Kramers-Wannier 論文について 1

2016.12.21　　鈴木　実

1　はじめに

イジング・モデルの 2 次元における厳密解は Lars Onsager [1] によって求められた．Onsager の方法は分配関数を移送行列の積のトレースをとる手法で，かつその行列 (transfer matrix) の最大の固有値を求めることにより，粒子数が十分大きいときに最大固有値の粒子数冪がトレースを与えるというものだった．Onsager は固有値を求めるために四元数的な演算子を用いて計算する独特な方法を用いたのであるが，一方，Onsager の計算の基礎となった移送行列とその固有値による方法を考えたのは，H. A. Kramers and G. H. Wannier [2] である．この Kramers-Wannier の論文は，しかし， 現在の統計物理学のスキームでは必ずしも clear-cut ではない．首をかしげる部分もある．その後の論文も Kramers-Wannier の手法あるいはモデルを踏襲するか，参考にする場合が多いので，丁寧に理解する必要があるのかもしれない．そこでここでは，普通に読んで疑問に思われるところをすこしずつメモしておくことにしよう．目的は Kramers-Wannier の論文に必要なら補足することにより結論まで clear-cut にすることである．

2　螺旋形モデル

2 次元イジングモデルを解くために考えられた Kramers-Wannier のモデルは，2 次元の周期的境界条件を考え，1 つの方向の境界を繋ぎあわせて円筒を作り，一周する毎に一段上の行につながるという螺旋状に円筒を巻いていくという構造を考える．段数は十分長いということを仮定している．図 1 はそのようなスピンの螺旋状構造の最終段を示したものである．最後の一回りは位置 0 から始まって位置 1，2, と続き，最後に位置 $n-1$ で終わる．次の位置 n は位置 0 の直上に位置して，原子 0 と原子 $n-1$ と相互作用し，位置 P に原子を置くことにより新しくそのエネルギーが付加される．

Kramers-Wannier により，磁場中のスピンおよびスピン相互作用の全エネルギー E は

$$-E/k_{\mathrm{B}}T = K\sum \mu_i(\mu_{i-1}+\mu_{-n+i}) + C\sum \mu_i \tag{1}$$

という形に表される．μ_i は位置 i のスピンで $\mu_i = \pm 1$ である．P に原子 1 個が加えられると，式 (1) に

$$K\mu_n(\mu_{n-1}+\mu_0) + C\mu_n \tag{2}$$

が付加される．

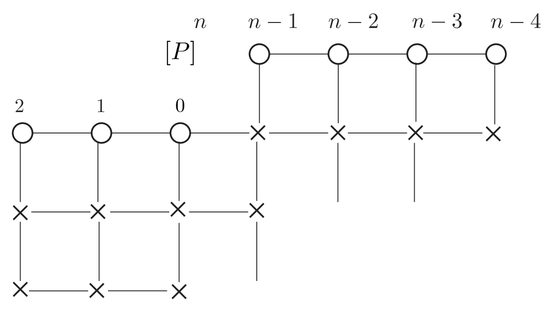

図 1: Kramers-Wannier 論文の螺旋形モデル

さらに Kramers-Wannier のように，$A(\mu_{n-1},\cdots,\mu_0)$ を位置 $n-1,\cdots,0$ のスピンが $\mu_{n-1},\cdots,\mu_0$ である確率，$P(\mu_n,\cdots,\mu_0)$ を位置 $n,n-1,\cdots,0$ のスピンが $\mu_n,\cdots,\mu_0$ である確率とする．そうすると，Kramers-Wannier は螺旋の長さが十分長い場合には次の関係が成立つとするのである．

$$\lambda P(\mu_n,\cdots,\mu_0)=A(\mu_{n-1},\cdots,\mu_0)\exp[K\mu_n(\mu_{n-1}+\mu_0)+C\mu_n] \tag{3}$$

ここで λ は定数として導入されているが，後にこれが固有値であることがわかる．この辺がどうも気になる．この式で，

$$\sum_{\mu_0}P(\mu_n,\cdots,\mu_0)=A(\mu_n,\cdots,\mu_1) \tag{4}$$

として良いから，式 (3) を用いて

$$\sum_{\mu_0}A(\mu_{n-1},\cdots,\mu_0)\exp[K\mu_n(\mu_{n-1}+\mu_0)+C\mu_n]=\lambda A(\mu_n,\cdots,\mu_1) \tag{5}$$

という関係式が得られる．

上の式の λ の意味を明確にするため，ここで，基礎に戻って考える．位置 n まで原子があるときの分配関数を Z_n とすると，

$$Z_n=\sum_{\mu_n,\mu_{n-1},\cdots=\pm1}\exp[K\sum_i^n\mu_i(\mu_{i-1}+\mu_{-n+i})+C\sum\mu_i] \tag{6}$$

である．磁場がない場合 $(C=0)$ を考えると，

$$Z_n=\sum_{\mu_n,\mu_{n-1},\cdots=\pm1}\exp[K\sum_i^n\mu_i(\mu_{i-1}+\mu_{-n+i})] \tag{7}$$

$$=\sum_{\mu_n,\cdots}\exp[\mu_n\mu_{n-1}+\mu_{n-1}\mu_{n-2}+\cdots]\exp[\mu_n\mu_0+\cdots+\mu_1\mu_{1-n}+\cdots] \tag{8}$$

と書くことができる．ここで，第 2 式の総和は少し省略してあるが，μ_n 以下の全てのスピンについて ±1 の総和を取る意味である．同様にして，

$$Z_{n-1}=\sum_{\mu_{n-1},\mu_{n-2},\cdots=\pm1}\exp[K\sum_i^{n-1}\mu_i(\mu_{i-1}+\mu_{-n+i})] \tag{9}$$

$$=\sum_{\mu_{n-1}=\pm1,\cdots}\exp[\mu_{n-1}\mu_{n-2}+\mu_{n-2}\mu_{n-3}+\cdots]\exp[\mu_{n-1}\mu_{-1}+\cdots+\mu_0\mu_{-n}+\cdots] \tag{10}$$

と書くことができる．

この Z_n と Z_{n-1} を用いると，$A(\mu_{n-1},\cdots,\mu_0)$ は次のように表すことができる．

$$\begin{aligned}&A(\mu_{n-1},\cdots,\mu_0)\\&=\frac{1}{Z_{n-1}}\sum_{\mu_{-1},\cdots=\pm1}\exp[K(\mu_{n-1}\mu_{n-2}+\cdots+\mu_0\mu_{-1}+\cdots)]\exp[K(\mu_{n-1}\mu_{-1}+\cdots+\mu_1\mu_{-n+1}+\cdots)]\end{aligned} \tag{11}$$

同様に，

$$\begin{aligned}&A(\mu_n,\cdots,\mu_1)\\&=\frac{1}{Z_n}\sum_{\mu_0,\cdots=\pm1}\exp[K(\mu_n\mu_{n-1}+\cdots+\mu_1\mu_0+\cdots)]\exp[K(\mu_n\mu_0+\cdots+\mu_0\mu_{-n}+\cdots)]\end{aligned} \tag{12}$$

である．これを用いて式 (5) の左辺を次のように計算する．

$$
\begin{aligned}
&\sum_{\mu_0}\exp[K\mu_n(\mu_{n-1}+\mu_0)]A(\mu_{n-1},\cdots,\mu_0)\\
=&\frac{1}{Z_{n-1}}\sum_{\mu_0}\exp[K\mu_n(\mu_{n-1}+\mu_0)]\\
\times&\sum_{\mu_{-1},\cdots}\exp[K(\mu_{n-1}\mu_{n-2}+\cdots+\mu_0\mu_{-1}+\cdots)]\exp[K(\mu_{n-1}\mu_{-1}+\cdots+\mu_1\mu_{-n+1}+\cdots)]\\
=&\frac{1}{Z_{n-1}}\sum_{\mu_0}\sum_{\mu_{-1},\cdots}\exp[K(\mu_n\mu_{n-1}+\mu_{n-1}\mu_{n-2}+\cdots)]\exp[K(\mu_n\mu_0+\mu_{n-1}\mu_{-1}+\cdots)]
\end{aligned}
\tag{13}
$$

この式の右辺に式 (8) を代入すると，

$$
\sum_{\mu_0}\exp[K\mu_n(\mu_{n-1}+\mu_0)]A(\mu_{n-1},\cdots,\mu_0)=\frac{Z_n}{Z_{n-1}}A(\mu_n,\cdots,\mu_1)
\tag{14}
$$

つまり，Kramers-Wannier の λ は分配関数 Z_n，Z_{n-1} を用いて次のように表されるということがわかる．

$$
\lambda=\frac{Z_n}{Z_{n-1}}
\tag{15}
$$

この式はこれ以上簡単にはならない．

λ の大きさを考えるために，以下にやや強引な近似をしてみよう．式 (15) の右辺を

$$
\frac{Z_n}{Z_{n-1}}=\frac{\displaystyle\sum_{\mu_n,\cdots}\exp[K(\mu_n\mu_{n-1}+\cdots+\mu_n\mu_0+\cdots)]}{\displaystyle\sum_{\mu_{n-1},\cdots}\exp[K(\mu_{n-1}\mu_{n-2}+\cdots+\mu_{n-1}\mu_{-1}+\cdots)]}
\tag{16}
$$

$$
=\frac{\displaystyle\sum_{\mu_n,\mu_{n-1},\mu_0}\exp[K(\mu_n\mu_{n-1}+\mu_n\mu_0)]\sum_{\mu_{n-2},\cdots}{}'\exp[K(\mu_n\mu_{n-1}+\cdots+\mu_n\mu_0+\cdots)]}{\displaystyle\sum_{\mu_{n-1},\mu_0}\sum_{\mu_{n-2},\cdots}{}'\exp[K(\mu_{n-1}\mu_{n-2}+\cdots+\mu_{n-1}\mu_{-1}+\cdots)]}
\tag{17}
$$

としておいて，ここで，$\sum'$ は総和から μ_{n-1} と μ_0 の和を除いた総和を意味する．そうしておいて，

$$
\sum_{\mu_{n-2},\cdots}{}'\exp[K(\mu_{n-1}\mu_{n-2}+\cdots+\mu_{n-1}\mu_{-1}+\cdots)]\equiv\Phi(\mu_{n-1},\mu_0)
\tag{18}
$$

とおくと

$$
\frac{Z_n}{Z_{n-1}}=\frac{\displaystyle\sum_{\mu_n,\mu_{n-1},\mu_0}\exp[K(\mu_n\mu_{n-1}+\mu_n\mu_0)]\Phi(\mu_{n-1},\mu_0)}{\displaystyle\sum_{\mu_{n-1},\mu_0}\Phi(\mu_{n-1},\mu_0)}
\tag{19}
$$

となる．$\Phi(\mu_{n-1},\mu_0)$ は μ_{n-1} と μ_0 の関数であるが，これを平均値で置き換えれば $\Phi(\mu_{n-1},\mu_0)$ は定数 Φ_0 となる．そうすると，

$$
\frac{Z_n}{Z_{n-1}}\simeq\frac{\displaystyle\sum_{\mu_n,\mu_{n-1},\mu_0}\exp[K(\mu_n\mu_{n-1}+\mu_n\mu_0)]\Phi_0}{\displaystyle\sum_{\mu_{n-1},\mu_0}\Phi_0}=\frac{2(\mathrm{e}^{2K}+2+\mathrm{e}^{-2K})}{4}=2\cosh^2(K)
\tag{20}
$$

となる．この式は式 (15) とは厳密には違うが，このようなオーダーであると考えられる．

参考文献

[1] Lars Onsager, “Crystal Statitics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition”, Phys. Rev. **65**, 117-149 (1944).

`http://www.totoha.net/archiv/3582.pdf`

[2] H. A. Kramers and G. H. Wannier, “Statitics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition”, Phys. Rev. **60**, 252-262 (1941).

`http://www.totoha.net/archiv/3606.pdf`