

§ 9.2 イジングモデル

2012年10月7日

1 モデルの設定

物質の磁化の様子をモデル化したもので、実際の原子からスピン以外の物理量を無視して単純化する。

- 磁気モーメントによる相互作用だけを考える。
- 磁気モーメントの元になるのはスピン
- 相互作用は隣の粒子との間だけ
- 隣の粒子とスピンの向きが同方向のときと反対方向の時ではエネルギーは逆符号で同じ大きさになる。

各粒子のスピンの向きがバラバラになっていけば、マクロにはそれらが打ち消し合って全体の磁化は0になる。逆にスピンの向きに偏りがあれば、全体としての磁気モーメントが現れる。外部磁場があればその影響でスピンの向きに偏りができるので磁化が起きる(常磁性)。外部磁場がなくてもスピンに偏りが出ることがある(自発磁化)。自発磁化が強磁性の元になる。

また、スピンの向きの分布の仕方は温度に依存する(カノニカル分布-§ 2.2)。

2 1次元の例

1次元の場合は厳密に解く事が出来る。粒子のスピン状態を $\sigma_i \in \{-1, 1\}$ とする。また、無限個の粒子を考える代わりに閉じた輪のような構造、つまり粒子数が N の時に $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ とする。すると、ハミルトニアンは、

$$H = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1}$$

となり、分配関数は、

$$Z = \sum_{(\sigma_1, \dots, \sigma_N) \in \{-1, 1\}^N} \exp\left\{ \sum_{i=1}^N \beta J \sigma_i \sigma_{i+1} \right\}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{(\sigma_1, \dots, \sigma_N) \in \{-1, 1\}^N} \prod_{i=1}^N \exp\{\beta J \sigma_i \sigma_{i+1}\} \\
&= 2^N \left\{ \left(\frac{e^{\beta J} + e^{-\beta J}}{2} \right)^N + \left(\frac{e^{\beta J} - e^{-\beta J}}{2} \right)^N \right\} \\
&\quad \beta = \frac{1}{k_B T}
\end{aligned}$$

である。

外部磁場がなければ、自発磁化はない。

3 平均場近似

一般の場合解が求められないので、隣接粒子の影響の平均値が全体の平均値と一致していることとして、全体の磁化とミクロの平均値が一致する (self-consistent) という方程式を解いて、近似解を求める。

ハミルトニアンは、

$$H = -J \langle m_z \rangle \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

完全に一様であることを仮定すれば、一つの粒子についてのみ考えれば充分なので、

$$\langle m_z \rangle = \frac{e^{\beta z J \langle m_z \rangle} - e^{-\beta z J \langle m_z \rangle}}{e^{\beta z J \langle m_z \rangle} + e^{-\beta z J \langle m_z \rangle}}$$

これを $\langle m_z \rangle$ について解く。