Onsager の2次元イジングモデル厳密解の論文を読む その10

2017.12.18 鈴木 実

14 The Principal Eigenvector 主固有ベクトル

この節の冒頭は、 ψ² で表されるスピン配置の分布確率に関する記述である。統計物理学における確率分布 に関しては当時と現在では理解が少し異なると考えられる。すでに述べたように、スピンの配置の差がエネル ギー差に帰結する場合にのみ統計物理学における分布確率に差がでる。そのことに注意して以下の内容を読み 進めよう

* * * * *

スピン配置が式 (O-96b)[1] の場合の確率分布について考える.式 (O-96b) の固有ベクトル関数の演算の定 義については十分に記述がないので,ここでは次のように定義しよう.式 (O-81)[2],および式 (O-96b) より,

$$\psi = \left(\exp\left[\sum_{1 < 2r < n} \frac{1}{2} \delta_{2r-1}^* i Z_{2r-1} \right], \ \chi_0^* \right) \tag{1}$$

$$= \exp\left[\sum_{1<2r< n} \frac{1}{2} \delta_{2r-1}^* i Z_{2r-1}\right] \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2^n} \left\{ \prod_j^n (1+\mu_j) + \prod_j^n (1-\mu_j) \right\}$$
(2)

となる. これがスピン配置 $(\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_n)$ に作用したときの値を $\psi(\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_n)$ で表し, その内容は, s_j に μ_j を代入し、 $\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_n$ に対象としているスピン配置の μ_j の値 ±1 を代入した値とする. そうすると、上 の場合では、 $\psi(++\cdots+)$ は¹式(1)の μ_i に1を代入して得られ、中括弧の値は 2ⁿ になる. 同様に $\psi(--\cdots-)$ も 2^n になる². 式 (1) をスピン配置 (++···+) または (--···-) に作用させることはこのように理解する.

「その9」[1]の式(1)を適用すると、式(2)は、

$$\psi = \prod_{1 < 2r < n} \left[\cos(\frac{1}{2} \delta_{2r-1}^* Z_{2r-1}) + i \sin(\frac{1}{2} \delta_{2r-1}^* Z_{2r-1}) \right] \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2^n} \left\{ \prod_j^n (1+\mu_j) + \prod_j^n (1-\mu_j) \right\}$$
(3)

$$= \prod_{1 < 2r < n} \left[1 - R_{2r-1} + R_{2r-1} \cos(\frac{1}{2}\delta_{2r-1}^*) + iZ_{2r-1} (\sin\frac{1}{2}\delta_{2r-1}^*) \right] \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{2^n} \left\{ \prod_j^n (1 + \mu_j) + \prod_j^n (1 - \mu_j) \right\}$$
(4)

と表すことができる.これをスピン配置 (+ + · · · +) に作用させる.このスピン配置では, χ_0^* は偶の固有ベク トル関数であるから, rが奇数のとき X_r^* と $R_r = X_r^{*2}$ は χ_0^* に作用してそれぞれ固有値 –1 と 1 をもつ [1].

一方, $Z_r = -Z_r^*$ は χ_0^* に作用して, r 番目の固有値のみ $-\xi_r$ となる X_r^* の別の固有ベクトル関数を作る. す なわち、この固有ベクトル関数 (Z_r, χ_0^*) は χ_0^* と比べて固有値の ξ_r のみが異なり、符号が反対である³. とい うことは、 (Z_r, χ_0^*) が0にならないスピン配置もそれに従って変わる。 χ_0^* が0にならない状態はスピン配置が 全て + か全て – の場合であるから、 Z_r が χ_0^* に作用した関数が 0 にならないという状態は、このスピンが全 て揃った配置ではなくなるということである.その状態は当然,全て + から全て – への変化した状態や,そ

 $(X_r^*, (Z_r^*, \chi_0^*)) = (X_r^* Z_r^*, \chi_0^*) = (-Z_r^* X_r^*, \chi_0^*) = -(Z_r^*, (X_r^*, \chi_0^*)) = -\xi_r(Z_r^*, \chi_0^*)$ となるので、 (Z_r^*, χ_0^*) で固有値が反転する.

 $[\]frac{1}{\psi(+,+,\cdots,+)}$ や $\psi(1,1,\cdots,1)$ は異なる表現で、内容は同じである. 2または $\psi(-1,-1,\cdots,-1)$ でも同じ.

³反交換関係 $Z_r^* X_r^* = -X_r^* Z_r^*$ から

の逆の状態ではない. χ_0^* はスピンが全て + か全て – の場合に 1,それ以外の場合は 0 である.以上のことを 考慮すると,式 (4)の大括弧の中の Z_r を含む項は χ_0^* の中括弧部分に作用して別の固有ベクトル関数となり, 全てのスピンが同じ方向を向いているスピン配置では 0 となるから,(++···+)または (--···-)の場合に この項は 0 になる.つまり,(Z_r , χ_0^*)(++···+)=0および (Z_r , χ_0^*)(--···-)=0 である.

 R_r は χ_0^* に作用して固有値が1であるから, $(R_r, \chi_0^*)0$ にならないスピン配置は $(++\cdots+)$ または $(--\cdots-)$ の場合になるので, その場合は $R_r = 1$ 同じであるから, 式 (4) で $R_r = 1$ としてよい. そうすると, 結局, 残るのは $\cos(\frac{1}{2}\delta_{2r-1}^*)$ の項のみで中括弧部分は 2^n となる. その結果,

$$\psi(++\dots+) = \prod_{1<2r< n} \left[\cos(\frac{1}{2}\delta_{2r-1}^*)\right] \frac{1}{\sqrt{2}}$$
(5)

となる. (--…)の場合も同じであるから,

$$\psi^{2}(++\dots+) = \psi^{2}(-\dots-) = \frac{1}{2} \prod_{1 < 2r < n} \cos^{2}(\frac{1}{2}\delta^{*}_{2r-1})$$
(6)

となる.

次に, iZ_{2r-1} を考えてみよう.「その 8」[2] で述べた Y_r の場合のように,かつ,脚注 3 でも述べたように, (Z_{2r-1}, χ_0^*) は X_{2r-1}^* の別の固有ベクトル関数となり,固有値 $-\xi_{2r-1}^*$ をもつ.すなわち, Z_{2r-1} は χ_0^* から固 有値 $-\xi_{2r-1}^*$ をもつ X_{2r-1}^* の固有ベクトル関数 (Z_{2r-1}, χ_0^*) を作る.これから,

$$\left(\prod_{1<2r< n} Z_{2r-1}, \chi_0^*\right) \tag{7}$$

は X_{2r-1}^* の χ_0^* の固有値を全て反転した固有ベクトル関数になる (偶関数であるから偶数番目は 0). χ_0^* の場合, X_{2r-1}^* の固有値は全て $\xi_{2r-1}^* = -1$ である. 一方, 全て $\xi_{2r-1}^* = 1$ となる場合はスピンが交互に反転する スピン配置, すなわち, $(+-+-\cdots-)$ および $(-+-+\cdots+)$ の場合だけである. なぜなら, Aの固有値が -nになるからである. これからわかるように, スピン配置が $(+-+-\cdots-)$ または $(-+-+\cdots+)$ のとき, 式 (4) の値は, 大括弧の Z_{2r-1} の項以外は 0 になり, Z_{2r-1} の項のみが残る. ここで,

$$\langle (Z_{2r-1}, \chi_0^*) | (Z_{2r-1}, \chi_0^*) \rangle = \langle \chi_0^* | (Z_{2r-1}^2, \chi_0^*) \rangle = 1$$
 (8)

であるから,

$$(Z_{2r-1}, \chi_0^*)(+-+-\dots) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$
(9)

としてよい. $1/\sqrt{2}$ は交互反転スピン配置には2種類あることから来ている. 結局,

$$\psi(+-+-\dots) = \prod_{1 < 2r < n} \left[\sin(\frac{1}{2}\delta_{2r-1}^*) \right] \frac{1}{\sqrt{2}}$$
(10)

となる. (-+-+・・+)の場合も同じであるから,

$$\psi^2(+-+-\dots) = \psi^2(-+-+\dots) = \frac{1}{2} \prod_{1<2r< n} \sin^2(\frac{1}{2}\delta^*_{2r-1})$$
(11)

という結果が得られる.

この後も引き続き、上の4種類のスピン配置の ψ^2 の計算に関する考察が続くが、冒頭に述べたよう理由で、 この確率分布に関する内容には深入りしないことにしよう.

* * * * *



図 1: 双曲面三角形 OD*D' の 3 つの角 ω , δ^* , δ' と 3 つの辺の長さ γ , $2H^*$, 2H'. 図 の三角形はポアンカレ円板上のものである [5, 6]. O はポアンカレ円板の中心. ポアン カレ円板上の直線はポアンカレ円の円周に直交する円弧である. 中心を通るときのみ直 線になる. 図では OD* と OD' が直線, D*D' が円弧である. OD* を固定して, $\omega \in 0$ から増加させて OD' を回転させる. 左が $2H^* > 2H'$ のとき, 右が左が $2H^* < 2H'$ の とき.

式 (O-89d) を用いて、 $\delta^* \ \epsilon \ \omega = r\pi/n$ の関数として計算することができる. $\omega_r \ \iota \ \pi/n \ b \ \delta \ \pi$ (または $\pi(n-1)/n$) まで変化する. そのとき、図1からわかるように、もし $2H^* > 2H'$ なら、 $\delta^* \ \iota \ \pi$ から 0 まで変化する. 一方、 $2H^* < 2H'$ なら、 $\delta^* \ \iota \ 0$ から増加して、あるところで最大値をとり、そのあとまた 0 まで減少する. $2H^* = 2H'$ の場合は、 $\delta^* \ \iota \ \pi/2$ から 0 まで単調に減少する.

 $2H^* < 2H'$ のとき、 δ^* がとる最大値は図1で $\delta' = \pi/2$ のときであることがわかる.一方、双曲正弦定理の式 (O-89c)[1]より、

$$\frac{\sinh 2H^*}{\sin \delta^*} = \frac{\sinh 2H'}{\sin \delta'} \tag{12}$$

となり,

$$\sin \delta^* = \frac{\sinh 2H^*}{\sinh 2H'} \sin \delta' \tag{13}$$

であるから、 δ^* が最大 δ^*_{\max} となるのは $\delta' = \pi/2$ のとき、つまり、 $\sin \delta' = 1$ が最大のときである. $\sinh 2H^* / \sinh 2H' < 1$ であるから、これから、

$$\delta_{\max}^* = \sin^{-1} \left(\frac{\sinh 2H^*}{\sinh 2H'} \right) < \frac{\pi}{2} \tag{14}$$

となる.

Onsager は δ^* の正方格子の場合の ω 依存性を Fig.5 に示している.正方格子では,H' = H である.温度は $J/k_{\rm B}T$ で規格化された温度,すなわち 1/H である.gd 2H = 0 のときは「その 1」[3] の式 (54) の gd $x = 2 \tan^{-1}(\tanh \frac{\pi}{2})$ より,H = 0 である.そのときは, H^* は式 (0-20) の,

$$\operatorname{gd} 2H + \operatorname{gd} 2H^* = \frac{\pi}{2}$$
 (0-20)

より $H^* = \infty$ となる. これを式 (O-89d) に代入すると, $\cot \delta^* = -\cot \omega$ となる. これから, 高温極限 $1/H = \infty$ では $\delta^* = \pi - \omega$ となることがわかる. T = 0の場合, $H = \infty$, $H^* = 0$ となり, $\delta^* = 0$ である.

一方, $H = H^*$ となるのは, gd $2H = \text{gd } 2H^* = \pi/4$ の場合である. このとき, $\omega = 0$ で $\delta^* = \pi/2$ で, gd 2H が $\pi/4$ より小さくなると, $H^* < H$ となり $\omega = 0$ で $\delta^* = 0$ となる. それ以外は, 式 (O-89d) を用いて 数値計算することにより得られる (計算の C プログラムは付録参照). 結果は図 2 に示されるように, 論文の Fig.5 と一致する.



図 2: 正方格子の H' = Hの場合の δ^* の ω 依存性の数値計算結果. 曲線は上から, gd 2H が 5°, 15°, 30°, 42°, 45°, 48°, 66°, 77°の場合である.

* * * * *

双曲面上の三角形の内角の和はπよりも小さい([5]の8.). すなわち,

$$\delta' + \delta^* + \omega < \pi \tag{15}$$

である.一方,必ず $\delta > 0$ であるから,

$$\pi - \omega - \delta^* > 0 \tag{16}$$

つまり、δ* が図2で直角三角形の斜辺よりも下にくることを示す.

本節,以下は十分な数学的根拠が明記されていない.後で数学的な根拠を思いついたときに,また記述する ことにしよう.今は,Onsagerの述べるところをそのまま以下に記すことにする.

Onsager は, Z_r を詳細に検討すると、この演算子はrが小さい時に1対のスピン反転を離れた距離で効率 よく起こすことがわかるという.したがって、式 (O-96a) や式 (O-96b) で Z_r を固有ベクトル関数に作用させ ると遠い方からスピン反転が増えるということを意味する.これを、 $Z_r = iX_rY_r$ であるから、 X_r または Y_r か ら考えてみよう.たとえば、 X_r は

$$X_r = \frac{1}{4n} \sum_{a,b=1}^{2n} \cos \frac{(a-b)r\pi}{n} P_{ab}$$
(0-62-1)

であるが、ここで、a - bをスピン間距離、すなわち実空間距離とみなし、rを波数とみなせば、 X_r は P_{ab} のフーリエ級数の係数とみなすことができる。 P_{ab} は可能なかぎりの C_j 列からなっている。したがって、多様なスピン反転演算の集合とみなすことができる。そのとき、rが小さいということは繰り返しの距離が大きいということである。繰り返しはスピンの反転があって周期が決まるので、rが小さいことはスピン反転間の距離が大きいことを意味しているということになる。

 δ^* がつねに小さい場合というのは、図1から、 $2H^* \ll 2H'$ の場合であることがわかる. 1/Hが規格化温度 であるから、 $2H^* \ll 2H$ は低温の状態に対応する. つまり、 $0 < \omega < \pi$ の範囲で常に δ^* が小さい状態は低温に 対応する. 一方、高温は $\delta^* \simeq \pi - \omega$ のとき、つまり $\pi - \omega - \delta^*$ が小さいときである. 図1では、 $2H' \ll 2H^*$ の場合に対応するが、この場合は辺 γ と辺 $2H^*$ が長くなり、その間の角 $\pi - \omega - \delta^*$ が常に小さくなることに 対応する. 低温では、スピンが完全に整列している状態に近い. すなわち、このような状態の固有ベクトル関 数は χ_0^* である. 高温では,スピンが完全にランダムな状態になる. このような状態の固有ベクトル関数は χ_0 である. 実際,前者はスピンの状態が揃っている場合のみ0 でないが,後者は定数であるからどのようなスピン配列に対しても同じ値をもつ. つまり,完全にランダムと同じである.

さらに,式 (O-96a), (O-96b) から考えてみよう.「その 9」[1] の式 (1) からそれぞれ次のように書き換える ことができる. すなわち,

$$\psi_{\max} = \left(\prod_{1 < 2r < n} \left(1 - R_{2r-1} + R_{2r-1} \cos \frac{\pi - \omega_{2r-1} - \delta_{2r-1}^*}{2} + iZ_{2r-1} \sin \frac{\pi - \omega_{2r-1} - \delta_{2r-1}^*}{2}\right), \chi_0\right) \quad (17)$$

$$\psi_{\max} = \left(\prod_{1 < 2r < n} \left(1 - R_{2r-1} + R_{2r-1} \cos \frac{1}{2} \delta_{2r-1}^* + i Z_{2r-1} \sin \frac{1}{2} \delta_{2r-1}^*\right), \ \chi_0^*\right) \tag{18}$$

となる.まず式 (17) をみると、高温の場合は $\pi - \omega - \delta^* \ll 1$ と考えてよい.そのとき、 $\cos \frac{1}{2}(\pi - \omega_{2r-1} - \delta^*_{2r-1}) \simeq 1$ 、 $\sin \frac{1}{2}(\pi - \omega_{2r-1} - \delta^*_{2r-1}) \simeq 0$ としてよいから、

$$\psi_{\max} \simeq \left(\prod_{1 < 2r < n} \left[1 - R_{2r-1} + R_{2r-1}\right], \chi_0\right) = (1, \chi_0) = \chi_0 \tag{19}$$

となり、まったくランダムな状態の固有ベクトル関数になる.

一方,式(18)では、低温の場合、δ*≪1と考えてよい。そうすると、上の場合と同じようにして、

$$\psi_{\max} \simeq \left(\prod_{1 < 2r < n} \left[1 - R_{2r-1} + R_{2r-1}\right], \chi_0^*\right) = (1, \chi_0^*) = \chi_0^* \tag{20}$$

となる. これは完全に整列したときの固有ベクトル関数である.

15 Propagation of Order 秩序の伝搬

スピン配列の秩序とはここでは、J > 0のときの+++・・・+あるいは---・・・のスピン配列を意味していて、その範囲、すなわちスピン反転から次のスピン反転までの距離が秩序長さである.この長さが長距離になると長距離秩序が定着して秩序状態になるのに対して、短いときは、短距離でのみ秩序がある短距離秩序状態で、これが結晶のいたるところで見られる状態が転移温度になる.このような秩序の理解に対して、Onsagerは \overline{V} の固有値 λ との関係、特に、 λ_{max} との関係をこの節で論じている.結論から述べると、 λ_{max} がそれ以下の λ よりも十分大きいとき、秩序状態であり、 λ が λ_{max} に近づいてくるにつれて、秩序長さの短い範囲が結晶中に広がり、非秩序状態になる、ということである.

Onsager は、秩序状態をスピンの秩序化された 2 つの配置が縮退している状態と考え、転移点よりも高い非 縮退の状態から転移点に達して、縮退状態に入る特異点のことを、複素関数の $z^{1/n}$ のような分岐と関係してい ると述べている.さらに、Onsager は、その分岐の縮絨度は式 (O-77)、(O-82)、(O-83) で示した行列表現と 密接に関係している、と述べている。これはこの後で述べる固有値 λ の分布と縮重に関係している。

本節の2番目の文節冒頭は式番号などが乱れていてそのままでは理解するのが難しい. この部分は少し丁寧 な説明が必要である. 前節 [1] の最後で、 λ_{max} は式 (O-93) あるいは式 (O-95) の形で表された. ここで、 λ_{max} よりも小さい固有値 λ がどのように表されるか考えてみよう. \overline{V} の固有値を一般に見出すには式 (O-91a) お よび式 (O-91b)[1] に戻ればよい. この式は、 X_0, \dots, X_n に共通な固有ベクトル関数 χ_0 に作用して、または X_0^*, \dots, X_n^* に共通な固有ベクトル関数 χ_0^* に作用して固有値 λ_{max} をもつが、これをさらに異なる演算子を用 いて相似変換することにより、 λ_{max} と異なる固有値を与える演算子に変形することができる. まず、そのため に、次の「その 9」の式 (O-85) をもう一度利用しよう.

$$e^{i\alpha Z_r} (X_r \cos\beta + Y_r \sin\beta) e^{-i\alpha Z_r} = X_r \cos(2\alpha + \beta) + Y_r \sin(2\alpha + \beta)$$
(21)

さらに,この式の X_r と Y_r を X_r^* と Y_r^* に変換するため,「その 9」の式 (20), (21) を代入し,三角関数の和の 公式を用いると,

$$e^{i\alpha Z_r}(-X_r^*\cos(\omega+\beta)+Y_r^*\sin(\omega+\beta))e^{-i\alpha Z_r} = -X_r^*\cos(2\alpha+\beta+\omega)+Y_r^*\sin(2\alpha+\beta+\omega)$$
(22)

が得られる.式 (21)で、 $\beta = 0$ 、 $\alpha = \pi/2$ とおくと、

$$e^{i\frac{\pi}{2}Z_r} X_r e^{-i\frac{\pi}{2}Z_r} = -X_r$$
(23)

となる.同じように、式 (22) で、 $\beta + \omega = 0$ 、 $\alpha = \pi/2$ とおくと、

$$e^{i\frac{1}{2}\pi Z_r} X_r^* e^{-i\frac{1}{2}\pi Z_r} = -X_r^*$$
(24)

という関係式が得られる. 左右の $e^{i\frac{1}{2}\pi Z_r}$ と $e^{-i\frac{1}{2}\pi Z_r}$ を交換しても成り立つ. これは両式に両側から $e^{-i\frac{1}{2}\pi Z_r}$ と $e^{i\frac{1}{2}\pi Z_r}$ を掛ければすぐわかる. 「その 9」の式 (56) から式 (58) を導いた場合と同じように, この関係式は, X_r および X_r^* が中乗になっても成り立つ. したがって,指数関数にしても成り立つから,式 (23), (24) は次 のようになる.

$$e^{i\frac{1}{2}\pi Z_r} e^{X_r} e^{-i\frac{1}{2}\pi Z_r} = e^{-X_r}$$
(25)

$$e^{i\frac{1}{2}\pi Z_r} e^{X_r^*} e^{-i\frac{1}{2}\pi Z_r} = e^{-X_r^*}$$
(26)

この関係式を式 (O-91a) および式 (O-91b) に応用する。それぞれの式に左から $e^{i\frac{1}{2}\pi Z_s}$, 右から $e^{-i\frac{1}{2}\pi Z_s}$ を掛けると、右辺の X_s と X_s^* の符号が反転する。すなわち、

$$\exp\left(-\sum_{r=1}^{n-1} \frac{1}{2}(\pi - \omega_r - \delta_r^*)iZ_r + \frac{1}{2}\pi iZ_s\right)\overline{V}\exp\left(\sum_{r=1}^{n-1} \frac{1}{2}(\pi - \omega_r - \delta_r^*)iZ_r - \frac{1}{2}\pi iZ_s\right)$$
$$= (2\sinh 2H)^{n/2}\exp\left((H' - H^*)X_0 - \sum_{r=1, r\neq s}^{n-1} \gamma_r X_r + \gamma_s X_s - (H^* + H')X_n\right)$$
(27)

$$\exp\left(\sum_{r=1}^{n-1} \frac{1}{2} \delta_r^* i Z_r + \frac{1}{2} \pi i Z_s\right) \overline{V} \exp\left(-\sum_{r=1}^{n-1} \frac{1}{2} \delta_r^* i Z_r - \frac{1}{2} \pi i Z_s\right)$$
$$= (2 \sinh 2H)^{n/2} \exp\left((H^* - H') X_0^* - \sum_{r=1, r \neq s}^{n-1} \gamma_r X_r^* + \gamma_s X_s^* - (H^* + H') X_n\right)$$
(28)

となる. この操作は相似変換を追加したことと同じである. その結果, この式 (27), (28) と式 (O-91a), (O-91b) を比較して見ると,相似変換する演算子は式 (O-91a) や式 (O-91b) と異なる別の相似変換を施したことになり, かつ,この相似変換は,見方を変えれば, Z_s の係数の $\delta_s^* \in \delta_s^* + \pi$ にしただけということができる. 右辺は式 (27) では式 (O-91b) と比較して, X_s の符号が反転しているので,固有値の ξ_s の符号が反転する. 式 (28) に ついても同様で,相似変換を追加することにより, X_s^* の符号が反転して,固有値の ξ_s^* の符号が反転する. 結 局,「その 9」[1]の式 (66) により,固有値の γ_s の係数は符号反転する. 式 (25), (26) による相似変換の修飾は 0 と n を除く任意の r について独立に可能である. その結果,固有ベクトル関数に χ_0 を用いた場合には,式 (O-93)の r = n を除く各 γ_r の符号は独立に変わることができるので,固有値は一般に

$$\ln \lambda - \frac{1}{2}n\ln(2\sinh 2H) = \begin{cases} \pm \gamma_1 \pm \gamma_3 \pm \dots \pm \gamma_{2m-1}; & (n=2m) \\ \pm \gamma_1 \pm \gamma_3 \pm \dots \pm \gamma_{2m-1} + \frac{1}{2}\gamma_{2m+1}; & (n=2m+1) \end{cases}$$
(O-97)

となる. Onsager は以上のことを,式 (O-96)の $\frac{1}{2}\delta_1^*, \frac{1}{2}\delta_3^*, \cdots$ を $\frac{1}{2}\delta_1^* + \frac{1}{2}\pi, \frac{1}{2}\delta_3^* + \frac{1}{2}\pi, \cdots$ に独立に置き換える と得られる,とのみ述べている.

上の固有値は行列表現が式 (O-77) の場合である. 行列表現が式 (O-82) の場合は, 固有ベクトル関数が奇関 数であり, 最大の固有値に属する固有ベクトル関数は $\chi_0^{(-)*}$ である. このときは, r が偶数の X_r^* のみ 0 でない 固有値を持つから,式 (O-91a) より, r が偶数の γ_r のみが残る.式 (O-91a) に $e^{\frac{1}{2}\pi i Z_r}$ の追加の相似変換を施 して, γ_r の異なる固有値を含めることができる.ただし, ξ_0^* と n が偶数の場合の ξ_n^* は符号反転ができない. $\xi_r^* = -1$ ($r = 0, 2, \dots, n$), $\xi_0 = -\xi_0^* = 1$, $\xi_n = \xi_n^* = -1$ ということと, n が偶数のときは, ($H' - H^*$) と ($H' + H^*$)が入り,奇数のときは ($H' - H^*$)のみになることを考慮すると,式 (O-82) の行列表現に対応する 対角行列の固有値は,

$$\ln \lambda - \frac{1}{2}n\ln(2\sinh 2H) = \begin{cases} (H' - H^*) \pm \gamma_2 \pm \gamma_4 \pm \dots \pm \gamma_{2m-2} + \frac{1}{2}\gamma_{2m}; & (n = 2m) \\ (H' - H^*) \pm \gamma_2 \pm \gamma_4 \pm \dots \pm \gamma_{2m}; & (n = 2m+1) \end{cases}$$
(29)

となる. *n* が偶数の式で, $(H'+H^*)$ となるべきところ, $\gamma_n/2$ になっているのは,「その 9」の式 (71) で述べたように, 双曲余弦定理 (O-89a) より $\gamma_n = 2(H'+H^*)$ となるからである. 一方, r = 0の場合は, $\omega_r = \cos(r\pi/n)$ より $\omega_0 = 0$ であるから, 式 (O-89a) から,

 $\cosh \gamma_0 = \cosh 2H' \cosh 2H^* - \sinh 2H' \sinh 2H^* \cos \omega_0 = \cosh(2H' - 2H^*) \tag{30}$

であるから、 $\gamma_0 = 2|H' - H^*|$ となり、H'と H^* の大小関係に依存する.

式 (29) の 0 < r < 2m +1 の和は, $\gamma_{n+r} = \gamma_{n-r}$ の関係を用いると, 0 < r < 2n - 2 までの和の 1/2 に r = 0 の項を加えることにより, n が偶数と奇数とに関わらず 1 つの書き方で表すことができる. すなわち,

$$\ln \lambda_{\max}^{(-)} - \frac{1}{2}n\ln(2\sinh 2H) = (H' - H^*) + \frac{1}{2}\sum_{r=1}^{n-1}\gamma_{2r}$$
(O-99-1)

となる. γ_0 を用いることにすれば、 $H' - H^* = |H' - H^*| \operatorname{sgn}(H' - H^*) = \frac{1}{2}\gamma_0 \operatorname{sgn}(H' - H^*)$ であるから、

$$\ln \lambda_{\max}^{(-)} - \frac{1}{2}n\ln(2\sinh 2H) = \frac{1}{2}\left(\gamma_0 \operatorname{sgn}\left(H' - H^*\right) + \sum_{r=1}^{n-1}\gamma_{2r}\right)$$
(O-99-2)

と表される.これで、奇関数の固有ベクトル関数 χ_0^* の場合の最大固有値 $\ln \lambda_{\max}^{(-)}$ が得られた.

次に, 偶関数の場合の $\ln \lambda_{\text{max}}$ (「その 9」の式 (O-93-1))と奇関数の場合の $\ln \lambda_{\text{max}}^{(-)}$ (式 (O-99-1))を比較 してみよう.

$$\ln \lambda_{\max}^{(-)} - \ln \lambda_{\max} = \begin{cases} \frac{1}{2}(\gamma_0 + \gamma_2 + \dots + \gamma_{2n-2}) - \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_3 + \dots + \gamma_{2n-1}) & H' > H^* \\ -\gamma_0 + \frac{1}{2}(\gamma_0 + \gamma_2 + \dots + \gamma_{2n-2}) - \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_3 + \dots + \gamma_{2n-1}) & H' < H^* \end{cases}$$
(31)

このように、 $\ln \lambda_{\max}^{(-)} - \ln \lambda_{\max}$ が H' と H* の大小関係に応じて異なる表現になるのは式 (O-99-2) で γ_0 の符 号が H' と H* に依存するからである. nが十分大きいときは、 $\sum \gamma_{2r-2}$ と $\sum \gamma_{2r-1}$ は $\gamma_r = \gamma(r\pi/n) = \gamma(\omega)$ という関数に置き換えると、数値積分の台形公式と同じで、

$$\sum_{r=1}^{n-1} \gamma_{2m-2} = \sum_{r=1}^{n-1} \gamma\left(\frac{2(r-1)\pi}{n}\right) = \frac{n}{2\pi} \sum_{r=1}^{n-1} \gamma\left(\frac{2(r-1)\pi}{n}\right) \frac{2\pi}{n} \simeq \frac{n}{2\pi} \int_{2\pi/n}^{2\pi(n-1)/n} \gamma(\omega) \,\mathrm{d}\omega \simeq \frac{n}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \gamma(\omega) \,\mathrm{d}\omega$$
(32)

となるから,式 (31) の $H' > H^*$ の場合は $\gamma_0 + \gamma_2 + \cdots + \gamma_{2n-2}$ と $\gamma_1 + \gamma_3 + \cdots + \gamma_{2n-1}$ の差はなくなる.した がって, $\ln \lambda_{\max}^{(-)} - \ln \lambda_{\max} = 0$ となる.一方, $H' < H^*$ の場合, $-\gamma_0 = 2(H' - H^*)$ であるから, $2(H' - H^*)$ が残る.結局,

$$\lim_{n \to \infty} \left(\lambda_{\max}^{(-)} / \lambda_{\max} \right) = \begin{cases} 1; & H' > H^* \\ \exp(2H' - 2H^*); & H' < H^* \end{cases}$$
(O-101)

という結果を得る4.

⁴原論文ではこの式に一部ミスプリントがある.

 $\ln \lambda$ には γ_r が含まれ、 γ_1 から γ_{n-1} は ± 両方の符号を取り得るので、固有値の数は $2^{(n-1)/2}$ オーダーになる. $\ln \lambda_{\max}$ にはすでに γ_r が入っているので、 γ_r の符号がマイナスの場合の $\ln \lambda$ は $\ln \lambda_{\max} - 2\gamma_r$ となる. そうすると、論文に記載されているように、式 (O-77) や式 (O-82) の行列表現に属する固有値はそれぞれ、

$$\ln \lambda_{\max} - 2\gamma_1, \ \ln \lambda_{\max} - 2\gamma_3, \ \ln \lambda_{\max} - 2\gamma_5, \ \cdots, \ \ln \lambda_{\max} - 2\gamma_1 - 2\gamma_3, \ \cdots$$
(33)

$$\ln \lambda_{\max}^{(-)} - 2\gamma_2, \ \ln \lambda_{\max}^{(-)} - 2\gamma_4, \ \ln \lambda_{\max}^{(-)} - 2\gamma_6, \ \cdots, \ \ln \lambda_{\max}^{(-)} - 2\gamma_2 - 2\gamma_4 \cdots$$
(34)

などとなることがわかる. Onsager は n が大きくなると、この固有値の分布が密 (dense) になると記している. これは γ_{2r+1} と γ_{2r-1} の差が小さくなるからである. これは図 1 などから直感的にもわかるが、偶関数の場合、

$$\sinh\frac{\gamma_{2r+1} - \gamma_{2r-1}}{2} = \sinh^{-1}\frac{\gamma_{2r+1} + \gamma_{2r-1}}{2}\sinh 2H'\sinh 2H^*\sin\frac{2r\pi}{n}\sin\frac{\pi}{n}$$
(35)

となるので, n が大きいときは

$$\gamma_{2r+1} - \gamma_{2r-1} < \sinh^{-1}(2H' + 2H^*) \sinh 2H' \sinh 2H^* \frac{2\pi}{n}$$
(36)

とすることができるので、 $\gamma_{2r+1} - \gamma_{2r-1}$ は π/n に比例して小さくなり、nが十分大きければ微小量になる.

 γ_{2r+1} は単調増加する. したがって, $\ln \lambda_{\max} - 2\gamma_1 \circ \gamma_1 \circ \gamma_3$ で置き換えれば $\ln \lambda$ は微小量減少し,次は $\gamma_3 \circ \gamma_5$ で置き換えというふうに順次進めてゆけば, $\ln \lambda$ は, $\ln \lambda_{\max} - 2\gamma_1$ を上限として, $\ln \lambda_{\max} - 2\gamma_1$ から $\ln \lambda_{\max} - 2\gamma_{2m-1}$ まで, 微小量ずつ単調に減少するので, 固有値 λ は密に分布していることがわかる.

奇関数の場合も,式 (34) から, $\ln \lambda_{\max}^{(-)} - 2\gamma_2$ を上限として, $\ln \lambda_{\max}^{(-)} - 2\gamma_2$ から $\ln \lambda_{\max} - 2\gamma_{2m-2}$ まで $\ln \lambda$ は密に分布していることがわかる.

 $H' > H^*$ の場合, $\ln \lambda_{\max} = \ln \lambda_{\max}^{(-)}$ であるから, $\ln \lambda_{\max}^{(-)} \ge \ln \lambda$ の上限, すなわち $\ln \lambda_{\max} - 2\gamma_1$ および $\ln \lambda_{\max}^{(-)} - 2\gamma_2$ の間には $2\gamma_1(\simeq 2\gamma_2)$ のギャップがある.

 $H' = H^*$ の場合は転移点である.このことはすでに「その3」[4] で述べた.このとき、 $\gamma_0 = 0$ である.したがって、 $\gamma_1 や \gamma_2$ も微小量となり、連続的に分布する λ の上極限は $\ln \lambda_{\max}^{(-)}$ になる.

 $H' < H^*$ の場合は、 $\ln \lambda_{\max} > \ln \lambda_{\max}^{(-)}$ で、 $2(H^* - H') = \gamma_0$ のギャップがある. つまり、奇関数の場合の 最大値 $\ln \lambda_{\max}^{(-)}$ は $H' > H^*$ のときの $\ln \lambda_{\max}^{(-)}$ よりも γ_0 だけ小さい. あるいは、 $\ln \lambda_{\max}$ よりも γ_0 だけ小さい. 偶関数の場合の $\ln \lambda$ は $\ln \lambda_{\max} - 2\gamma_1$ を上限としているから、連続帯の上限と $\ln \lambda_{\max}^{(-)}$ の差は $\gamma_0 - 2\gamma_1$ である. つまり、 $\ln \lambda_{\max}^{(-)}$ と連続帯との間には $\gamma_0 - 2\gamma_1 \simeq \gamma_1$ のギャップがある.

つまり, $H' \neq H^*$ であれば, $\ln \lambda$ 連続帯と $\ln \lambda_{max}$ または $\ln \lambda_{max}^{(-)}$ の間には有限のギャップがある. では常に ギャップが存在するかというと,そうではない.その例として,式(O-83b)で行列表現されたときの式(O-83a) の固有ベクトル関数の固有値の場合,すなわち $\ln \lambda$ があげられる. この場合は上の2つの場合と少し異なる. 奇関数の場合の式(O-82)と比較して異なる点は, $\xi_0 = -1$ であること,それから式(O-83a)で定義される2r に相当する既約表現がないので, $\xi_{2r} = 0$ であることで,それ以外の点は上で述べた奇関数の場合と同じであ る.この場合の最大の $\ln \lambda$ は X_0 の固有値の係数として($H^* - H'$)をもつこと,すなわち, $H' < H^*$ ののと きの $\ln \lambda_{max}^{(-)}$ の場合よりも2($H^* - H'$) = γ_0 だけ大きいことに注意すると,

$$\ln \lambda = \ln \lambda_{\max}^{(-)} + \gamma_0 - \gamma_{2r} \tag{O-102}$$

となることがわかる.ここで、2r が小さい場合、 $\gamma_0 - \gamma_{2r}$ は無限小になり得る.つまり、 $\ln \lambda$ は式 (O-83a)の 一連の固有ベクトル関数をもとに連続帯を形成し、 $\ln \lambda_{\max}^{(-)}$ がその上極限となることがわかる.

以上の固有値の上限と連続帯の関係をまとめると次の式 (O-103) になる.

$$\lambda_{\max} = \lambda_{\max}^{(-)} > (連続 \lambda \mathcal{O} \bot 極限); \quad (H' > H^*)$$

$$\lambda_{\max} = \lambda_{\max}^{(-)} = (連続 \lambda \mathcal{O} \bot 極限); \quad (H' = H^*)$$

$$\lambda_{\max} > \lambda_{\max}^{(-)} = (連続 \lambda \mathcal{O} \bot 極限); \quad (H' < H^*)$$
(O-103)

転移点よりも低温では、すなわち $H' > H^*$ では、2 重に「縮退している」とOnsager は記している。通常は 磁場の向き (0 磁場であっても)に対してスピンが正の方向に揃った場合と負の方向に揃った場合の2つを考え る.いまの場合は、 $\lambda_{max}^{(-)}$ が下側から λ_{max} に漸近し、転移点で一致することを指しているようである。それが長 距離秩序がみなぎることの兆候である。転移点以上では、最大固有値つまり主固有値 (principal characteristic number)に縮退はなく、転移点で数多くの固有ベクトル関数の状態が最大固有値の固有関数に漸近していくと Onsager は述べている。さらに、連続に固有値が分布しているからここでは無限次元の縮退としている。この 辺の記述も、どちらかと言えば量子力学の概念との混同があるような気がする。

* * * * *

最後に、この節のタイトル「秩序の伝搬」に関する内容が述べられている。Onsager は秩序が乱れる長さ、 つまり β を定義して、具体的な定義がないものの、 $\ln(\lambda_{max}/\lambda)$ に反比例すると述べている。このことと、式 (O-102) から、

$$\frac{1}{\beta} = \ln \frac{\lambda_{\max}^{(-)}}{\lambda} = \gamma_{2r} - \gamma_0 \tag{37}$$

としよう. Onsager はこの β の異方性について述べている. 異方性は $H \ge H'$ の差から生じる. 極端な場合, $H \gg H'$ なら tier 方向に早く秩序が伝搬すると考えられる. つまり, β が最大となる方向を φ とすると, その ときは $\varphi \simeq 0$ となるであろう. 逆に, $H \ll H'$ なら層と直角方向に秩序が揃うと考えられるから, $\varphi \simeq \pm \pi/2$ となるであろう. それ以外の一般の場合について, Onsager は tentative な計算と断りつつ, 次の式をあげて いる.

$$\cosh 2H \cosh 2H' - \sinh 2H \cosh(\beta \sin \varphi) - \sinh 2H' \cosh(\beta \cos \varphi) = 0 \tag{O-104}$$

この式の根拠や φ , β の数学的な定義は十分ではない.この式は今のところまだ導出できない.しかし,次のように考えることができる.双曲余弦定理 (O-89a) から

$$\cosh 2H' \cosh 2H^* - \sinh 2H' \sinh 2H^* \cos_{2r} - \cosh \gamma_{2r} = 0, \tag{38}$$

これに式 (O-17) の $\cosh 2H^* = \cosh 2H \sinh 2H^*$ を代入すると,

$$\cosh 2H' \cosh 2H \sinh 2H^* - \sinh 2H' \sinh 2H^* \cos_{2r} - \cosh \gamma_{2r} = 0, \tag{39}$$

これに式 (O-17) の $\sinh 2H^* = 1/\sinh 2H$ を代入すると,

$$\cosh 2H' \cosh 2H - \sinh 2H' \cos \omega_{2r} - \sinh 2H \cosh \gamma_{2r} = 0 \tag{40}$$

となる. ここで,式 (O-104) と一致するには, $\gamma_{2r} = \beta \sin \varphi$ でなければならないが,そうすると ω_{2r} は複素数 でなければならない. この部分は定義が不十分でもあるし,Onsager も tentative と断っているので,若干の 修正が必要になるかもしれないので,これ以上関わるのは止めることにしよう.

* * * * *

次は、分配関数の解析的な式を具体的に導くことになる.

参考文献

[1] 「その9」(2017/12/7のエントリー).
 http://totoha.web.fc2.com/Onsager_paper9.pdf

- [2] 「その8」(2017/12/2のエントリー). http://totoha.web.fc2.com/Onsager_paper8.pdf
- [3] 「その1」(2017/8/7のエントリー). http://totoha.web.fc2.com/Onsager_paper9.pdf
- [4] 「その3」(2017/10/5のエントリー). http://totoha.web.fc2.com/Onsager_paper9.pdf
- [5] 「双曲面幾何 その 2」(2017/2/10のエントリー). http://totoha.web.fc2.com/Hyperboloid_geo_2.pdf
- [6] 「双曲余弦定理の補足」(2017/3/23のエントリー). http://totoha.web.fc2.com/Hyperboloid.geo_S.pdf

付録

以下は Fig.5(図 2) の δ^* - ω のグラフを計算するための C プログラムである.

```
/* delta_star_omega.c */
/* M. Suzuki 2017.12.11 */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
double atanh(double y)
{
    double z;
    if(fabs(y)>0.999) return 1.0e99;
    z=(1+y)/(1-y);
    return 0.5*log(z);
}
int main(int argc, char *argv[])
{
    FILE *fp;
    char *filename[8]={"delta_star_omega_5.txt", "delta_star_omega_15.txt",
                       "delta_star_omega_30.txt", "delta_star_omega_42.txt",
                       "delta_star_omega_45.txt", "delta_star_omega_48.txt",
                       "delta_star_omega_66.txt", "delta_star_omega_77.txt"};
    int i, j, n;
    double deg, domega, omega, pi;
    double H, Hstar, delta;
    double x, y, z;
    double gd2H[8]={5,15,30,42,45,48,66,77};
```

```
n=200;
pi=M_PI;
deg=pi/180;
domega=pi/n;
for(i=0;i<8;i++){</pre>
    x=gd2H[i]*deg;
    y=tan(x/2);
    H=2*atanh(y);
    x=(90-gd2H[i])*deg;
    y=tan(x/2);
    Hstar=2*atanh(y);
    fp=fopen(filename[i], "w");
    printf("delta* %lf\n", delta);
    for(j=1;j<n;j++)</pre>
    {
        omega=j*domega;
        z=(sinh(H)/tanh(Hstar)-cosh(H)*cos(omega))/sin(omega);
        delta=atan(1/z);
        if(z<0) delta+=pi;</pre>
        printf("%lf\t%lf\n", omega, delta);
        fprintf(fp, "%lf\t%lf\n", omega, delta);
    }
    fclose(fp);
}
```

}