

Spin系の統計力学：序論



Spin系とは

- 金属が磁気を帯びる性質：磁性(Magnetism)
- 局在電子の作る微小な磁気モーメント
 - これをspinと呼ぶ
- Spin間の相互作用はPauli排他律などの量子力学的力
 - 磁氣的力ではない
 - 単純にN極とS極が引き合うのではない

磁性の種類

- 強磁性(ferromagnetism)
 - 隣接するspinが同じ向きに配向する
 - 系全体として特定の向きに磁化する
 - 低温で実現する
- 反強磁性(anti-ferromagnetism)
 - 隣接するspinが逆向きに配向する
 - 低温で実現する
- 常磁性(paramagnetism)
 - 系全体として磁化していない
 - 高温で実現する

例：鉄

- 鉄は通常の温度で強磁性体
 - 常温で磁石に付く
- 770°C (Curie点) 以上で常磁性
 - 磁石に付かない
- Curie点の上下で強磁性から常磁性に変化する
 - 相転移: Phase Transition

磁性体のモデル

- 金属原子の位置にspin変数があるようなモデル
- Ising spin系 $S = \pm 1$
 - 統計力学の標準モデル
 - 様々な概念の具体例を与える
 - 様々な手法(理論、シミュレーション)の開発

Spin系のエネルギー

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} s_i s_j$$
$$J_{ij} = J_{ji}$$

- 負の符号は、spinが揃うとエネルギーが下がるように($J > 0$ の場合)
- $\frac{1}{2}$ は同じスピンの組が2度ずつ現れるため
- $\langle i, j \rangle$ は隣接サイトに関する和

$N=2$ の場合

$$E = -J_{12} s_1 s_2$$

- $J_{12} > 0$ ならば二つのスピンの揃うとエネルギーが下がる。
 - 絶対零度ではスピンの揃った状態が安定

$$(s_1, s_2) = (1, 1) \text{ または } (s_1, s_2) = (-1, -1)$$

$N=3$ の場合

$$E = -J_{12} s_1 s_2 - J_{23} s_2 s_3 - J_{31} s_3 s_1$$

- J_{ij} が全て正の場合
 - エネルギー最小の状態(基底状態、ground state)

$$(s_1, s_2, s_3) = (1, 1, 1) \text{ または } (s_1, s_2, s_3) = (-1, -1, -1)$$

-
- J_{ij} が全て負の場合
 - ループに沿った相互作用の積が負になる frustration が起こる。
 - 多数のスピンからなる系
 - 正負の相互作用が入り乱れている場合には、frustration が起こる。

$$N \rightarrow \infty$$

- 眼に見えるような (macroscopic)物理系
 - アボガドロ(Avogadro)数($N \sim 10^{23}$)程度の分子からなる
- 事実上無限個の粒子系として扱える
 - 無限個として扱った平均値からのずれは
 $N^{-1/2}$ 程度

スピングラス(spin glass)

- 正と負の相互作用が入り乱れた系
- アモルファス(Amorphous)
- 磁性体を高温にした後急冷するとできる
- 多数の準安定状態を持つ
- 神経回路網モデル

緩和過程(relaxation process)

- エネルギーを下げる方法
 - 一つ一つのスピンをどのように変化させればよいか
- site i のスピンの値を変化させたときのエネルギーの変化
$$\Delta E = -\Delta s_i \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_j$$
 - $\Delta E < 0$ となる場合にスピンを反転させることによって、エネルギーを下げるができる。

-
- 緩和によって局所的最小状態に行くことができる。
 - しかし、基底状態へ到達するとは限らない。
 - spin glass などのfrustrationがある系
 - 多数の局所最小状態

-
- 有限温度の系
 - 熱という相関の無い雑音がある。
 - 外部とエネルギーのやりとり
 - エネルギー的に高い方へ系が動くことが出来る。
 - 系は局所最小状態を抜け出ることが出来る。

熱浴(heat bath)

- 通常考えている系(正準集合)
 - 対象となる系(自由度)と環境となる巨大な系(自由度)からなる。
 - この環境となる巨大な系を熱浴と呼ぶ。
 - スピン系に対する固体格子のフォノン(phonon)
 - 気体に対する壁を通じた散乱

-
- 熱浴は無限系として理想化される。
 - 無限の熱容量を持つ。
 - 熱浴は系に対して雑音源のように振舞う。