

1 イジングモデル

エルンスト・イジングは磁性体のモデルとして Ising モデルと呼ばれる単純化したスピン系のモデルを提案した (1925). ここでは, 特に最近接相互作用の一次元モデルの平均場近似理論について説明し, 温度パラメータによって自発磁化が消失する現象が分岐現象として理解できることを示す. 更に, キュリー温度が磁子間の相互作用の強さと関係していることを説明する.

1.1 確率

Ising モデルを理解するにあたり確率についての基本的な知識を必要とするので, ここでは簡単におさらいする.

K 種類の事象 (出来事) e_i ($i = 1, \dots, K$) が起る確率を相対頻度

$$\Pr[e_i] = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n(e_i)}{n} \quad (1)$$

で定義する. ここで, e_i は図. 1 に示すように, 排他的 $e_i \cap e_j = \phi$ ($i \neq j$) であり, 全事象 U は

$$\cup_i^K e_i = U \quad (2)$$

となる. ここで, $n(e_i)$ は事象 e_i が観測された回数, $n = \sum_{i=1}^K n(e_i)$ は観測された事象の総数である. 観測総数 n を大きくしていくと相対頻度は事象の生起確率 $\Pr[e_i]$ に漸近する. 確率は

$$0 \leq \Pr[e_i] \leq 1 \quad (i = 1, \dots, K) \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^K \Pr[e_i] = 1 \quad (4)$$

を満す.

N 個の対象 S_j ($j = 1, \dots, N$) に対して, それぞれ K_j 種類の事象が同時に起る確率は結合確率 (joint probability) と呼ばれ, 同時に事象が N 個の対象について観測される回数 $n(S_1, \dots, S_N)$ を用いて

$$\Pr[S_1, \dots, S_N] = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n(S_1, \dots, S_N)}{n} \quad (5)$$

により定義される. ただし, S_j は K_j 個の事象 $(e_{j,1}, \dots, e_{j,K_j})$ を実現する. ここで観測総数 n は

$$n = \sum_{S_1 \in (e_{1,1}, \dots, e_{1,K_1})} \dots \sum_{S_N \in (e_{N,1}, \dots, e_{N,K_N})} n(S_1, \dots, S_N) \quad (6)$$

により与えられる.

U

e_1	e_2			
			e_{K-1}	e_K

Figure 1: 事象

1.2 所得の分配

社会に M 円だけ通貨が流通していてこの通貨総数を N 人へ配分する問題を考える. この巨視的状态は各個人についてみれば色々な可能性があるが, まずこの微視的状态の数を考えてみよう. これは総額 M 円のお金を N 人に配分する方法の数の数に等しい. これを $W_N(M)$ とおくと

$$W_N(M) = \frac{(M + N - 1)!}{(N - 1)!M!} \quad (7)$$

となる. ここで $N!$ とは N の階乗をあらわし

$$N! = 1 \times 2 \times 3 \times \cdots (N - 1) \times N \quad (8)$$

である.

1.2.1 組み合わせ数の証明

$W_N(M)$ は M 個の白玉を N 人に配分する方法の数である. いま第 1 番から N 番までの人々に対してある配分が行なわれたとする. このとき, 1 番の手持ちの白玉を全部吐き出させてそれを左から 1 列に並べ, 次に 1 個の黒玉を入れて区別を表わし, 2 番目の手持ち白玉をその右に並べ, 以下同様に所有者の番号が変わるたびに黒玉をはさんで白玉を陳列させることにする. 結局, こうして白玉 M 個, 黒玉 $(N - 1)$ 個が 1 列に並ぶことになる.

いまここで白玉には 1 から M まで, 黒玉には 1 から $N - 1$ までの番号をつけているとすれば, そのつけ方は全体で

$$M! \times (N - 1)! \quad (9)$$

だけあることは明らかであろう. この操作をあらゆる分配に対して行なうならば, 結局番号付きの白玉と黒玉をあらゆる方法で 1 列に並べることになる. これは

$(M + N - 1)!$ だけある. ゆえに番号のない白玉の配分方法 $W_N(M)$ は

$$M!(N - 1)!W_N(M) = (M + N - 1)! \quad (10)$$

で与えられる.

1.2.2 通貨発行総数が定まっている場合の社会に属する 1 個人の所有 x の従う法則

この社会の中の 1 個人の通貨所有量 x を調べてみる. この 1 個人が x 円を持っているなら他の $N - 1$ 人には残り $M - x$ が配分されている. この条件のもとで可能な微視的状态の数は,

$$M_{N-1}(M - x) \quad (11)$$

である. $x = 0, 1, 2, \dots, M$ に対してこの数が決まるが, その総和は

$$\sum_{x=0}^M W_{N-1}(M - x) = W_N(M) \quad (12)$$

となる. 要するにすべての配分法の数となる. このうち 1 個人が x 円をもつ場合は $W_{N-1}(M - x)$ だけにすぎない. $W_N(M)$ 個の微視的状态のおのおのが等しい確率で現われるのであるから, 1 個人が x 円だけをもつ確率は

$$\Pr(x) = \frac{W_{N-1}(M - x)}{W_N(M)} \quad (13)$$

で与えられる. これに (7) 式を代入すると

$$\begin{aligned} \Pr(x) &= \frac{(M + N - x - 2)!(N - 1)!M!}{(M + N - 1)!(N - 2)!(M - x)!} \\ &= (N - 1) \frac{M(M - 1) \cdots (M - x + 1)}{(M + N - 1)(M + N - 2) \cdots (M + N - x - 1)} \end{aligned}$$

となるが, $N \gg 1, x \ll M$ として M および $M + N$ に比べて x および 1 を省略すれば

$$\begin{aligned} \Pr(x) &\approx N \frac{\overbrace{M \cdots M}^{x \text{ 個}}}{\underbrace{(M + N) \cdots (M + N)}_{(x+1) \text{ 個}}} \\ &= \frac{N}{M + N} \left(\frac{M}{M + N} \right)^x \end{aligned} \quad (14)$$

という結論に達する.

ここで, 頭割りの平均額を $\kappa = M/N$ を導入することにより,

$$\Pr(x) = \frac{1}{1 + \kappa} \left(\frac{\kappa}{1 + \kappa} \right)^x \quad (15)$$

と書き直せる. この式より, x が大きくなると確率 $\text{Pr}(x)$ は極めて小さくなることがわかる. またこの式は確率の規格化条件

$$\sum_{x=0}^{\infty} \text{Pr}(x) = \frac{1}{1+m} \sum_{x=0}^{\infty} \left(\frac{\kappa}{1+\kappa}\right)^x = 1 \quad (16)$$

を満足している.
更に,

$$\theta = \frac{1}{\log(1 + \frac{1}{\kappa})} \quad (17)$$

と置くと,

$$\text{Pr}(x) \propto e^{-x/\theta} \quad (18)$$

と書ける.

1.3 ギブス分布 (カノニカル分布) について

量子状態ではエネルギーは離散的にしか配分されない. この離散性はプランク定数

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \quad (19)$$

という普遍的な定数を単位として離散化されている.

全エネルギー $E = Mh\nu = M\epsilon_0$ なる N 個の振動子集団にエネルギー $\epsilon_0 = h\nu$ を単位としてエネルギーを配分することを考える. この分配の数はエネルギー E の関数であり

$$G_N(E) = W_N(M) \quad (20)$$

となる. ところで, 特定の一つの振動子が E のうち $\epsilon = x\epsilon_0$ をもつ確率は 1.2 節の議論と同じなので, (7) 式を用いて

$$\frac{G_{N-1}(E - \epsilon)}{G_N(E)} = \frac{W_{N-1}(M - x)}{W_N(M)} \quad (21)$$

となる. よってエネルギー状態 ϵ となる確率は $\epsilon \ll E$ ($x \ll M$) なる限り, (15) 式を得たときと同じ議論により

$$p_1(\epsilon) = \frac{N}{M+N} \left(\frac{\kappa}{1+\kappa}\right)^x \quad (22)$$

となり, $x > M$ では x の値は非常に小さな値しかとらないので,

$$\frac{\kappa}{1+\kappa} = \frac{E}{N\epsilon_0 + E} = e^{-\epsilon_0/\theta} \quad (23)$$

あるいは

$$\theta = \epsilon_0 / \log\left(1 + \frac{1}{\kappa}\right) \quad (24)$$

と置くと

$$p_1(\epsilon) \propto e^{-x\epsilon_0/\theta} = e^{-\epsilon/\theta} \quad (25)$$

と書くことができる. すなわち $e^{-\epsilon/\theta}$ は全エネルギー一定なる振動子系に属するひとつの振動子が ϵ なるエネルギーをもつ相対的確率である.

同様に振動子系のうち N_l 個からなるものに着目し, その部分系のもつエネルギー E_l の分布を考えると

$$\begin{aligned} p_{N_l}(E_l) &\propto G_{N_l}(E_l) \left(\frac{\kappa}{1+\kappa} \right)^{M_l} \\ &\propto G_{N_l}(E_l) e^{-E_l/\theta} \end{aligned} \quad (26)$$

となる. ここで, $E_l = M_l \epsilon_0$, $G_{N_l}(E_l) = W_{N_l}(M_l)$ であって, ひとつの振動子の場合と同じである. このことから, ミクロカノニカル集団に属する振動子系から N_l 個だけ抜き出してつくられた体系において, そのエネルギーが E_l であるひとつの微視的状态の存在する確率は

$$e^{-E_l/\theta} \quad (27)$$

に比例する.

以上より, 系の固有エネルギーが $E_1, E_2, \dots, E_l, \dots$ であるようなカノニカル集団においてエネルギー E_l をもつ量子状態の確率は (27) 式に比例するからエネルギー状態 E_l となる量子状態 l の実現確率は

$$p(E_l) = \frac{e^{-E_l/\theta}}{\sum_l e^{-E_l/\theta}} \quad (28)$$

により与えられる. ここで, 特に規格化定数の逆数

$$Z(\theta) = \sum_l e^{-E_l/\theta} \quad (29)$$

を分配関数と呼ぶ.

1.4 イジングモデルの平均場近似

一次元イジングモデルでは, N 個の磁子が一次元上に並んでいると考える. 各磁子の磁化の向きに応じて上向きと下向きとのスピン状態をそれぞれ $+1$ と -1 により符号化する. i 番目のスピン状態を S_i とし,

$$S_i = \begin{cases} +1 \\ -1 \end{cases} \quad (30)$$

とする. 更に, エネルギー E を磁子 i と j との相互作用の強さ J_{ij} を用いて

$$E(S_1, \dots, S_N) = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j \quad (31)$$

と定義する. 自然はエネルギーを最小とするように実現を与えるので, $J_{ij} > 0$ は強磁性相互作用 (スピンの向きが互いにそろいやすい相互作用), $J_{ij} < 0$ は反磁性相互作用 (スピンの向きが互いに逆向きになりやすい相互作用), $J_{ij} = 0$ は相互作用が存在しないことを意味する.

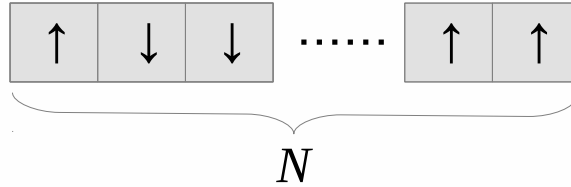


Figure 2: 一次元イジングモデルの模式図.

簡単化のため相互作用は一律とし, $J_{ij} = J/2$ ($J > 0$) の場合を考える. 更に, エネルギー E となる状態の実現確率がギブス分布 (カノニカル分布) $p(E) = Z^{-1} \exp(-E/\theta)$ に従うことを用いると¹, 各スピンの配位状態の実現確率は

$$p(S_1, \dots, S_N) = Z^{-1} \exp(-E(S_1, \dots, S_N)/\theta) = Z^{-1} \exp\left(\frac{J}{2\theta} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j\right) \quad (32)$$

となる. ここで Z は分配関数(partition function) と呼ばれ確率の規格化のための定数であり,

$$Z = \sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \exp\left(\frac{J}{2\theta} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j\right) \quad (33)$$

により定義される.

今自発磁化を N 個の磁子のスピン状態 S_i の平均値

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i = \langle S_i \rangle \quad (34)$$

により定義する. この値が 1 に近ければ磁子の多くはスピン状態 $S_i = 1$ を取り, -1 に近ければ磁子の多くはスピン状態 $S_i = -1$ を取っていることを意味する. また 0 に近い場合, スピン状態はばらばらであることがわかる. 磁石では m が +1 または -1 に近いほど N または S の磁石となっていることに対応している. また m が 0 近傍にあることはこの磁石が磁力を持たないことに対応する.

¹確率的に状態が推移するような多自由度系では低いエネルギー状態ほどよく観測され, 高いエネルギー状態はめったに実現しないことを表現している.

スピン状態を与える確率は (32) 式で与えられるので自発磁化 m は

$$m = \frac{\sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} S_i \exp\left(\frac{J}{2\theta} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j\right)}{\sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \exp\left(\frac{J}{2\theta} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j\right)} \quad (35)$$

となる. i について和を取ることを考える.

$$\begin{aligned} \text{(分子)} &= \sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \sum_{S_i=\pm 1} S_i \exp\left(\frac{J}{2\theta} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j\right) \\ &= \sum_{i=1}^N \left\{ \exp\left(\frac{J}{2\theta}(S_{i-1} + S_{i+1})\right) - \exp\left(-\frac{J}{2\theta}(S_{i-1} + S_{i+1})\right) \right\} \quad (36) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{(分母)} &= \sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \sum_{S_i=\pm 1} \exp\left(\frac{J}{2\theta} \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j\right) \\ &= \sum_{i=1}^N \left\{ \exp\left(\frac{J}{2\theta}(S_{i-1} + S_{i+1})\right) + \exp\left(-\frac{J}{2\theta}(S_{i-1} + S_{i+1})\right) \right\} \quad (37) \end{aligned}$$

(36) 式と (37) 式より

$$m = \frac{\sum_{i=1}^N \left\{ \exp\left(\frac{J}{2\theta}(S_{i-1} + S_{i+1})\right) - \exp\left(-\frac{J}{2\theta}(S_{i-1} + S_{i+1})\right) \right\}}{\sum_{i=1}^N \left\{ \exp\left(\frac{J}{2\theta}(S_{i-1} + S_{i+1})\right) + \exp\left(-\frac{J}{2\theta}(S_{i-1} + S_{i+1})\right) \right\}} \quad (38)$$

を得る. ここで全てのスピン状態 S_i は自発磁化 m と等しいと近似 (平均場近似) してみる. すなわち $m \approx S_{i-1} \approx S_{i+1}$ である. すると (38) 式は

$$\begin{aligned} m &\approx \frac{\sum_{i=1}^N \left\{ \exp\left(\frac{Jm}{\theta}\right) - \exp\left(-\frac{Jm}{\theta}\right) \right\}}{\sum_{i=1}^N \left\{ \exp\left(\frac{Jm}{\theta}\right) + \exp\left(-\frac{Jm}{\theta}\right) \right\}} \\ &= \frac{N \left\{ \exp\left(\frac{Jm}{\theta}\right) - \exp\left(-\frac{Jm}{\theta}\right) \right\}}{N \left\{ \exp\left(\frac{Jm}{\theta}\right) + \exp\left(-\frac{Jm}{\theta}\right) \right\}} \\ &= \frac{\exp\left(\frac{Jm}{\theta}\right) - \exp\left(-\frac{Jm}{\theta}\right)}{\exp\left(\frac{Jm}{\theta}\right) + \exp\left(-\frac{Jm}{\theta}\right)} \\ &= \tanh\left(\frac{Jm}{\theta}\right) \quad (39) \end{aligned}$$

ここで双曲関数に関する関係式

$$\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2} \quad (40)$$

$$\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad (41)$$

$$\tanh(x) = \frac{\sinh(x)}{\cosh(x)} = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (42)$$

を用いた。

(39) 式は自己無矛盾な方程式 (self-consistent equation) と呼ばれる。この方程式の解は m の固定点を与える。強磁性層 ($J > 0$) に今興味があるので、(39) 式は $\tanh(-\infty) = -1$, $\tanh(\infty) = 1$ となる性質から常に解をもつことがわかる。更に、 $\tanh(\frac{Jm}{\theta})$ の原点における傾き

$$\frac{d}{dm} \left(\tanh\left(\frac{Jm}{\theta}\right) \right) \Big|_{m=0} = \frac{J/\theta}{\cosh^2(\frac{Jm}{\theta})} \Big|_{m=0} = \frac{J}{\theta} \quad (43)$$

を考えると、(a) $J/\theta > 1$ において解を 3 つもち、(b) $J/\theta < 1$ において解を 1 つもつことがわかる。

(a) $J/\theta > 1$ の場合、(39) 式の解は作図的に得ることができ $m = 0, \pm m^*$ の 3 つの解が存在する。また (b) $J/\theta < 1$ の場合、 $m = 0$ の 1 つのみが解である。

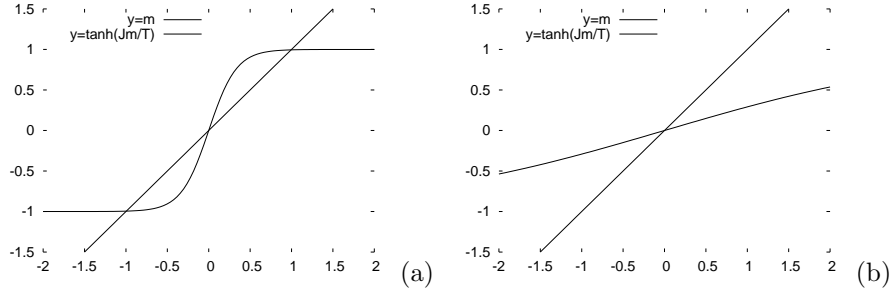


Figure 3: $J/\theta > 1$ の場合の $y = m$ と $y = \tanh(\frac{J}{\theta}m)$ の交点。 (b) $J/\theta < 1$ の場合の $y = m$ と $y = \tanh(\frac{J}{\theta}m)$ の交点。

1.5 Ising モデルに対応する Glauber 力学系

1.4 節では、体系全体でのエネルギー最小の観点から Ising モデルの自発磁化 m に対する自己無矛盾な方程式を導出したが、ここでは、ひとつのスピンの立場になって別の見方で自発磁化について考察してみる。

1.4 節同様に、相互作用 J_{ij} は均一であると仮定し $J_{ij} = J/2$ として最近接相互作用のみを考える。スピン i がある時刻 t で感じる外場を $I_i(t)$ とすると最近接相互作用を考えているので

$$I_i(t) = \frac{J}{2} (S_{i-1}(t) + S_{i+1}(t)) \quad (44)$$

となる。時刻 $t + \Delta t$ でのスピン i の状態は時刻 t での外場に依存して確率的に推移すると考え、以下のルールを仮定する。

$$S_i(t + \Delta t) = \begin{cases} +1 & w.p. \quad p_+(t) = \frac{1}{1 + \exp(-2I_i(t)/\theta)} \\ -1 & w.p. \quad p_-(t) = 1 - p_+(t) \end{cases} \quad (45)$$

ここで, $\theta(> 0)$ は温度に対応するパラメータである. 時刻 $t + \Delta t$ における自発磁化は

$$m(t + \Delta t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i(t + \Delta t) \approx \langle S_i(t + \Delta t) \rangle \quad (46)$$

により定義される. 平均場近似 $S_{i-1} \approx S_{i+1} \approx m$ を用いると, $I_i(t) \approx Jm(t)$ となる. よって,

$$\begin{aligned} m(t + \Delta t) &= +1 \times p_+(t) + (-1) \times p_-(t) \\ &= \frac{1}{1 + \exp(-2Jm(t)/\theta)} - \frac{\exp(-2Jm(t)/\theta)}{1 + \exp(-2Jm(t)/\theta)} \\ &= \frac{1 - \exp(-2Jm(t)/\theta)}{1 + \exp(-2Jm(t)/\theta)} \\ &= \frac{\exp(Jm(t)/\theta) - \exp(-Jm(t)/\theta)}{\exp(Jm(t)/\theta) + \exp(-Jm(t)/\theta)} \\ &= \tanh\left(\frac{Jm(t)}{\theta}\right) \end{aligned}$$

を得る. 両辺から $m(t)$ を引き Δt で割ることにより

$$\frac{\Delta m}{\Delta t} = h \left(\tanh\left(\frac{Jm}{\theta}\right) - m \right) \quad (47)$$

となる. ここで, $h = 1/\Delta t$ と置く. 更に

$$F(m) = \tanh\left(\frac{Jm}{\theta}\right) - m \quad (48)$$

と置くことにより, 固定点の決定と安定性の判別を行うことができる. ポテンシャル $V(m)$ は

$$\begin{aligned} V(m) &= - \int_{m_0}^m F(m') dm' \\ &= -h \int_{m_0}^m \left(\tanh\left(\frac{Jm'}{\theta}\right) - m' \right) dm' \\ &= -h \left(\int_{m_0}^m \frac{\sinh(\frac{Jm'}{\theta})}{\cosh(\frac{Jm'}{\theta})} dm' - \left[\frac{1}{2} m' \right]_{m_0}^m \right) \\ &= h \left(\frac{1}{2} m^2 - \frac{\theta}{J} \log \cosh\left(\frac{Jm}{\theta}\right) \right) + C \quad (49) \end{aligned}$$

で与えられる. ここで C は定数であり, $C = \frac{1}{2} m_0^2 - \frac{\theta}{J} \log \cosh\left(\frac{Jm_0}{\theta}\right)$ で与えられる.

固定点は $F(m) = 0$ から計算することができこれは 1.4 節で得られた (39) 式

$$\tanh\left(\frac{Jm}{\theta}\right) - m = 0 \quad (50)$$

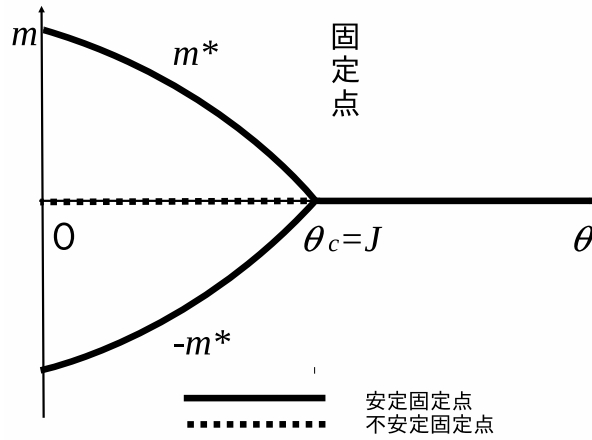


Figure 4: 最近接相互作用の場合の Ising モデルの平均場近似から得られる固定点の温度依存性 (分岐図).

を与える. よって (a) $J/\theta > 1$ のとき固定点は $m = 0, \pm m^*$ の 3 つあり, (b) $J/\theta < 1$ のとき固定点は $m = 0$ の 1 つのみである.

ポテンシャル $V(m)$ の増減表は (a) $J/\theta > 1$ の場合と $J/\theta < 1$ の場合とに条件分けされてそれぞれ表. 1 と表. 2 のようになる. (a) では $m = 0$ は不安定固定点, $m = \pm m^*$ は安定固定点であることがわかる. (b) においては $m = 0$ は安定固定点である. よって, 温度に対応するパラメータ θ に対する自発磁化 m は $\theta < J$ においては $m = \pm m^*$ であるが θ を徐々に大きくしていくと $\theta = J$ において $m = 0$ が安定固定点として実現するようになる. すなわち自発磁化の消失温度 (キュリー温度) は $\theta_c = J$ により与えられる. これは相互作用 J によって決っている.

Table 1: (a) $J/\theta > 1$ の場合のポテンシャル $V(m)$ の増減表.

m	...	$-m^*$...	0	...	m^*	...
$V'(m)$	-	0	+	0	-	0	+
$V(m)$	↘	極小	↗	極大	↘	極小	↗

Table 2: (b) $J/\theta < 1$ の場合のポテンシャル $V(m)$ の増減表.

m	...	0	...
$V'(m)$	-	0	+
$V(m)$	↘	極小	↗

練習問題

最近接相互作用を有する一次元 Ising モデルに対応する Glauber 力学系

$$S_i(t + \Delta t) = \begin{cases} +1 & w.p. \ p_+(t) = \frac{1}{1 + \exp(-2I_i(t)/\theta)} \\ -1 & w.p. \ p_-(t) = 1 - p_+(t) \end{cases} \quad (51)$$

から、平均場近似に対応するポテンシャル $V(m)$ を求めよ。ここで $\theta > 0$ は温度に対応するパラメータであり、 $I_i(t) = J(S_{i-1}(t) + S_{i+1}(t))$ とする。 $J/\theta > 1$ と $J/\theta < 1$ に対して増減表を書け。また、これを用いて θ に対する m の固定点の分岐図を描け。ただし $J > 0$ とする。