イジングモデル

物理的な意味合いや量子力学的な話は飛ばして、1 次元イジングモデルの単純に解き方を示します。

磁気モーメント $\boldsymbol{m}$ を持ったものが磁場 $\boldsymbol{B}$ の中にあると、磁場と磁気モーメントの相互作用によって

$$E = -\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{B}$$

というエネルギーを持つことになり、これをゼーマンエネルギーと言ったりします。簡単のために z 方向のみに磁場がかかっているとします。量子論ではスピン角運動量と呼ばれるものが存在し (単にスピンと言っていきます)、これによって磁気モーメントが生じ、この磁気モーメントは

$$m = \mu_B S$$

のように書けて、S はスピンを表し、$S = \pm 1/2$ とします（z 方向のみなのでベクトルではないです）。μ_B はボーア磁子です。これは定数 g をつけて $-g\mu_B S$ としたほうが正確ですが、ここではどうでもいいです。この磁気モーメントによってエネルギーは

$$E = -mB = -\mu_B SB = -\mu_B \frac{1}{2}\sigma B$$

と書くことができます。$\sigma = \pm 1$ です。

簡単な例を最初にだしておきます。スピン $\sigma = +1, -1$ によって区別される 2 つの状態があり、$+1$ を上向き、-1 を下向きと呼ぶことにします。そうすると、上向きと下向きで磁気モーメントの符号が変わるので、上向きのときは $E = -mB$、下向きのときは $E = mB$ となります。このためエネルギーが $\pm mB$ という 2 準位系の問題になるので分配関数は

$$Z = \exp[-\frac{mB}{kT}] + \exp[\frac{mB}{kT}]$$

となります。これがスピンによるエネルギーを単純に考えたときの話です。

こういったものが磁性を考えたときの基本的な考え方です。ちなみにこの場合では熱力学の第三法則を満たしていません。この場合は、スピン間に働く相互作用をまったく考えていないからです。つまり、実際はスピン間相互作用というものが存在していて、このスピン相互作用を考慮に入れて計算しなければなりませんが、これによって難易度が跳ね上がります。

ここではスピン間相互作用の問題を考えていくときの磁性体に対する一つのモデルであるイジングモデル (Ising model) を扱います。イジングモデルは合金を考えるときに使われたりしています。このイジングモデルは量子論から導かれるスピンを含んでいますが、スピン成分が 1 つ (普通は z 成分) のみなので量子論的な計算の煩わしさがほとんど消えていて考えやすいです。

イジングモデルは、等間隔に 1 列に並べた N 個の原子 (スピンさえあれば何でもいい) が上下方向のスピンを持っているとし、隣り合ったスピン間に相互作用が働いている、としたものです (1 次元イジングモデル)。このときのエネルギーは

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

σ_i はスピンの方向に対応して上向きなら $+1$、下向きなら -1 になるとしたものです。第一項は隣り合ったスピン間の相互作用を表し、第二項はスピンと磁場との相互作用を表します。$h = \mu_B B/2$ で、J はスピン間相互作用の大きさを表します。もしくは磁気モーメントを $\pm 1/2$ に簡略化したものとしてもいいです。

J の符号によって状況が変わります。$-J\sigma_i\sigma_{i+1}$ は、σ_i は $+1$ か -1 が取れるので

$$-J\sigma_i\sigma_{i+1} = -J \quad (\sigma_i = \sigma_{i+1})$$

$$-J\sigma_i\sigma_{i+1} = +J \quad (\sigma_i \neq \sigma_{i+1})$$

となっています。このとき、$J > 0$ なら隣り合ったスピンが同じ向き $(\sigma_i = \sigma_{i+1})$ のとき $-J$ なのでエネルギーは下がり、異なった向き $(\sigma_i \neq \sigma_{i+1})$ だと $+J$ なのでエネルギーが上がります。$J < 0$ では逆で、スピン同じ向きだとエネルギーは上がり、異なった向きだとエネルギーが下がります。ここで、現実に存在している対象はよりエネルギーの低い可能な状態へ行こうとする性質があることを踏まえると、$J > 0$ のときスピンは同じ方向を向こうとし、$J < 0$ ではスピンは異なった方向を向こうとすると考えられます。このため、イジングモデルは、$J > 0$ なら相互作用はスピンの方向を同じに揃えようと働き、$J < 0$ なら逆方向を向かせるように働くモデルと言えます。こういったスピンの向きをお互いに同方向や、逆方向に向かせようとする相互作用のことを交換相互作用と言います。こういった要請を H の第一項は持っています。

これが 1 次元イジングモデルと言われるものです。ちなみに、イジングモデルは 2 次元までは解けるらしいですが、3 次元の解法はまだ確立されていません。1 次元の解法でさえ面倒なものになっているのがこれから分かります。

1 次元イジングモデルを解いていきます。ここで 1 つ条件として $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ というものをいれます。円状に並んでいて、一周したら元に戻りますよという条件 (周期的境界条件) です。この条件によって

$$E = -J\sum_{i=1}^{N-1}\sigma_i\sigma_{i+1} - h\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \ \Rightarrow\ -J\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\sigma_{i+1} - h\sum_{i=1}^{N}\frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2}$$

第一項の範囲が $N-1$ から N になるのは、一列に N 個の原子を並べたときは σ_N は σ_{N-1} としか隣り合いませんが、円状になっていると σ_N は $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ とも隣り合うからです。第二項は、$\sigma_{N+1} = \sigma_1$ から

$$\sum_{i=1}^{N}\sigma_{i+1} = \sigma_2 + \sigma_3 + \cdots + \sigma_N + \sigma_{N+1} = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \cdots + \sigma_N = \sum_{i=1}^{N}\sigma_i$$

となるので

$$\sum_{i=1}^{N}\sigma_i = \frac{1}{2}(\sum_{i=1}^{N}\sigma_i + \sum_{i=1}^{N}\sigma_{i+1}) = \sum_{i=1}^{N}\frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2}$$

と書けるからです。

というわけで、分配関数は

$$Z = \sum_{\sigma_1 = \pm 1}\cdots\sum_{\sigma_N = \pm 1}\exp[-\beta\sum_{i=1}^{N}(-J\sigma_i\sigma_{i+1} - h\frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2})]$$

可能な状態としてスピンによる ± 1 の区別があるのでその和を取っています。この和は σ_i に対して $+1, -1$ で和を取れという意味です（$\Sigma f(\sigma_1) = f(+1) + f(-1)$）。ここで exp 部分を行列で表現しようと試みます。そのために

$$\exp[\beta(J\sigma_i\sigma_{i+1}+h\frac{\sigma_i+\sigma_{i+1}}{2})]=<\sigma_i|A|\sigma_{i+1}> \tag{1}$$

このような表記を導入して、行列 A を計算することを考えます。量子力学でのブラケットと同じになっていますが、同じ計算規則になっているので単に記号としてこう書いているだけです。なので行列 U,V を使って

$$<\sigma_i|A|\sigma_{i+1}> \Leftrightarrow\ UAV$$

と書いても良いです。

まず、(1) の左辺を 2×2 行列の成分だと考えます。$\sigma_i=+1$ か $\sigma_i=-1$ のどちらかが選べることから、2×2 行列を作れて、その成分は σ_i が ± 1 のどちらかで指定されます。σ_i が ± 1 のどちらであるかを表すために

$$\sigma_i(+)=+1\ ,\ \sigma_i(-)=-1$$

と書くことにします。そうすると、

$$\exp[\beta(J\sigma_i(+)\sigma_{i+1}(+)+h\frac{\sigma_i(+)+\sigma_{i+1}(+)}{2})]=<\sigma_i(+)|A|\sigma_{i+1}(+)> \tag{2a}$$

$$\exp[\beta(J\sigma_i(-)\sigma_{i+1}(-)+h\frac{\sigma_i(-)+\sigma_{i+1}(-)}{2})]=<\sigma_i(-)|A|\sigma_{i+1}(-)> \tag{2b}$$

$$\exp[\beta(J\sigma_i(+)\sigma_{i+1}(-)+h\frac{\sigma_i(+)+\sigma_{i+1}(-)}{2})]=<\sigma_i(+)|A|\sigma_{i+1}(-)> \tag{2c}$$

$$\exp[\beta(J\sigma_i(-)\sigma_{i+1}(+)+h\frac{\sigma_i(-)+\sigma_{i+1}(+)}{2})]=<\sigma_i(-)|A|\sigma_{i+1}(+)> \tag{2d}$$

という 4 つの組み合わせが出来るので、これによって左辺は 2×2 行列

$$\begin{pmatrix} \sigma_+\sigma_+ & \sigma_+\sigma_- \\ \sigma_-\sigma_+ & \sigma_-\sigma_- \end{pmatrix} \tag{3}$$

の各成分になるとします。$\sigma_i(+)\sigma_{i+1}(+)$ によって指定されるものを $\sigma_+\sigma_+$ のようにして書いています。これは

$$\sigma_+\sigma_+\ :\ \exp[\beta(J(1\times 1)+h\frac{1+1}{2})]=\exp[\beta(J+h)]$$

$$\sigma_-\sigma_-\ :\ \exp[\beta(J((-1)\times(-1))+h\frac{-1-1}{2})]=\exp[\beta(J-h)]$$

$$\sigma_+\sigma_-\ :\ \exp[\beta(J(1\times(-1))+h\frac{1-1}{2})]=\exp[-\beta J]$$

$$\sigma_-\sigma_+\ :\ \exp[\beta(J((-1)\times 1)+h\frac{-1+1}{2})]=\exp[-\beta J]$$

と対応しています。

次に右辺に移ります。左辺が 2×2 行列 (3) の成分に対応しているので、$|\sigma_i>$ を行列として

$$|\sigma_i(+)>= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\ ,\ |\sigma_i(-)>= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

とします。$<\sigma_i|A|\sigma_{i+1}>$ が (3) の各成分になるようにしたいので、行列の計算規則から

$$<\sigma_i(+)| = (1\ 0)\ ,\ <\sigma_i(-)| = (0\ 1)$$

とします。この表記を使って A を作ります。$<\sigma_i|A|\sigma_{i+1}>$ を計算することで (3) に対応するようにするだけなので作るのは簡単です。例えば、$\sigma_+\sigma_+$ に対応するのは (2a) なので、$<\sigma_i(+)|$、$|\sigma_{i+1}(+)>$ から

$$\sigma_+\sigma_+\ \ :<\sigma_i(+)|A|\sigma_{i+1}(+)>= (1\ 0)\begin{pmatrix} a\ b \\ c\ d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = a = A_{11}$$

A_{11} は行列 A の (1,1) 成分のことです。他の場合も同様に

$$\sigma_-\sigma_-\ \ :<\sigma_i(-)|A|\sigma_{i+1}(-)>= (0\ 1)\begin{pmatrix} a\ b \\ c\ d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = d = A_{22}$$

$$\sigma_+\sigma_-\ \ :<\sigma_i(+)|A|\sigma_{i+1}(-)>= (1\ 0)\begin{pmatrix} a\ b \\ c\ d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = b = A_{12}$$

$$\sigma_-\sigma_+\ \ :<\sigma_i(-)|A|\sigma_{i+1}(+)>= (0\ 1)\begin{pmatrix} a\ b \\ c\ d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = c = A_{21}$$

となります。なので (3) と (2a)〜(2d) から

$$A = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix} \tag{4}$$

とすればいいです。

(1) を使って分配関数を書くと

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1} <\sigma_1|A|\sigma_2><\sigma_2|A|\sigma_3>\cdots<\sigma_{N-1}|A|\sigma_N><\sigma_N|A|\sigma_{N+1}>$$

A には σ_i は含まれていません。そして、ベクトルの直積 ($n \times 1$ 行列と $1 \times m$ 行列の積) の規則から分かるように

$$
\begin{aligned}
\sum_{\sigma_i=\pm 1} |\sigma_i><\sigma_i| &= |\sigma_+><\sigma_+| + |\sigma_-><\sigma_-| \\
&= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1\ 0) + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (0\ 1) \\
&= \begin{pmatrix} 1\ 0 \\ 0\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0\ 0 \\ 0\ 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1\ 0 \\ 0\ 1 \end{pmatrix} \\
&= I
\end{aligned}
$$

となっていることと (I は単位行列)、最初に入れた条件 $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ を考えてやれば

$$
\begin{aligned}
Z = & \sum_{\sigma_1=\pm 1} <\sigma_1|A^N|\sigma_1> \\
= & <\sigma_+|A^N|\sigma_+> + <\sigma_-|A^N|\sigma_-> \\
= & (1\ 0)A^N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + (0\ 1)A^N \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

A は 2×2 行列なので、

$$
(1\ 0) \begin{pmatrix} a\ b \\ c\ d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = a\ ,\ (0\ 1) \begin{pmatrix} a\ b \\ c\ d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = d
$$

となり

$$
Z = \mathrm{tr}[A^N]
$$

と書けます。

直積を使わなくても計算できます。行列 U 同士の積 $UU = U^2$ が

$$
(U^2)_{ij} = \sum_k U_{ik} U_{kj}
$$

と書けることを利用すればいいです。(4) を出すときに見たように $<\sigma_i|A|\sigma_{i+1}>$ は A の成分 A_{ij} に対応しています。それを

$$
A_{\sigma_i \sigma_{i+1}} =<\sigma_i|A|\sigma_{i+1}>
$$

として、σ_i の ± 1 に対して

$$A_{11} =< \sigma_i(+)|A|\sigma_{i+1}(+) > \ ,\ A_{22} =< \sigma_i(-)|A|\sigma_{i+1}(-) >$$

$$A_{12} =< \sigma_i(+)|A|\sigma_{i+1}(-) > \ ,\ A_{21} =< \sigma_i(-)|A|\sigma_{i+1}(+) >$$

とします。そうすると

$$\begin{aligned}
&\sum_{\sigma_1=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1} < \sigma_1|A|\sigma_2 >< \sigma_2|A|\sigma_3 > \cdots < \sigma_{N-1}|A|\sigma_N >< \sigma_N|A|\sigma_{N+1} > \\
&= \sum_{\sigma_1=\pm1}\sum_{\sigma_3=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}(\sum_{\sigma_2=\pm1} < \sigma_1|A|\sigma_2 >< \sigma_2|A|\sigma_3 >)\cdots < \sigma_{N-1}|A|\sigma_N >< \sigma_N|A|\sigma_{N+1} > \\
&= \sum_{\sigma_1=\pm1}\sum_{\sigma_3=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}(< \sigma_1|A|\sigma_2(+) >< \sigma_2(+)|A|\sigma_3 > + < \sigma_1|A|\sigma_2(-) >< \sigma_2(-)|A|\sigma_3 >) \\
&\qquad\qquad \times \cdots < \sigma_{N-1}|A|\sigma_N >< \sigma_N|A|\sigma_{N+1} > \\
&= \sum_{\sigma_1=\pm1}\sum_{\sigma_3=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}(A_{\sigma_1 1}A_{1\sigma_3} + A_{\sigma_1 2}A_{2\sigma_3}) < \sigma_3|A|\sigma_4 > \cdots < \sigma_{N-1}|A|\sigma_N >< \sigma_N|A|\sigma_{N+1} > \\
&= \sum_{\sigma_1=\pm1}\sum_{\sigma_3=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}(A^2)_{\sigma_1\sigma_3} < \sigma_3|A|\sigma_4 > \cdots < \sigma_{N-1}|A|\sigma_N >< \sigma_N|A|\sigma_{N+1} > \\
&= \sum_{\sigma_1=\pm1}\sum_{\sigma_4=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}\sum_{\sigma_3=\pm1}(A^2)_{\sigma_1\sigma_3}A_{\sigma_3\sigma_4}\cdots < \sigma_{N-1}|A|\sigma_N >< \sigma_N|A|\sigma_{N+1} > \\
&= \sum_{\sigma_1=\pm1}\sum_{\sigma_4=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}(A^3)_{\sigma_1\sigma_4}\cdots < \sigma_{N-1}|A|\sigma_N >< \sigma_N|A|\sigma_{N+1} > \\
&= \sum_{\sigma_1=\pm1}(A^N)_{\sigma_1\sigma_1} \\
&= (A^N)_{11} + (A^N)_{22} \\
&= \mathrm{tr}[A^N]
\end{aligned}$$

となって、同じ結果になります。

A の形を見れば分かるように実対称行列と呼ばれるものなので、ユニタリー行列によって対角化することができます。そして、その対角成分は A の固有値が対応します (この話は線形代数の本には必ず載っています。簡易的な話は量子力学の「ユニタリー変換について」でしています)。つまり、A のトレースを求めることは固有値を足すことと同じなので、行列での固有値を求める方法から (| | は行列式)

$$
\begin{aligned}
0 &= |A - \lambda I| \\
&= \left| \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} \right| \\
&= \left| \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} - \lambda & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} - \lambda \end{pmatrix} \right| \\
&= \lambda^2 - \lambda(e^{\beta(J+h)} + e^{\beta(J-h)}) + e^{\beta(J+h)+\beta(J-h)} - e^{-2\beta J} \\
&= \lambda^2 - \lambda(e^{\beta(J+h)} + e^{\beta(J-h)}) + e^{2\beta J} - e^{-2\beta J} \\
&= \lambda^2 - \lambda e^{\beta J}(e^{\beta h} + e^{-\beta h}) + (e^{2\beta J} - e^{-2\beta J}) \\
&= \lambda^2 - 2\lambda e^{\beta J}\cosh(\beta h) + 2\sinh(2\beta J)
\end{aligned}
$$

解の公式を使えば λ は

$$
\begin{aligned}
\lambda &= e^{\beta J}\cosh(\beta h) \pm \sqrt{e^{2\beta J}\cosh^2(\beta h) - 2\sinh(2\beta J)} \\
&= e^{\beta J}\cosh(\beta h) \pm \sqrt{e^{2\beta J}(1 + \sinh^2(\beta h)) - e^{2\beta J} + e^{-2\beta J}} \\
&= e^{\beta J}\cosh(\beta h) \pm \sqrt{e^{2\beta J}\sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}
\end{aligned}
$$

というわけで固有値 λ は二つになって

$$
\lambda_1 = e^{\beta J}\cosh(\beta h) + \sqrt{e^{2\beta J}\sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}
$$

$$
\lambda_2 = e^{\beta J}\cosh(\beta h) - \sqrt{e^{2\beta J}\sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta J}}
$$

トレースの式に入れると

$$
\mathrm{tr}[A^N] = \mathrm{tr}\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N
$$

なので分配関数は

$$
Z = \lambda_1^N + \lambda_2^N
$$

となります。こういった方法を転送行列の方法といいます。ここまで見てきた分かったと思いますが、特殊な計算技術を使っています。1 次元でさえこんなんですから、2 次元になったらさらに難易度が跳ね上がります。

別の解法というか、外部磁場がない場合だとかなり簡単に求められます。外部磁場がないときのエネルギーは

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

というスピン間相互作用部分だけになります。ここでも $\sigma_{N+4}=\sigma_1$ という条件はいれます (いれない場合は下の補足 1 で計算しています)。このときの分配関数は

$$Z=\sum_{\sigma_1=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}\exp[\sum_{i=1}^{N}(\beta J\sigma_i\sigma_{i+1}]$$

そして exp 部分である

$$\exp[\beta J\sigma_i\sigma_{i+1}]=\begin{cases}\exp[\beta J] & (\sigma_i=\sigma_{i+1})\\ \exp[-\beta J] & (\sigma_i\neq\sigma_{i+1})\end{cases}$$

これは上手いこと双曲線関数で書くことができて

$$\begin{aligned}\exp[\beta J\sigma_i\sigma_{i+1}]=&\ \frac{e^{\beta J}+e^{-\beta J}}{2}+(\pm1)\frac{e^{\beta J}-e^{-\beta J}}{2}\\ =&\ \cosh(\beta J)+\sigma_i\sigma_{i+1}\sinh(\beta J)\end{aligned}$$

これを使って分配関数を書くと

$$Z=\sum_{\sigma_1=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}\big(\cosh(\beta J)+\sigma_1\sigma_2\sinh(\beta J)\big)\times\cdots\times\big(\cosh(\beta J)+\sigma_N\sigma_1\sinh(\beta J)\big)$$

ここでもさっきと同じように $\sigma_{N+1}=\sigma_1$ という条件を入れています。これに対して

$$\sigma_i^2=1\ ,\ \sum_{\sigma_i=\pm1}\sigma_i=0$$

の関係を使います。積を展開すると

$$
\begin{aligned}
Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm 1}\Big(&(\cosh(\beta J))^N + \sigma_1\sigma_2\sigma_2\sigma_3\cdots\sigma_N\sigma_1(\sinh(\beta J))^N \\
&+\cosh(\beta J)\sigma_2\sigma_3\sigma_3\sigma_4\cdots\sigma_N\sigma_1(\sinh(\beta J))^{N-1}+\cdots \\
&+(\cosh(\beta J))^2\sigma_3\sigma_4\sigma_4\sigma_5\cdots\sigma_N\sigma_1(\sinh(\beta J))^{N-2}+\cdots \\
&+\cdots\Big) \\
= \sum_{\sigma_1=\pm 1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm 1}\Big(&(\cosh(\beta J))^N + \sigma_1^2\sigma_2^2\sigma_3^2\cdots\sigma_N^2(\sinh(\beta J))^N \\
&+\cosh(\beta J)\sigma_1\sigma_2\sigma_3^2\sigma_4^2\cdots\sigma_N^2(\sinh(\beta J))^{N-1}+\cdots \\
&+(\cosh(\beta J))^2\sigma_1\sigma_3\sigma_4^2\sigma_5^2\cdots\sigma_N^2(\sinh(\beta J))^{N-2}+\cdots \\
&+\cdots\Big)
\end{aligned}
$$

となっています。例えば σ_1 の和を取るとすれば、σ_1^2 を含んでいない項は全て消えて

$$
\begin{aligned}
Z = \sum_{\sigma_2=\pm 1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm 1}\Big[\Big(&(\cosh(\beta J))^N + \sigma_2^2\sigma_3^2\cdots\sigma_N^2(\sinh(\beta J))^N \\
&+\cosh(\beta J)\sigma_2\sigma_3^2\sigma_4^2\cdots\sigma_N^2(\sinh(\beta J))^{N-1}+\cdots \\
&+(\cosh(\beta J))^2\sigma_3\sigma_4^2\sigma_5^2\cdots\sigma_N^2(\sinh(\beta J))^{N-2}+\cdots \\
&+\cdots\Big) \\
+\Big(&(\cosh(\beta J))^N + \sigma_2^2\sigma_3^2\cdots\sigma_N^2(\sinh(\beta J))^N \\
&-\cosh(\beta J)\sigma_2\sigma_3^2\sigma_4^2\cdots\sigma_N^2(\sinh(\beta J))^{N-1}+\cdots \\
&-(\cosh(\beta J))^2\sigma_3\sigma_4^2\sigma_5^2\cdots\sigma_N^2(\sinh(\beta J))^{N-2}+\cdots \\
&+\cdots\Big)\Big] \\
= 2\sum_{\sigma_2=\pm 1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm 1}&((\cosh(\beta J))^N + \sigma_2^2\sigma_3^2\cdots\sigma_N^2(\sinh(\beta J))^N+\cdots)
\end{aligned}
$$

となります。最後の $\cdots$ 部分は σ_1^2 を含んでいた他の項です。同様に σ_2 以降も行っていけば、結局 σ_i を含んでいる項は全て消えて、この 2 つの項だけが生き残ることが分かります。そして、σ_i の和を取るとき常に係数として 2 が出てくるので、σ_1 から σ_N までの N 回繰り返すことから 2^N となって

$$
Z = 2^N[\cosh(\beta J))^N + (\sinh(\beta J))^N]
$$

となります。これは転送行列の方法で求めた結果の $h=0$ をとったものと同じです。

この外部磁場がない場合のエントロピーを求めて第三法則を満たしているか確かめておきます。N が大きい場合、ようは微視的な系でなく巨視的な系の場合だとしてやります。まず、exp は正の値しか持たないことから

$$
(e^{\beta J}+e^{-\beta J}) > (e^{\beta J}-e^{-\beta J})
$$

このとき N が十分大きければ

$$(\cosh(\beta J))^N(1+\frac{\sinh(\beta J)}{\cosh(\beta J)})^N \ \Rightarrow\ (\cosh(\beta J))^N$$

と近似することができます。これで大分簡単になります。分配関数は

$$Z \simeq 2^N(\cosh(\beta J))^N$$

となるので、ヘルムホルツの自由エネルギーは

$$F=-kT\log Z=-NkT\log(2\cosh(\beta J))=-NkT\log(e^{\beta J}+e^{-\beta J})$$

これからエントロピーを求めてやれば

$$\begin{aligned} S &= -\frac{\partial F}{\partial T}=Nk\log(2\cosh(\beta J))-NkT\frac{2\sinh(\beta J)}{2\cosh(\beta J)}\frac{J}{kT^2} \\ &= Nk\log(2\cosh(\beta J))-N\frac{J}{T}\tanh(\beta J) \end{aligned}$$

で、これの低温極限をとってやると

$$\begin{aligned} S &= Nk\log(e^{\beta J}(1+e^{-2\beta J}))-N\frac{J}{T}\frac{e^{-\beta J}(e^{2\beta J}-1)}{e^{-\beta J}(e^{2\beta J}+1)} \\ &= Nk\beta J+Nk\log(1+e^{-2\beta J})-N\frac{J}{T}\frac{(e^{2\beta J}-1)}{(e^{2\beta J}+1)} \\ &= N\frac{1}{T}J\frac{(e^{2\beta J}+1)}{(e^{2\beta J}+1)}-N\frac{J}{T}\frac{(e^{2\beta J}-1)}{(e^{2\beta J}+1)}+Nk\log(1+e^{-2\beta J}) \\ &= N\frac{J}{T}\frac{2}{e^{2\beta J}+1}+Nk\log(1+e^{-2\beta J}) \\ &\simeq N\frac{J}{T}\frac{2}{e^{2\beta J}+1}+Nk\log 1 \qquad (\beta\to\infty) \\ &= 2N\frac{J}{T}e^{-2\beta J}\simeq 0 \end{aligned}$$

というわけで絶対零度でエントロピーが 0 になっています。
　ちなみに、今の近似においては分配関数が

$$Z\simeq 2^N(\cosh(\beta J))^N=2^N(\frac{e^{\beta J}+e^{-\beta J}}{2})^N=(e^{\beta J}+e^{-\beta J})^N$$

となっているので、2 準位系が N 個ある状況と同じになっています。

・補足 1

　原子の並びを円状にしましたが、1 列に並べた場合も $h=0$ のときは簡単に計算できます。この場合は

$$Z=\sum_{\sigma_1=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}\exp[\beta J\sum_{i=1}^{N-1}\sigma_i\sigma_{i+1}]$$

を計算すればいいです。双曲線関数にしなくても簡単に計算できるので、小細工せずに素直に和を取っていくと

$$\begin{aligned}
Z=&\sum_{\sigma_1=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}\exp[\beta J(\sigma_1\sigma_2+\sigma_2\sigma_3+\cdots+\sigma_{N-1}\sigma_N)]\\
=&\sum_{\sigma_2=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}\sum_{\sigma_1=\pm1}e^{\beta J\sigma_1\sigma_2}\exp[\beta J(\sigma_2\sigma_3+\cdots+\sigma_{N-1}\sigma_N)]\\
=&\sum_{\sigma_2=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}\sum_{\sigma_1=\pm1}(e^{\beta J\sigma_2}+e^{-\beta J\sigma_2})\exp[\beta J(\sigma_2\sigma_3+\cdots+\sigma_{N-1}\sigma_N)]\\
=&\sum_{\sigma_3=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}\sum_{\sigma_2=\pm1}(e^{\beta J\sigma_2}+e^{-\beta J\sigma_2})e^{\beta J\sigma_2\sigma_3}\exp[\beta J(\sigma_3\sigma_4+\cdots+\sigma_{N-1}\sigma_N)]\\
=&\sum_{\sigma_3=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}((e^{\beta J}+e^{-\beta J})e^{\beta J\sigma_3}+(e^{-\beta J}+e^{\beta J})e^{-\beta J\sigma_3})\exp[\beta J(\sigma_3\sigma_4+\cdots+\sigma_{N-1}\sigma_N)]\\
=&\sum_{\sigma_3=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}(e^{\beta J}+e^{-\beta J})(e^{\beta J\sigma_3}+e^{-\beta J\sigma_3})\exp[\beta J(\sigma_3\sigma_4+\cdots+\sigma_{N-1}\sigma_N)]\\
=&\sum_{\sigma_4=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}\sum_{\sigma_3=\pm1}(e^{\beta J}+e^{-\beta J})(e^{\beta J\sigma_3}+e^{-\beta J\sigma_3})e^{\beta J\sigma_3\sigma_4}\exp[\beta J(\sigma_4\sigma_5+\cdots+\sigma_{N-1}\sigma_N)]\\
=&\sum_{\sigma_4=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}(e^{\beta J}+e^{-\beta J})((e^{\beta J}+e^{-\beta J})e^{\beta J\sigma_4}+(e^{-\beta J}+e^{\beta J})e^{-\beta J\sigma_4})\exp[\beta J(\sigma_4\sigma_5+\cdots+\sigma_{N-1}\sigma_N)]\\
=&\sum_{\sigma_4=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}(e^{\beta J}+e^{-\beta J})^2(e^{\beta J\sigma_4}+e^{-\beta J\sigma_4})\exp[\beta J(\sigma_4\sigma_5+\cdots+\sigma_{N-1}\sigma_N)]
\end{aligned}$$

と続いていきます。σ_4 の和を取るときに 2 乗になっているので、σ_N まで計算すれば

$$\begin{aligned}
Z=&\sum_{\sigma_{N-1}=\pm1}\sum_{\sigma_N=\pm1}(e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{N-3}(e^{\beta J\sigma_{N-1}}+e^{-\beta J\sigma_{N-1}})e^{\beta J\sigma_{N-1}\sigma_N}\\
=&\sum_{\sigma_N=\pm1}(e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{N-3}((e^{\beta J}+e^{-\beta J})e^{\beta J\sigma_N}+(e^{-\beta J}+e^{\beta J})e^{-\beta J\sigma_N}\\
=&\sum_{\sigma_N=\pm1}(e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{N-2}(e^{\beta J\sigma_N}+e^{-\beta J\sigma_N})\\
=&(e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{N-2}(e^{\beta J}+e^{-\beta J}+e^{-\beta J}+e^{\beta J})\\
=&2(e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{N-1}
\end{aligned}$$

となります。

・補足 2

スピンを考慮した別のモデルであるハイゼンベルグモデルのさわりの部分だけを見ておきます。こういったモデルもあるんだ程度の話です。

　ハイゼンベルグモデル (Heisenberg model) というのはイジングモデルと同様にスピン間相互作用を考えるモデルの一種で、ハイゼンベルグモデルのハミルトニアンは

$$H = -J\sum_{i,j} \boldsymbol{s_i}\cdot\boldsymbol{s_j} - \sum_i m_i h$$

s はスピン演算子、m は磁気モーメント、h は外部磁場です。何がイジングモデルと違うのかというと、スピンがベクトルになっていて内積で表現されているところです。イジングモデルではスピンを 1 方向のみの場合として考えていましたが、今度は他の成分も含まれた形になります。

　まず必要になるのが $\boldsymbol{s_i}\cdot\boldsymbol{s_j}$ は何なのかなので、これだけ求めます。外部磁場はないとします。どうするのかというと、量子力学でのスピンの合成という話を持ち出してきます (量子力学の「角運動量演算子」や「角運動量の合成」参照)。スピン 1/2 を持つ $\boldsymbol{s}_1, \boldsymbol{s}_2$ を合成して

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2$$

とします。$\boldsymbol{S}$ が合成されたスピンです。これから

$$\boldsymbol{S}^2 = \boldsymbol{s}_1^2 + \boldsymbol{s}_2^2 + 2\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2$$

演算子とした $\boldsymbol{S}^2$ の固有値は $\hbar^2 S(S+1)$ で、$\boldsymbol{s}_1^2$ と $\boldsymbol{s}_2^2$ の固有値は

$$\frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$$

で与えられます。このとき S の取れる値は $0, 1$ です。これから $\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2$ の固有値として

$$\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{S}^2 - \boldsymbol{s}_1^2 - \boldsymbol{s}_2^2) = \frac{1}{2}\hbar^2(S(S+1) - \frac{3}{4} - \frac{3}{4})$$

というものが得られ、S は 0 か 1 なので

$$\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2 = \begin{cases} \dfrac{1}{4} & (S=1) \\ -\dfrac{3}{4} & (S=0) \end{cases}$$

となります。なので H は

$$H = -J\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2 = \begin{cases} -\dfrac{1}{4} & (S=1) \\ \dfrac{3}{4} & (S=0) \end{cases}$$

になります。一応このモデルの性質について簡単に言っておくと、ある温度を下回ると外部磁場がなくても磁気モーメントを持ち始め、磁化率が発散します。

　ハイゼンベルグモデルやイジングモデルは物性に関するモデルとして使用されているものです。ハイゼンベルグモデルのほうが量子力学的な効果が強いためイジングモデルに比べて状況が複雑でやっかいな代物となっていますが、ハイゼンベルグモデルは固体物理の基礎的なものとして扱われます。