数理解析研究所講究録
第434巻 1981年 1-27

結晶構造を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（異方性液体）等においてしばしば現われている。例えば、石けんを水に溶かした時、重量濃度が小さい時には系は分散系であるが、30%位の濃度においては柱状の結晶構造をとり、60%位の濃度においては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方を、疎水性部分は脂質の方を向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。

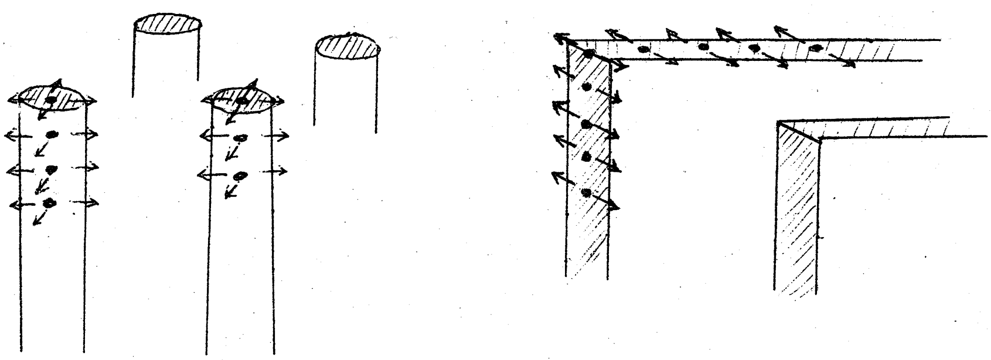
ここでは、この様な密度の大小に応じて結晶構造を変えるという現象を格子modelを用いて説明しよう。

格子modelにおけるphase transitionの確率論的側面からの研究は、Dobrushin [11]，Lanford，Ruelle [10]，等によって始められ、その後 Minlos，Sinai [1]．[2]．，Gallavotti，Mirade-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 のさまざまな評価を用いて、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 と同様の概念である Bloch-wall を定義し、その correlation function を用い、disordered region D(ξ) 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

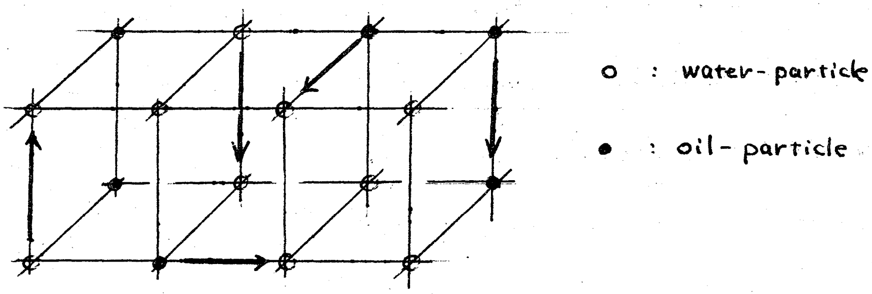
↑ ---- 親水性部分

---- 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 の上には 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↑で表わし、矢の先端部を親水基、矢の尾部を疎水基であると考える。（Fig. 2 参照）

Fig. 2



粒子間に働く Interaction について述べる前に、格子 model に関する基本的な 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

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

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

とおく。bond A と bond B が一点で接しており、かつ直交している時、pair (A, B) を perpendicular pair of bonds と呼ぶ。

以下簡単のために、oil-particle を O-particle, water-particle を W-particle, soap-molecule を S-molecule で表わす。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 W-particle が存在している事を表わしており、又 $\omega(t) = \phi$ は bond $t \in T$ の上に 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 粒子間のみに働き、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 の間に働く 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.

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

$$U_{o,w}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \varepsilon_0 > 0 & \text{if} \quad |\mathbf{r}| = 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

つまり、o-particles 同志、w-particles 同志の間には interaction が働らず、o-particle と w-particle の間に nearest neighbour repulsive interaction が働いている。

2) o-particle, w-particle と s-molecule の間に働く 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 $-\varepsilon_0$ 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、$2\varepsilon_0$ の repulsive な interaction が働く.

Fig. 3

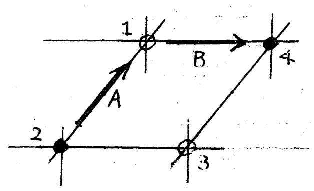


Fig. 3 において A という s - molecule と 1 という w-particle の間、及び A と 2 という o - particle の間に $-\varepsilon_0$ の attractive な interaction が働いている。又 B と 4 の間、B と 1 の間には、$2\varepsilon_0$ の repulsive な interaction が働いている。

3) 平行な bonds 上にある s - molecules 間に働く interaction

平行な 2 本の bonds 上におかれた 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 な interaction が働き、逆の方向を向いている時には、repulsive な 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 に示された様に与えられているとする。

Fig. 4

distance	1	$\sqrt{2}$	2
attractive	$-\varepsilon_1$	$-\varepsilon_3$	$-\varepsilon_5$
repulsive	ε_2	ε_4	ε_6

Fig. 5

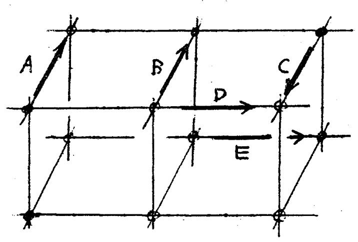
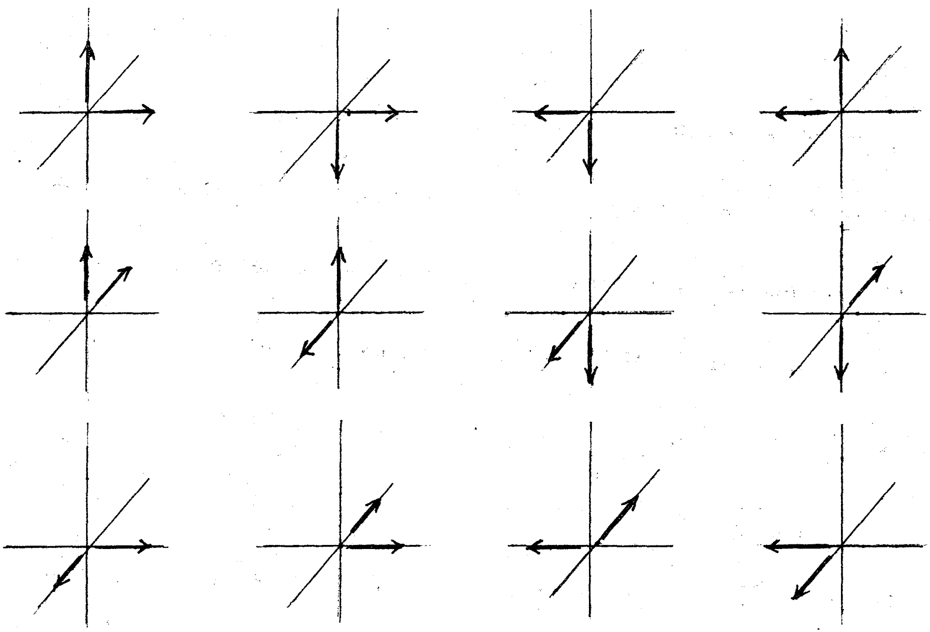


Fig. 5 において、AB間に $-\varepsilon_1$、BC間に ε_2、AC間に ε_4、DE間に $-\varepsilon_3$ の interaction が働いている。

4) perpendicular pair of bonds 上におかれた s-molecules 間に働く interaction.

Fig. 6 に示された 12 の types の *soap-molecules* 間には $-\varepsilon_7$ の attractive interaction が働き、これら以外の perpendicular pair of bonds 上におかれた s-molecules 間には ε_8 の repulsive interaction が働く。

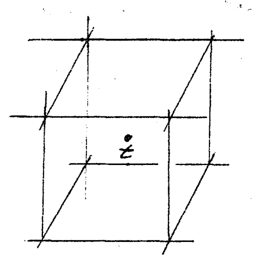
Fig. 6



5) o-particle は 8μ の chemical potential を与え，他の粒子には chemical potential を与えない。

以上で粒子間に働く interaction の設定は終った。次に block energy，block configuration の概念を導入する。S を $\mathbb{Z}^3$ の dual lattice とし，Fig. 7 の様な unit cube における sites と bonds の集合を"block"と呼び，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 つの sites と 12 本の bonds より成り，各 site については o-particle，w-particle の 2 通りの場合が考えられ，各 bond については 2 種類の S-molecules の内のいずれかが存在しているか又は存在していないかの 3 つの場合が考えられるから，

$$\# \Sigma = 2^8 \cdot 3^{12}$$

となる。

$\bar{\Omega} = \Sigma^S$ とおき，$\omega \in \bar{\Omega}$ に対して任意の隣接する blocks の pair (z_1, z_2) について

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

が成り立つ時，ω は consistent であると言う。

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

とおくと、$\hat{\Omega}$ と本来の configuration space Ω との間に 1 対 1 の対応がつく。

$\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_7, \varepsilon_8$ - 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 に共有されている事を考慮して、block $t \in S$ の config. が $\xi \in \Sigma$ である時の block t 内の粒子間の interaction energy $E_t(\xi)$ を次で定義する。

(1-1) $$E_t(\xi) = \frac{1}{2}\left(-n_1(\xi)\varepsilon_1 + n_2(\xi)\varepsilon_2 - n_7(\xi)\varepsilon_7 + n_8(\xi)\varepsilon_8\right)$$

$$- n_3(\xi)\varepsilon_3 + n_4(\xi)\varepsilon_4 - \mu\, n(\xi)$$

$$+ \frac{1}{4}\left(\text{total energy of particle - molecule pairs in } t\right)$$

ここで、$n(\xi)$, $n_i(\xi)$ は block t における ⊖ - 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 (t_1, t_2) の間の mutual interaction energy $E_{t_1,t_2}(\xi)$ を次で定義する。

(1-2) $$E_{t_1,t_2}(\xi) = \frac{1}{2}\left(-n_5(\xi)\varepsilon_5 + n_6(\xi)\varepsilon_6\right)$$

ここで $n_5(\xi)$, $n_6(\xi)$ は $t_1 \cup t_2$ における ε_5 - pairs, ε_6 - pairs の数である。

さらに $\xi \in \hat{\Omega}$ の下での block t の block energy $E(t : \xi)$ を

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

によって与える。

bounded set $V \subset S$ について、V における consistent config. の全体を $\hat{\Omega}_V$ で表わす。$\xi \in \hat{\Omega}_V$　$\omega \in \hat{\Omega}$ に対して

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

とおく。$(\xi,\omega) \in \hat{\Omega}$ となる時、$\xi \in \hat{\Omega}_V$ は ω に関して consistent であると言う。$\hat{\Omega}_{V,\omega}$ を ω に関して consistent な config. $\xi \in \hat{\Omega}_V$ の全体とする。

$\hat{\Omega}_{V,\omega}$ 上に次の様に Gibbs measure $P_{V,\omega}(\cdot)$ を定義する。

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

ここで、

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

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

$\hat{\Omega}$ 上の random field $\{X_t : t \in S\}$ が Gibbsian random field

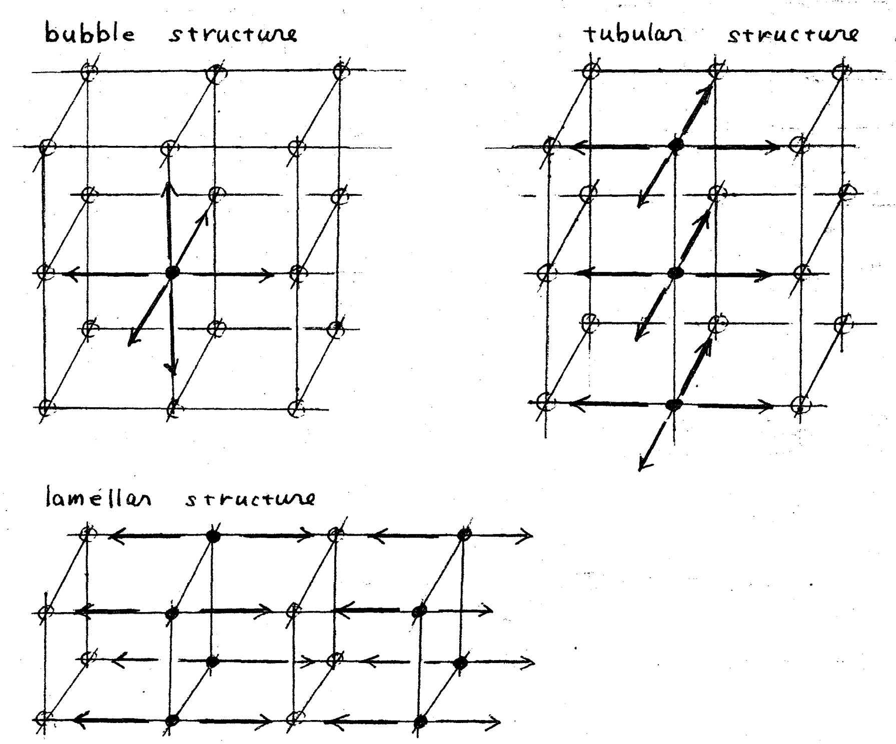
$\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}$　$\forall V \subset S$: bounded に対して

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

§2 Main Results

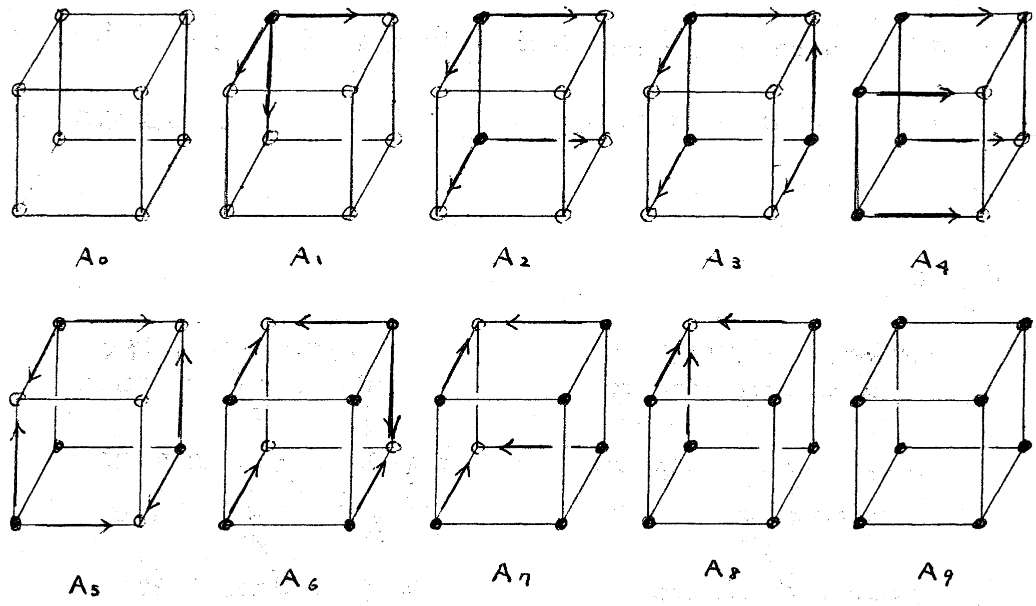
この§において、我々の考えている model が o-particle の chemical potential μ が増加するに従って bubble structure から tubular structure, lamellar structure へと構造を変化させる事を示そう。ここで bubble structure, tubular structure, lamellar structure とは Fig. 8 に示されている様な periodic config. の事である。さらにこの§では、$V \longrightarrow \mathbb{Z}^3$, $N \longrightarrow \infty$, $\frac{N}{V} \longrightarrow n^*$ とした時の canonical Gibbs 測度の漸近的な挙動についても調べる。ここで n^* は o-particles の密度で、N は o-particles の数である。

Fig. 8



まず最初に、どの様なconfig.の下で各blockのblock energyが最小になるかを調べる。ε_0、ε_2、ε_4 が他のinteraction parameters に比べて十分大きいとすると、$\xi \in \Sigma$ が Fig. 9 で示されている A_0 から A_9 の10のtypesのconfig.のどれかと一致する時のみ、$E_t(\xi)$ は最小値をとりうる事がわかる。

Fig. 9.



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

$$\#(\Sigma_0) = \#(\Sigma_9) = 1, \quad \#(\Sigma_1) = \#(\Sigma_3) = \#(\Sigma_5) = \#(\Sigma_6) = \#(\Sigma_8) = 8, \quad \#(\Sigma_2) = \#(\Sigma_7) = 12, \quad \#(\Sigma_4) = 6$$

となる。

$$\Pi_i = \{ \omega \in \hat{\Omega} \;;\; \omega(t) \in \Sigma_i \quad \text{for } \forall t \in S \}$$

とおくと．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 から明らかな様に．Π_1、Π_2、Π_4 の各 element はそれぞれ．bubble，tubular，lamellar structure を表わす．

以下において．interaction parameters $\varepsilon_0 \sim \varepsilon_8$ は条件

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

に加えて．次の3つの条件 (C-1) ～ (C-3) を満すとする。

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

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

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

この時、次の 1) ～ 3) が成立する。

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

$$\Rightarrow \quad E(t : \omega_1) < E(t : \omega) \quad \text{for } \forall \omega_1 \in \Pi_1 \quad \forall \omega \in \hat{\Omega} \setminus \Pi_1$$

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

$$\Rightarrow \quad E(t : \omega_2) < E(t : \omega) \quad \text{for } \forall \omega_2 \in \Pi_2, \quad \forall \omega \in \hat{\Omega} \setminus \Pi_2$$

3) $\mu \in K_4 \equiv (\mu_2, \mu_3)$

$$\Rightarrow \quad E(t : \omega_4) < E(t : \omega) \quad \text{for } \forall \omega_4 \in \Pi_4, \quad \forall \omega \in \hat{\Omega} \setminus \Pi_4$$

ここで

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

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

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

この時、次の定理が成り立つ。

Theorem 1　$\forall \mu \in K_i \ (i = 1, 2, 4)$ 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 $P_{\omega_j^{(i)}} \ (j = 1, 2, \dots N_i)$ が存在して次をみたす.

$$P_{\omega_j^{(i)}} (X_t = \omega_j^{(i)}(t) : t \in C) \geq 1 - g_i(\beta) \quad (i = 1, 2 \dots, N_i)$$

ここで $C \subset S$ は finite set で $g_i(\beta)$ は $g_i(\beta) \downarrow 0$ as $\beta \to \infty$ となる β の関数である。

次の結果を述べる前に、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,

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

となる block t を static block と呼び、これ以外の block を active block と呼ぶ。active blocks の全体を $B(\xi)$ で表わす。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 であると呼ぶ。 2つの B-walls $\bar{B}_1 = (B_1,\ \xi(t)\ t\in B_1)$ $\bar{B}_2 = (B_2,\ \zeta(t)\ t\in B_2)$ に対して、B_1 が B_2 に translation T でもって重ねる事ができ、$\xi(t) = \zeta(T(t))$ $t\in B_1$ が成り立つ時、B_1 と B_2 は congruent であると言う。B-wall の congruence class を $\bar{\gamma}$ で表わし、congruence classes の全体を Γ で表わす。

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

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

$\beta,\ \mu,\ j = 1, 2, 4$ に対して

$$\delta^*(\beta,\mu) = \sum_{\bar{\gamma}\in\Gamma} V(\gamma)\ \rho(\bar{\gamma}:\beta,\mu)$$

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

とおく。ここで、$u_1 = \frac{1}{8}$　$u_2 = \frac{1}{4}$　$u_4 = \frac{1}{2}$，

$\rho(\bar{\gamma}:\beta,\mu)$ は $\bar{\gamma}\in\Gamma$ の limiting correlation function.

$\langle n(\bar{\gamma})\rangle$ は ensemble $\Upsilon(\bar{\gamma}:\beta,\mu)$ における $N_{oil}(\cdot)$ の平均値である。$\rho(\bar{\gamma}:\beta,\mu)$，$\Upsilon(\bar{\gamma}:\beta,\mu)$ の定義は次の§で与えられる。この§では $\delta^*(\beta,\mu)\downarrow 0$ exponentially，$n_j^{**}(\beta)\longrightarrow u_j$ as $\beta\longrightarrow\infty$ となる事だけを注意しておく。

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

$$P_{V,\omega}^{N}(\cdot) = P_{V,\omega}(\cdot \mid N_{oil}(\xi) = N)$$

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

$|D(\xi)|$ の漸近的挙動について、次の2つの結果が得られる。

<u>Theorem 2</u> $\forall \mu \in K_i$, $\forall \omega \in \Pi_i$ $(i = 1, 2, 4)$ に対して、$\exists f(\beta)$ $\exists g(\beta)$; $f(\beta) \downarrow 0$, $g(\beta) \downarrow 0$ as $\beta \to \infty$ で

$$(2\text{-}1) \qquad P_{V,\omega}(\,|\,|D(\xi)| - \delta^{*}(\beta)|V|\,| > f(\beta)|V|^{\frac{1}{2}}\,) < g(\beta)$$

$$(2\text{-}2) \qquad P_{V,\omega}(\,|\,N_{oil}(\xi) - n_i^{**}|V|\,| > f(\beta)|V|^{\frac{1}{2}}\,) < g(\beta)$$

for sufficiently large β.

<u>Theorem 3</u> $\forall \omega \in \Pi_i$ $(i = 1, 2, 4)$ $\exists g(\beta) \downarrow 0$ as $\beta \to \infty$; $0 < \alpha < \frac{1}{4}$ なる任意の α と $|N - n_i^{**}(\beta, \mu)|V|| < F_i(\beta)|V|^{\frac{1}{2}}$ $(\mu \in K_i)$ を満たす任意の N に対して、β が十分に大きい時次の評価が成り立つ。

$$(2\text{-}3) \qquad P^N_{V,\omega}\left(\left| |D(\xi)| - \delta^*(\beta)|V| \right| > g(\beta)\,|V|^{\frac{3}{4}+\alpha} \right) < C(\beta)\,\frac{1}{|V|^{2\alpha}}$$

$C(\beta)$: 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 としてもつ $\hat{\Omega}_{V,\omega}$ の elements の全体を $\Delta_{V,\omega}(\bar{B})$ で表わす。この時、$\bar{B}$ の correlation function を

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

で定義する。次に B-wall $\bar{B}$ のもつ energy $E(\bar{B})$ を

$$(3\text{-}2) \qquad E(\bar{B}) = \sum_{t \in B} E(t:\xi) \qquad (\xi \in \Delta_{V,\omega}(\bar{B}))$$

で定める。以後、簡単のために、$E(t:\xi) - \min_{\xi} E(t:\xi)$ を改めて $E(t:\xi)$ として定める。この様な修正に関して、Gibbs meas. $P_{V,\omega}(\cdot)$ の定義は変化をうけない。

config. ξ の下での B-walls の全体を $B(\xi)$ で表わすと、$\tau_{V,\omega}(\cdot)$ は次の様に表わされる。

$$(3\text{-}3) \qquad q_{V,\omega}(\bar{B}) = \frac{1}{Z_V(\omega)} \sum_{\xi \in \Delta_{V,\omega}(\bar{B})} \prod_{\bar{B} \in B(\xi)} \exp(-\beta E(\bar{B}))$$

$q_{V,\omega}(\bar{B})$ に関して、Heilmann の reflection method (See [3]) を用いると、次の評価がえられる。

$$(3\text{-}4) \qquad q_{V,\omega}(\bar{B}) < \exp(-c_1 \beta |\bar{B}|)$$

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 を S の finite subset とし、V の outer bdry. で囲まれる領域を $\theta(V)$ で表わし、$In(V) = \theta(V) \setminus V$ を V の inner region と呼ぶ。任意の $\mu \in K_i$, $\omega \in \Pi_i$ に対して、

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

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

とおく。この時 $B \in \Upsilon_{V,\omega}$ or $\Upsilon_{V,\omega}^{out}$ における各 outer B-wall は ω-type となっている事に注意。

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

$\Upsilon_{V,\omega}^{out}$ 上に次の様な probability measure を定める.

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

ここで、

$$Z(J_k(\bar{B}) : \omega_k(\bar{B})) = \sum_{B \in \Upsilon_{J_k(\bar{B}),\omega_k(\bar{B})}} \prod_{\bar{B} \in B} \exp(-\beta E(\bar{B})) .$$

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

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

で定める。

(3-4) の場合と同様に、Heilmann の reflection method を用いると、次の lemma が得られる。

<u>Lemma 3.1</u> 十分大なる β に対して、

$$\rho_{V,\omega}(\bar{B}_1, \ldots, \bar{B}_s) \leq \prod_{i=1}^{s} \exp(-\beta c_1 |B_i|)$$

なる評価が成立。

Ising model の場合と同様に、correlation functions の間には次の様な correlation equation が成り立つ。

$$(3\text{-}5)\quad \begin{cases} \rho_{V,\omega}(\bar{B}_1, \ldots, \bar{B}_s) = \exp(-\beta E(\bar{B}_1)) \Big\{ \rho_{V,\omega}(\bar{B}_2, \ldots, \bar{B}_s) \\ \quad + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \sum_{V,k}^{1} \rho_{V,\omega}(\bar{B}_2, \ldots, \bar{B}_s, \bar{F}_{i_1}, \ldots, \bar{F}_{i_k}) \\ \quad - \sum_{V}^{2} \rho_{V,\omega}(\bar{B}_2, \ldots, \bar{B}_s, \bar{H}) \Big\} \qquad \text{if} \quad s > 1 \\ \rho_{V,\omega}(\bar{B}_1) = \exp(-\beta E(\bar{B}_1)) \Big\{ 1 \\ \quad + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \sum_{V,k}^{1} \rho_{V,\omega}(\bar{F}_{i_1}, \ldots \bar{F}_{i_k}) - \sum_{V}^{2} \rho_{V,\omega}(\bar{H}) \Big\} \\ \quad \text{if} \quad s = 1 \end{cases}$$

ここで $\sum_{V,k}^{1}$ は B_1 と intersect or touch する k 個の $\Upsilon_{V,\omega}^{out}$ の elements $(\bar{F}_{i_1}, \ldots, \bar{F}_{i_k})$ にわたってとられる。

Σ^2_V は．B_1 を interior region に含む $\Upsilon^{out}_{V,\omega}$ の element $\bar{H}$ にわたってとられる。

X_0 を次の様な infinite sequence of functions の集合とする．

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

ここで $\phi_k(\bar{B}_1, \ldots \bar{B}_k)$ は．k-outer B-walls in Z^3 $(\bar{B}_1, \cdots \bar{B}_k)$ の関数である。

$$X = \{ \Phi \in X_0 \; ; \; |\Phi| < \infty \} \quad \text{とおく}$$

ここで．

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

この時．$(X, |\cdot|)$ は Banach space となる。

X 上の operator A を次で定める。

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

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

$$- \sum^{2}_{Z^3} \phi_s(\bar{B}_2, \ldots \bar{B}_s, \bar{H}) \}$$

（ $s = 1$ の時 $\phi_0 = 0$ と定める．）

$\Lambda \in X$ を

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

で定め、

$$(3-7) \qquad \rho_\omega = \Lambda + A \rho_\omega$$

なる equation を考える。これを infinite region における correlation equation と呼ぶ。一方、X 上の operator $\chi_{V,\omega}$ を

$$(\chi_{V,\omega} \Phi)_s (\bar{B}_1, \ldots, \bar{B}_s) = \prod_{i=1}^{s} \chi_{V,\omega}(\bar{B}_i) \, \phi_s(\bar{B}_1, \ldots, \bar{B}_s)$$

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

で与えると、V における correlation equation (3-5) は

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

という形で表わされる。

Lemma 3-1 を用いると、$\|A\|$ に関して次の事が示される。

<u>Lemma 3-2</u> $\quad \|A\| < 1$ for sufficiently large β

Lemma 3-2 より infinite region における correlation eq. (3-7) は unique solution $\rho_\omega(\cdot)$ をもつ。これを limiting correlation function と呼ぶ。Minlos - Sinai (See [2]) が Ising model について用いた方法を適用すると、$\rho_{V,\omega}(\cdot)$、$\rho_\omega(\cdot)$ に関する次の様な性質が導かれる。

<u>Lemma 3.3</u>

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

(3-8) $$|\rho_{V,\omega}(\bar{B}_1, \ldots, \bar{B}_s) - \rho_\omega(\bar{B}_1, \ldots, \bar{B}_s)|$$

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

for sufficiently large β

なる評価が成り立つ。ここで、$d(B_1, \ldots B_s : \partial V)$ は、$B_1 \cup B_2 \cup \cdots \cup B_s$ と ∂V との間の距離。

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

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

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

for sufficiently large β

なる評価が成り立つ。

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

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

$$(3-11)\qquad V_{V,\omega}(|D(\xi)|)$$

$$= \sum_{\substack{\bar{\gamma}_1,\bar{\gamma}_2\in\Gamma_\omega\\ \bar{\gamma}_1\neq\bar{\gamma}_2}} V(\gamma_1)V(\gamma_2) \sum_{\substack{\bar{B}_1\in\bar{\gamma}_1 \quad B_1\subset V\\ \bar{B}_2\in\bar{\gamma}_2 \quad B_2\subset V}} |\rho_{V,\omega}(\bar{B}_1,\bar{B}_2) - \rho_{V,\omega}(\bar{B}_1)\rho_{V,\omega}(\bar{B}_2)|$$

$$+ \sum_{\bar{\gamma}\in\Gamma_\omega} V(\gamma)^2 \sum_{\substack{\bar{B}\in\bar{\gamma}\\ B\subset V}} \rho_{V,\omega}(\bar{B})(1-\rho_{V,\omega}(\bar{B}))$$

$N_{0,i}(\xi)$ についても同様の表式が得られる。Lemma 3・3 を用いる事により次の prop. が成り立つ。

Prop 3-1　$\forall\omega\in\Pi_i$ $\forall\mu\in K_i$ に対して β を十分大にとると、次の 1) ~ 4) が成り立つ。

1)　$|\langle N_{0,i}\rangle_{V,\omega,\mu} - n_i^{**}|V|| < F_1(\beta)|V|^{\frac{1}{2}}$,　$F_1(\beta)\downarrow 0$ exponentially as $\beta\to\infty$.

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

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

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

(Proof of Theorem 2)

$m(\beta)$ を次の 1), 2) をみたす関数とする。

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

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

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

Prop 3-1 と Chevyshev's inequality より.

$$(3\text{-}12) \qquad P_{V,\omega}\left(\left|\, |D(\xi)| - \delta^* |V| \,\right| > f(\beta)\, |V|^{\frac{1}{2}} \right)$$

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

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

⊣ q.e.d.

Theorem 3 の証明については、次の Prop に注意すれば、Theorem 2 の証明と同様にして証明できる。

<u>Proposition 3-2</u>　$\forall \mu \in K_i$. $\forall \omega \in \Pi_i$ に対して β を十分大きくとると、次の評価が成り立つ。

$$(3\text{-}13) \qquad P_{V,\omega}\left(N_{oil}(\xi) = N \right) > C_3(\beta) \frac{1}{|V|^{\frac{1}{2}}}$$

ここで、N は $\left| N - n_i^{**} |V| \right| < F_1(\beta)\, |V|^{\frac{1}{2}}$ をみたす任意の positive integer N で、$C_3(\beta)$ は $C_3(\beta) \downarrow 0$ as $\beta \to \infty$ なる β 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)