Onsager の 2 次元イジングモデル厳密解の論文を読む　その 1

2017.7.21　　鈴木　実

1　はじめに

Onsager が 2 次元イジングモデルを厳密に解いた．その内容を記述した論文 [1] は Appendix も入れると 33 頁もある．この論文は長い上に数式が多く，かつ数式の展開に関する説明も省略されているところが多く，論旨を理解する前に見通しを失う場合も少なくないのではないだろうか．今回，この論文を読み通して見て，これを理解するのは時間も掛かりなかなか大変であろうことがわかった．学生や，この分野に入ってまだ新しい人には，数式展開に時間が掛かり過ぎて途中で放棄したくなる場合も少なくないのではないかと思われる．それでも是非とも読み通したいと思われる方々のために，読み通すための補助資料があれば有用ではないかと思い，このメモを残すことにした[1]．

原論文との対応を良くするために，節タイトル，変数，式番号は共通にした．ただし，ここでは原論文の式を示すときにはここの文章の式と区別するために式番号の頭に「O-」をつけることにした．

2　INTRODUCTION

強磁性体相転移のモデルとしてスピンの方向が z 軸方向の正負方向のみが許されるイジングモデルが考えられていたが，この論文 [1] が書かれた時点 (1944 年) で 2 次元のイジングモデルを厳密に解いた例は他になかった．少し前 (1941 年) に Kramers と Wannier[3] が，イジングモデルにおいて分配関数を計算するときに，微視的状態で総和する部分が，行列の積とそのトレースとみなして計算することと等価であり，それが結局，行列の固有値計算に結びつくことを示している．さらに，2 つの行列の和を係数を持つ 1 つの行列に変換する手法を考えて固有値問題を具体的な計算の対象にすることが可能になった．この論文はそうした先行する研究成果の上に立って発展された研究の結果である．ただし，Kramers と Wannier の論文は正編 [3] と続編 [4] とあるが，現在の確立された統計物理学から見て，少し理解が異なる取扱い方をしているので，注意が必要である [5]．

3　OUTLINE OF METHOD

この論文は，Kramers と Wannier [3] の固有値問題の方法を取る．ただし，Kramers と Wannier の論文は次元の大きい行列 (16×16) を扱っているが，この論文では演算子を用いている．

最初は準備として 1 次元のモデル (linear model)，次に本題の 2 次元モデル (square model) を扱う．2 次元シートを筒状に巻いて周期的条件を満たすようにする．Kramers と Wannier[3] は螺旋状に 2 次元面を形成するモデルだった（螺旋モデル）．

この節は，計算に関する技術的な内容が多く，あまり outline にはなっていない．そこで，ここは簡単にこの論文の outline を記しておこう．

[1]新たに読もうとする人には論文を手に入れる手間が必要がある．大学や研究所にいれば手に入れるのは簡単だし，そういう人の中に知人が居れば手に入れてもらえるかもしれない．希にネットに載っている場合もある．例えば，今のところ，“Crystal Statistics. I.”でネット検索することにより，続編の “Crystal Statistics. II.” も合わせてネットから手に入れることができる [2]．著作権のある文献なので，通常は，米国物理学会から有料でダウンロードすることになる．料金は 25 ドルで本 1 冊分ほど掛かり必ずしも安くない．

[1°]　まず，最初に 1 次元のイジングモデルを扱う．分配関数の計算が実は固有値問題となる．その固有値を求める基本的な演算子の関数である V を導く．この V は

$$V = \mathrm{e}^{H}E + e^{-H}C \tag{1}$$

という形をしている（式 (O-12)）．ここで，H は $k_{\mathrm{B}}T$ で割った相互作用のエネルギー，E は 2 次元の単位行列，C も 2 次元の行列である．この形は 2 次元イジングモデルでも現れる．1 次元イジングモデルの場合のように分配関数が $\mathrm{Tr}\ V^n$ という形に書かれる場合は，V の固有値が簡単に求められるので，V をこのままにしておいても構わない．しかし，V と他の行列の積を作りその n 乗となるときには取扱いが複雑になる．できれば，V を因数に分解して単一項にしておきたい．そこで，H に 1 つの数学的な変換を施した H^*（H^* は複素共役ではない）を用いて，

$$V = \alpha e^{H^* C} \tag{2}$$

となるようするのである（式 (O-15)）．この式を満たすように H を H^* に変換するのを Kramers-Wannier の star 変換という．α は定数である．H^* は H の複素共役のように見えるが，全く違うので注意を要する．このように変換することで以下の 2 次元イジングモデルにおける分配関数の計算を非常にすっきりした形で扱うことができるようになる．

[2°]　Onsager が考えた 2 次元イジングモデルでは横 1 列のスピン列 (tier) を 1 列ずつ追加して 2 次元格子面を形成する．横 1 列を追加することにより，それまでの格子面との相互作用および新たに加えられた横 1 列の隣接スピン間の相互作用が加わる．この相互作用が加わるごとに，それまでの格子面の分配関数に因子が付加されて，それを繰り返すことにより十分大きな，たとえば $n \times n$ のような 2 次元格子面の分配関数が計算されるという考え方である．これを Kramers-Wannier の螺旋モデルに対して，tier モデルと呼ぶ．最初に $n \times n$ の 2 次元格子面を考えて，その中から相互作用を拾いだして分配関数を計算する方法と微妙に違うのはいずれ検討する余地があるが，ここでは Onsager の方法に従う[2]．tier モデルを考えると，このような計算において横 1 列に関する分配関数の追加部分は指数部分が横のスピンとの相互作用の和と下のスピンとの相互作用の和になる．前者は

$$V_2 = \exp(H'A), \quad A = \sum_{j=1}^{n} s_j s_{j+1}, \tag{3}$$

後者は

$$V_1 = \exp(H^* B), \quad B = \sum_{j=1}^{n} C_j, \tag{4}$$

と表される．s_j は後で述べるところの原子 j のスピン演算子である．分配関数は $\cdots V_2V_1V_2V_1V_2V_1\cdots$ である．したがって，固有値を求める対象となる基本行列は $V = V_2V_1$ である．これを表現する行列の次元は 2^n であり，その固有値を求めるのが簡単ではないことは明らかである．

[3°]　A と B に現れる演算子は直接には s_j と C_j である．演算子間の演算関係から，1，s_j，C_j，s_jC_j という演算子が基本になることがわかる．-1，$-s_j$，$-C_j$，$-s_jC_j$ も加えれば群を構成する．この 4 つの演算子は四元数代数 (quaternion algebra) の演算を満たす．行列で表現すれば 2 次の行列の n 個の直積になる．上の A と B はこの四元数演算子で表すことができる．このような四元数演算子の関数をそのまま対角化するというのは暗闇で物を探すことに等しい．これを解決するためには，演算関係が明確な一般的な演算子に変換して相互関係を整理し，見通しを得ることが重要である．

[4°]　1，s_j，C_j，s_jC_j を用いてもっと一般的な演算子を表すことを考える．このような一般的な演算子を考える理由は，そうして得られる一連の演算子の 1 次結合が A あるいは B となり，こうした一般的な演算子の固有ベクトルを求めることにより，A と B の固有ベクトル，ひいては $V = V_2V_1$ の固有ベクトルをも求めようとするからである．一般的な演算子の構成は 2 段階で行われる．まず，第 1 段階では

$$P_{ab} = s_a C_{a+1} C_{a+2} \cdots C_{b-1} s_b \tag{O-45}$$

[2]可換な物理量のみを扱うのであれば同等であるが，非可換な演算子を含む場合の吟味が必要であろう．

を定義する．原論文のこの定義では少し計算が合わなくなる部分があるので少し手直しが必要である．それについては後述する．

[5°]　次に，P_{ab} を用いて，一般的な演算子 X_r，Y_r，Z_r，R_r $(r = 1, \cdots, n)$ を定義する．この演算子は四元数代数を満たすように作られている．かつ，A と B はこの一般的な演算子の 1 次結合として表すことができる．このことと，X_r，Y_r，Z_r，R_r が四元数代数を満たすことから，$V = V_2 V_1$ の対角化が著しく簡単になる．実際にはそれほど簡単とも言えないが，対角化の見通しが立ち，実際に対角化が可能になるのである．対角化するのは実際には，$V = V_1^{1/2} V_2 V_1^{1/2}$ であるが，同じことである．V は A と B を指数部に持つので，対角化するときに，両脇から作用する演算子が四元数の演算で冪乗が簡約化されるため (例えば，$C^2 = 1$ とか $s_j^2 = 1$ となること)，対角化計算が成り立つ．四元数代数を満足する演算子でなければこうした計算は実質上成り立たず，とても対角化は覚束ないものと思われる．Onsager が四元数代数演算子に着目した点はまさに慧眼と言える．

[6°]　X_r の固有値を ξ_r，これに属する固有ベクトル χ とすると，最も基本的な固有ベクトルは χ_0 ですべての X_r の固有ベクトルとなり，かつすべての固有値は -1 となる．他の固有値と固有ベクトルは具体的に問題にする必要はない．この χ_0 が重要な役割を果たす．

[7°]　求めるべきは $V = V_1^{1/2} V_2 V_1^{1/2}$ の固有値である．この論文の重要な点，すなわちこの論文の肝は，この固有値および固有ベクトルと χ_0 の関係を見出して，そこから $V = V_1^{1/2} V_2 V_1^{1/2}$ の最大の固有値を導き出したことである．

それはどういうことかと言うと，線形代数のペロン・フロベニウスの定理 [6] に密接に関係している．V の成分は e^x の形であるから正行列である．ペロン・フロベニウスの定理から，V の固有値は正でその最大の固有値に属する固有ベクトルは正ベクトルである．したがって，X_r の固有ベクトル χ_0 とは直交しないで，1 次従属である．つまりこれは何を意味するかと言うと，χ_0 は，V の最大固有値に属する不変部分空間と X_r の固有値 -1 に属する不変部分空間の共通の不変部分空間に含まれるということである．したがって，χ_0 による V の期待値は V の最大の固有値を与えることになる．つまり，これから 2 次元イジングモデルの分配関数が導かれることになる．Onsager が，最後のこの段階を見通して，そこに導くように一般的な四元数演算子を考え出したところは本当に素晴らしいことである．

[8°]　相転移の有無に関する知見は，基本演算子（基本物理量）である 1，s_j，C_j，$s_j C_j$ をこれが表現する物理量が変わらないように置換しても，すなわち，自己同型変換しても，V の固有値が変わらなくなる温度，すなわち対称性が現れる温度として定義することができる．これは，秩序状態では自己同型変換に関してある物理量は異方的であるが，非秩序状態では等方的になるという考えに基づいている．これにより，2 次元イジングモデルでは相転移が起こることが導かれる．

[9°]　Appendix は主として最大固有値およびこれから得られる熱力学的物理量を数値的に評価するときに，収束の早い式に変換するために，ヤコビの楕円関数を用いて式の展開をする手法を述べている．1944 年当時はプログラムを使う計算機がなかったので，主として数表を用いる計算に頼らざるを得なかったため，このような数式の展開が必要だったものと思われる．現在の PC を用いれば，得られた数式から直接数値計算が可能である．

論文の展開は長いが，概ね上のような流れに沿って記述されている．式の展開とその証明が長くなり，見通しが暗くなった時には上の論理の流れを再度確認して論文を読み進めるようにすればよい．

4　THE LINEAR ISING MODEL

この節は 2 次元イジングモデルに入る前の準備である．分配関数を求めることが固有値問題であることと，Kramers-Wannier の star 変換 [3] について述べられている．

1 次元イジングモデルでは，直線上に並んだ 1 次元スピン列で，相互作用は隣接スピン間にのみ存在する．サ

イト k のスピン座標を $\mu^{(k)}$ とする．スピン座標は 1 または -1 の 2 値しか取らない．このとき，$\mu^{(k)}$ と $\mu^{(k-1)}$ との間のスピン間相互作用 u は，$u = u(\mu^{(k)}, \mu^{(k-1)})$ と書かれ次の値を持つ．

$$u(\mu^{(k)}, \mu^{(k-1)}) = -J\mu^{(k)}\mu^{(k-1)} \tag{O-1}$$

$\mu^{(k)} = \mu^{(k-1)} = 1$ および $\mu^{(k)} = \mu^{(k-1)} = -1$ のときに $u = -J$ の相互作用エネルギーを持ち，それ以外は $u = J$ である．そのとき，この 1 次元スピン結晶の分配関数 $Q(T)$ は

$$Q(T) = \mathrm{e}^{-F/k_\mathrm{B}T} = \sum_{\mu^{(1)},\mu^{(2)},\cdots,\mu^{(N)}=\pm1} \exp(-\sum_k u(\mu^{(k)}, \mu^{(k-1)})/k_\mathrm{B}T) \tag{O-2}$$

である[3]．また，F はヘルムホルツの自由エネルギーである．この式で総和は，全てのスピン座標の組み合わせについて和をとることを意味する．この式で $\mu^{(k)}$ と $\mu^{(l)}$ は可換であるから，$\beta = 1/k_\mathrm{B}T$ として，

$$Q(T) = \sum_{\mu^{(1)},\mu^{(2)},\cdots,\mu^{(N)}=\pm1} \mathrm{e}^{\beta J\mu^{(1)}\mu^{(2)}}\ \mathrm{e}^{\beta J\mu^{(2)}\mu^{(3)}} \cdots \mathrm{e}^{\beta J\mu^{(N-1)}\mu^{(N)}} \tag{O-2}$$

となる．ここで，$\mathrm{e}^{\beta J\mu^{(2)}\mu^{(3)}}$ などは $\mu^{(2)}$ および $\mu^{(3)}$ を添字とする 2 次行列の成分とみなすことができる．したがって，

$$\sum_{\mu^{(2)}} \mathrm{e}^{\beta J\mu^{(1)}\mu^{(2)}}\ \mathrm{e}^{\beta J\mu^{(2)}\mu^{(3)}}$$

は，2 つの行列 $(\mathrm{e}^{\beta J\mu^{(1)}\mu^{(2)}})$ と $(\mathrm{e}^{\beta J\mu^{(2)}\mu^{(3)}})$ の積の $\mu^{(1)}\mu^{(3)}$ 成分である．さらに $\mu^{(3)}$ に関する総和はこの積と行列 $(\mathrm{e}^{\beta J\mu^{(3)}\mu^{(4)}})$ の積を作る．このようにして，式 (3) は行列 $(\mathrm{e}^{\beta J\mu^{(1)}\mu^{(2)}})$ から行列 $(\mathrm{e}^{\beta J\mu^{(N-1)}\mu^{(N)}})$ の積を含んでいる．$(\mathrm{e}^{\beta J\mu^{(2)}\mu^{(3)}})$ などの行列は全て等しい．これを V としよう．そうすると，

$$\sum_{\mu^{(2)},\cdots,\mu^{(N-1)}=\pm1} \mathrm{e}^{\beta J\mu^{(1)}\mu^{(2)}}\ \mathrm{e}^{\beta J\mu^{(2)}\mu^{(3)}} \cdots \mathrm{e}^{\beta J\mu^{(N-1)}\mu^{(N)}} = V^{N-1}$$

である．もっとわかりやすくするために，行列の成分 $\mathrm{e}^{\beta J\mu^{(2)}\mu^{(3)}}$ を

$$\mathrm{e}^{\beta J\mu^{(2)}\mu^{(3)}} = (\mu^{(2)} \mid V \mid \mu^{(3)}) \tag{O-3}$$

と表すことにしよう．そうすると，上の式は，

$$\sum_{\mu^{(2)},\cdots,\mu^{(N-1)}=\pm1} (\mu^{(1)}|V|\mu^{(2)})(\mu^{(2)}|V|\mu^{(3)})\cdots(\mu^{(N-1)}|V|\mu^{(N)}) = (\mu^{(1)}|V^{N-1}|\mu^{(N)})$$

となる．したがって，

$$\begin{aligned} Q(T) &= \sum_{\mu^{(1)},\cdots,\,\mu^{(N)}=\pm1} (\mu^{(1)}|V|\mu^{(2)})(\mu^{(2)}|V|\mu^{(3)})\cdots(\mu^{(N-1)}|V|\mu^{(N)}) \\ &= \sum_{\mu^{(1)},\,\mu^{(N)}=\pm1} (\mu^{(1)}|V^{N-1}|\mu^{(N)}) \end{aligned} \tag{5}$$

である．

ここで，線状になったスピン列の端をつなぎ輪にすることを考えてみよう．つまり，$\mu^{(N)}$ の次に $\mu^{(N+1)}$ を考え，$\mu^{(N+1)} = \mu^{(1)}$ とし，$\mu^{(N)}$ と $\mu^{(1)}$ の間に他と同じスピン間相互作用を考える．そうすると，

$$\begin{aligned} Q(T) &= \sum_{\mu^{(1)},\cdots,\,\mu^{(N+1)}=\pm1} (\mu^{(1)}|V|\mu^{(2)})(\mu^{(2)}|V|\mu^{(3)})\cdots(\mu^{(N-1)}|V|\mu^{(N)})(\mu^{(N)}|V|\mu^{(N+1)})\delta_{\mu^{(1)},\,\mu^{(N+1)}} \\ &= \sum_{\mu^{(1)},\,\mu^{(N+1)}=\pm1} (\mu^{(1)}|V^N|\mu^{(N+1)})\delta_{\mu^{(1)},\,\mu^{(N+1)}} \\ &= \sum_{\mu^{(1)}=\pm1} (\mu^{(1)}|V^N|\mu^{(1)}) \end{aligned} \tag{6}$$

[3]現在では，分配関数には Z を使うのが普通であるが，ここは原論文に従い Q を用いる．

となる．結局，

$$Q(T) = \sum_{\mu^{(1)}=\pm 1} (\mu^{(1)}|V^N|\mu^{(1)}) = \mathrm{Tr}\, V^N \tag{7}$$

となる．

$\mu^{(N+1)} = \mu^{(1)}$ とする条件は周期的境界条件と言われ，このまま N を十分大きくすれば実際の系を反映すると考えられる．相互作用がカスケードになっているときで，かつ周期的境界条件が満たされる場合は分配関数は相互作用行列の N 乗積のトレース（跡）になる．$\mathrm{Tr}\, AB = \mathrm{Tr}\, BA$ が成り立つから，$T^{-1}VT$ が対角化行列であるとすると，

$$Q(T) = \mathrm{Tr}\, V^N = \mathrm{Tr}\, (T^{-1}VT)^N \tag{8}$$

であるから，V の固有値を $\lambda_1, \cdots, \lambda_N$ とすると，

$$Q(T) = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i^N \tag{9}$$

となる．最大の固有値を λ_{m} とすると，

$$Q(T) = \lambda_{\mathrm{m}}^N \left[\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_{\mathrm{m}}}\right)^N + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_{\mathrm{m}}}\right)^N + \cdots + 1 + \cdots + \left(\frac{\lambda_N}{\lambda_{\mathrm{m}}}\right)^N \right] \tag{10}$$

である．ここで, N が十分大きいとき，$(\lambda_i/\lambda_{\mathrm{m}})^N \ll 1$ であるから，

$$Q(T) = \lambda_{\mathrm{m}}^N + o(1) \tag{O-4}$$

となり，式 (O-4) が得られる.（なお，式 (O-4) で V^{N-1} は V^N の，$\mu^{(N)}$ は $\mu^{(N+1)}$ の誤りである.）

* * * * *

$H = \beta J$ とおくと (式 (O-7))，V は

$$V = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{H} & \mathrm{e}^{-H} \\ \mathrm{e}^{-H} & \mathrm{e}^{H} \end{pmatrix} \tag{O-8}$$

と書くことができる (式 (O-8))．つまり，V の (i,j) 成分は $\mathrm{e}^{H\mu^{(k)}\mu^{(k+1)}}$ において，$\mu^{(k)} = 1$ のとき $i = 1$, $\mu^{(k)} = -1$ のとき $i = 2$ とし，$\mu^{(k+1)}$ と j の関係も同様にする．そうすると，上の式のような行列になる．

V の特性方程式 $|V - \lambda E| = 0$ を解くと，

$$\lambda = \mathrm{e}^{H} \pm \sqrt{\mathrm{e}^{2H} - (\mathrm{e}^{2H} - \mathrm{e}^{-2H})} = \mathrm{e}^{H} \pm \mathrm{e}^{-H} \tag{11}$$

となり，$\lambda = 2\cosh H$ または $\lambda = 2\sinh H$ である．λ_{m} は最大の固有値であるから，

$$\lambda_{\mathrm{m}} = 2\cosh H \tag{O-6}$$

である．

V の作用するベクトルを ψ，引数を μ とすると，引数はスピン座標であるから $\mu = 1, \mu = -1$ の 2 つで，ベクトルを成分で表示すると，

$$\psi(\mu) = \begin{pmatrix} \psi(1) \\ \psi(-1) \end{pmatrix} \tag{12}$$

となる．通常は正規化条件を満たすので，

$$|\psi(1)|^2 + |\psi(-1)|^2 = 1 \tag{13}$$

の条件を満たす．$\psi(\mu)$ は一般には $\psi(1)$ と $\psi(-1)$ はこの条件を満たすベクトルである．特別の場合として，単一のスピンが対象の場合，正の向きの場合 ($\mu=1$) は，$\psi(1)=1$，$\psi(-1)=0$ であり，ベクトルの成分で表せば,

$$\psi(\mu=1)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \tag{14}$$

である．スピンが負の方向を向いている場合 ($\mu=-1$) は逆に,

$$\psi(\mu=-1)=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{15}$$

である．$0<\psi(1)$, $\psi(-1)<1$ の場合は複数のスピンの平均的な意味を持つと考える．

λ_{m} に属する固有ベクトルを求めよう．$V\psi_{\mathrm{m}}=\lambda_{\mathrm{m}}\psi_{\mathrm{m}}$ より

$$\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{H} & \mathrm{e}^{-H}\\ \mathrm{e}^{-H} & \mathrm{e}^{H}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_{\mathrm{m}}(1)\\ \psi_{\mathrm{m}}(-1)\end{pmatrix}=2\cosh H\begin{pmatrix}\psi_{\mathrm{m}}(1)\\ \psi_{\mathrm{m}}(-1)\end{pmatrix} \tag{16}$$

を解くと $\psi_{\mathrm{m}}(1)=\psi_{\mathrm{m}}(-1)$ となり，これから

$$\psi_{\mathrm{m}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} \tag{17}$$

となる．ここで Onsager が指摘しているのは，V は正行列であるので，ペロン・フロベニウスの定理 [6] により最大の正の固有値（ここでは $2\cosh H$）に属する固有ベクトルは正ベクトル（あるいはその定数倍）であることである．これは，この論文の最終段階で重要な部分に用いられるので，その具体的な例をここで言及している．

* * * * *

さて，ここで V を次のように書き換えてみよう．

$$V=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{H} & \mathrm{e}^{-H}\\ \mathrm{e}^{-H} & \mathrm{e}^{H}\end{pmatrix}=\mathrm{e}^{H}E+\mathrm{e}^{-H}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} \tag{18}$$

これを $\psi(\mu)$ に作用させると

$$(V,\psi(\mu))=\mathrm{e}^{H}\psi(\mu)+\mathrm{e}^{-H}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi(1)\\ \psi(-1)\end{pmatrix}=\mathrm{e}^{H}\psi(\mu)+\mathrm{e}^{-H}\begin{pmatrix}\psi(-1)\\ \psi(1)\end{pmatrix} \tag{19}$$

となる．第 3 式第 2 項のベクトルを見ると，成分が逆転していることがわかる．つまり，μ が $-\mu$ に変わることと同じである．このことは式 (14) と (15) の関係を見ればわかる．したがって,

$$(V,\psi(\mu))=\mathrm{e}^{H}\psi(\mu)+\mathrm{e}^{-H}\psi(-\mu) \tag{O-9}$$

となる．ここで，次のような μ を反転する演算子 C を用いる．

$$(C,\psi(\mu))=\psi(-\mu) \tag{O-10}$$

この C を Complementary operator(相補演算子) という．C を用いて式 (O-9) 第 2 項の $\psi(-\mu)$ を書き換えると

$$(V,\psi(\mu))=\mathrm{e}^{H}\psi(\mu)+\mathrm{e}^{-H}(C,\psi(\mu))$$

となり，式 (O-12) になる．C を 2 回作用させると $C^2=1$ となることはすぐわかる．

式 (18) から，

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{20}$$

であることがわかる．これから，C の固有値 λ は式 (20) の特性方程式から，$\lambda = \pm 1$ が簡単に得られる．

C の固有関数を考えると，$\lambda = 1$ の場合は μ の符号が変化しない場合，すなわち μ の偶数巾乗がその固有関数になり得る．もっとも簡単な $\mu^0 = 1$ を選ぶと，

$$(C, 1) = 1 \tag{O-11}$$

となる．一方，$\lambda = 1$ に属する固有関数は μ の奇数巾乗がこれを満たし，その中から最も簡単なもっとも簡単な $\mu^1 = \mu$ を選ぶと，

$$(C, \mu) = -\mu \tag{O-11}$$

となる．固有関数はこのような適切な関数を用いて表すこともできる．演算子が行列で表現されている場合は固有ベクトルで考える．なお，演算子の行列による表現は基底関数を用いても得られる．上の場合は，μ と $-\mu$ が基底関数になる．

固有ベクトルも求めておこう．固有値 ± 1 に対応する固有ベクトルはそれぞれ，

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \psi_- = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \tag{21}$$

ただし，正規化定数 $1/\sqrt{2}$ は無視した．これは，

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \psi_- = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{22}$$

と表すことができる．これから，C が μ に作用する時と，行列としてベクトルに作用する時の関係が把握できる．

* * * * *

以上により，行列 V は結局，次のように表すことができる．

$$V = \mathrm{e}^{H} + \mathrm{e}^{-H} C \tag{O-12}$$

この V が，分配関数を固有値問題として計算するときに対象となる行列の単位である．この V に，Kramers-Wannier の star 変換が導入される．今後の計算で V の冪あるいは同様の演算子との積が出てくるとき，対数をとった場合に C などの演算子が線形であって欲しい．つまり，$\alpha \mathrm{e}^{\eta C}$ のような形になってくれれば二項展開も必要ないし，演算子の積も簡単になり固有値問題を解く際に都合がよい．Kramers-Wannier の star 変換はまさにそれを実現してくれる．

H を star 変換すると H^* になるとしよう．（くどいが，H^* は H の複素共役ではない．）そのとき，その間の関係は次のようになる．

$$H^* = \frac{1}{2} \ln \coth H = \tan^{-1}(\mathrm{e}^{-2H}) \tag{O-14}$$

これは次のようにも書ける．

$$\mathrm{e}^{-2H} = \tanh H^* \tag{23}$$

このとき，V は次のように変形できる．

$$V = \mathrm{e}^{H}(1 + \mathrm{e}^{-2H} C) = \mathrm{e}^{H}(1 + (\tanh H^*) C) = \frac{\mathrm{e}^{H}}{\cosh H^*}(\cosh H^* + (\sinh H^*) C) \tag{24}$$

ここで，$C^2=1$ であることに着目すると，$\cosh H^*$ および $\sinh H^*$ を展開した時に次の関係が成り立つことがわかる．すなわち，

$$\begin{aligned}\cosh H^* &= 1-\frac{1}{2!}(H^*)^2+\frac{1}{4!}(H^*)^4-\cdots \\ &= 1-\frac{1}{2!}(H^*C)^2+\frac{1}{4!}(H^*C)^4-\cdots \\ &= \cosh(H^*C) \qquad (25) \\ (\sinh H^*)C &= H^*C-\frac{1}{3!}(H^*)^3C+\frac{1}{3!}(H^*)^5C-\cdots \\ &= H^*C-\frac{1}{3!}(H^*C)^3+\frac{1}{3!}(H^*C)^5-\cdots \\ &= \sinh(H^*C) \qquad (26)\end{aligned}$$

となる．これから，

$$\cosh H^*+(\sinh H^*)C=\cosh(H^*C)+\sinh(H^*C)=\mathrm{e}^{H^*C} \tag{27}$$

という関係式が得られる[4]．これを式 (24) に代入すると，

$$V=\frac{\mathrm{e}^H}{\cosh H^*}\mathrm{e}^{H^*C} \tag{O-15}$$

となる．ここで，e^{H^*C} の係数に関係して，次の関係式が成り立つことに注意しよう．

$$\frac{\mathrm{e}^H}{\cosh H^*}=\sqrt{\frac{\mathrm{e}^{2H}}{\cosh^2 H^*}}=\sqrt{\frac{\coth H^*}{\cosh^2 H^*}}=\sqrt{\frac{1}{\sinh H^*\cosh H^*}}=\sqrt{\frac{2}{\sinh 2H^*}}=(2\sinh 2H)^{1/2} \tag{28}$$

この式の最後の変形で，この後で示す関係式 $\sinh 2H\sinh 2H^*=1$ を代入した．これを代入すると，

$$V=(2\sinh 2H)^{1/2}\mathrm{e}^{H^*C} \tag{O-15}$$

という関係式が得られる．この式を見ると，式 (O-12) で演算子の和だった V が star 変換によって，定数係数の単一項となり，演算子は指数部に入り，まさに狙い通りになっていることがわかる．この関係式はこの後 2 次元イジングモデルの計算でも出てくる重要な式である．

式 (O-15) の関係式は，行列を用いて導くこともできる．そこで式 (24) を次のように書こう．E は単位行列である．

$$V=\mathrm{e}^H(E+\mathrm{e}^{-2H}C)=\mathrm{e}^H(E+(\tanh H^*)C)=\frac{\mathrm{e}^H}{\cosh H^*}((\cosh H^*)E+(\sinh H^*)C) \tag{29}$$

C をユニタリー行列 P を用いて対角化すると，

$$P^{-1}CP=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} \tag{30}$$

となる．したがって，

$$(\sinh H^*)P^{-1}CP=\begin{pmatrix}\sinh H^*&0\\0&-\sinh H^*\end{pmatrix} \tag{31}$$

とすることができる．同様に，

$$P^{-1}(\cosh H^*)EP=\begin{pmatrix}\cosh H^*&0\\0&\cosh H^*\end{pmatrix} \tag{32}$$

[4] このような式変形は四元数演算の一例であり，後半の対角化計算の際に多用される．

したがって，

$$
\begin{aligned}
&P^{-1}[(\cosh H^*)E+(\sinh H^*)C]P\\
&=\begin{pmatrix}\cosh H^* & 0\\ 0 & \cosh H^*\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\sinh H^* & 0\\ 0 & -\sinh H^*\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{H^*} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{-H^*}\end{pmatrix}\\
&=\exp\left[H^*\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\right] \qquad (33)
\end{aligned}
$$

とすることができる．第3式への変形は，対角行列の行列多項式は，対角成分の多項式を成分とする行列と同じということを用いている．したがって，

$$
\begin{aligned}
(\cosh H^*)E+(\sinh H^*)C&=P\exp\left[H^*\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\right]P^{-1}=\exp\left[H^*P\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}P^{-1}\right]\\
&=\mathrm{e}^{H^*C} \qquad (34)
\end{aligned}
$$

が成り立つ[5]．したがって，式 (29) に代入すると，式 (O-19) が得られる．

なお，式 (31) から，

$$
(\sinh H^*)P^{-1}CP=\begin{pmatrix}\sinh H^* & 0\\ 0 & -\sinh H^*\end{pmatrix}=\sinh\begin{pmatrix}H^* & 0\\ 0 & -H^*\end{pmatrix} \qquad (35)
$$

となり，これから，

$$
(\sinh H^*)C=P\sinh\begin{pmatrix}H^* & 0\\ 0 & -H^*\end{pmatrix}P^{-1}=\sinh\left[P\begin{pmatrix}H^* & 0\\ 0 & -H^*\end{pmatrix}P^{-1}\right]=\sinh\left[\begin{pmatrix}0 & H^*\\ H^* & 0\end{pmatrix}\right] \qquad (36)
$$

となり，式 (26) と同じ

$$
(\sinh H^*)C=\sinh(H^*C) \qquad (37)
$$

が成り立つ．

* * * * *

本節の最後に述べられている Krammers-Wannier の star 変換についてまとめておこう．まず定義式 (O-14) から，

$$
H^*=\tanh^{-1}(\mathrm{e}^{-2H}) \qquad (38)
$$

の関係がある．これからすぐに，

$$
\tanh H^*=\mathrm{e}^{-2H} \qquad (39)
$$

$$
\coth H^*=\mathrm{e}^{2H} \qquad (40)
$$

が導かれる．これから e^{2H^*} について解くと，

$$
\mathrm{e}^{2H^*}=\coth H \qquad (41)
$$

$$
\mathrm{e}^{-2H^*}=\tanh H \qquad (42)
$$

が成り立つ．つまり H^* と H を交換した式も成り立つ．式 (41) から式 (42) を引いて，

$$
\sinh 2H^*=\ \mathrm{cosech}\, 2H, \qquad (43)
$$

[5] ここでは

$$
PC^nP^{-1}=PCP^{-1}PCP^{-1}PC\cdots P^{-1}PCP^{-1}=(PCP^{-1})^n
$$

という関係を用いている．

式 (41) に式 (42) を加えて，

$$\cosh 2H^* = \coth 2H, \tag{44}$$

式 (43) を式 (44) で割って，

$$\tanh 2H^* = \operatorname{sech} 2H, \tag{45}$$

などの関係式が成り立つ．式 (43) から，

$$\sinh 2H^* \sinh 2H = 1, \tag{O-17}$$

式 (45) から，

$$\tanh 2H^* \cosh 2H = 1, \tag{O-17}$$

式 (44) から，

$$\tanh 2H \cosh 2H^* = 1, \tag{O-17}$$

が得られる．

　次に，以下の恒等式を考えよう．

$$\tanh(A + a) = \frac{\sinh(A + a)}{\cosh(A + a)} = \frac{\sinh A \cosh a + \cosh A \sinh a}{\cosh A \cosh a + \sinh A \sinh a} \tag{46}$$

ここで，$a = \pm \mathrm{i}\pi/2$ とおくと，$\cosh \mathrm{i}x = \cos x$，$\sinh \mathrm{i}x = \mathrm{i} \sin x$ であるから，

$$\tanh(A \pm \frac{1}{2}\pi\mathrm{i}) = \frac{\cosh A}{\sinh A} = \coth A \tag{47}$$

という関係式が得られる．一方，

$$\tanh((-H)^*) = \mathrm{e}^{2H} = \coth H^* \tag{48}$$

とすることができるので，式 (47) の関係を用いると，

$$\tanh((-H)^*) = \tanh(H^* \pm \frac{1}{2}\pi\mathrm{i}) \tag{49}$$

が成り立つ．これより，

$$(-H)^* = H^* \pm \frac{1}{2}\pi\mathrm{i} \tag{O-16}$$

が導かれる．式 (O-16) の第 2 式は，cosh の和の公式を用いて，式 (47) を導くときと同様にして得られる．

＊　＊　＊　＊　＊

　本節末尾に記述されているグーデルマン (Gudermann) 関数 gd の定義は

$$\operatorname{gd} x = \int_0^x \frac{\mathrm{d}t}{\cosh t} \tag{50}$$

である [7]．この積分の解き方によってグーデルマン関数の表現がいろいろ変わる．$\sinh t = u$，$u = \tan v$ とおくことにより，

$$\operatorname{gd} x = \tan^{-1} \sinh x, \tag{51}$$

分子分母に $\cosh t$ を掛けてから $\tanh t = u$，$u = \sin v$ とおくことにより，

$$\operatorname{gd} x = \sin^{-1} \tanh x, \tag{52}$$

$\mathrm{e}^t = u$，$u = \tan v$ とおくことにより，積分の下限が 0 でないことに注意すると，

$$\operatorname{gd} x = 2 \tan^{-1}(\mathrm{e}^x) - \frac{\pi}{2}, \tag{53}$$

$\cosh t$ を $\cosh^2(t/2)(1+\tanh^2(t/2))$ としてから $\tanh^2(t/2) = u$ とおき，$u = \tan v$ とおくことにより，

$$\mathrm{gd}\, x = 2\tan^{-1}(\tanh\frac{x}{2}) \tag{54}$$

という結果が得られる．

式 (51) から式 (O-19) の第 1 式が，式 (52) から式 (O-19) の第 2 式が得られる．また式 (51) と式 (52) から

$$\cos\ \mathrm{gd}\, x = \frac{\sin\ \mathrm{gd}\, x}{\tan\ \mathrm{gd}\, x} = \frac{\tanh x}{\sinh x} = \ \mathrm{sech}\, x\, \mathrm{gd}\, x \tag{55}$$

となる．これから式 (O-19) の第 3 式が得られる．

この論文に書いてあるように，双曲線関数はグーデルマン関数で表すことができる．式 (O-17) の第 1 式から $(\tan\ \mathrm{gd}\, 2H)(\tan\ \mathrm{gd}\, 2H^*) = 1$ となり，これより，

$$\tan\ \mathrm{gd}\, 2H = \cot\ \mathrm{gd}\, 2H^* = \tan(\frac{\pi}{2} -\ \mathrm{gd}\, 2H^*) \tag{56}$$

となるので，

$$\mathrm{gd}\, 2H +\ \mathrm{gd}\, 2H^* = \frac{\pi}{2} \tag{O-20}$$

が得られる．

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).

この文章の執筆段階で，この論文は下記の Colorado 大学のサイトからダウンロードできるようである．

`http://www.colorado.edu/physics/phys7230/phys7230_sp08/Kaufman1944.pdf`

米国物理学会から購入する場合は，

`https://journals.aps.org/pr/pdf/10.1103/PhysRev.65.117`

からダウンロードできる．

あるいは下記からダウンロードできる．

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

[2] Bruria Kaufman, “Crystal Statitics. II. Partition Function Evaluated by Spinor Analysis”, Phys. Rev. **76**, 1232-1243 (1944).

この文章の執筆段階で，この論文は下記の Colorado 大学のサイトからダウンロードできるようである．

`http://www.colorado.edu/physics/phys7230/phys7230_sp08/Onsager1949.pdf`

`http://www.totoha.net/archiv/3598.pdf`

[3] H. A. Kramers and G. H. Wannier, “Statitics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I.”, Phys. Rev. **60**, 252-262 (1941). `http://www.totoha.net/archiv/3606.pdf`

[4] H. A. Kaufman and G. H. Wannier, “Statitics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part II.”, Phys. Rev. **60**, 263-276 (1941). `http://www.totoha.net/archiv/3607.pdf`

[5] たとえば,「Kramers-Wannier 論文について 1」(2016/12/31 のエントリー).

[6] 斎藤正彦「線形代数入門」東京大学出版会 (1966), p. 217.

[7] 森口，宇田川，一松「数学公式 I」岩波書店 (1956), p. 157.