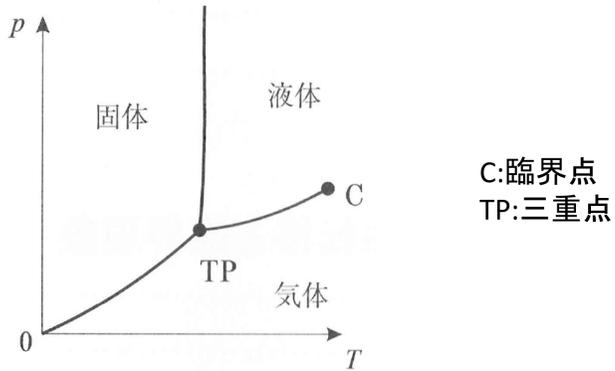


Ising模型における相転移と臨界現象

香取研究室 本田良二郎

相と相図

相: 物質の性質が一様な状態(例: 氷、水、水蒸気)
相図:



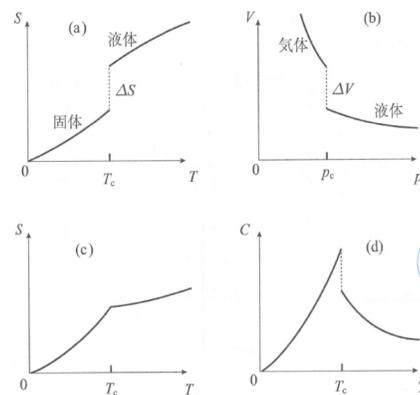
相境界を横切って系のパラメータを変化させると、相が急激に変化する。(例: 液体→気体)
臨界点では相の区別ができなくなり、物質は異常な性質を示す。この異常な性質を調べるのが臨界現象の理論。

相は様々な量によって特徴づけられるが、重要なのは相を構成する微視的な要素がどれだけそろっているかを表す秩序パラメータ。(例: 磁性体の磁化)

相転移

相転移は微視的な性質の急激な変化だが、理論的には物理量を表す関数の特異性として特徴づけられる。

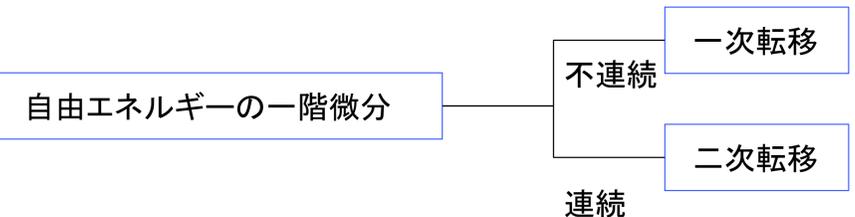
図:



関数を見れば、相転移が起きることがわかる

エントロピーS, 体積V, 比熱Cに飛びや尖り、発散が見られる

相転移は熱力学量の特異性の度合いによって2種類に分類される。



2次元Ising模型

相転移・臨界現象の研究において、問題が厳密に解ける例は限られている。
1944年にOnsagerによって求められた2次元Ising模型の厳密解はこの分野に重要な役割を果たした。
ここでは2次元Ising模型の考え方と、シミュレーションによる計算値をみる。

2次元Ising模型では、図1のような正方格子上のスピンの相互作用を考える。
このとき、ハミルトニアンは次式で与えられる。

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

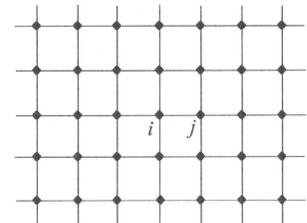


図1

S_i は格子点*i*にあるIsingスピン($S_i = \pm 1$), $\langle i, j \rangle$ は相互作用しているスピンの対を表す。
これは格子サイズが ∞ の極限で臨界温度 $T_c \approx 2.269$ で相転移を起こすことが知られている。
このとき比熱Cや帯磁率 χ の相図をみると $T = T_c$ で特異性が現れている。
図2は帯磁率 χ が $T = T_c$ で発散している様子である。

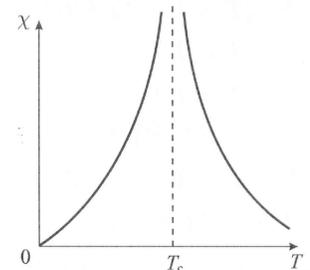


図2

図3, 図4, 図5はモンテカルロシミュレーションによる比熱Cと帯磁率 χ の計算結果である。
(サイズ: 50, フリップ数: 10000, 有効フリップ数: 5000)
帯磁率 χ は $\chi \propto |T - T_c|^{-\gamma}$ と表されることが知られていて、両辺の対数をとると $\log(\chi) \propto -\gamma \log|T - T_c|$ となり、傾き $-\gamma$ の直線としてみなせる。
この γ は臨界指数と呼ばれていて、その値は $\gamma = 1.75$ である。

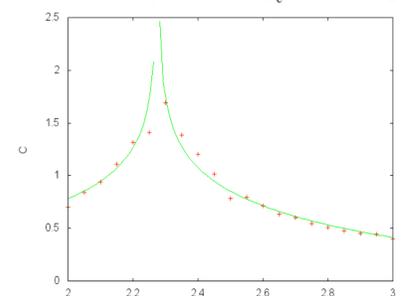


図3

シミュレーション結果から回帰曲線を求めると次のようになる。

$$\begin{aligned} T < T_c & \quad C = -0.360 \log(-T + 2.270) + 0.309 \\ & \quad \log(\chi) = -2.379 \log(-T + 2.269) - 4.219 \\ T > T_c & \quad C = -0.370 \log(T - 2.280) + 0.291 \\ & \quad \log(\chi) = -1.465 \log(T - 2.269) + 0.924 \end{aligned}$$

図4

比熱Cは $T_c \approx 2.269$ 付近で対数発散していることがわかる。
図4は $T < T_c$, 図5は $T > T_c$ での $\log(\chi)$ とその回帰直線である。
回帰直線の傾きは臨界指数 γ に近い値をとっている。

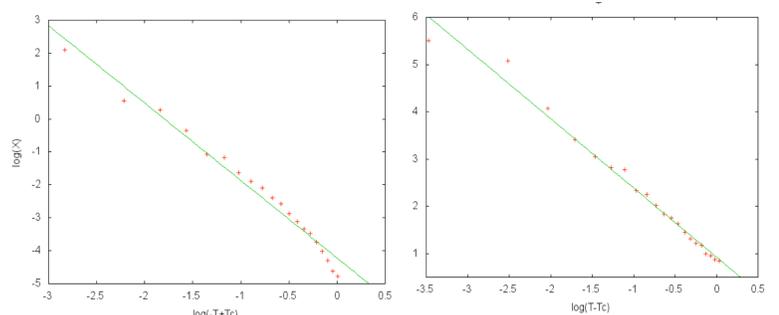


図5