イジングモデル

みそ

2005.3.23

1 統計力学の基礎

ニュートン力学では、すべてのエネルギー値をとることができたが、量子力学的な体系の場合、ある状態は、とびとびの値を持つエネルギー、すなわち固有値で表される。それを固有状態と呼ぶ。その固有状態はそれぞれ等しい確率で実現される。しかし、固有状態 i の固有地を E_i として、固有状態 i が実現する確率を P_i とすると、

$$P_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}} \tag{1}$$

というふうに確率を表す。ここで、 $\beta = \frac{1}{kT}$ であり、k はボルツマン定数、T は温度である。また、式 (1) の分母

$$Z(T) = \sum_i e^{-\beta E_i} \tag{2}$$

を分配関数という。ここでは、式 (1) を磁性体のスピンの方向の決定に用いる。

磁化 m を次のように定義する。

$$m = \frac{1}{N} \sum_i s_i \tag{3}$$

ここで、N はスピンの自由度を持つ系の個数である。よって磁化は -1 から 1 までの値となる。

系のエネルギー U は

$$U = \frac{\sum_i E_i e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}} \tag{4}$$

である。

ここで式 (2) の分配関数から

$$
\begin{aligned}
\log Z(T) &= \log(\sum_i e^{-\beta E_i}) \\
\frac{d\log Z}{d\log T} &= \frac{1}{kT}\frac{\sum_i E_i e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}} \\
&= \frac{1}{kT}\langle E\rangle
\end{aligned}
$$

エネルギーの平均 $\langle E\rangle$ を用いて定積比熱 C_V を求めると

$$
\begin{aligned}
C_V &= \frac{d\langle E\rangle}{dT} \\
&= k\frac{d}{dT}(\frac{T\log Z}{\log T}) \\
&= \frac{1}{kT^2}(\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2) \qquad (5)
\end{aligned}
$$

系のエネルギーはゆらいでいるので、その平均を利用して定積比熱を求めるのである。

2 イジングモデル

イジングモデルとはある系の磁気について調べるために用いるモデルである。これはイジングによって考え出された磁性体のモデルなので、イジングモデルと呼ばれる。磁気は電子の動きにより発生する。調べたい系に含まれる電子の数は莫大でそれぞれの変数を考慮して計算を行うのは難しい。そこでイジングモデルでは電子の自由度の１つであるスピンの向きに注目する。

電子は、スピンという自由度を持っている。厳密には正しくないが、電子が自転してるようなもので、反時計回りが上向き、時計回りが下向きと考えても今は差し支えない。上向きの値が１、下向きが－１という値をとる。ここで、i 番目の電子のスピンの値を、 $s_i = \pm 1$ というふうに表す。

ある物質で磁性を決める大きな要因は電子のスピンの方向である。ある物質でスピンの向きがそろっていると磁性が強い。またそろってないほど磁性が弱い。その理由は難しいのだが、電子がスピンにより円電流

ができてるとしよう。スピンの向きがそろっていると、同じ方向の円電流がいくつもでき、電流により発生する磁場の向きがそろい、磁性が強くなる。厳密には正しくない説明だが、今はこれで十分としよう。

ここで、ある１次元の系を考える。そのエネルギー E はスピン相互作用により、

$$E = -\sum_i J s_i s_{i+1} - H \sum_i s_i \tag{6}$$

と表せる。ただし、他の相互作用はないとする。また、Ｊは交換相互作用で、正なら強磁性相互作用、負なら反強磁性相互作用である。Ｊが正なら隣り合うスピンの向きがそろっている方がＥの値が低くなり、安定することがわかるだろう。エネルギーが高いよりも低い方が安定するからである。H は外部磁場の強さである。この H の値によりあるスピンの方向がそろっている方がエネルギー E が低くなるので、外部磁場はスピンの方向を一定の向きにそろえることがわかるであろう。

3 計算方法

今回は一次元のある物質を考えて、自由度はスピン方向上下二つとする。また外部磁場の影響はないとする。

まず与えられた系に対して、適当な初期配置としてエネルギーを決めなければならない。すなわち、スピンの方向を決めるということである。この初期状態によって影響を受けない結果を得るには、まずある初期状態から以下の計算を一定回数行い、また別の初期状態から先ほどと同様に計算を行う。それからそれぞれの結果の平均をとりそれを初期状態にすればよい。

次に、乱数を利用して、新しいエネルギー値を決める。すなわちランダムである電子を選びそのスピンの方向を変えるのである。

式 (1) より、前と新しいエネルギーの差が ΔE のとき、新しく発生した状態の確率は、$\Delta P = e^{-\beta \Delta E}$ に比例する。もし、新しいエネルギー値の方が低いか、または同じならば ΔE は負か０となるから、このままの方が実現しやすいのでスピンの方向は先ほど変わって好かったということである。

もし、新しいエネルギー値の方が高くなった場合先ほどスピンの方向を変えたのが悪かったということである。だからすぐスピンの方向を元に戻すわけではなく、$\Delta P = e^{-\beta \Delta E}$ の確率で、スピンの方向を元に戻さ

ないということにするのである。ここでも乱数を上手く利用する。0 から 1 の間の乱数を発生させ、 $\Delta P = e^{-\beta\Delta E}$ が発生した乱数より大きければ、スピンの方向を元に戻さず、小さければ元に戻す。

これらの作業は、エネルギーが低い方が高い方より実現しやすいということを利用したのである。以上これらを繰り返す。J の値や温度を変えるといつも同じ状態にならないことがわかるだろう。

4 解の予想

実際に数値計算しなくても、ある程度は解が予想できる。初期状態として系全体のスピンの方向が一定方向へ向いているしよう。そこから上記の方法でシミュレーションを行ってみるのである。

まず、温度が 0 または極小の場合はどうだろうか。この場合 β が無限か極めて大きい値となるため、スピンの方向は滅多に変わることはないと思われる。

温度がある程度大きくなると、スピンの方向は ± 1 どちらとも、ほぼ同じ確率で実現するように思われる。つまり系の磁化が 0 になるか、ほぼ 0 に近くなると思われる。