

結晶構造と変える格子システムの数学的モデル

筑波大 数学系 黒田耕嗣

§ 0 Introduction

密度の大小に応じて結晶構造が変化するという現象が、液体結晶（異性液体）等においてしばしば現われている。例えば、石けんと水に溶かした時、重量濃度が小さい時には系は分散系であるが、30%位の濃度において柱状の結晶構造をとり、60%位の濃度において層状の結晶構造をとる。この時、石けん分子の親水性部分は水のうき、疎水性部分は脂質のうきと同く様にして結晶構造が構成されている。さらに、重量濃度が85%位になると系は gel 状態になる。

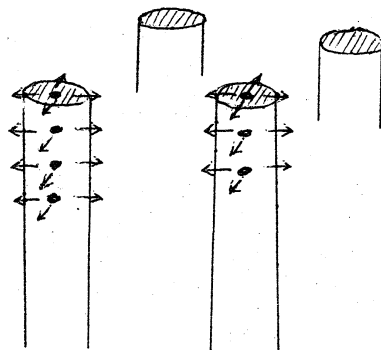
ここでは、この様な密度の大小に応じて結晶構造を変えるという現象と格子 model を用いて説明しよう。

格子 model における phase transition の確率論的側面からの研究は、Dobrushin [1], Lanford, Ruelle [10], 等によっても始められ、その後 Minlos, Sinai [1], [2], Gallavotti, Miracle-Sole [7]

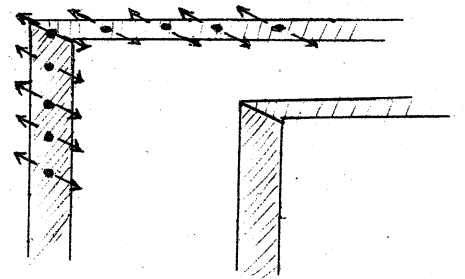
Russo, Higuchi, Eisenmann 等により数多くの興味ある結果がえられてきている。

特に、[1], [2] では、Minlos, Sinai は Ising model において、contours の correlation functions のさまじまに評価を用いて、phase separation (相分離) の問題を数学的に厳密な形で解いている。我々の model では、Ising model における contour と同様の概念にある Bloch-wall と定義し、その correlation function を用い、disordered region $D(\delta)$ の大きさを評価する事によって、上で述べた現象を説明しよう。

Fig. 1



柱構造



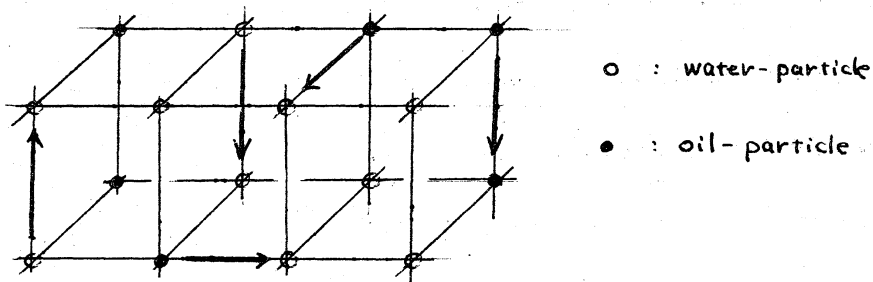
層構造

- : 脂質 ↑ : 石けん分子
- ↑ --- 親水性部分
 ↓ --- 疎水性部分

§ 1 Model の設定

3次元格子 $\mathbb{Z}^3$ を考える。system は oil-particle, water-particle, soap-molecule と呼ばれる3種の粒子より構成され、各 site 上には oil-particle, water-particle のいずれかが配置されており、bond 上には soap-molecule が配置されうるとする。(soap-molecule が配置されていない bond が存在する事に注意。) この時、soap-molecule を矢印 $\uparrow$ で表わし、矢の先端部を親水基、矢の尾部を疎水基にあまると考える。(Fig. 2 参照)

Fig. 2



粒子間には Interaction について述べる前に、格子 model に因する基本的不 notations について述べておく。
 $x, y \in \mathbb{Z}^3$ の間の Euclidean distance を $|x - y|$ で表わし、 $|x - y| = 1$ の時、 x と y は隣接していると言う。
 $\mathbb{Z}^3$ の bounded subset V が与えられた時、 $\forall x, y \in V$ に

対して, $x_0 = x$, $x_1, x_2, \dots, x_n = y$; $|x_i - x_{i+1}| = 1$
 $(i = 0, 1, 2, \dots, n-1)$ となる path $(x_0, x_1, \dots, x_n)$ がと
 れる時, V は connected であると呼ばれる. 又 bounded
 subset V に対して

$$\partial V = \{ x \in V^c ; |x - y| = 1 \text{ for some } y \in V \}$$

$$\partial_{in} V = \{ x \in V ; |x - y| = 1 \text{ for some } y \in V^c \}$$

と置く. bond A と bond B が一点で接しており, $A \cap B$
 交している時, pair (A, B) は perpendicular pair of bonds
 と呼ぶ.

以下簡単のため, oil-particle を o -particle, water-
 particle を w -particle, soap-molecule を s -molecule で表
 わす. $\mathbb{Z}^3$ における sites と bonds の全体を T で表わし, T
 上に configuration space Ω を定義する. configuration $\omega \in \Omega$
 に対して, $\omega(z) = w$ ($z \in T$) は site $z \in T$ の上には w -
 particle が存在している事を表わしており, 又 $\omega(t) = \emptyset$
 は bond $t \in T$ の上には soap-molecule が存在していない事を表わ
 している.

粒子間の interaction は 2 粒子間のみになり, 平行移動で
 不変とする. 粒子間の配向性等を考慮する事により, interaction
 を次の様に定める.

1) O-particles, w-particles の間には interaction.

O-particle と O-particle, w-particle と w-particle, O-particle と w-particle の間には次の様な interaction を設定する.

$$U_{O,O}(r) = U_{w,w}(r) \equiv 0$$

$$U_{O,w}(r) = \begin{cases} \epsilon_0 > 0 & \text{if } |r| = 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

つまり、O-particles 同士、w-particles 同士の間には interaction が無い。O-particle と w-particle の間には nearest neighbour repulsive interaction が働いている。

2) O-particle, w-particle と S-molecule の間には interaction

2-1) O-particle と S-molecule の疎水基が接している時と、

w-particle と S-molecule の親水基が接している時には $-\epsilon_0$ の attractive な interaction が働く。

2-2) O-particle と S-molecule の親水基が接している時と

w-particle と S-molecule の疎水基が接している時には、

$2\epsilon_0$ の repulsive な interaction が働く。

Fig. 3

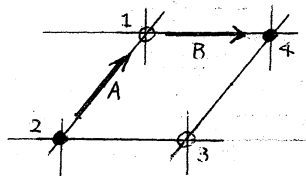


Fig. 3 に於いて A と 1 の s -molecule と 1 と 1 の w -particle の間、及び A と 2 と 1 の o -particle の間には $-\epsilon_0$ の attractive interaction が働いている。又 B と 4 の間、B と 1 の間には $2\epsilon_0$ の repulsive interaction が働いている。

3) 平行な bonds 上にある s -molecules 間における interaction

平行な 2 本の bonds 上に於いた s -molecules の間には、2 つの s -molecules が同じ方向を向いている場合には、attractive interaction が働き、逆の方向を向いている時には、repulsive interaction が働くとする。そしてその interaction energy は 2 つの bonds 間の距離に応じて、次の Fig. 4 に示された様になるというとする。

Fig. 4

distance	1	$\sqrt{2}$	2
attractive	$-\epsilon_1$	$-\epsilon_3$	$-\epsilon_5$
repulsive	ϵ_2	ϵ_4	ϵ_6

Fig. 5

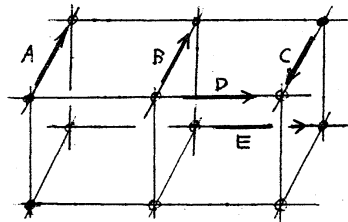
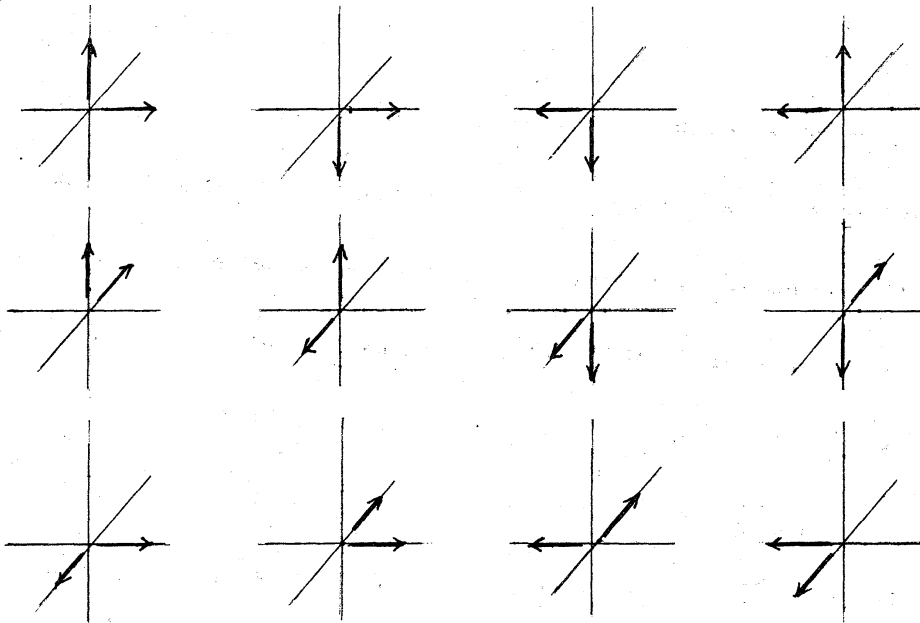


Fig. 5 において, AB 間には $-\epsilon_1$, BC 間には ϵ_2 , AC 間には ϵ_4 , DE 間には $-\epsilon_3$ の interaction が働いている。

4) perpendicular pair of bonds 上にあがれた S -molecules 間には ϵ_7 の interaction 。

Fig. 6 に示された 12 の types の soap-molecules 間には $-\epsilon_7$ の attractive interaction が働き, これ以外に perpendicular pair of bonds 上にあがれた S -molecules 間には ϵ_7 の repulsive interaction が働く。

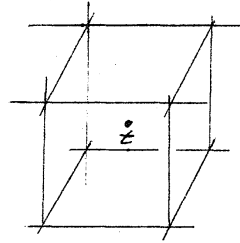
Fig. 6



5) 0 -particle は 8μ の chemical potential と今え、他の粒子には chemical potential と今えない。

以上で粒子間における interaction の設定は終った。次に block energy, block configuration の概念を導入する。 S と $\mathbb{Z}^3$ の dual lattice とし、Fig. 7 の様な unit cube における sites と bonds の集合を "block" と呼ぶ、その block を block の中心の site $z \in S$ で表わす。

Fig. 7.



Σ を一つの block における configurations の全体とする。一つの block は 8 の sites と 12 本の bonds より成り、各 site には 0 は 0 -particle, w -particle の 2 通りの場合が考えられ、各 bond には 0 は 2 種類の S -molecules の内の 1 つかが存在して 1 つかは存在して 1 つか 2 つかの 3 つの場合が考えられ、

$$\# \Sigma = 2^8 \cdot 3^{12} \quad \text{と今え。}$$

$\bar{\Omega} = \sum^S$ とおき、 $\omega \in \bar{\Omega}$ に対し 7 任意の隣接する blocks の pair (z_1, z_2) に対し

$$\omega(z_1) | z_1 \cap z_2 = \omega(z_2) | z_1 \cap z_2 \quad (\omega \in \bar{\Omega})$$

が成り立つ時、 ω は consistent であると言う。

$$\hat{\Omega} = \{ \omega \in \bar{\Omega} : \omega \text{ is consistent} \}$$

とみると、 $\hat{\Omega}$ と本来の configuration space Ω との間には 1 対 1 の対応がとく。

$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_7, \varepsilon_8$ - pairs は 2 つの隣接する blocks に共有され、molecule - particle pairs は 4 つの隣接する blocks に共有され、 ε_3 と ε_4 を考慮して、block $z \in S$ の config. $\xi \in \Sigma$ である時の block z 内の粒子間の interaction energy $E_z(\xi)$ を次のように定義する。

$$(1-1) \quad E_z(\xi) = \frac{1}{2} (-n_1(\xi)\varepsilon_1 + n_2(\xi)\varepsilon_2 - n_7(\xi)\varepsilon_7 + n_8(\xi)\varepsilon_8) \\ - n_3(\xi)\varepsilon_3 + n_4(\xi)\varepsilon_4 - \mu n(\xi) \\ + \frac{1}{4} (\text{total energy of particle - molecule pairs in } z)$$

ここで、 $n(\xi)$ 、 $n_i(\xi)$ は block z における 0 -particles の数及び ε_i -pairs の数を表わす。

$\xi \in \hat{\Omega}$ に対して隣接 blocks (z_1, z_2) の間の mutual interaction energy $E_{z_1, z_2}(\xi)$ を次のように定義する。

$$(1-2) \quad E_{z_1, z_2}(\xi) = \frac{1}{2} (-n_5(\xi)\varepsilon_5 + n_6(\xi)\varepsilon_6)$$

ここで、 $n_5(\xi)$ 、 $n_6(\xi)$ は $z_1 \cup z_2$ における ε_5 -pairs、 ε_6 -pairs の数である。

さしして $\xi \in \hat{\Omega}$ の下での block z の block energy $E(z; \xi)$ を

$$(1-3) \quad E(t; \xi) = E_t(\xi(t)) + \frac{1}{2} \sum_{S: |t-s|=1} E_{t,s}(\xi)$$

に よ っ て 入 る 。

bounded set $V \subset S$ に つ い て , V に お い て consistent config.

の 全 体 を $\hat{\Omega}_V$ で 表 わ す . $\xi \in \hat{\Omega}_V$, $\omega \in \hat{\Omega}$ に つ い て

$$(\xi, \omega)(t) = \begin{cases} \xi(t) & t \in V \\ \omega(t) & \text{otherwise} \end{cases}$$

と お く . $(\xi, \omega) \in \hat{\Omega}$ と な る 時 , $\xi \in \hat{\Omega}_V$ は ω に 関 し て

consistent 7" あ る と 言 う . $\hat{\Omega}_{V, \omega}$ を ω に 関 し て consistent 7"

config. $\xi \in \hat{\Omega}_V$ の 全 体 と す る .

$\hat{\Omega}_{V, \omega}$ 上 に 次 の 様 に Gibbs measure $P_{V, \omega}(\cdot)$ と 定 義 す る .

$$(1-4) \quad P_{V, \omega}(\xi) = \frac{1}{Z_V(\omega)} \exp \{ -\beta U_V(\xi | \omega) \}$$

と 7" .

$$(1-5) \quad U_V(\xi | \omega) = \sum_{t \in V \cup \partial V} E(t; (\xi, \omega))$$

$$(1-6) \quad Z_V(\omega) = \sum_{\xi \in \hat{\Omega}_{V, \omega}} \exp \{ -\beta U_V(\xi | \omega) \}$$

$\hat{\Omega}$ 上 の random field $\{X_t : t \in S\}$ は Gaussian random field

def

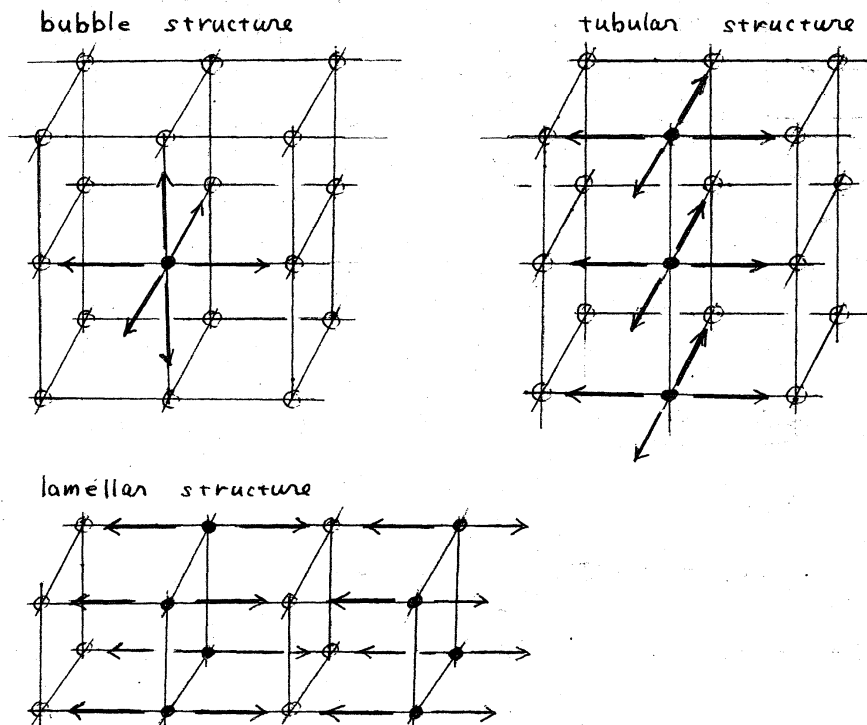
$\iff \forall V \subset S : \text{bounded} \quad (1-7)$

$$P_r \{ X_t = \xi(t) : t \in V \mid X_t = \omega(t) : t \in S \setminus V \} = P_{V, \omega}(\xi) \quad \forall \xi \in \hat{\Omega}_{V, \omega} \text{ a.a. } \omega$$

§ 2 Main Results

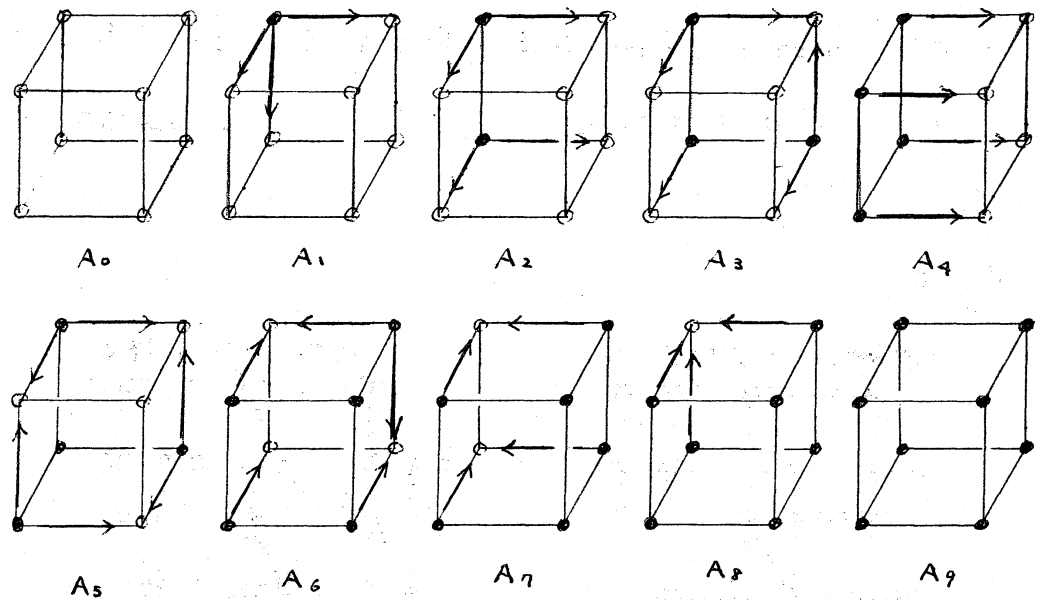
この § に お け て、我々の考へて いる model の ϕ -particle の chemical potential μ が 増加 する に 従 っ て、bubble structure が $\rightarrow$ tubular structure, lamellar structure と 構造 を 変 化 さ せ る 事 を 示 せ る。こ の 7 bubble structure, tubular structure, lamellar structure と は Fig. 8 に 示 さ れ て いる 様 な periodic config. の 事 である。さ ら に こ の § 7 は、 $V \rightarrow \mathbb{Z}^3$, $N \rightarrow \infty$, $\frac{N}{V} \rightarrow n^*$ と し た 時 の canonical Gibbs 測 度 の 漸 近 的 な 挙 動 に つ い て と 調 べ る。こ の 7 n^* は ϕ -particles の 密 度 1、 N は ϕ -particles の 数 である。

Fig. 8



まず最初は、この様な config. の下で各 block の block energy が最小になるかを調べる。 $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2$ が他の interaction parameters に比べて十分大きいとすると、 $\Sigma \in \Sigma$ が Fig. 9 に示されている A_0 から A_9 の 10 の types の config. のどれかと一致する時のみ、 $E_t(\Sigma)$ は最小値をとることがわかる。

Fig. 9.



$\Sigma_i \subset \Sigma$ ($i = 0, 1, \dots, 9$) を A_i -type の config. の全体とすると、

$$\begin{aligned} \#(\Sigma_0) &= \#(\Sigma_9) = 1, \quad \#(\Sigma_1) = \#(\Sigma_3) = \#(\Sigma_5) = \#(\Sigma_6) \\ &= \#(\Sigma_8) = 8, \quad \#(\Sigma_2) = \#(\Sigma_7) = 12, \quad \#(\Sigma_4) = 6 \end{aligned}$$

となる。

$$\pi_i = \{ \omega \in \hat{\Omega} \ ; \ \omega(z) \in \Sigma_i \ \text{for} \ \forall z \in S \}$$

とおく。 π_i の各 element は periodic な config となり、 π_i の elements の数と Σ_i の elements の数は等しくなる。又 Fig. 8 Fig. 9 から明らかなように、 π_1 、 π_2 、 π_4 の各 element はそれぞれ bubble, tubular, lamellar structure を表わす。

以下に於いて、 interaction parameters $\varepsilon_0 \sim \varepsilon_8$ は条件

(C-0) $\varepsilon_0, \varepsilon_2, \varepsilon_4$ は他の parameters に比べて十分大きく

に取ると、次の3つの条件 (C-1) ~ (C-3) を満たすとする。

$$(C-1) \quad 3\varepsilon_8 + 4\varepsilon_1 > 3\varepsilon_7 + 2\varepsilon_3 + 2\varepsilon_5$$

$$(C-2) \quad \varepsilon_1 + \varepsilon_5 > 2\varepsilon_3$$

$$(C-3) \quad \text{Min}(\varepsilon_1 + \varepsilon_5 + \varepsilon_8, 2\varepsilon_1 + 3\varepsilon_3 + \varepsilon_5) > \varepsilon_7 > 2\varepsilon_1 + \varepsilon_5$$

この時、次の1) ~ 3) が成立する。

$$1) \quad \mu \in K_1 \equiv [0, \mu_1)$$

$$\Rightarrow E(z; \omega_1) < E(z; \omega) \ \text{for} \ \forall \omega_1 \in \pi_1, \ \forall \omega \in \hat{\Omega} \setminus \pi_1$$

$$2) \quad \mu \in K_2 \equiv (\mu_1, \mu_2)$$

$$\Rightarrow E(z; \omega_2) < E(z; \omega) \ \text{for} \ \forall \omega_2 \in \pi_2, \ \forall \omega \in \hat{\Omega} \setminus \pi_2$$

$$3) \quad \mu \in K_3 \equiv (\mu_2, \mu_3)$$

$$\Rightarrow E(z; \omega_4) < E(z; \omega) \ \text{for} \ \forall \omega_4 \in \pi_4, \ \forall \omega \in \hat{\Omega} \setminus \pi_4$$

ここで

$$\mu_1 = \frac{1}{2}\varepsilon_7 - \varepsilon_1 - \frac{1}{2}\varepsilon_5, \quad \mu_2 = \frac{1}{2}\varepsilon_7 - \frac{1}{2}\varepsilon_1 - \varepsilon_3, \quad \mu_3 = \frac{1}{2}\varepsilon_1 + \varepsilon_3 + \frac{1}{2}\varepsilon_8$$

$$\pi_i = \{ \omega_1^{(i)}, \omega_2^{(i)}, \dots, \omega_{N_i}^{(i)} \} \quad (i=1, 2, 4)$$

$$N_1 = 8, \quad N_2 = 12, \quad N_4 = 8 \quad \text{とおく.}$$

この時、次の定理が成り立つ。

Theorem 1 $\forall \mu \in K_i \quad (i=1, 2, 4)$ を fix する。 β を

十分大にとると、 N_i 個の相異なる極限 Gibbs measures

$P\omega_j^{(i)} \quad (j=1, 2, \dots, N_i)$ が存在して次をみたす。

$$P\omega_j^{(i)}(Xz = \omega_j^{(i)}(z) : z \in C) \geq 1 - g_i(\beta) \quad (i=1, 2, \dots, N_i)$$

ここで $\gamma \subset C \subset S$ は finite set なら $g_i(\beta)$ は $g_i(\beta) \downarrow 0$ as

$\beta \rightarrow \infty$ とする β の函数がある。

次の結果を述べた前には、いくつかの言葉の定義をしておく。

bounded set V , boundary condition $\omega \in \pi_1 \cup \pi_2 \cup \pi_4$ を任意

にとり fix する。 $\xi \in \hat{\Omega}_V, \omega$ に対して、

$$\xi(s) = \omega(s) \quad \text{for } \forall s \rightarrow |s - t| \leq 1$$

とする block t を static block と呼ぶ。これ以外の block を

active block と呼ぶ。 active blocks の全体を $B(\xi)$ と書く。

この時 $B(\xi)$ は connected components の family $\{B_1(\xi), \dots, B_s(\xi)\}$

に unique に分解される。 connected component B_i とその上の

config. の組 $\bar{B}_i = (B_i, (\xi(t) : t \in B_i))$ を B-wall

と呼ぶ。 B-wall $\bar{B}$ が他の B-wall に囲まれていない時

B は outer γ であると呼ぶ。2つの B -walls $\bar{B}_1 = (B_1, \xi(z) \in B_1)$
 $\bar{B}_2 = (B_2, \zeta(z) \in B_2)$ に対して B_1 が B_2 に translation T である
 とき、 $\xi(z) = \zeta(T(z))$ $z \in B_1$ が成り立つ
 とき、 B_1 と B_2 は congruent γ であると言う。 B -wall の congruence
 class を $\bar{\gamma}$ γ 表わし、congruence classes の全体を $\mathcal{P}$ γ 表わす。

$\xi \in \hat{\Omega}_{V,\omega}$ に対して γ 、outer B -walls の outer boundaries によ
 り囲まれた region を "disordered phase" と呼ぶ $D(\xi)$ γ
 表わす。又、 $O(\xi) = V \setminus D(\xi)$ を "ordered phase" と呼ぶ。

γ γ 囲まれた region の volume を $V(\gamma)$ γ 表わし、 $\xi \in \hat{\Omega}_{V,\omega}$
 の下での V における oil-particles の数を $N_{oil}(\xi)$ γ 表わす。

$\beta, \mu, j = 1, 2, 4$ に対して

$$\mathcal{G}^*(\beta, \mu) = \sum_{\bar{\gamma} \in \mathcal{P}} V(\gamma) P(\bar{\gamma} : \beta, \mu)$$

$$n_j^{**} = u_j - \sum_{\bar{\gamma} \in \mathcal{P}} (u_j V(\gamma) - \langle n(\gamma) \rangle) P(\bar{\gamma} : \beta, \mu)$$

とおく。このとき、 $u_1 = \frac{1}{8}$ $u_2 = \frac{1}{4}$ $u_4 = \frac{1}{2}$ 、

$P(\bar{\gamma} : \beta, \mu)$ は $\bar{\gamma} \in \mathcal{P}$ の limiting correlation function、

$\langle n(\gamma) \rangle$ は ensemble γ ($\bar{\gamma} : \beta, \mu$) における $N_{oil}(\cdot)$ の平均
 値である。 $P(\bar{\gamma} : \beta, \mu)$ 、 $\gamma(\bar{\gamma} : \beta, \mu)$ の定義は次の通りである。

このとき $\mathcal{G}^*(\beta, \mu) \downarrow 0$ exponentially, $n_j^{**}(\beta) \rightarrow u_j$

as $\beta \rightarrow \infty$ となる事だけを注意しておく。

canonical Gibbs measure $P_{V,\omega}^N(\cdot)$ と

$$P_{V,\omega}^N(\cdot) = P_{V,\omega}(\cdot \mid \text{Noil}(\mathfrak{s}) = N)$$

によつて定義する。このとき、 $P_{V,\omega}^N(\cdot)$ は μ に independent とする事に注意。

$|D(\mathfrak{s})|$ の漸近的挙動について、次の2つの結果が知られている。

Theorem 2. $\forall \mu \in K_i, \forall \omega \in \Pi_i \quad (i = 1, 2, 4)$ に対して
 $\exists f(\beta) \searrow 0, \exists g(\beta) \searrow 0 \quad \text{as } \beta \rightarrow \infty$ なる

$$(2-1) \quad P_{V,\omega}(|D(\mathfrak{s})| - g^{*}(\beta)|V| > f(\beta)|V|^{\frac{1}{2}}) < g(\beta)$$

$$(2-2) \quad P_{V,\omega}(|\text{Noil}(\mathfrak{s}) - n_i^{**}|V| > f(\beta)|V|^{\frac{1}{2}}) < g(\beta)$$

for sufficiently large β .

Theorem 3. $\forall \omega \in \Pi_i \quad (i = 1, 2, 4) \quad \exists g(\beta) \searrow 0 \quad \text{as } \beta \rightarrow \infty$

; $0 < \alpha < \frac{1}{4}$ なる任意の α と $|N - n_i^{**}(\beta, \mu)|V| < F_1(\beta)|V|^{\frac{1}{2}}$

($\mu \in K_i$) を満たす任意の N に対して、 β が十分に大きければ

時次の評価が成り立つ。

$$(2-3) \quad P_{V,\omega}^N (|ID(\xi)| - \delta^*(\beta) |V| > \delta(\beta) |V|^{\frac{2}{3}+\alpha}) < C(\beta) \frac{1}{|V|^{2\alpha}}$$

$C(\beta)$: some const.

§ 3 Correlation functions of B-wall

この § では、B-wall の correlation function を定義し、
それらの性質を用いる事により Theorems の証明を行なう。

finite cube $V \subset S$, boundary cond. $\omega \in \hat{\Omega}$ に対して、
B-wall $\bar{B}$ を B-wall とし $\bar{B} \supset \hat{\Omega}_{V,\omega}$ の elements の全体を
 $\Delta_{V,\omega}(\bar{B})$ と表わす。この時、 $\bar{B}$ の correlation function を

$$(3-1) \quad \tau_{V,\omega}(\bar{B}) = \frac{1}{Z_V(\omega)} \sum_{\xi \in \Delta_{V,\omega}(\bar{B})} \exp \{-\beta U_V(\xi; \omega)\}$$

と定義する。次に B-wall $\bar{B}$ の total energy $E(\bar{B})$ を

$$(3-2) \quad E(\bar{B}) = \sum_{z \in \bar{B}} E(z; \xi) \quad (\xi \in \Delta_{V,\omega}(\bar{B}))$$

と定める。以後、簡単のため、 $E(z; \xi) = \min_{\xi} E(z; \xi)$

と改め、 $E(z; \xi)$ とし、これを定める。この様子を修正は無し。

Gibbs meas. $P_{V,\omega}(\cdot)$ の定義は変化は無い。

config. ξ の下での B-walls の全体を $B(\xi)$ と表わすと、

$\tau_{V,\omega}(\cdot)$ は次の様に表わされる。

$$(3-3) \quad \tau_{V,\omega}(\bar{B}) = \frac{1}{Z_V(\omega)} \sum_{\bar{x} \in \Delta_{V,\omega}(\bar{B})} \prod_{\bar{B} \in B(\bar{x})} \exp(-\beta E(\bar{B}))$$

$\tau_{V,\omega}(\bar{B})$ は 周知の Heilmann の reflection method (See [3]) を用いると、次の評価がえされる。

$$(3-4) \quad \tau_{V,\omega}(\bar{B}) < \exp(-C_1 \beta |\bar{B}|)$$

ここで、 C_1 はある absolute const.

(3-4) を用いると、standard argument により、Theorem 1 は直ちに導かれる。

次に outer B-walls の correlation function、及び correlation equation について述べる。 V は S の finite subset とし、 V の outer bdry. を囲まれた領域を $\theta(V)$ と表わし、

$\text{In}(V) = \theta(V) \setminus V$ を V の inner region と呼び、任意の $\mu \in K_i$, $\omega \in \Pi_i$ に対して、

$\mathcal{T}_{V,\omega} = \{ B = (\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_s) : \text{a family of B-walls in } V \text{ which doesn't enclose the inner region of } V \}$

$\mathcal{T}_{V,\omega}^{\text{out}} = \{ B = (\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_s) : \text{a family of outer B-walls in } V \text{ which doesn't enclose the inner region of } V \}$

とおく。この時 $B \in \mathcal{T}_{V,\omega}$ or $\mathcal{T}_{V,\omega}^{\text{out}}$ における各 outer

B-wall は ω -type とする事に注意。

与えられた B-wall $\bar{B}$ に対して $\bar{B}$ の inner region は connected components $\{I_1(\bar{B}), \dots, I_n(\bar{B})(\bar{B})\}$ に decompose される。 $J_k(\bar{B}) = I_k(\bar{B}) \setminus \partial_{\text{in}} I_k(\bar{B})$ とおくと、 $\partial J_k(\bar{B}) = \partial_{\text{in}} I_k(\bar{B})$ における config. は $\bar{B}$ によって unique に決定される。そこで τ 、それを $\omega_k(\bar{B}) \in \Pi_i$ と表わす。

$\mathcal{T}_{V,\omega}^{\text{out}}$ 上に次の様な probability measure を定める。

$$P_{V,\omega}(B) = \frac{1}{Z(V,\omega)} \prod_{i=1}^s \exp(-\beta E(\bar{B}_i)) \prod_{k=1}^{n(\bar{B}_i)} Z(J_k(\bar{B}_i); \omega_k(\bar{B}_i))$$

と置く。

$$Z(J_k(\bar{B}); \omega_k(\bar{B})) = \sum_{B \in \mathcal{T}_{J_k(\bar{B}), \omega_k(\bar{B})}} \prod_{\bar{B} \in B} \exp(-\beta E(\bar{B}))$$

outer B-walls の correlation function $P_{V,\omega}(\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_s)$ と

$$P_{V,\omega}(\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_s) = \sum_{B: B \supset \{\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_s\}} P_{V,\omega}(B)$$

と定める。

(3-4) の場合と同様 12. Heilmann の reflection method を用いると、次の lemma がえられる。

Lemma 3.1 + 分大 3 β 11 17.

$$\rho_{V, \omega}(\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_s) \leq \prod_{i=1}^s \exp(-\beta c_i |\bar{B}_i|)$$

を評価する。

Ising model の場合と同様 12. correlation functions の値には次の様な correlation equation が成り立つ。

$$(3-5) \quad \left\{ \begin{array}{l} \rho_{V, \omega}(\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_s) = \exp(-\beta E(\bar{B}_1)) \{ \rho_{V, \omega}(\bar{B}_2, \dots, \bar{B}_s) \\ + \sum_{R=1}^{\infty} \frac{(-1)^R}{R!} \sum_{V, R}^1 \rho_{V, \omega}(\bar{B}_2, \dots, \bar{B}_s, \bar{F}_{i_1}, \dots, \bar{F}_{i_R}) \\ - \sum_V^2 \rho_{V, \omega}(\bar{B}_2, \dots, \bar{B}_s, \bar{H}) \} \quad \text{if } s > 1 \\ \rho_{V, \omega}(\bar{B}_1) = \exp(-\beta E(\bar{B}_1)) \{ 1 \\ + \sum_{R=1}^{\infty} \frac{(-1)^R}{R!} \sum_{V, R}^1 \rho_{V, \omega}(\bar{F}_{i_1}, \dots, \bar{F}_{i_R}) - \sum_V^2 \rho_{V, \omega}(\bar{H}) \} \\ \text{if } s = 1 \end{array} \right.$$

ここで $\sum_{V, R}^1$ は B_1 と intersect or touch する R 個の $\gamma_{V, \omega}^{\text{out}}$ の elements $(\bar{F}_{i_1}, \dots, \bar{F}_{i_R})$ 12 $R > 1$ とされる。

$\sum_V^2$ は, B_1 は interior region には $\gamma_{V,\omega}^{\text{out}}$ の element

$\bar{H}$ には $\bar{H}$ の γ とされる。

X_0 は次の様な infinite sequence of functions の集合とする。

$$\Phi = \{ \phi_1(\bar{B}_1), \phi_2(\bar{B}_1, \bar{B}_2), \dots, \phi_k(\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_k), \dots \}$$

$\therefore \gamma$ $\phi_k(\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_k)$ は, k -outer B -walls in $\mathbb{Z}^3$ ($\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_k$)

の函数 γ である。

$$X = \{ \Phi \in X_0 ; |\Phi| < \infty \} \quad \text{と置く}$$

$\therefore \gamma$.

$$|\Phi| = \sup_{s \geq 1} \left[\sup_{(\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_s)} |\phi_s(\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_s)| \prod_{i=1}^s \frac{\exp(C_1 \beta |\bar{B}_i|)}{2^{|\bar{B}_i|}} \right]$$

この時, $(X, |\cdot|)$ は Banach space とする。

X 上の operator A は次のように定める。

$$(A\Phi)_s(\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_s) = \exp(-\beta E(\bar{B}_1)) \{ \phi_{s-1}(\bar{B}_2, \dots, \bar{B}_s)$$

$$+ \sum_{k=1}^s \frac{(-1)^k}{k!} \sum_{\bar{Z}^3} \phi_{s-1+k}(\bar{B}_2, \dots, \bar{B}_s, \bar{F}_{i_1}, \dots, \bar{F}_{i_k})$$

$$- \sum_{\bar{Z}^3} \phi_s(\bar{B}_2, \dots, \bar{B}_s, \bar{H}) \}$$

($s=1$ の時 $\phi_0 = 0$ と定める。)

$$\Lambda \in X \quad \&$$

$$\Lambda(\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_s) = \begin{cases} \exp(-\beta E(\bar{B}_1)) & \text{if } s=1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

1" 定め、

$$(3-7) \quad \rho_\omega = 1 + \Lambda \rho_\omega$$

3.2 equation を考えよ。これは infinite region における correlation equation と呼ぶ。 - 3. X 上の operator $\chi_{V,\omega}$ と

$$(\chi_{V,\omega} \Phi)_s(\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_s) = \sum_{i=1}^s \chi_{V,\omega}(\bar{B}_i) \Phi_s(\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_s)$$

$$\chi_{V,\omega}(\bar{B}) = \begin{cases} 1 & \text{if } B_1 \subset V \text{ and } \bar{B}_1 \text{ is } \omega\text{-type} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

1" 考えよ。 V における correlation equation (3-5) は

$$(3-8) \quad \rho_{V,\omega} = \chi_{V,\omega} 1 + \chi_{V,\omega} \Lambda \chi_{V,\omega} \rho_{V,\omega}$$

という形で表わされる。

Lemma 3-1 と同じように、 $\|A\|$ に関して次の事がえられろ。

Lemma 3-2 $\|A\| < 1$ for sufficiently large β

Lemma 3-2 * 1) infinite region に & 17 3 correlation eq.

(3-7) は unique solution $f_\omega(\cdot)$ とおつ。これを limiting correlation function と呼ぶ。Minlos - Sinai (see [2]) が Ising model に適用する法を適用すると、 $f_{V,\omega}(\cdot)$ 、 $f_\omega(\cdot)$ に成る次の様な性質が導かれる。

Lemma 3-3

1). $(\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_s)$ が ω -type τ 、 V に含まれる時。

$$(3-8) \quad |f_{V,\omega}(\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_s) - f_\omega(\bar{B}_1, \dots, \bar{B}_s)|$$

$$< c_1(\beta) (2 \exp(-c_1\beta))^{|B_1|+|B_2|} \exp\{-(\beta c_1 - \ln c_2) d(B_1, \dots, B_s; \partial V)\}$$

for sufficiently large β

を評価が成り立つ。 $\tau = \tau$ 、 $d(B_1, \dots, B_s; \partial V)$ は

$B_1 \cup B_2 \cup \dots \cup B_s$ と ∂V との間の距離。

2). $\bar{B}_1, \bar{B}_2$ が ω -type τ V に含まれる時。

$$(3-9) \quad |f_{V,\omega}(\bar{B}_1, \bar{B}_2) - f_{V,\omega}(\bar{B}_1) f_{V,\omega}(\bar{B}_2)|$$

$$< c_2(\beta) (2 \exp(-c_1\beta))^{|B_1|+|B_2|} \exp\{-(\beta c_1 - \ln c_2) d(B_1, B_2)\}$$

for sufficiently large β

を評価が成り立つ。

Γ_ω を ω -type congruence classes の全体とする時、 $|D(s)|$ の expectation と variance は次の形に書かれる。

$$(3-10) \quad \langle |D(s)| \rangle_{V, \omega} = \sum_{\bar{\gamma} \in \Gamma_\omega} V(\gamma) \sum_{\substack{\bar{B} \in \bar{\gamma} \\ B \subset V}} P_{V, \omega}(\bar{B})$$

$$(3-11) \quad V_{V, \omega}(|D(s)|)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{\substack{\bar{\gamma}_1, \bar{\gamma}_2 \in \Gamma_\omega \\ \bar{\gamma}_1 \neq \bar{\gamma}_2}} V(\gamma_1) V(\gamma_2) \sum_{\substack{\bar{B}_1 \in \bar{\gamma}_1 \\ \bar{B}_2 \in \bar{\gamma}_2}} |P_{V, \omega}(\bar{B}_1, \bar{B}_2) - P_{V, \omega}(\bar{B}_1) P_{V, \omega}(\bar{B}_2)| \\ &\quad + \sum_{\bar{\gamma} \in \Gamma_\omega} V(\gamma)^2 \sum_{\substack{\bar{B} \in \bar{\gamma} \\ B \subset V}} P_{V, \omega}(\bar{B}) (1 - P_{V, \omega}(\bar{B})) \end{aligned}$$

Noil (s) については同様の表式が与えられる。Lemma 3.3 を用いる事により次の prop. が成り立つ。

Prop 3-1 $\forall \omega \in \Pi: \forall \mu \in K: n$ 対し β は十分大になると

と、次の 1) ~ 4) が成り立つ。

- 1) $|\langle \text{Noil} \rangle_{V, \omega, \mu} - n \varepsilon^{**} |V|| < F(\beta) |V|^{\frac{1}{2}}, \quad F(\beta) \downarrow 0 \text{ exponentially as } \beta \rightarrow \infty.$

2) $|\langle D \rangle_{V, \omega, \mu} - \delta^*(\beta, \mu) IV| < F_2(\beta) |V|^{\frac{1}{2}}$, $F_2(\beta) \downarrow 0$ exponentially as $\beta \rightarrow \infty$

3) $V_{V, \omega, \mu}(Noil) < F_3(\beta) |V|$, $F_3(\beta) \downarrow 0$ exponentially as $\beta \rightarrow \infty$

4) $V_{V, \omega, \mu}(D) < F_4(\beta) |V|$, $F_4(\beta) \downarrow 0$ exponentially as $\beta \rightarrow \infty$.

(Proof of Theorem 2)

$m(\beta)$ は次の 1), 2) のみ π す関数とする。

1) $m(\beta) \downarrow 0$ as $\beta \rightarrow \infty$

2) $F_4(\beta) / m^2(\beta) \downarrow 0$ as $\beta \rightarrow \infty$.

$f(\beta) = F_2(\beta) + m(\beta)$ とおくと。

Prop 3-1 と Chebyshev's inequality より。

$$(3-12) \quad P_{V, \omega} (|ID(\beta)| - \delta^* |V| > f(\beta) |V|^{\frac{1}{2}})$$

$$< P_{V, \omega} (|ID(\beta)| - \langle ID(\beta) \rangle_{V, \omega} > m(\beta) |V|^{\frac{1}{2}})$$

$$< F_4(\beta) / m^2(\beta) \downarrow 0 \quad \text{as } \beta \rightarrow \infty.$$

+ e. e. d.

Theorem 3 の証明に用いるのは、次の Prop に注意すれば、
Theorem 2 の証明と同様にし、証明できる。

Proposition 3-2 $\forall \mu \in K; \quad \forall \omega \in \Pi; \quad$ 11 に対し β が十分
大きくとると、次の評価が成り立つ。

$$(3-13) \quad P_{V, \omega} (\text{Noil}(\beta) = N) > C_3(\beta) \frac{1}{|V|^{\frac{1}{2}}}$$

ここで、 N は $|N - n;^* |V|| < F_1(\beta) |V|^{\frac{1}{2}}$ を満たす任意の
positive integer N であり、 $C_3(\beta)$ は $C_3(\beta) \downarrow 0 \quad \text{as } \beta \rightarrow \infty$
なる 3 の関数。

References

- [1] Minlos, R. A., Sinai, Ja. G. : Math. Sbornik, 73, 115 (1967)
- [2] _____, _____ ; Trans. Moskow Math. Soc.
19, 121 (1968)
- [3] Heilmann, O. J. ; Commun. math. Phys. 36 91 (1974)
- [4] Gertsik, V. M., Dobrushin, R. L. ; Funkts. Analiz. 8, 12 (1972)
- [5] Tachibana, T., Kobayashi, K., Suzuki, H., Honda, K.,
Sukigara, M., ; 「液晶」 共立出版 (1972)
- [6] Miyamoto, M. ; 「格子気体の相転移」 Seminar on
prob. (1972)
- [7] Gallavotti, G., Miracle-Sole, S. ; Commun. math. Phys.
27, 103 (1972)
- [8] Abraham, D. B., Heilmann, O. J. ; J. stat. Phys. 4
15 (1972)
- [9] _____, _____ ; J. stat. Phys. 13, 6,
461 (1975)
- [10] Ruelle, D. ; Statistical mechanics. Rigorous results,
New York ; Benjamin (1969)
- [11] Dobrushin, R. L. ; Funct. Anal. Appl. 8, 302 (1968)