イジング模型の定義

宇佐見 公輔

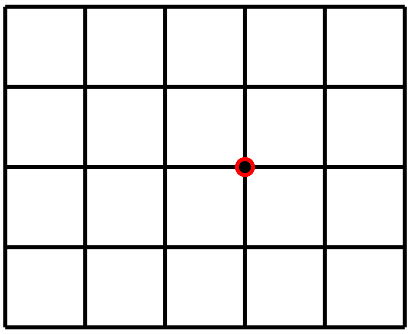
2020 年 10 月 16 日

イジング模型（Ising model）は統計力学で扱われる数理模型のひとつです。強磁性体や格子気体の模型として用いられます。1 次元と 2 次元のイジング模型は、数学的に厳密解を求めることができる可解格子模型です。

ここでは、2 次元イジング模型の定義と、それを解くとはどういうことを指すのかを述べます。

2 次元イジング模型の定義

m 行 n 列の格子（lattice）を考えます。次の図は 5×6 の格子の例です。



格子点を座標 (i, j) であらわすことにします。例えば上の図で赤い格子点は $(3, 4)$ であらわします。また、$m \times n$ の格子点全体の集合を L とします。

それぞれの格子点 $(i, j) \in L$ に対して $+1$ または -1 の値を指定することを、配置（configuration）と呼びます。つまり配置とは、写像

$$L \to \{\pm 1\}$$
$$(i, j) \longmapsto s_{ij}$$

のことです。また、s_{ij} を格子点 (i, j) のスピン（spin）と呼びます。配置 $s : L \to \{\pm 1\}$ と写像で書く代わりに、$s = (s_{ij})_{1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq n}$ という書き方もします。

配置 $s = (s_{ij})$ が与えられたとき、$s_{i+m, j} = s_{ij}$ および $s_{i, j+n} = s_{ij}$ という規則を追加することで、$i, j \in \mathbb{Z}$ に定義を拡張しておきます。この規則を周期境界条件と呼びます。

配置 $s=(s_{ij})$ に対して、実数値 $E(s)$ を次で定義します。

$$E(s) := -E_1 \sum_{i,j} s_{ij}s_{i+1,j} - E_2 \sum_{i,j} s_{ij}s_{i,j+1}$$

ここで、E_1 と E_2 は正の定数、$\sum_{i,j}$ は $\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}$ の略記です。$E(s)$ を配置 s のエネルギー（energy）と呼びます。

このように、格子点集合 L の配置 s に対するエネルギー $E(s)$ を設定した模型をイジング模型（Ising model）と呼びます。今は L を 2 次元の格子としているため、特に 2 次元イジング模型と呼びます。

補足 1：模型（model）という言葉は数理物理の用語です。

補足 2：イジング模型は、より一般には、磁場を考えたり相互作用が最近接に限らなかったりします。上述の定義は、最も狭い意味の定義となっています。

分配関数

統計力学の一般論によれば、ある系が絶対温度 T の平衡状態にあるとき、エネルギー $E(s)$ を持つ配置 s が出現する確率は

$$p(s) = \frac{1}{Z}\exp\left(-\frac{E(s)}{k_BT}\right)$$

です。ここで k_B は Boltzmann 定数です。Z は全確率を 1 に規格化する定数で、

$$Z = \sum_{s}\exp\left(-\frac{E(s)}{k_BT}\right)$$

です。$\sum_{s}$ は全ての配置 s についての和をとるという意味です。Z は T によって決まる値ですので、T についての関数と見ることができます。$Z(T)$ は分配関数（partition function）と呼ばれます。

2 次元イジング模型の分配関数は、

$$\begin{aligned}
Z(T) &= \sum_{s}\exp\left(-\frac{E(s)}{k_BT}\right)\\
&= \sum_{s}\exp\left(\frac{E_1}{k_BT}\sum_{i,j} s_{ij}s_{i+1,j} + \frac{E_2}{k_BT}\sum_{i,j} s_{ij}s_{i,j+1}\right)\\
&= \sum_{s}\exp\left(K_1\sum_{i,j} s_{ij}s_{i+1,j} + K_2\sum_{i,j} s_{ij}s_{i,j+1}\right)
\end{aligned}$$

と書けます。ここで $K_1 := \frac{E_1}{k_BT}$、$K_2 := \frac{E_2}{k_BT}$ とおきました。

いま、格子 L は $m\times n$ の有限のサイズとしていました。統計力学の模型として本当に考えたいのは、$m, n \to \infty$ の場合です。その場合の分配関数 $Z(T)$ を記述するのがひとつの目標となります。

模型が「解ける」とは

統計力学と熱力学の一般論によれば、ある系の自由エネルギー $F(T)$ と分配関数 $Z(T)$ との間に次の関係があります。

$$F(T) = -k_B T \log Z(T)$$

$F(T)$ は熱力学において最も基本的な物理量であり、他の熱力学量を導くことができます。したがって、分配関数を記述することができれば、模型が「解ける」といえます。

そして、2 次元イジング模型はこの意味で「解ける」模型です。

補足：一般には模型が「解ける」という言葉はこの意味に限りません。