研究解説

多次元協力格子の配置エントロピーの境界値とその幾何学的性質

Boundary values and geometric properties of the configuration entropy of multidimensional cooperative lattices

工藤徹一*・安井　至**・松本広重***
永沢裕之**・日比野光宏*
Tetsuichi KUDO, Haru YASUI, Hiroshige MATSUMOTO, Hiroyuki NAGASAWA and Mitsuhiro HIBINO

多次元協力格子の配置エントロピー（s）の境界値を求めるとともに，その頂点（確率的期待値）近傍の曲率を計算機シミュレーションにより調べた．これらの知見をもとに，sと一次元格子の厳密エントロピーおよびベーテ近似と等価なエントロピー（s_β）の相互関係について考察した．sは，頂点においてs_βと二次またはこれより高次に接し，境界においては一次元と一致する曲線と考えられる．

1. はじめに

互いに距離の等しいN個の格子点をもつ任意の格子にn個の粒子AとN-n個の粒子Bを配置したとき，近接するAA，BB，ABボンド間に相互作用u_1, u_2, u_3が作用するとすれば，それらの数をN_{AA}，N_{BB}，N_{AB}として，この体系の自由エネルギーは，

$$F=U\text{-}TS=U_{ex}+u_1N_{AA}+u_2N_{BB}+u_3N_{AB}\text{-}kT\log W \quad (1)$$

と記述されよう．ここで，Uexは外部からの作用など，粒子間相互作用以外の内部エネルギーの項，klogWは配置エントロピーである．このWは，当然，各ボンドの数が$N_{AA}(=n_0)$，$N_{BB}(=z_0)$，$N_{AB}(=2p)$となるようにn個のAを配置するやり方の数でなければならない．ボンド数の間には，格子点の配位数をCとすれば，

$$n_0=(C/2)n\text{-}p,\quad z_0=(C/2)(N\text{-}n)\text{-}p \quad (2)$$

なる関係があり，一つを決めれば他は自動的にきまる．たとえば，$n_0(=N_{AA})$を独立変数と見なしたときのWをW(n_0, n)などと書く．この自由エネルギーの表現は簡明，かつ，直接的であり，相転移の計算などに適している．一次元格子のW(n_0, n)は菊池[1]によって厳密に与えられている．しかし，多次元格子については，イジングモデルの厳密解が知られている正方格子も含めて，W(n_0, n)の厳密，且つ，露な表現は未だ与えれていない．したがって，式（1）に基づく計算には，通常，平均場近似に相当するエントロピー$s_m=\log W_t(W_t=N!/n!(N\text{-}n)!)$やベーテ近似[2]と等価なエントロピー$s_\beta$が用いられる．しかし，これらの近似は，その性格上，相互作用の弱いときににしか成り立たない．

本論文の目的は，一次元格子の厳密なエントロピー，ベーテ近似のエントロピーs_βおよび多次元格子の未知な厳密エントロピーsの相互関係を，新たに求めたsの境界値などの知見をもとに議論することにある．この結果は，sのより正確な表現を追求するうえで役立つものではないかと考える．

2. 1次元格子のエントロピー

1次元格子のエントロピーは既知であるが，ここで用いる変数（ボンド数）との関係が明確にわかるように，われわれの開発した新たな方法によりそれを導くことにする．

既報[3]のように，一次元の円環格子はA，Bがどんな配置をとっても，両端にAを半分に割ったものをもつ以下の部品を適当な個数（n_0, n_1, n_2, ……）使うことによって組み立てることができる．

$$A_{1/2}\text{-}A_{1/2}(n_0),\ A_{1/2}\text{-}B\text{-}A_{1/2}(n_1),\ A_{1/2}\text{-}B\text{-}B\text{-}A_{1/2}(n_2),$$
$$A_{1/2}\text{-}B\text{-}B\text{-}B\text{-}A_{1/2}(n_3),\ \cdots\cdots$$

*東京大学生産技術研究所　材料界面マイクロ工学研究センター
**東京大学国際・産学共同研究センター
***名古屋大学理工科学総合研究センター

ここで注意すべきは，部品 $A_{1/2}$-$A_{1/2}$ の数 n_0 は考えている配置に存在する AA ボンドの数 N_{AA} に等しいことである．前項で N_{AA} を n_0 と書いたのはこの理由による．格子点の数が N，A の数が $N_A(=n)$ のとき，$n_0, n_1, n_2, \cdots\cdots$ は次式を満たさなければならない．

$$N_A=n=n_0+n_1+n_2+\cdots\cdots\cdots+n_m\,(m=N\text{-}n) \tag{3}$$
$$N_B=N\text{-}n=n_1+2n_2+3n_3+\cdots\cdots+mn_m \tag{4}$$

式（3）は，このような個数の部品を使って実現できる配置の種類の数wが

$$w=n!/n_0!n_1!n_2!n_3!\cdots\cdots n_m! \tag{5}$$

であることを主張する．そして，実際の格子ではこれを最も大きくするように $n_0, n_1, n_2, \cdots\cdots$ の値が選ばれているだろう（S=klogw最大）．式（3），（4）の束縛条件のもとに w を最大化すれば，

$$n_0=a,\ n_1=ab,\ n_2=ab^2,\ n_3=ab^3,\ \cdots\cdots \tag{6}$$
$$(a=\exp(-\lambda_1),\ b=\exp(-\lambda_2))$$

ここで，λ_1, λ_2 は Lagrange の未定乗数である．これらを束縛条件の式に代入し，b<1 を仮定すれば，

$$n=a+ab+ab^2+ab^3+\cdots\cdots=a/(1\text{-}b) \tag{7}$$
$$N\text{-}n=ab+2ab^2+3ab^3+\cdots\cdots=ab/(1\text{-}b)^2 \tag{8}$$

これらから未定乗数 a, b は b<1 の仮定を満たしつつ次のように定まる．

$$a=n^2/N \qquad b=(N\text{-}n)/N\,(<1) \tag{9}$$

これを式（6）に入れれば $n_0, n_1, n_2, \cdots\cdots$ が定まる．式（5）の log(w) を Stirling の公式（logn!=nlogn-n）で展開し，$n_0, n_1, n_2, \cdots\cdots$ の値を代入すれば，

$$\log(w)=n\log(N\text{-}n)/n+N\log N/(N\text{-}n)$$
$$\text{or } w=N!/(N\text{-}n)!n! \tag{10}$$

この結果自体は前項でも述べたところであり，計算するまでもなく自明であるが，格子の分割方法など，上記の議論の妥当性を保証するものである．

つぎに n_0 を一定と見なして同様の計算を行ってみよう．これによって求まる w は n_0 個の AA ボンドをもつときの最大配置数であるから $W(n_0, n)$ に等しい．この場合の束縛条件は

$$p=n\text{-}n_0=n_1+n_2+\cdots\cdots+n_m\,(m=N\text{-}n) \tag{11}$$
$$N\text{-}n=n_1+2n_2+3n_3+\cdots\cdots+mn_m \tag{12}$$

で与えられる（$p=N_{AB}/2$）．これらの下に w を最大化すれば，

$$n_1=ab,\ n_2=ab^2,\ n_3=ab^3,\cdots\cdots$$

（a，bの意味は上述と同じ）．したがって，b<1 を仮定すれば，

$$p=ab/(1\text{-}b) \quad \text{and} \quad N\text{-}n=ab/(1\text{-}b)^2 \tag{13}$$

が得られ，未定乗数は仮定を満足しつつ，次のように定まる．

$$a=p^2/z0 \quad \text{and} \quad b=z_0/(N\text{-}n)\,(=N_{BB}/N_B<1) \tag{14}$$

これらから決まる $n_0, n_1, n_2, \cdots\cdots$ の値を式（5）の w の展開式に代入し，整形すれば，

$$\log(w)=n\log\text{-}n+(N\text{-}n)\log(N\text{-}n)\text{-}(N\text{-}n)\text{-}$$
$$(n_0\log n_0\text{-}n_0)\text{-}(z_0\log z_0\text{-}z_0)\text{-}(2p\log\text{-}2p) \tag{15}$$

したがって，少なくとも，logm!=mlogm-m の近似のレベルにおいて，

$$W(n_0, n)=n!(N\text{-}n)!/n_0!z_0!(p!)^2 \tag{16}$$

と表現することができる．絶対的に厳密な配置数には，$(\log R)/N\to 0\,(N\to\infty)$ となるような小さい付加項Rが乗ぜられているものと思われるが，実際の計算に用いられる次の形のエントロピーは実質的に厳密と考えられる．

$$s=S/Nk=(1/N)\log W(n0, n)$$
$$=x\log(z_0/n_0)(x/(1\text{-}x))+\log(1\text{-}x)/z_0+p\log(n_0z_0/p^2) \tag{17}$$

ここで，x=n/N，$n_0=n_0/N$，$z_0=z_0/N$，p=p/N であるが，以下，とくに紛らわしいことのないときは，このように n_0/N 等を単に n_0 等と記す．式 (16) あるいは (17) は，当然，菊池[1)]の与えた1次元のエントロピーと等価である．

なお，この関数 s=(1/N)logW の定義域は，p と x を独立変数とすれば図1によって示される．各境界での値は，

$$s=0;\ p=0\,(n_0=n,\ z_0=N\text{-}n)) \tag{18}$$

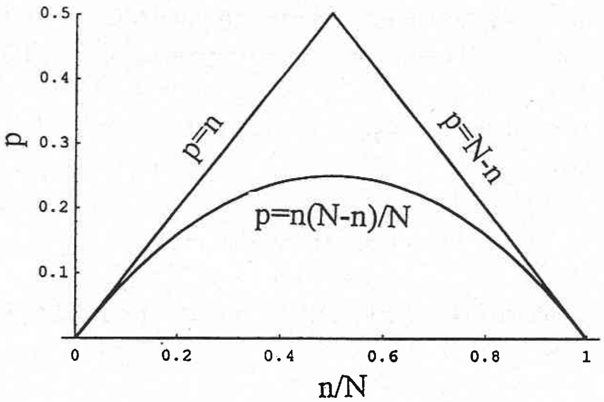

図1　1次元格子のエントロピー（s (p, x)）の定義域（p=x (1-x) はエントロピーの尾根）

$$s=(1/N)\log(N\text{-}n)!/n!(N\text{-}2n)!;\ p=n\ (n_0=0,\ z_0=N\text{-}2n) \quad (19)$$

$$s=(1/N)\log n!/(N\text{-}n)!(2n\text{-}N)!;\ p=N\text{-}n\ (n_0=2n\text{-}N,\ z_0=0) \quad (20)$$

であり，例えば，式（19）はAAボンドを作らないようにn個のAをN個の格子点に配置するときの配置数を与えている．

このエントロピーが熱力学的体系において何を主張するかを見ることは，多次元格子のエントロピーを考察する上で大いに参考になる．そこで，AAボンドだけにukTなる相互作用が働くという最も簡単な体系を考えてみる．pを独立変数に選べば，自由エネルギーは

$$f=F/NkT=u(n\text{-}p)\text{-}s \quad (21)$$

従って，平衡条件 $\partial f/\partial p=0$ は

$$n_0z_0/p^2=(n\text{-}p)(N\text{-}n\text{-}p)/p^2=e^{-u} \quad (22)$$

これからpがnの関数として求まる．u=0のときは，$p=n(N\text{-}n)/N$（従って，$n_0=n^2/N$，$z_0=(N\text{-}n)^2/N$）となり，純粋に確率的な期待値を与える．一方，$u\rightarrow\pm\infty$ では，$p\rightarrow n$（または，$p\rightarrow N\text{-}n$）および $p\rightarrow 0$ であり，uの絶対値が大きくなるとpは境界に漸近する．このように，sは至極当たり前のことを一次元格子に要求しているのである．式（22）は各ボンド数と相互作用のエネルギーの関係を質量作用の法則で表したような形をしている．FowlerとGuggenheimは，この式（准化学的平衡条件と呼んでいる）を基本式に用い，合金多次元格子の相転移現象を論じている[4]．結果はBethe近似を用いたときと同じである．

3. 多次元格子のエントロピーの境界値

多次元格子のうち，蜂の巣（C=3），正方（C=4），ダイアモンド（C=4），単純立方（C=6），体心立方（C=8）は，n=N/2で，AとAが隣接することのない（つまり，$n_0=0$）規則格子をもつ．この場合，W (p, n)（あるいはs (p, n)）の定義域は境界線

$$p=0,\ p=(C/2)n,\ p=(C/2)(N\text{-}n) \quad (23)$$

によって囲まれる三角形で，p軸を2/C倍にすれば図1と合同になる．したがって，一次元の配置数（式（16））を2/Cで規格化することによって得られる

$$W_{\alpha,C}=n!(N\text{-}n)!/(2n_0/C)!(2z_0/C)!\{(2p/C)!\}^2 \quad (24)$$

はこの境界線を与える．$s_{\alpha,C}=\log W_{\alpha,C}$ は，pの純確率的期待値 $Cn(N\text{-}n)/2N$ において $\log W_t$ となり，ここでのエントロピーとしての必要条件を満足する．また，このエントロピーを用いて，式（22）に相当する平衡条件をもとめると，

$$n_0z_0/p^2=((C/2)n\text{-}p)((C/2)(N\text{-}n)\text{-}p)/p^2=e^{-cu/2} \quad (25)$$

が得られる．これから定まるpは，1次元のときと同様，u=0で確率的期待値 $p=Cn(N\text{-}n)/2N$ をとり，$u\rightarrow\pm\infty$ で境界に漸近する．ただし，指数の肩が単にuではなくCu/2となる．

さて，$s_{\alpha,C}=\log_{\alpha,C}$ 値の境界値であるが，各境界において一次元のそれ（式（18-20））と一致しており，ここでもエントロピーの必要条件を満足する．どのような格子でも，$p\rightarrow 0$ で $s\rightarrow 0$ は自明である．一方，n=N/2に規則格子を持つ場合，配位数Cに関係なく，$p=(C/2)n$（∴ $n_0=0$）のとき $s\rightarrow(1/N)\log(N\text{-}n)!/n!(N\text{-}2n)!$ でなければならない．このことについて以下に説明する．

粒子Aの半占有状態n=N/2において，Aが隣接しない規則格子 $A_{N/2}B_{N/2}$ を有する格子（例えば，一次元，正方，単純立方格子）に，任意のn個のAを隣接を許さずに配置するやり方の数をW (0, n; N) とするとき，配置エントロピー s=(1/N)logW (0, n; N)は，Nの増大に伴い，格子の配位数や種類に関係なく，次の値に漸近することを証明すればよい．

$$s=(1/N)\log[N\text{-}n\,|\,n]\ (N\rightarrow\infty) \quad (26)$$

（[N-n|n]は，組み合わせ $_{N\text{-}n}C_n$ を示す）

まず，準備としてAを任意に配置できる場合について，格子の中でn（<N/2）個のAとN-nのBが完全に分離している状態（図2 (1)）から考える．r個のAとBを交換すれば，Aのみであった区域には，[n|r]通りの，また，

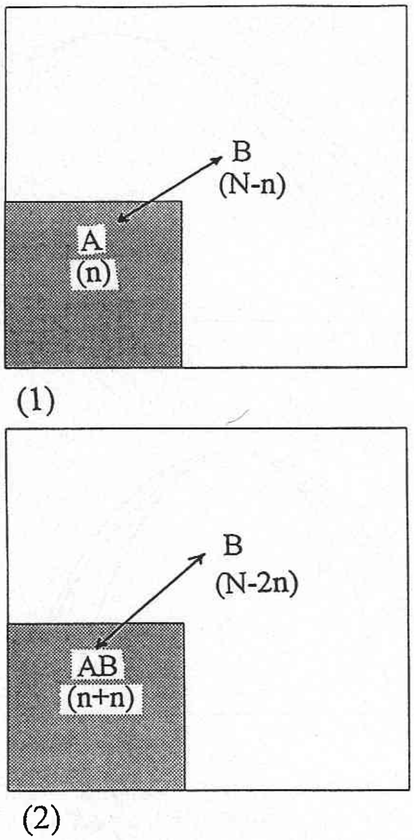

図2　配置数の計算に用いる分離格子モデル

Bのみの区域には$[N\text{-}n \mid r]$通りの配置数が実現する．したがって，この交換によって実現される配置の数は，これらの積になる．このような交換操作をr＝0からnまで行ったときに生じるすべての配置数は$\Sigma[n \mid r][N\text{-}n \mid r]$であり，二項係数の公式から，

$$\Sigma[n \mid r][N\text{-}n \mid r]=[N \mid n] \qquad (27)$$

したがって，このような考え方で配置数を計算できることがわかる（n>N/2|のときも同じ）．

さて，本題であるAの隣接を許さないときの配置数W(0, n; N）を，格子がAとB（それぞれn個）が交互に配列した規則格子の部分と，B（N-2n個）のみからなる部分に分離している状態（図2(2)）を出発点に考えよう．規則格子中のr個のAと，Bのみの区域にあるr個のBを交換し，それぞれの区域においてAが隣接することのない配置をつくる．両区域の実現可能な配置数は，W(0, n-r; 2n）およびW(0, r; N-2n）であるから，この交換によって生じる格子全体の配置数はこれらの積となる．r>(N-2n)/2では，Bのみの区域にAの隣接しない配置を実現し得なくなるので，意味のあるrの範囲は，0≦r≦n（n≦N/4），0≦r≦(N-2n)/2（N/4≦n≦N/2）である．このような可能なrの全てについて積の和をとれば，その値はW(0, n; N）に等しくならなくてはならない．n≦N/4のとき，

$$\sum_{r=0}^{n} W(0, n\text{-}r; 2n) \times W(0, r; N\text{-}2n) = W(0, n; N) \qquad (28)$$

いま，$W(0, n; N) = [N\text{-}n \mid n]$とすれば，

$$\sum_{r=0}^{n} [n+r \mid n\text{-}r][N\text{-}2n\text{-}r \mid r] = [N\text{-}n \mid n] \qquad (29)$$

が要求されることになる．この和を計算するための二項係数の公式は知られていないと考えられるので，数値計算により求めざるを得ないが，Nを大きくして行くにしたがい，式（29）の左辺と右辺の比$R(=[N\text{-}n \mid n]/\Sigma)$は正確，単調にN/(N-n）に漸近することが確かめられる．(1/N) logR→0（N→∞）であるから，式（29）はNの大きいとき，(1/N) logのレベルでは成り立つことがわかる（N/4≦n≦N/2のときも同じ）．以上の議論は，格子がn＝N/2に規則格子をもてば，その配位数Cに関係なく成り立つこと，また，各格子の$W_C(0, n; N)$の形は唯一つであること，を考えると漸近式（26）が正しいと結論することができよう．（格子の特徴はNが大きくなると無視し得る付加項が担うことになる．）なお，詳細は省略するが，

$$W_C(0, n; N) = \{N(N\text{-}n+1\text{-}C)/(N\text{-}n)(N\text{-}n\text{-}1)\}[N\text{-}n \mid n] \quad (30)$$

とすれば，(1/N)log(式（28））は$N=10^4$程度でほぼ正確に成り立つ．

このように$W_{\alpha,C}$は，一見，正しいW(p, n）に見えるが，適当な数（n）の粒子Aを単純立方格子など（N～10000）に何回も（～10^5）ばらまき，ボンド数がp（あるいはn_0）である配置の出現頻度を見るという計算機シミュレーション（詳細は，付録参照）の結果は$s=\log W_{\alpha,C}$を再現しない．このシミュレーションでは，pやn_0が確率的期待値$n_0=Cn^2/N$からずれると急速に頻度が減少するため，n_0*のごく近傍での様子しか調べられないが，図3に示すように，この付近での曲率が$s=(1/N)\log W_{\alpha,C}$のそれとは明らかに異なっているのである．（なお，一次元格子の場合，両者は完全に一致する．）したがって，$W_{\alpha,C}(C>2)$は，境界付近でのみ正しいエントロピーを与えるものといえる．

4. ベーテ近似のエントロピー

準化学的平衡条件（式（22））を与え，かつ，pの確率的期待値（$p^*=Cn(N\text{-}n)/2N$）においてW_tとなるように，

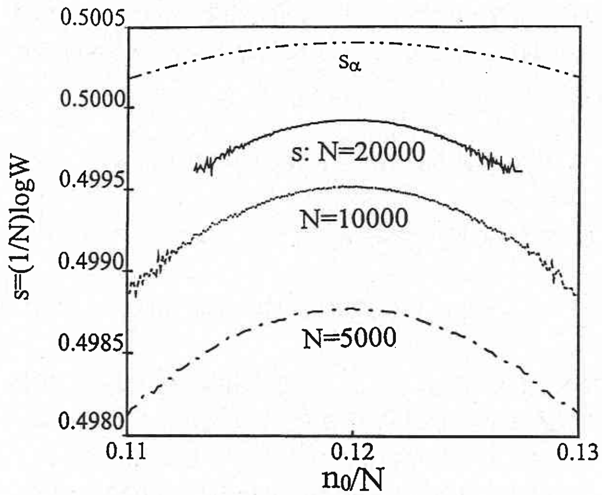

図 3　計算機シミュレーションによる厳密なエントロピーと $s_{\alpha,C}=\log W_{\alpha,C}$（C=6, x=0.2）の比較

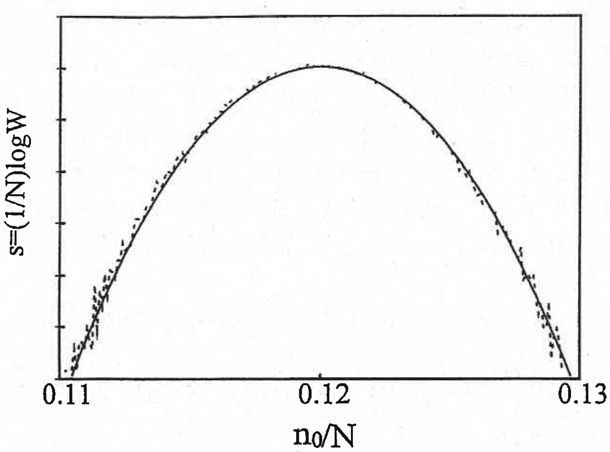

図 4　計算機シミュレーションによる厳密エントロピーとベーテ近似相当エントロピー（$s_{\beta,C}$）の曲率比較（C=6, x=0.2）

$W_{\alpha,C}$ に細工を施してみよう．

$$W_{\beta,C}=\Omega^{C/2}W_t^{(1-C/2)} \tag{31}$$

（但し，$\Omega=n!(N\text{-}n)!/(2n_0/C)!(2z_0/C)!\{(2p/C)!\}^2$）

$s_{\beta,C}=(1/N)\log W_{\beta,C}$ は，高木[5]あるいは菊池[1]の導いた近似エントロピーと等価なもので，ベーテ近似のエントロピーに相当する（C=2 では厳密）．図 4 に示すように，$p=p^*$ 近傍における $s_{\beta,C}$ の曲率は，上記の計算機シミュレーションの結果とぴったり一致しており，ボンド数の確率的期待値の近傍（つまり，u が十分小さいとき）においては，厳密なエントロピーと $s_{\beta,C}$ は 2 次またはそれより高次に接しているものと看ることができる．

5. 厳密なエントロピーの幾何学的性質

エントロピー $s_{\beta,C}=\log W_{\beta,C}\,(C>2)$ が，所詮，近似でし

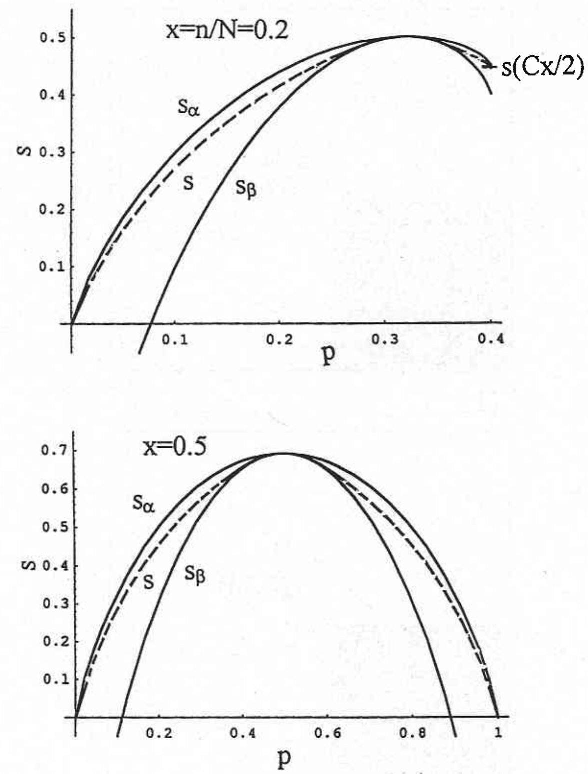

図 5　ベーテ近似相当エントロピー（$s_{\beta,C}$）と一次元格子相当エントロピー（$s_{\alpha,C}$）の比較（C=4, x=0.2 (a), x=0.5 (b)）厳密なエントロピー（破線）は $s_{\beta,C}$ から $s_{\alpha,C}$ に乗り移る曲線

かないことは図 5 を見れば明白である．すなわち，p=0, $p=(C/2)n$ でともに境界値を満たさず，とくに，p=0 の付近では $s<0$ となってしまう．

シミュレーションにより配置数を求めることのできる p あるいは n_0 の範囲は確率的期待値の前後のきわめて狭いものではあるが，この範囲では C の値を問わず $s_{\beta,C}=\log W_{\beta,c}$ の形状（曲率）と完全に一致する．したがって，厳密なエントロピー $s_{C,i}=\log W_{C,i}(p, n)$ は，p の確率的期待値 $p^*=(C/2N)n(N\text{-}n)$ において，$s_{\beta,C}=\log W_{\beta,c}$ と二次あるいはそれより高次に接触（$(\partial^2 s_{C,i}/\partial p^2)_x=(\partial^2 s_{\beta,C} f/\partial x^2)_x$,……）しているが，p が p^* から遠ざかるとともに $s_{\beta,C}=\log W_{\beta,C}$ から離れ，両境界（p=0, p=Cn/2）の付近で，$s_{\alpha,C}=\log W_{\alpha,C}$ に乗り移る図 5 の点線のような曲線と考えることができる．（ここで，添え字 i は格子の種類，例えば，正方とダイヤモンド格子は共に C=4 で n=N/2 に規則格子をもつが，エントロピーは異なるはずである．）

6. 若干の検証

図 5 の点線のエントロピーの最も単純な近似は，境界を通り $s_{\beta,C}$ に接する 2 つの直線と $s_{\beta,C}$ それ自体の 3 つの部分

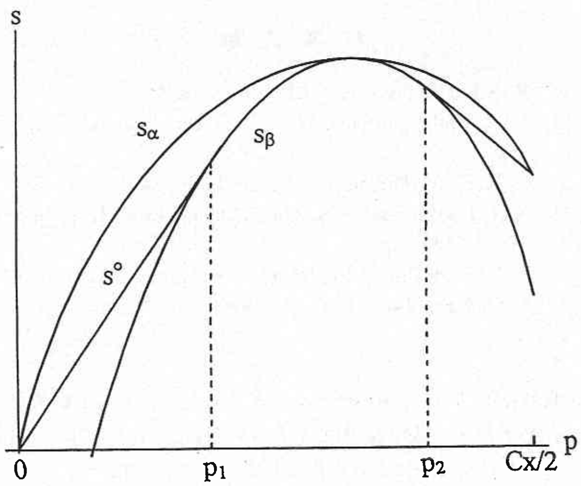

図 6　ベーテ近似相当エントロピー ($s_{\beta,C}$) から一次元格子相当エントロピー ($s_{\alpha,C}$) に乗り移る曲線 (s°) の最も単純な近似

からなる図 6 の s° であろう．とくに，x=1/2 のとき

$$
\begin{aligned}
s^\circ &= s_\beta \ (p_1 \leqq p \leqq p_2) \\
&= \{2\log(C/4-p_1)/p_1\}p \quad (0 \leqq p \leqq p_1) \\
&= \{2\log(C/4-p_2)/p2\}(p-C/4) \quad (p_2 \leqq p \leqq C/4) \qquad (32)
\end{aligned}
$$

ここで，p_1 と p_2 は接点で，$p_1=(C/4)(1-2^{2/C-1})$，$p_2=(C/4)2^{2/C-1}$．このエントロピーを用いれば，強磁性スピン格子の自由エネルギーは

$$f = F/NkT = 4Kp - CK/2 - B(2x-1) - s^\circ \qquad (33)$$
$$(K=J/2kT,\ B=mH/kT=0)$$

平衡条件の 1 つ，$\partial f/\partial p=0$，から，$4K=(\partial s^\circ/\partial p)_{x=1/2}$ であるが，この値は $0 \leqq p \leqq p_1$ の範囲で一定．したがって，とにかくこの範囲で転移が起こるとすれば，転移温度 ($K_c=J/2kT_c$) は次式で近似される．

$$K_c(C)=(1/2)\log\{(C/4-p_1)/p_1\} \qquad (34)$$

表 1 に，このようにして計算される転移温度を既に知られているその厳密値あるいは近似値と比較して示す．とくに，C=4 での値は平面正方格子の厳密値 ($K_c=(1/2)\sinh^{-1}1$) と完全に一致している．

ところで，平面正方格子 (C=4) については，強磁性イジング模型の厳密解が Onsager[6] によって与えられているので，これと比較するのも興味深い．転移前 (T>Tc) の内部エネルギー (U/NkT=4Kp-2K) から，x=1/2 での p と K の厳密な関係は，

Table 1. Calculated critical temperatures as compared with reported theoretical values

	Present calculation		Reported values	
Lattice	K_c	kT_c/J	K_c	kT_c/J
honeycomb (C=3)	0.6737	0.742	0.6585 (exact)	0.759 (exact)
square (C=4)	0.4407	1.135	0.4407 (exact)	1.135 (exact)
simple cubic (C=6)	0.2660	1.880	0.2099 (*)	2.382 (*)
bcc (C=8)	0.1915	2.611	0.1438 (**)	3.476 (**)

(*) Kramers-Wannier-Kikuchi approximation
(**) Bethe approximation

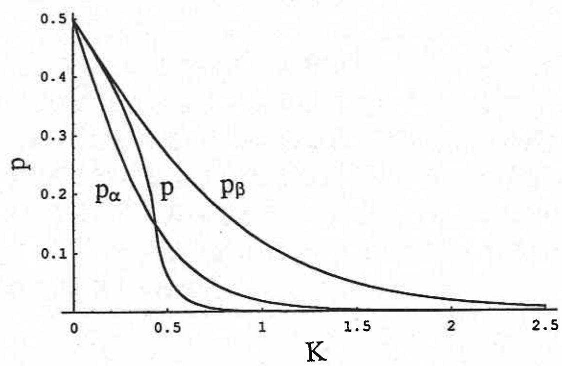

図 7　強磁性正方スピン格子の p-K 関係 (p: Onsager の理論より計算される厳密関係，p_α および p_β は $s_{\alpha,C}$ および $s_{\beta,C}$ から計算される関係)

$$U/NKkT=4p-2=-[1+(2/p)(2\tanh^2 2K-1)K_1(m)]\coth 2K \qquad (35)$$
$$(m=2\sinh 2K/\cosh^2 2K,\ K1：第 1 種完全楕円積分)$$

により与えられる．一方，$s_{\alpha,C}=\log W_{\alpha,C}$ $s_{\beta,C}=\log W_{\beta,C}$ から得られる平衡関係 ($4K=(\partial s/\partial p)_{x=1/2}$) からは，

$$p_\alpha(x=1/2)=1/2-(1/2)\tanh 2K \qquad (36)$$
$$p_\beta(x=1/2)=1/2-(1/2)\tanh K \qquad (37)$$

が得られる．これらの 3 つの K-p 曲線を図 7 に比較してある．曲線 p (厳密) と p_β は K=0，つまり，p=p*=1/2 の付近では密に接しているが，これは，s と s_β の曲線が p の確立的期待値の付近で高次に接触していることに対応している．また，p と p_α には 1 つの交点 ($\partial(s-s_\alpha)/\partial p=0$) が存在するが，これは s が s_β から s_α に乗り移る曲線であることに矛盾しない．(なお，p と p_α の交点が厳密は転移点 (sinh2K=1) を与えていることに注意.)

7. 結　　　言

さて，厳密なエントロピー s_C を p と n の関数 ϕ_C を用いて，つぎの形に書いてみよう（簡単のため，配位数を示す添え字 C を省略）.

$$s = \log \Omega^{C\ g/2} W_t^{(1-C\ g/2)} \qquad (38)$$
$$(g = 2/C + (1\text{-}2/C)\phi(p, n))$$

関数 $\phi(p, n)$ が，$0 < \phi(p, n) \leqq 1$, $\phi(p, n) = \phi(p, N\text{-}n)$, を満たせば s はエントロピーとしての要件を満たす．また,

$$\phi(p, n) = 1\,(p = p^* = Cn(N\text{-}n)/2N),$$
$$\phi(p, n) = 0\,(p = 0,\ Cn/2) \qquad (39)$$

が満たされれば，s は境界条件を満たしつつ，$p = p^*$ で $s_{\beta,C}$ に少なくとも3次に接する．もちろん，このような ϕ は無数に存在する．ある数学的な仮説の下に，Onsager の厳密解を与えるような ϕ を特定できないだろうか？これが可能であれば，他の多次元格子の厳密なエントロピーを求めるためのヒントとなるかも知れない.

（1997年1月16日受理）

参 考 文 献

1) R. Kikuchi, Phys. Rev. 81（1951），988
2) H. A. Bethe and H.H. Wills, Proc. Roy. Soc. A150（1935），552
3) T. Kudo M. Hibino, Solid State Ionics 84（1996），65
4) R.H. Fowler and E.A. Guggenheim, Proc. Roy. Soc. A 174（1940），189
5) Y. Takagi, Proc. Phys.-Math. Soc. Japan 23（1941），44
6) L. Onsager, Phys. Rev. 65（1944），117

付　録

n 個の粒子 A を N 個のサイトに配するときに生じる配置のうち，AA ボンドの数が n_0 個であるものの数 $W(n_0, n; N)$ を計算機シミュレーションにより求める方法について記す.

総配置数は $W_t = N!/n!(N\text{-}n)!$ であるから，すべての可能な n_0 の値に対する $W(n_0, n; N)$ の和はこれに等しい.

$$\sum_{n_0=0}^{CN/2} W(n_0, n; N) = W_t \text{ or } \Sigma\, g = 1 \qquad (A1)$$

ここで，$g = W(n_0, n; N)/W_{to}$ この g は，n 個の A を N 個のサイトに繰り返しばらバラまくという操作において，n_0 個の AA ボンドをもつ配置の出現確率（$P(n_0, n; N)$）に相当するものと看すことができる．サイト数 N（～20000）の仮想格子（例えば，単純立方格子）を用意し，この中にある与えられた数 n 個の A を乱数を用いて配してから，AA ボンドの数 n_0 を検出する．この操作を M（～10^5回）繰り返し，配置の出現確率（P＝出現回数/M）を n_0 の関数として求めた．なお，格子の境界における数え落としを防ぐために，各境界には，仮想格子を並進することによって，レプリカ粒子を配置した.