束する。すべての係数が零になるのは、恐

鈴木増雄

らく一次元の特殊性に依るのであろう。二次元、三次元のモデルでは、途中までの係数が T_c で 0 になり、その後、0 にならない term も現われると期待される。それをきちんと証明するには、公式(2)から各 cumulant の相対的な singularity の order を計算しなければならない。

そこで、上の議論をもとに、次のような現象論を立てる。¹⁾ ϕ の展開式の中で $A_{2m}M^{2m}$ の項が寄与して、それより、前の係数は T_c で 0 になり、しかも、higher order とする。そうすると、結果的には、 T_c のごく近くでは、

$$\phi = \phi_0 + AM^2 + A_{2m}M^{2m} - HM \quad (27)$$

としてよい。更に、 T_c 以下でも A , A_{2m} の singularity の order は、上側と同じであるとすれば、自発磁化 $M_S \propto t^\beta$, $r^{-1} \propto tr$, 比熱 $C \propto t^{-\alpha}$, $M(T_c) \propto H^{1/\delta}$, $t = (T_c - T)$ として ($T \leq T_c$)

$$r = \beta(2m - 2) \quad (28)$$

$$\delta = 2m - 1 \quad (29)$$

が示せる。更に、Fisher の関係 $\alpha + 2\beta + r = 2$ を組み合わせると、次のように実験や Padé の結果をうまく説明出来る。

表 I

model	m(model)	α	β	r	δ
分子場	2	0	1/2	1	3
イジング	2d	0 0 (Onsager)	1/8 (仮) 1/8 (Yang)	7/4 $\approx 7/4$	15 15.00 ± 0.08 ⁷⁾
	3d	3 $0 \leq \alpha \leq 1/4$	5/16 $\approx 5/16$	5/4 (仮) $\approx 5/4$	5 5.20 ± 0.15 ⁷⁾
Heisenberg 3d	3	0	1/3 $\approx 1/3?$	4/3 (仮) $\approx 4/3$	5
実験			0.33 (EuS)	1.33 (Ni)	4.2 (Ni)

d ⇒ dimension

上 段 \Rightarrow present theory

下 段 \Rightarrow Padé 近似又は厳密解

(仮) \Rightarrow α, β, r の中一つを仮定した

最後に、御指導下さった久保先生に、感謝致します。また有益な discussion をして下さった久保研の皆さんに感謝致します。

reference

- 1) 鈴木増雄；物性研究 3, ('65) 317
1965年春の分科会予稿集（物性基礎）
- 2) 久保亮五；物性論研究 1, ('43) 1
- 3) H. Takahashi; Proc. Phys. Math. Soc. Japan, 24 ('42) 60
- 4) Van Hove; Physica 16, ('50) 137
- 5) C. Domb; Advances in Physics 9, ('60) 149
- 6) R. Kubo; J. Phys. Soc. Japan 17, ('62) 1100
- 7) D. S. Gaunt, M. E. Fisher, M. F. Sykes, J. W. Essam; Phys. Lett. 13, ('64) 713