

Kaufman の 2次元イジングモデル厳密解の論文を読む その 1

2019.1.3 鈴木 実

はじめに

ここで取り上げるのは次の 2次元イジングモデルの厳密解に関する論文である。[1]

Bruria Kaufman, “Crystal Statistics. II. Partition Function Evaluated by Spinor Analysis”,
Physical Review Vol. 76, No. 8, pp.1232–1243 (1949) .

この論文では、スピンの状態をスピノールで表し、分配関数を与える演算子をスピノールで表現することにより線形代数の問題として、その固有値問題を解くことにより 2次元イジングモデルを厳密に解いている。

2次元イジングモデルの厳密解は Onsager によって得られたが、その論文 [2] は数学的表現が非常に難解で理解するのは一般に困難であるとされてきた。そこではリー代数を満たす関数空間における固有値問題を解くことになり、関数の基底系を複数回変換して固有値に到達する。その過程はかなり複雑で論文も長く見通しは良くない。そのためか、Onsager は論文の Outline of Method の節で、直積で表される 2^n 次元のベクトル (スピノール) を用いて直接永年方程式を解いて固有値を得る方法に言及し、その内容は別途論文にすると書いている。ここで取り上げる Bruria Kaufman の論文 [1] はまさにその論文である。ちなみに、Onsager の論文は “Crystal Statistics. I.” で、この論文のシリーズは “Crystal Statistics. III.” までである。[3]

この論文の肯綮は、問題とする演算子が 2^n 次元のスピノールで表現される時、それが $2n$ 個の基底演算子の回転を表し、元の演算子の固有値が、 $2n$ 個の回転を表す行列の固有値で表されるということである。ちなみに、この 2つの空間の固有値の関係は、南部陽一郎の導いた固有値問題と同じである。[4] この論文では、2次元イジングモデルから出発して、2つの空間における固有値の関係を、線形代数で一般的なベクトルと行列で厳密に表現し、導出している。したがって、線形代数に慣れた人には、Onsager の論文よりかなり分かりやすくなっている。ただし、論文というスペースの限られたところでの記述であるために、説明は必ずしも十分ではないところがある。したがって、読み進むのは必ずしも簡単ではないように思われる。また、符号の誤りなどがしばしば見られる。そこで、ここではそういう部分を補足するような、つまり学生やその他必要とする人のために「Onsager の 2次元イジングモデルの厳密解の論文を読む」を書いた時と同じような資料が必要と思われる。本文は、そういう意味でのこの論文を読み通すための補助資料としてのメモである。論文の式番号を示す時は、(O-1) のように数字の前に O を付した。

1. SETTING UP THE MATRIX PROBLEM (行列問題への定式化)

この論文で取り扱われるモデルは、長方形を基本並進格子とする 2次元格子の格子点に 1 個のスピンを配置した系で、横のスピン並び (x 軸方向) を行 (row) とし、1つの行に n 個のスピンが並び、その行が縦に m 行並んでいるスピン系である。縦の m 個のスピン並び (y 軸方向) は列 (column) と呼び、1 個のスピンを特定するときには i 行 j 列のスピンと表示する。

スピンの方向は z 軸の 2 方向のみに限られ、正の方向を $\uparrow(+1)$ 、もう一方を $\downarrow(-1)$ とする。スピン間の相互作用は、 x 軸または y 軸の最近接スピン間のみで、そのエネルギーは同方向スピン間には、横方向 (x 軸) で $-J'$ 、縦方向 (y 軸) で $-J$ とし、反対スピン間には、横方向 (x 軸) で $+J'$ 、縦方向 (y 軸) で $+J$ とする。(論文ではこの部分は逆に記述されている。しかし、その後は Onsager の論文と同じ本来の記述に戻っているので、ここでは正しい記述に合わせておく。) 全体のエネルギー E_c は、横方向の隣接スピン対で同方向の対の

数から反対方向の対の数を引いた数 n'_c と、縦方向の隣接スピン対で同方向の対の数から反対方向の対の数を引いた数 n_c から得られる。すなわち、

$$E_c = -n_c J - n'_c J'$$

である。

温度 T において、全スピンがある組み合わせの配位にある確率は、その時の E_c を用いて、 $\exp(-E_c/k_B T)$ に比例する。すなわち、

$$\exp\{(n_c J + n'_c J')/k_B T\}$$

に比例する。ここで、 $H \equiv J/k_B T$, $H' \equiv J'/k_B T$ という変数を導入する。そうすると、 Z を分配関数とし、全体のスピンの配位をとる確率は、

$$\frac{1}{Z} \exp\{n_c H + n'_c H'\}$$

である。分配関数は、

$$Z = \sum \exp\{n_c H + n'_c H'\}$$

となり、総和は全ての組み合わせのスピンの配位についてとる。スピンは互いに独立であるから、その配位の数 は 2^{mn} である。この数は天文学的で単に個々の配位を総和するような手法では Z を求めることはできない。通常はスピン間相互作用を行列で表し、その冪乗のトレースを取るという方法が用いられる。

まず、1次元のイジングモデルを考えてみよう。最近接スピン間相互作用エネルギーのみを考える時、1対のスピンの相互作用エネルギーは、2つのスピンが独立に変化するので、4つの場合が考えられる。したがって、この4つの値の組を、それを成分とする行列とみなしてもよい。これを敷衍して、連続した2対のスピンの場合を考え、中央のスピンについて総和をとると、2つの行列の積になるということがわかる。同様にスピンの数を増やしていけばスピンの数だけの行列の積になる。このようにして連続した1次元のスピン列の分配関数を計算することができる。2次元イジングモデルの場合も、これと同様な行列の積になるように持っていくたい。このような取扱いは以前にも述べたが [5]、ここではこの論文の表記に統一して述べることにする。

2次元格子の中から両端ではない隣り合う2本のスピンの行 (x 軸方向の並び) を取り上げよう。これを i 番目の行と $i+1$ 番目の行とする。 i 番目の行のスピンの値を左から $\mu_1^{(i)}, \mu_2^{(i)}, \dots, \mu_n^{(i)}$ とし、 $i+1$ 番目の行のスピンの値を左から $\mu_1^{(i+1)}, \mu_2^{(i+1)}, \dots, \mu_n^{(i+1)}$ としよう。 $\mu_j^{(i)}$ は i 行 j 列の格子点にあるスピンの値である。 i 番目の行の横方向のスピン間相互作用と、 i 番目の行と $i+1$ 番目の行の間の j 列にあるスピン間 (最近接スピン間) の相互作用を考える。ここでは、 $j=1$ と $j=n$ においては周期的境界条件を取り入れて、 $\mu_{j+n}^{(i)} = \mu_j^{(i)}$ とし、 n 番目のスピンの隣には1番目のスピンが来て相互作用が生じると考える。

上に述べたところにおいて、前者の x 軸方向のエネルギー E_i は

$$E_i = \sum_{j=1}^n -J' \mu_j^{(i)} \mu_{j+1}^{(i)}$$

となる。後者の y 軸方向のエネルギー $E_{i,i+1}$ は、

$$E_{i,i+1} = \sum_{j=1}^n -J \mu_j^{(i)} \mu_j^{(i+1)}$$

となる。エネルギー E_i はスピン $\mu_1^{(i)}, \mu_2^{(i)}, \dots, \mu_n^{(i)}$ の値の組み合わせに依存する。この組み合わせの数は、それぞれのスピン $\mu_j^{(i)}$ が独立に $+1$ と -1 を取り得るので 2^n 通りある。エネルギー $E_{i,i+1}$ はスピン $\mu_1^{(i)}, \mu_2^{(i)}, \dots, \mu_n^{(i)}$ とスピン $\mu_1^{(i+1)}, \mu_2^{(i+1)}, \dots, \mu_n^{(i+1)}$ の値の組み合わせに依存する。 $i+1$ 行のスピンの組み合わせの数も 2^n 通りあるので $E_{i,i+1}$ は 2^{2n} 通りのスピンの組み合わせに依存する。

ここで、1行に存在する n 個のスピンの組み合わせに個別に番号 ν_i を付けよう。組み合わせの数は、 n 個のスピンの独立に $+1$ と -1 の値を取るため、 ν_i の範囲は、

$$1 \leq \nu_i \leq 2^n \tag{1}$$

である.

スピンの組み合わせの順番は, 重複なく網羅してさえいればよいので, 特別に決める必要はない. 例えば,

$$\begin{aligned}
\nu_i = 1 &\rightarrow (1, 1, 1, \dots, 1, 1) \\
\nu_i = 2 &\rightarrow (1, 1, 1, \dots, 1, -1) \\
\nu_i = 3 &\rightarrow (1, 1, 1, \dots, -1, 1) \\
&\dots \\
\nu_i = 2^n &\rightarrow (-1, -1, -1, \dots, -1, -1)
\end{aligned}$$

という具合に 2 進数のようにしても良い. そうすると, E_i はより具体的に表される. これを論文と同じように $E(\nu_i)$ と書くことにしよう. 同様に, $E_{i,i+1}$ も $E(\nu_i, \nu_{i+1})$ と書くことにする. このとき, i 行スピン列の横方向スピン間相互作用のエネルギーと, i 行と $i+1$ 行スピン列の縦方向スピン間相互作用のエネルギーの和は

$$E(\nu_i) + E(\nu_i, \nu_{i+1}) = \sum_{j=1}^n (-J\mu_j^{(i)}\mu_{j+1}^{(i)} - J'\mu_j^{(i)}\mu_j^{(i+1)})$$

と書くことができる.

さらに $i+2$ 行目のスピン列を加えれば, $i+1$ 行の横方向のスピン間相互作用と, $i+1$ 行と $i+2$ 行の間の縦方向スピン間相互作用が加わる. 同様にして, 1 行から m 行までのスピン列を加え, さらに縦方向にも周期的境界条件を導入して, m 行と $m+1$ 行の間の縦方向のスピン間相互作用を, m 行と 1 行の間の縦方向のスピン間相互作用に置き換えれば, $n \times m$ の 2 次元格子のスピン間相互作用の全エネルギー E_c は

$$E_c = \sum_{i=1}^m [E(\nu_i) + E(\nu_i, \nu_{i+1})] = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (-J'\mu_j^{(i)}\mu_{j+1}^{(i)} - J\mu_j^{(i)}\mu_j^{(i+1)}) \quad (2)$$

と表される.

周期的境界条件を数式で示せば, $\mu_{n+1}^{(i)} = \mu_1^{(i)}$, および $\mu_j^{(m+1)} = \mu_j^{(1)}$ である. したがって, $\nu_{m+1} = \nu_1$ である. 横方向のみの周期的境界条件であれば格子平面は円筒の表面になり, さらに縦方向の周期的境界条件を入れるとトーラス表面の 2 次元格子になる. n と m を十分大きく取ればこの周期的境界条件の影響は考えなくてもよい.

分配関数は式 (2) を用いると,

$$\begin{aligned}
Z &= \sum_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_m} \exp(-E_c/k_B T) \\
&= \sum_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_m} \exp[-\sum_{i=1}^m \{E(\nu_i) + E(\nu_i, \nu_{i+1})\}/k_B T] \\
&= \sum_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_m} \prod_{i=1}^m \exp[-E(\nu_i)/k_B T] \exp[-E(\nu_i, \nu_{i+1})/k_B T] \quad (3)
\end{aligned}$$

$$= \sum_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_m} \prod_{i=1}^m \exp(\sum_{j=1}^n J'\mu_j^{(i)}\mu_{j+1}^{(i)}/k_B T) \exp(\sum_{j=1}^n J\mu_j^{(i)}\mu_j^{(i+1)}/k_B T) \quad (4)$$

となる. ここで,

$$V_{\nu_i, \nu_{i+1}}^{(1)} \equiv \exp(-E(\nu_i, \nu_{i+1})/k_B T) = \exp(\sum_{j=1}^n J\mu_j^{(i)}\mu_j^{(i+1)}/k_B T) = \exp(\sum_{j=1}^n H\mu_j^{(i)}\mu_j^{(i+1)}) \quad (5)$$

$$V_{\nu_i}^{(2)} \equiv \exp(-E(\nu_i)/k_B T) = \exp(\sum_{j=1}^n J'\mu_j^{(i)}\mu_{j+1}^{(i)}/k_B T) = \exp(\sum_{j=1}^n H'\mu_j^{(i)}\mu_{j+1}^{(i)}) \quad (6)$$

とおく、これを用いると分配関数は

$$Z = \sum_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_m} \prod_{i=1}^m V_{\nu_i}^{(2)} V_{\nu_i, \nu_{i+1}}^{(1)} \quad (7)$$

となる。これが行列の積のトレースになることは次のようにすればわかる。まず、

$$V_{\nu_1}^{(2)} V_{\nu_1, \nu_2}^{(1)}$$

を考える。これを次のように書き換えてみよう。

$$\sum_{\nu'_1} V_{\nu_1}^{(2)} \delta_{\nu_1, \nu'_1} V_{\nu'_1, \nu_2}^{(1)}$$

そうすると、 $\{A_{ij}\}$ は行列 A を表すとして、これは $\{V_{\nu_1}^{(2)} \delta_{\nu_1, \nu'_1}\}$ という行列と $\{V_{\nu'_1, \nu_2}^{(1)}\}$ という 2^n 次正方行列の積を表している。 $\{V_{\nu_1}^{(2)} \delta_{\nu_1, \nu'_1}\}$ は 2^n 次の単位行列である。したがって、 $V_{\nu_1}^{(2)} V_{\nu_1, \nu_2}^{(1)}$ は 2^n 次正方行列の (ν_1, ν_2) 成分であることがわかる。同様に、 $V_{\nu_2}^{(2)} V_{\nu_2, \nu_3}^{(1)}$ は 2^n 次正方行列の (ν_2, ν_3) 成分であることがわかる。これから、

$$\sum_{\nu_2} V_{\nu_1}^{(2)} V_{\nu_1, \nu_2}^{(1)} V_{\nu_2}^{(2)} V_{\nu_2, \nu_3}^{(1)}$$

は行列 $\{V_{\nu_1}^{(2)} V_{\nu_1, \nu_2}^{(1)}\}$ と $\{V_{\nu_2}^{(2)} V_{\nu_2, \nu_3}^{(1)}\}$ の積であることがわかる。つまり、行列 $(V^{(2)} V^{(1)})^2$ の (ν_1, ν_3) 成分である。

以上のことを $\{V_{\nu_m}^{(2)} V_{\nu_m, \nu_{m+1}}^{(1)}\}$ まで適用すると、

$$\sum_{\nu_2, \nu_3, \dots, \nu_m} V_{\nu_1}^{(2)} V_{\nu_1, \nu_2}^{(1)} V_{\nu_2}^{(2)} V_{\nu_2, \nu_3}^{(1)} V_{\nu_3}^{(2)} V_{\nu_3, \nu_4}^{(1)} \dots V_{\nu_m}^{(2)} V_{\nu_m, \nu_{m+1}}^{(1)} = \sum_{\nu_2, \nu_3, \dots, \nu_m} \prod_{i=1}^m V_{\nu_i}^{(2)} V_{\nu_i, \nu_{i+1}}^{(1)}$$

は結局、行列 $(V^{(2)} V^{(1)})^m$ の (ν_1, ν_{m+1}) 成分であることがわかる。すなわち、

$$\sum_{\nu_2, \nu_3, \dots, \nu_m} V_{\nu_1}^{(2)} V_{\nu_1, \nu_2}^{(1)} V_{\nu_2}^{(2)} V_{\nu_2, \nu_3}^{(1)} V_{\nu_3}^{(2)} V_{\nu_3, \nu_4}^{(1)} \dots V_{\nu_m}^{(2)} V_{\nu_m, \nu_{m+1}}^{(1)}$$

$\nu_{m+1} = \nu_1$ であるから、これを分配関数の式に適用すると、

$$Z = \sum_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_m} \prod_{i=1}^m V_{\nu_i}^{(2)} V_{\nu_i, \nu_{i+1}}^{(1)} = \sum_{\nu_1} [(V^{(2)} V^{(1)})^m]_{\nu_1, \nu_1} = \text{tr} \{(V^{(2)} V^{(1)})^m\} \quad (8)$$

となる。したがって、 $V^{(2)} V^{(1)}$ の固有値を $\lambda_1^m, \lambda_2^m, \dots, \lambda_{2^n}^m$ とすれば、

$$Z = \lambda_1^m + \lambda_2^m + \dots + \lambda_{2^n}^m \quad (9)$$

となることがわかる。最大の固有値を λ_{\max} とすると、 m が十分大きい時は、

$$\begin{aligned} Z &= (\lambda_{\max})^m \left\{ \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_{\max}} \right)^m + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_{\max}} \right)^m + \dots + 1 + \dots + \left(\frac{\lambda_m}{\lambda_{\max}} \right)^m \right\} \\ &\simeq (\lambda_{\max})^m \end{aligned} \quad (10)$$

と近似して良い。

これで行列 $V^{(1)}$, $V^{(2)}$ は式 (5), (6) で定義され、 $V^{(2)} V^{(1)}$ の固有値により分配関数が表されることがわかった。問題は、この式からどのようにして固有値を求めるのか、ということである。

Onsager は C, s という演算子から 2 回の変数変換を経て Lie 代数演算を満たす変数を作り、それを用いて対角化している。[5] Onsager の方法是对角化までの筋道が複雑である。一方、Kaufman は見通しの良い行列による表現を用いて対角化することを提示した。そのためには、 2^n 次元のスピンスpaceによる表現にする必要があるが、式 (5), (6) では 2^n 次元のスピンスpaceにおけるどのような演算子の表現にはなっていないのかわかっていない。そのような演算子が具体的にわかれば、それを用いて固有値を求める手立てが考えられるようになるのである。そこで、以下では、 $V^{(2)} V^{(1)}$ を 2^n 次元のスピンスpaceによる表現となっている演算子を求めることになる。

* * * * *

これまででは $\mu_j^{(i)}$ をスピン値の数として扱った。以下では、1つのスピンの状態を示すベクトル（スピノール）とそれに作用するスピン演算子 $s_j^{(i)}$ を導入し、 $\mu_j^{(i)}$ は、 $s_j^{(i)}$ の固有値として取り扱う。最初に、まず1個のスピンの状態を表すベクトル（スピノール）を定義しよう¹。1個のスピンの2つの固有状態を \uparrow と \downarrow 、あるいは $+1$ と -1 とし、それをスピノールで

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \alpha, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \beta \quad (11)$$

と表そう。 α か β となるスピノールの変数を μ と表し、 i 行 j 列のスピンを特定したい時は、 $\mu_j^{(i)}$ と表すことにする。すなわち、

$$\mu_j^{(i)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mu_j^{(i)} \text{が} \uparrow \text{のとき} \quad (12)$$

$$\mu_j^{(i)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \mu_j^{(i)} \text{が} \downarrow \text{のとき} \quad (13)$$

である。

次に n 個のスピンの全体の配位を表すスピノールを考えよう。これは、1個のスピンのスピノールの n 個の直積で表すことができる。これは 2^n 行 1 列のベクトルである。 i 行における n 個のスピンの ν_i 番目の状態を表すスピノールを μ_{ν_i} とすると、

$$\mu_{\nu_i} = \mu_1^{(i)} \otimes \mu_2^{(i)} \otimes \cdots \otimes \mu_n^{(i)} \quad (14)$$

となる。

ここで、 n 個の直積から成るベクトル \mathbf{a} と \mathbf{b} の内積 $\langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle$ は直積の対応する個々のベクトル成分間の内積の積になることに注意しよう。すなわち、

$$\mathbf{a} = \mathbf{a}_1 \otimes \mathbf{a}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{a}_n \quad (15)$$

$$\mathbf{b} = \mathbf{b}_1 \otimes \mathbf{b}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{b}_n \quad (16)$$

とすると、

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle &= \langle \mathbf{a}_1 | \mathbf{b}_1 \rangle \langle \mathbf{a}_2 | \mathbf{b}_2 \rangle \cdots \langle \mathbf{a}_n | \mathbf{b}_n \rangle \\ &= \left(\sum_i \overline{a_{1i}} b_{1i} \right) \left(\sum_i \overline{a_{2i}} b_{2i} \right) \cdots \left(\sum_i \overline{a_{ni}} b_{ni} \right) \end{aligned} \quad (17)$$

である。

1個のスピンのスピノールの場合、 $\mu_j^{(i)} = \mu_j^{(i')}$ のとき $\langle \mu_j^{(i)} | \mu_j^{(i')} \rangle = 1$ で、それ以外は0になる。したがって、 μ_{ν_i} と $\mu_{\nu_i'}$ の内積は全ての j について $\mu_j^{(i)} = \mu_j^{(i')}$ のときのみ1で、それ以外は0となる。すなわち、

$$\langle \mu_{\nu_i} | \mu_{\nu_i'} \rangle = \langle \mu_1^{(i)} | \mu_1^{(i')} \rangle \langle \mu_2^{(i)} | \mu_2^{(i')} \rangle \cdots \langle \mu_n^{(i)} | \mu_n^{(i')} \rangle = \delta_{\nu_i \nu_i'} \quad (18)$$

である。

1個のスピンは α あるいは β の状態にあり、両方共スピン演算子 \mathbf{s} 固有ベクトルであるから、 \mathbf{s} の固有ベクトルは式 (12), (13) である。したがって、 \mathbf{s} は次の2次正方対角化行列として表される。

$$\mathbf{s} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (19)$$

¹スピン波動関数をスピン演算子の固有関数で展開した時に、スピンの $\frac{1}{2}$ なら展開係数が2個あって、それを2行1列のベクトル形式で表したものがスピノールである。ベクトルとスピノールの違いは、スピン演算子で回転させると違いが出てくる。スピノールは 4π の回転で元に戻る。本論文ではベクトルとの違いは出てこないでベクトルと表記する。

スピンの値 $\mu_j^{(1)}$ は \mathbf{s} をスピノールに作用させたときの固有値である。すなわち、

$$\mathbf{s} \boldsymbol{\mu}_{i,j} = \mu_{i,j} \boldsymbol{\mu}_{i,j} \quad (20)$$

となる。

n 個のスピンの列に対しては、次のような演算子の直積を n 個のスピンのスピノールに作用させる。

$$\mathbf{s}_r = \overbrace{\mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}}^{r-1} \otimes \mathbf{s} \otimes \mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1} \quad (\text{O-5-1})$$

ただし、

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (21)$$

は単位行列である。

いま、一般に、 n 個の 2 次正方行列 \mathbf{G}_i の直積を、 n 個の 2 次元ベクトル \mathbf{a}_i の直積に演算させると、

$$\langle \mathbf{G}_1 \otimes \mathbf{G}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{G}_n | \mathbf{a}_1 \otimes \mathbf{a}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{a}_n \rangle = (\mathbf{G}_1 \mathbf{a}_1) \otimes (\mathbf{G}_2 \mathbf{a}_2) \otimes \cdots \otimes (\mathbf{G}_n \mathbf{a}_n) \quad (22)$$

である。また、 n 個の 2 次元ベクトル \mathbf{a}_i の直積と n 個の 2 次元ベクトル \mathbf{b}_i の直積の内積は、

$$\langle \mathbf{a}_1 \otimes \mathbf{a}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{a}_n | \mathbf{b}_1 \otimes \mathbf{b}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{b}_n \rangle = \langle \mathbf{a}_1 | \mathbf{b}_1 \rangle \langle \mathbf{a}_2 | \mathbf{b}_2 \rangle \cdots \langle \mathbf{a}_n | \mathbf{b}_n \rangle \quad (23)$$

となる。以上の関係は 2 個の直積に関する式を示せば、数学的帰納法で一般に成り立つことを示すことができる。

この関係を用いると、

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_r \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} &= (\mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1} \otimes \mathbf{s} \otimes \mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}) (\boldsymbol{\mu}_1^{(i)} \otimes \cdots \otimes \boldsymbol{\mu}_r^{(i)} \otimes \cdots \otimes \boldsymbol{\mu}_n^{(i)}) \\ &= (\mathbf{1} \boldsymbol{\mu}_1^{(i)}) \otimes \cdots \otimes (\mathbf{s} \boldsymbol{\mu}_r^{(i)}) \otimes \cdots \otimes (\mathbf{1} \boldsymbol{\mu}_n^{(i)}) \\ &= \boldsymbol{\mu}_1^{(i)} \otimes \cdots \otimes \boldsymbol{\mu}_r^{(i)} \boldsymbol{\mu}_r^{(i)} \otimes \cdots \otimes \boldsymbol{\mu}_n^{(i)} \\ &= \boldsymbol{\mu}_r^{(i)} \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} \end{aligned} \quad (24)$$

となることがわかる。

これから、式 (5) や式 (6) の $\mu_j^{(i)}$ や $\mu_{j+1}^{(i)}$ は

$$\mu_j^{(i)} = \langle \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} | \mathbf{s}_j \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} \rangle \equiv \langle \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} | \mathbf{s}_j | \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} \rangle \quad (25)$$

$$\mu_{j+1}^{(i)} = \langle \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} | \mathbf{s}_{j+1} \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} \rangle \equiv \langle \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} | \mathbf{s}_{j+1} | \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} \rangle \quad (26)$$

のようにスピノールによるスカラー積によって与えられる。 $\boldsymbol{\mu}_{\nu_i}$ は 2^n 次元空間の正規直交基底であるから、

$$\begin{aligned} \mu_j^{(i)} \mu_{j+1}^{(i)} &= \langle \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} | \mathbf{s}_j \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} \rangle \langle \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} | \mathbf{s}_{j+1} \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} \rangle \\ &= \langle \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} | \mathbf{s}_j | \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} \rangle \langle \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} | \mathbf{s}_{j+1} | \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} \rangle \\ &= \sum_{\nu_k} \langle \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} | \mathbf{s}_j | \boldsymbol{\mu}_{\nu_k} \rangle \langle \boldsymbol{\mu}_{\nu_k} | \mathbf{s}_{j+1} | \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} \rangle \end{aligned} \quad (27)$$

$$= \langle \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} | \mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1} | \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} \rangle \quad (28)$$

となる。ただし、式 (28) では

$$\langle \boldsymbol{\mu}_{\nu_i} | \mathbf{s}_j | \boldsymbol{\mu}_{\nu_k} \rangle = \mu_j^{(i)} \delta_{\nu_i, \nu_k} \quad (29)$$

という関係を用いた。

式 (28) の関係は μ_{ν_i} が \mathbf{s}_r の固有ベクトルであることから得られる。すなわち、 $\mathbf{s}_r \mathbf{s}_s$ を作用させることにより、

$$\begin{aligned} \langle \mu_{\nu_i} | \mathbf{s}_r \mathbf{s}_s | \mu_{\nu_i} \rangle &= \mu_{i,s} \langle \mu_{\nu_i} | \mathbf{s}_r | \mu_{\nu_i} \rangle \\ &= \mu_{i,r} \mu_{i,s} \langle \mu_{\nu_i} | \mu_{\nu_i} \rangle \\ &= \mu_{i,r} \mu_{i,s} \end{aligned} \quad (30)$$

となる。式 (29) の関係は μ_{ν_i} が \mathbf{s}_r の固有ベクトルであることと等価である。

次に、 μ_{ν_i} は \mathbf{s}_j の固有値 $\mu_j^{(i)}$ に属する固有ベクトルであることと、 $\exp(\mathbf{s}_j)$ が冪乗展開が可能であることに着目すると、

$$\mathbf{s}_j \exp(\mu_{\nu_i}) = \exp(\mu_j^{(i)}) \mu_{\nu_i}$$

が成り立つ。同様に、

$$\mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1} \exp(\mu_{\nu_i}) = \exp(\mu_j^{(i)} \mu_{j+1}^{(i)}) \mu_{\nu_i}$$

が成り立つ。これから、

$$\langle \mu_{\nu_i} | \exp\left(\sum_{j=1}^n \mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1}\right) | \mu_{\nu_i} \rangle = \exp\left(\sum_{j=1}^n \mu_j^{(i)} \mu_{j+1}^{(i)}\right) \quad (31)$$

という式が成り立つ。

これで式 (ref6) は $\exp(\sum \mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1})$ という形の演算子のスピノールによる表現になっていることがわかった。この式で、 \mathbf{s}_j と μ_j が対応しているのは、 \mathbf{s}_j が対角行列であるからである。

* * * * *

$\mu_j^{(i)} \mu_j^{(i+1)}$ の場合は、 $\mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1}$ の場合とは少し異なる。この場合は $\mu_j^{(i)}$ と $\mu_j^{(i+1)}$ が同じ場合は 1、異なる場合は -1 となるのだが、スピノールの内積を取ると、異なる場合は 0 になってしまう。したがって、これを避けるために一方のスピノールを 2 個用意し、一方はそのまま、もう一方は \mathbf{s} が作用するスピノール部分を反転する（↑から↓へ、またはその逆へ変える）ようにすれば、必ずどちらかが 1 となり、もう一方は 0 となる。反転した方のスピノールに -1 の係数をつけておけば $\mu_j^{(i)} \mu_j^{(i+1)}$ が正しく評価されることになる。すなわち、

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (32)$$

という演算子 \mathbf{C} を定義すると、 \mathbf{C} は $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ を $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ に、 $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ を $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ にスピンの向きを反転する。つまり、

$$\mathbf{s} \mathbf{C} \mu_{i,j} = -\mu_{i,j} \mu_{i,j} \quad (33)$$

となる。

\mathbf{C} を用いると、上のような演算は $\mathbf{1} - \mathbf{C}$ という形の演算子で表すことができる。実際、

$$\langle \mu_j^{(i+1)} | (\mathbf{1} - \mathbf{C}) | \mu_j^{(i)} \rangle = \begin{cases} 1 & \mu_j^{(i+1)} = \mu_j^{(i)} \\ -1 & \mu_j^{(i+1)} \neq \mu_j^{(i)} \end{cases} \quad (34)$$

となる。つまり、 $\mathbf{1} - \mathbf{C}$ の $(\mu_j^{(i+1)}, \mu_j^{(i)})$ 成分は

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad (35)$$

となる。

これから、式(5)がスピノールによる表現になる演算子としては $\exp\{H(\mathbf{1}-\mathbf{C})\}$ を考えれば一見よさそうに思われるが、しかし、これでは上手くいかない。1個のスピンで考えれば、いま、求めたい演算子は $(\mu_j^{(i+1)}, \mu_j^{(i)})$ 成分が

$$\begin{pmatrix} e^H & e^{-H} \\ e^{-H} & e^H \end{pmatrix} \quad (36)$$

となる演算子である。しかし、 $\exp\{H(\mathbf{1}-\mathbf{C})\}$ の $(\mu_j^{(i+1)}, \mu_j^{(i)})$ 成分、すなわち、

$$\langle \mu_j^{(i+1)} | \exp\{H(\mathbf{1}-\mathbf{C})\} | \mu_j^{(i)} \rangle$$

は式(36)のようにはならない²。実際、 $\exp\{H(\mathbf{1}-\mathbf{C})\}$ も、 $H \exp\{(\mathbf{1}+\mathbf{C})\}$ も

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2}(e^{2H}+1) & \frac{1}{2}(e^{2H}-1) \\ \frac{1}{2}(e^{2H}-1) & \frac{1}{2}(e^{2H}+1) \end{pmatrix} = e^H \begin{pmatrix} \cosh H & \sinh H \\ \sinh H & \cosh H \end{pmatrix} \quad (37)$$

という成分になる。係数の e^H は $\exp(H\mathbf{1})$ から来ているので、 $\exp(H\mathbf{C})$ に着目すれば、その成分は

$$\begin{pmatrix} \cosh H & \sinh H \\ \sinh H & \cosh H \end{pmatrix} \quad (38)$$

となる³。すなわち、

$$e^{H\mathbf{C}} = \cosh H \begin{pmatrix} 1 & \tanh H \\ \tanh H & 1 \end{pmatrix} \quad (39)$$

となる。ここで、

$$\tanh H = e^{-2H^*} \quad (40)$$

²これは次のことからわかる。 Λ の固有値を λ 、固有ベクトルを μ とすると、

$$\Lambda\mu = \lambda\mu$$

$f(\Lambda)$ を展開可能な Λ の関数とすると、一般に、

$$f(\Lambda)\mu = f(\lambda)\mu$$

である。次に、 $\mathbf{1}-\mathbf{C}$ の固有値は 2 と 0 で、その固有ベクトルは $\alpha-\beta$ と $\alpha+\beta$ である。 $\mathbf{1}+\mathbf{C}$ の固有値も 2 と 0 で、その固有ベクトルは $\alpha+\beta$ と $\alpha-\beta$ である。両方同じ結果を示すので、ここでは $\mathbf{1}+\mathbf{C}$ について計算しよう。

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \exp[H(\mathbf{1}+\mathbf{C})] | \alpha \rangle &= \frac{1}{4} \langle (\alpha+\beta) + (\alpha-\beta) | \exp[H(\mathbf{1}+\mathbf{C})] | (\alpha+\beta) + (\alpha-\beta) \rangle \\ &= \frac{1}{4} \langle (\alpha+\beta) + (\alpha-\beta) | e^{2H}(\alpha+\beta) + e^0(\alpha-\beta) \rangle \\ &= \frac{1}{2}(e^{2H}+1) \end{aligned}$$

となる。 $\langle \beta | \exp[H(\mathbf{1}-\mathbf{C})] | \beta \rangle$ も同じ結果になる。

同様に、

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \exp[H(\mathbf{1}+\mathbf{C})] | \beta \rangle &= \frac{1}{4} \langle (\alpha+\beta) + (\alpha-\beta) | \exp[H(\mathbf{1}+\mathbf{C})] | (\alpha+\beta) - (\alpha-\beta) \rangle \\ &= \frac{1}{4} \langle (\alpha+\beta) + (\alpha-\beta) | e^{2H}(\alpha+\beta) - e^0(\alpha-\beta) \rangle \\ &= \frac{1}{2}(e^{2H}-1) \end{aligned}$$

である。 $\langle \beta | \exp[H(\mathbf{1}+\mathbf{C})] | \alpha \rangle$ も同じ結果になる。

³実際、 \mathbf{C} の固有値は 1 と -1 で、その固有ベクトルは $\alpha+\beta$ と $\alpha-\beta$ である。

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \exp(H\mathbf{C}) | \alpha \rangle &= \frac{1}{4} \langle (\alpha+\beta) + (\alpha-\beta) | \exp(H\mathbf{C}) | (\alpha+\beta) + (\alpha-\beta) \rangle \\ &= \frac{1}{4} \langle (\alpha+\beta) + (\alpha-\beta) | e^H(\alpha+\beta) + e^{-H}(\alpha-\beta) \rangle \\ &= \frac{1}{2}(e^H + e^{-H}) \end{aligned}$$

となる。その他の成分も同様である。

とおくと、式 (39) は、

$$e^{HC} = \cosh H \begin{pmatrix} 1 & e^{-2H^*} \\ e^{-2H^*} & 1 \end{pmatrix} = \frac{\cosh H}{e^{H^*}} \begin{pmatrix} e^{H^*} & e^{-H^*} \\ e^{-H^*} & e^{H^*} \end{pmatrix} \quad (41)$$

となる。ここで、 H と H^* を交換すると、

$$\begin{pmatrix} e^H & e^{-H} \\ e^{-H} & e^H \end{pmatrix} = \frac{e^H}{\cosh H^*} e^{H^*C} \quad (42)$$

および、

$$\tanh H^* = e^{-2H} \quad (43)$$

となる。すなわち、 $(\mu^{(i)}, \mu^{(i+1)})$ 成分が式 (38) となる演算子は式 (42) の右辺で与えられるということである。つまり、これが得ようとしていた演算子ということになる。式 (42) の右辺の係数はさらに、

$$\begin{aligned} \frac{e^{2H}}{\cosh^2 H^*} &= e^{2H}(1 - \tanh^2 H^*) = e^{2H}(1 - e^{-4H}) \\ &= e^{2H} - e^{-2H} \\ &= 2 \sinh 2H \end{aligned} \quad (44)$$

となることを用いて、式 (42) は、

$$\begin{pmatrix} e^H & e^{-H} \\ e^{-H} & e^H \end{pmatrix} = (2 \sinh 2H)^{1/2} e^{H^*C} \quad (45)$$

となる。これが1個のスピンロールで内積をとった時に式 (6) になる演算子である。

* * * * *

1 対のスピンの縦方向相互作用の演算子、すなわち (45) の右辺を用いて、 i 行と $i+1$ 行の間の n 対間の縦方向相互作用を記述したい。そのため、式 (45) を式 (14) のスピンロールで挟んで成分を計算したらどうなるだろうか。式 (45) を n 個のスピンのベクトルに作用させるためには、

$$\mathbf{C}_r = \overbrace{\mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}}^{r-1} \otimes \mathbf{C} \otimes \mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1} \quad (\text{O-5-2})$$

という演算子 \mathbf{C}_r を定義し、式 (45) の右辺にある \mathbf{C} の代わりに用いばよい。 \mathbf{C}_r 用いた場合の成分を計算する前に、以下の \mathbf{C}_r の演算関係に注意しておこう。 $\mu_j^{(i)}$ を反転したスピンロールを $\overline{\mu_j^{(i)}}$ として、 μ_{ν_i} の $\mu_r^{(i)}$ を反転した配列を $\overline{\mu_{\nu_i}}$ とすると、

$$\mathbf{C} \mu_r^{(i)} = \overline{\mu_j^{(i)}} \quad (46)$$

$$s\mathbf{C} \mu_r^{(i)} = -\mu_{i,j} \overline{\mu_j^{(i)}} \quad (47)$$

これは $\mathbf{C}^2 = \mathbf{1}$ であることを用いて、次のようにしても導くことができる。

$$\begin{aligned} e^{HC} &= \mathbf{1} + \frac{1}{2!}(HC)^2 + \frac{1}{4!}(HC)^4 + \cdots + HC + \frac{1}{3!}(HC)^3 + \frac{1}{5!}(HC)^5 + \cdots \\ &= (1 + \frac{1}{2!}H^2 + \frac{1}{4!}H^4 + \cdots)\mathbf{1} + (H + \frac{1}{3!}H^3 + \frac{1}{5!}H^5 + \cdots)\mathbf{C} \\ &= \mathbf{1} \cosh H + \mathbf{C} \sinh H \end{aligned}$$

であるから、 C_r の μ_{ν_i} に対する演算は次のようになる。

$$C_r \mu_{\nu_i} = \overline{\mu_{\nu_i}} \quad (48)$$

$$C_r \overline{\mu_{\nu_i}} = \mu_{\nu_i} = C_r^2 \mu_{\nu_i}, \quad C_r^2 = 1 \quad (49)$$

$$\langle \mu_{\nu_i} | C_r \mu_{\nu_i} \rangle = \langle \mu_j^{(i)} | \mu_j^{(i)} \rangle \cdots \langle \mu_j^{(i)} | C \mu_j^{(i)} \rangle \cdots \langle \mu_j^{(i)} | \mu_j^{(i)} \rangle = \langle \mu_r^{(i)} | \overline{\mu_r^{(i)}} \rangle = 0 \quad (50)$$

$$\langle \mu_{\nu_i} | C_r \overline{\mu_{\nu_i}} \rangle = \langle \mu_j^{(i)} | \mu_j^{(i)} \rangle \cdots \langle \mu_j^{(i)} | C \overline{\mu_j^{(i)}} \rangle \cdots \langle \mu_j^{(i)} | \mu_j^{(i)} \rangle = \langle \mu_r^{(i)} | \mu_r^{(i)} \rangle = 1 \quad (51)$$

となる。

式 (45) の係数は無視して、 $e^{H^* C_r}$ のスピノールによる成分を計算しよう。取り敢えず、係数を取り敢えず無視して、単に、

$$\langle \mu_{\nu_i} | e^{H^* C_r} | \mu_{\nu_{i+1}} \rangle \quad (52)$$

の成分を計算することを考えてみよう。しかし、式 (52) のままでは、 r 番目のスピン対のみ係数を除いて式 (45) 左辺の成分を与えるがそれ以外のスピン対では、方向が異なる場合に 0 になるので、一般の n 個のスピン列に関する成分を与えることができない。つまり、 $i = r$ 以外のスピン対で異なるものがあれば成分は 0 になる。

この問題を解決するために、1 番目のスピノールから n 番目のスピノールまで全てに $e^{H^* C_r}$ を作用させることにすればよい。すなわち、 $e^{H^* C_r}$ のかわりに、

$$\prod_{r=1}^n e^{H^* C_r} = \exp\left(\sum_{r=1}^n H^* C_r\right) \quad (53)$$

を演算子として用いれば良いということがわかる。このようにできることは、 \mathbf{A} 、 \mathbf{B} を

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_1 \otimes \mathbf{A}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{A}_n$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_1 \otimes \mathbf{B}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{B}_n$$

のような行列の直積とすると、

$$\mathbf{AB} = (\mathbf{A}_1 \mathbf{B}_1) \otimes (\mathbf{A}_2 \mathbf{B}_2) \otimes \cdots \otimes (\mathbf{A}_n \mathbf{B}_n)$$

が成り立ち、式 (O-5-2) からわかるように、直積の各行列成分は \mathbf{C} の 1 次であることと、 C_r と C_s が可換であることから来ている。これにより、 n 個のスピノールによる成分は

$$\langle \nu_{i+1} | \exp\left(\sum_{r=1}^n H^* C_r\right) | \nu_i \rangle = \exp\left\{\sum_{j=1}^n H \mu_j^{(i)} \mu_{j+1}^{(i)}\right\} \quad (54)$$

となり、求める演算子が得られた。

* * * * *

さて、もともとの目的は、式 (5)、(6) が 2^n 次元スピノールによる表現になるような演算子を求めることだった。つまり、

$$V_{\nu_i, \nu_{i+1}}^{(1)} = \exp(-E(\nu_i, \nu_{i+1})/k_B T) = \exp\left\{\sum_{j=1}^n J' \mu_j^{(i)} \mu_j^{(i+1)}/k_B T\right\} \equiv (\mathbf{V}_1)_{\nu_i \nu_{i+1}} = \langle \mu_{\nu_i} | \mathbf{V}_1 | \mu_{\nu_{i+1}} \rangle \quad (O-1)$$

$$V_{\nu_i}^{(2)} = \exp(-E(\nu_i)/k_B T) = \exp\left\{\sum_{j=1}^n J \mu_j^{(i)} \mu_{j+1}^{(i)}/k_B T\right\} \equiv (\mathbf{V}_2)_{\nu_i \nu_i} = \langle \mu_{\nu_i} | \mathbf{V}_2 | \mu_{\nu_i} \rangle \quad (O-2)$$

となるような演算子 \mathbf{V}_1 , \mathbf{V}_2 を探してきたわけである。前節までの検討の結果, \mathbf{V}_1 と \mathbf{V}_2 は式 (31), 式 (54) から,

$$\mathbf{V}_1 = \exp(H^* \sum_{r=1}^n \mathbf{C}_r) \equiv \exp(H^* \mathbf{B}) \quad (\text{O-8})$$

$$\mathbf{V}_2 = \exp(H' \sum_{r=1}^n \mathbf{s}_r \mathbf{s}_{r+1}) \equiv \exp(H' \mathbf{A}) \quad (\text{O-4-1})$$

とすれば良いことがわかる。ただし,

$$\mathbf{B} \equiv \sum_{r=1}^n \mathbf{C}_r \quad (55)$$

$$\mathbf{A} \equiv \sum_{r=1}^n \mathbf{s}_r \mathbf{s}_{r+1} \quad (56)$$

とおいた。本来なら, \mathbf{V}_1 には式 (45) の $(2 \sinh 2H)^{1/2}$ という因数を付け加える必要があるが, 対角化の計算には関係しないので, 論文のように後で分配関数を計算する時に付け加えることにすれば良い。

これで, 式 (6) の分配関数 Z は

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}_2 \mathbf{V}_1 \quad (57)$$

として, \mathbf{V}^m のトレースであることになった。すなわち, \mathbf{V}_1 で無視した因子を加えると,

$$\begin{aligned} Z &= (2 \sinh 2H)^{mn/2} \text{tr}(\mathbf{V}^m) \\ &= (2 \sinh 2H)^{mn/2} \text{tr}(\mathbf{V}_2 \mathbf{V}_1)^m \\ &= (2 \sinh 2H)^{mn/2} \left(\sum_{i=1}^{2^n} \lambda_i^m \right) \end{aligned} \quad (\text{O-9})$$

となる。

次は行列計算により $\mathbf{V} = \mathbf{V}_2 \mathbf{V}_1$ の固有値を求める。

(その 1 終わり)

参考文献

- [1] Bruria Kaufman, “Crystal Statistics. II. Partition Function Evaluated by Spinor Analysis”, Phys. Rev. **76**, 1232-1243 (1944). <http://www.totoha.net/archiv/3598.pdf>
- [2] Lars Onsager, “Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition”, Phys. Rev. **65**, 117-149 (1944). <http://www.totoha.net/archiv/3582.pdf>
- [3] Bruria Kaufman, “Crystal Statistics. III. Short-Range Order in a Binary Ising Lattice”, Phys. Rev. **76**, 1244-1252 (1949). <http://www.totoha.net/archiv/3649.pdf>
- [4] 「南部陽一郎の 2 次元イジングモデル厳密解 (固有値問題) の論文を読む その 1」(2018/9/26 のエントリー)。
http://totoha.web.fc2.com/Nambu_paper1.pdf
- [5] 「Onsager の 2 次元イジングモデル厳密解の論文を読む その 1」(2017/8/7 のエントリー)。
http://totoha.web.fc2.com/Onsager_paper1.pdf