Onsager の 2 次元イジングモデル厳密解の論文を読む　その 11

2018.1.25　　鈴木　実

16　THERMODYNAMIC PROPERTIES OF A LARGE CRYSTAL　大きな結晶の熱力学的性質

この節から分配関数の解析的な数式を具体的に計算する．表題で LARGE を大きなとしているのは，n が無限大とみなせるほど十分大きいという意味である．

＊　＊　＊　＊　＊

1 スピン当りの分配関数 λ_∞ は

$$\lambda = \lambda_\infty = \lim_{n=\infty} (\lambda_{\max})^{1/n} \tag{O-105}$$

で与えられる．「その 9」[1] の式 (O-95) の $\lambda_{\max}$ は，偶の固有ベクトル関数で与えられる最大の固有値，つまり表現 (O-77) の最大の固有値である．式 (O-95) は γ_{2r-1} の和になっているが，n が十分大きいときは，「その 10」[2] の式 (32) のように積分で置き換えることができる．そうすると，式 (O-95),「その 10」の式 (32)，および式 (O-105) より，

$$\ln \lambda_\infty = \frac{1}{2}\ln(2\sinh 2H) + \frac{1}{2\pi}\int_0^\pi \gamma(\omega)\mathrm{d}\omega \tag{O-106}$$

となる．$\gamma(\omega)$ は「その 9」[1] の双曲余弦定理 (O-89a) から，

$$\cosh\gamma(\omega) = \cosh 2H' \cosh 2H^* - \sinh 2H' \sinh 2H^* \cos\omega \tag{1}$$

である．ただし，$\gamma(\omega)$ はもともと γ_r であったものを n が十分大きいとして $\omega_r = r\pi/n$ を連続変数にしたものである．式 (O-106) は H と H' に関して対称である．式 (1) を用いて式 (O-106) の $\gamma(\omega)$ を消去することを考えよう．そのために，Onsager は次の式を利用した（この関係式は脚注のようにして導かれる[1]）．

$$\int_0^{2\pi} \ln(2\cosh x - 2\cos\omega)\mathrm{d}\omega = 2\pi x \tag{O-107}$$

式 (O-107) で $x = \gamma(\omega')$ とおき，0 から π まで ω' で積分すると，

$$\int_0^\pi \int_0^\pi \ln(2\cosh\gamma(\omega') - 2\cos\omega)\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega' = \pi\int_0^\pi \gamma(\omega')\,\mathrm{d}\omega' \tag{2}$$

となる[2]．これに式 (1) を代入して，

$$\pi\int_0^\pi \gamma(\omega')\,\mathrm{d}\omega' = \int_0^\pi\int_0^\pi \ln(2\cosh 2H'\cosh 2H^* - 2\sinh 2H'\sinh 2H^*\cos\omega' - 2\cos\omega)\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega' \tag{3}$$

[1] この式は，次の積分公式（[3] の p.260）を用いて得ることができる．

$$\int_0^\pi \ln(a + b\cos x)\mathrm{d}x = \pi\ln\frac{a+\sqrt{a^2-b^2}}{2}, \qquad (a \geq |b|)$$

被積分関数は $x=\pi$ で対称であるから，積分区間を 0 から 2π に拡大して右辺を 2 倍し，さらに，x を ω とし，$a = 2\cosh x$，$b=-2$ を代入すると，

$$\int_0^{2\pi} \ln(2\cosh x - 2\cos\omega)\,\mathrm{d}\omega = 2\pi\ln\frac{2\cosh x + 2\sinh x}{2} = 2\pi x$$

となり，式 (O-107) が得られる．

[2] 式 (O-107) は，積分範囲を $0\sim\pi$ と $\pi\sim 2\pi$ に分けて，後者で，$2\pi-\omega$ を θ と置き換えると，

$$\int_\pi^{2\pi} \ln(2\cosh x - 2\cos\omega)\mathrm{d}\omega = -\int_\pi^0 \ln(2\cosh x - 2\cos\theta)\mathrm{d}\theta = \int_0^\pi \ln(2\cosh x - 2\cos\theta)\mathrm{d}\theta$$

となるので，

$$\int_0^\pi \ln(2\cosh x - 2\cos\omega)\mathrm{d}\omega = \pi x$$

とすることができる．

となる．式 (O-17) の $\tanh 2H\ \cosh 2H^* = 1$ から $\cosh 2H^* = \cosh 2H \sinh 2H^*$ となるので，これを代入して

$$\pi \int_0^\pi \gamma(\omega')\ \mathrm{d}\omega' = \int_0^\pi \int_0^\pi \ln(2\cosh 2H' \cosh 2H \sinh 2H^* - 2\sinh 2H' \sinh 2H^* \cos\omega' - 2\cos\omega)\mathrm{d}\omega \mathrm{d}\omega'$$

となる．同じく，式 (O-17) から $\sinh 2H^* = 1/\sinh 2H$ となるので，これを代入して

$$\begin{aligned}\pi \int_0^\pi \gamma(\omega')\ \mathrm{d}\omega' &= \int_0^\pi \int_0^\pi \ln \frac{2}{\sinh 2H}(\cosh 2H' \cosh 2H - \sinh 2H' \cos\omega' - \sinh 2H \cos\omega)\mathrm{d}\omega \mathrm{d}\omega' \\ &= -\pi^2 \ln \frac{\sinh 2H}{2} + \int_0^\pi \int_0^\pi \ln(\cosh 2H' \cosh 2H - \sinh 2H' \cos\omega' - \sinh 2H \cos\omega)\mathrm{d}\omega \mathrm{d}\omega'\end{aligned}$$

となる．したがって，これを式 (O-106) に代入すると，

$$\begin{aligned}\ln \lambda_\infty &= \frac{1}{2}\ln(2\sinh 2H) + \frac{1}{2\pi}\int_0^\pi \gamma(\omega)\mathrm{d}\omega \\ &= \frac{1}{2}\ln(2\sinh 2H) - \frac{1}{2}\ln\frac{\sinh 2H}{2} \\ &\qquad + \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi \int_0^\pi \ln(\cosh 2H' \cosh 2H - \sinh 2H' \cos\omega' - \sinh 2H \cos\omega)\mathrm{d}\omega \mathrm{d}\omega' \\ &= \ln 2 + \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi \int_0^\pi \ln(\cosh 2H' \cosh 2H - \sinh 2H' \cos\omega' - \sinh 2H \cos\omega)\mathrm{d}\omega \mathrm{d}\omega' \qquad (4)\end{aligned}$$

となる．したがって，λ_∞ を λ と書き換えて，

$$\ln \frac{\lambda}{2} = \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi \int_0^\pi \ln(\cosh 2H' \cosh 2H - \sinh 2H' \cos\omega' - \sinh 2H \cos\omega)\mathrm{d}\omega \mathrm{d}\omega' \qquad \text{(O-108)}$$

となる．

* * * * *

つづいて，分配関数の展開式表示を求めておこう．これは先に Kramers-Wannier [4] が求めていたもので，式 (O-108) から得ることができる．

$2H$ と $2H'$ の代わりに，次のようなパラメータ κ と κ' を導入しよう．

$$\begin{aligned}2\kappa &= \frac{\tanh 2H}{\cosh 2H'} = \sin g \cos g' \\ 2\kappa' &= \frac{\tanh 2H'}{\cosh 2H} = \cos g \sin g'\end{aligned} \qquad \text{(O-109a)}$$

ここで，gd はグーデルマン関数（「その 1」[5]，あるいは APPENDIX の式 (O-2.3)）で，g および g' をそれぞれ，

$$g = \mathrm{gd}\ 2H \qquad (5)$$

$$g' = \mathrm{gd}\ 2H' \qquad (6)$$

とおくと，定義により，

$$\sin g = \tanh 2H \qquad (7)$$

$$\cos g' = \ \mathrm{sech}\ 2H' \qquad (8)$$

である．

まず，式 (O-108) から，

$$
\begin{aligned}
\ln\frac{\lambda}{2} &= \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi\int_0^\pi \ln\left[\cosh 2H'\cosh 2H(1-\frac{\tanh 2H'}{\cosh 2H}\cos\omega' - \frac{\tanh 2H}{\cosh 2H'}\cos\omega)\right]\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega' \\
&= \frac{1}{2}\ln(\cosh 2H'\cosh 2H) + \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi\int_0^\pi \ln(1-2\kappa'\cos\omega' - 2\kappa\cos\omega)\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega' \qquad \text{(O-109b-1)}
\end{aligned}
$$

である．これから，

$$
\ln\lambda - \frac{1}{2}\ln(4\cosh 2H\cosh 2H') = \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi\int_0^\pi \ln(1-2\kappa\cos\omega - 2\kappa'\cos\omega')\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega' \qquad (9)
$$

となる．ここで，

$$
\ln(1-2\kappa\cos\omega - 2\kappa'\cos\omega') = -\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}(2\kappa\cos\omega + 2\kappa'\cos\omega')^n \qquad (10)
$$

であるから[3]，

$$
\int_0^\pi\int_0^\pi \ln(1-2\kappa\cos\omega - 2\kappa'\cos\omega')\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega' = -\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}\int_0^\pi\int_0^\pi(2\kappa\cos\omega + 2\kappa'\cos\omega')^n\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega' \qquad (11)
$$

となる．この式の右辺で，$\cos\omega$ と $\cos\omega'$ の奇数次の項は積分して 0 になる．すなわち，両者とも偶数次のときのみ 0 でない．したがって，n は偶数のときのみ積分は 0 でない．そこで，$n = 2r + 2s$ としよう．そうすると，右辺の積分は，

$$
\int_0^\pi\int_0^\pi(2\kappa\cos\omega + 2\kappa'\cos\omega')^n\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega' = \sum_{r=0}^{n/2}\binom{2r+2s}{2r}\int_0^\pi\int_0^\pi(2\kappa)^{2r}\cos^{2r}\omega(2\kappa')^{2s}\cos^{2s}\omega\,\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega' \qquad (12)
$$

となる．ここで，次の積分公式（[3] の p.244）を用いる．

$$
\int_0^\pi \cos^n x\mathrm{d}x = \frac{(n-1)!!}{n!!}\pi \qquad (13)
$$

n を $2n$ に置き換えると，

$$
\int_0^\pi \cos^{2n} x = \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}\pi = \frac{(2n)!}{[\,(2n)!!\,]^2}\pi = \frac{(2n)!}{(n!)^2 2^{2n}}\pi = \binom{2n}{n}\frac{\pi}{2^{2n}} \qquad (14)
$$

となる[4]．これを式 (12) に適用すると，

$$
\begin{aligned}
\int_0^\pi\int_0^\pi(2\kappa\cos\omega + 2\kappa'\cos\omega')^n\,\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega' &= \sum_{r=0}^{n/2}\binom{2r+2s}{2r}2^{2r+2s}\kappa^{2r}\kappa'^{2s}\binom{2r}{r}\binom{2s}{s}\frac{\pi^2}{2^{2r}2^{2s}} \\
&= \pi^2\sum_{r=0}^{\infty}\frac{(2r+2s)!}{(r!)^2(s!)^2}\kappa^{2r}\kappa'^{2s} \qquad (15)
\end{aligned}
$$

この結果を式 (11) に代入し，それを式 (9) に代入することによって，

$$
\ln\lambda - \frac{1}{2}\ln(4\cosh 2H\cosh 2H') = -\frac{1}{2}\sum_{r=0}^{n/2}\frac{(2r+2s-1)!}{(r!)^2(s!)^2}\kappa^{2r}\kappa'^{2s} \qquad \text{(O-109b-2)}
$$

---

[3] $\ln(1-x)$ を以下のようにテイラー展開する．

$$
\ln(1-x) = -x - \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{3} - \cdots = -\sum_{n=1}^{\infty}\frac{x^n}{n}
$$

[4] 二重階乗

$$
n!! = \begin{cases} n(n-2)\cdots 3\cdot 1 & n:\mathrm{odd} \\ n(n-2)\cdots 4\cdot 2 & n:\mathrm{even} \end{cases}
$$

となる．

正方格子の場合，$H=H'$，$\kappa=\kappa'$ となるから，

$$\begin{aligned}\ln\lambda-\ln(2\cosh 2H)&=\frac{1}{2\pi^2}\int_0^{\pi}\int_0^{\pi}\ln(1-2\kappa\cos\omega-2\kappa\cos\omega')\,\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega'\\&=\frac{1}{2\pi^2}\int_0^{\pi}\int_0^{\pi}\ln(1-4\kappa\cos\frac{\omega+\omega'}{2}\cos\frac{\omega-\omega'}{2})\,\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega'\end{aligned}\tag{16}$$

となる．この式で，$\omega_1=(\omega+\omega')/2$，$\omega_2=(\omega'-\omega)/2$ とおくと，

$$\ln\lambda-\ln(2\cosh 2H)=\frac{1}{2\pi^2}\int_0^{\pi}\int_0^{\pi}\ln(1-4\kappa\cos\omega_1\cos\omega 2)\,\mathrm{d}\omega_1\mathrm{d}\omega_2\tag{O-109c-1}$$

である[5]．対数を展開すると，$\cos^n\omega_1\cos^n\omega_2$ の項が出てくるが，これらの項は n が奇数のときは積分して 0 になる．したがって，偶数の n で展開しても構わない．そうすると，

$$\begin{aligned}I&=\int_0^{\pi}\int_0^{\pi}\ln(1-4\kappa\cos\omega_1\cos\omega 2)\,\mathrm{d}\omega_1\mathrm{d}\omega_2\\&=-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{2n}\int_0^{\pi}\int_0^{\pi}(4\kappa)^{2n}\cos^{2n}\omega_1\cos^{2n}\omega_2\,\mathrm{d}\omega_1\mathrm{d}\omega_2\end{aligned}\tag{17}$$

となる．式 (16) を適用すると，

$$\begin{aligned}&=-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{2n}\left(\frac{(2n)!\pi}{2^{2n}(n!)^2}\right)^2(4\kappa)^{2n}\\&=-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{2n}\binom{2n}{n}^2\pi^2\kappa^{2n}\end{aligned}\tag{18}$$

となる．これを式 (O-109c-1) に代入すると，

$$\ln\lambda-\ln(2\cosh 2H)=-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{4n}\binom{2n}{n}^2\kappa^{2n}\tag{O-109c-2}$$

となる．この式を次のような対数を用いた展開式に展開する．

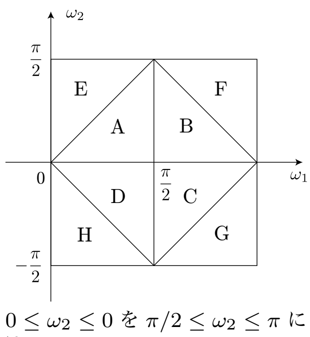
$$\ln\lambda-\ln(2\cosh 2H)=\ln(1-a_2\kappa^2-a_4\kappa^4-a_6\kappa^6-a_8\kappa^8-\cdots)\tag{19}$$

$$=-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}(a_2\kappa^2+a_4\kappa^4+a_6\kappa^6+a_8\kappa^8+\cdots)^n\tag{20}$$

---

[5] ここの部分は気にしなければこの式が結果的に導かれるが，次のような段階を経て導出される．ω，ω から $\omega_1=(\omega+\omega')/2$，$\omega_2=(\omega'-\omega)/2$ へ変数変換すると，ヤコビアンが 2 で，積分 I は，

$$I=2\iint_{0\le\omega_1-\omega_2\le\pi,\ 0\le\omega_1+\omega_2\le\pi}\ln\left(1-4\kappa\cos\omega_1\cos\omega 2\right)\mathrm{d}\omega_1\mathrm{d}\omega_2$$



である．積分範囲は，ω_1 と ω_2 はそれぞれ独立ではない．被積分関数を見ると，$\omega_2=\omega_1\pm l\pi$，および $\omega_2=-\omega_1\pm m\pi$ に関して対称である．これに注意して，積分範囲を拡張して，ω_1 と ω_2 に関して独立にしたい．この積分範囲のうち，$0\le\omega_1\le\pi/2$, $0\le\omega_2\le\omega_1$ は，$\omega_2=\omega_1$ を対称軸として，$0\le\omega_2\le\pi/2$, $\omega_1\le\omega_2\le\pi/2$ に反映する．これは図でいうと，A と E が対称であることを示す．つまり，積分範囲 A と積分範囲 E は同じ積分値を与える．したがって，A と E を積分範囲とする積分は A を積分範囲とする積分値の 1/2 である．同様に，B と F，C と G，D と H が同じ対称関係にある．したがって，もともとの積分範囲 A+B+C+D は A+B+C+D+E+F+G+H，すなわち $0\le\omega\le\pi/2$, $-\pi/2\le\omega_2\le\pi/2$ の 2 倍である．したがって，積分範囲を後者にして係数 1/2 を掛ければよい．

また，n が偶数のときは，$\omega_2+\pi$ を ω_2 に変換しても積分値は変わらない．したがって，積分範囲の $0\le\omega_2\le 0$ を $\pi/2\le\omega_2\le\pi$ に移動してもよい．これにより，全体の積分範囲を $0\le\omega_1$，$\omega_2\le\pi/2$ にすることができる．結局，積分は，

$$I=\int_0^{\pi}\int_0^{\pi}\ln\left(1-4\kappa\cos\omega_1\cos\omega 2\right)\mathrm{d}\omega_1\mathrm{d}\omega_2$$

となる．

この式と式 (O-109c-2) と κ^{2n} の係数を比較することにより，

$$\ln\lambda - \ln(2\cosh 2H) = \ln(1-\kappa^2-4\kappa^4-29\kappa^6-265\kappa^8-2745\kappa^{10}-30773\kappa^{12}-364315\kappa^{14}-\cdots) \tag{21}$$

という展開式が得られる[6]．この展開式は任意の温度で収束する．なぜなら，式 (12) より，

$$|2\kappa\cos\omega+2\kappa'\cos\omega'| \leq 2\kappa+2\kappa' = \sin g\cos g'+\cos g\sin g' = \sin(g+g') \leq 1 \tag{22}$$

となるからである．転移点近傍では収束が悪い．

* * * * *

熱力学的な性質を表す計算可能な数式を導く前に，これらの物理量を，H，H'，H^*，γ などで表す必要がある．特に温度に関する偏微分は H および H' に関する偏微分に変換しておくと都合がよい．最初はそうした数学的な準備である．

---

[6]具体的には次の計算をする．κ^2 の係数を比較することにより，

$$a_2 = 1,$$

κ^4 の係数を比較することにより，

$$a_4 + \frac{1}{2}a_2^2 = \frac{9}{2},$$

となる．これから，

$$a_4 = 4,$$

κ^6 の係数を比較することにより，

$$a_6 + \frac{1}{2}(2a_2a_4) + \frac{1}{3}a_2^3 = \frac{100}{3},$$

となる．これから，

$$a_6 = 29,$$

κ^8 の係数を比較することにより，

$$a_8 + \frac{1}{2}(2a_2a_6 + a_4^2) + \frac{1}{3}3a_2^2a4 + \frac{1}{4}a_2^4 = \frac{1225}{4},$$

となる．これから，

$$a_8 = 265,$$

κ^{10} の係数を比較することにより，

$$a_{10} + \frac{1}{2}(2a_2a_8 + 2a_4a_6) + \frac{1}{3}(3a_2^2a6 + 3a_2a_4^2) + \frac{1}{4}4a_2^3a_4 + \frac{1}{5}a_2^5 = \frac{15876}{5},$$

となる．これから，

$$a_{10} = 2745,$$

κ^{12} の係数を比較することにより，

$$a_{12} + \frac{1}{2}(2a_2a_{10} + 2a_4a_8 + a_6^2) + \frac{1}{3}(3a_2^2a8 + 6a_2a_4a_6 + a_4^3) + \frac{1}{4}(4a_2^3a_6 + 6a_2^2a_4^2) + \frac{1}{5}5a_2^4a_4 + \frac{1}{6}a_2^6 = 35574,$$

となる．これから，

$$a_{12} = 30773,$$

κ^{14} の係数を比較することにより，

$$a_{14} + \frac{1}{2}(2a_2a_{12} + 2a_4a_{10} + 2a_6a_8) + \frac{1}{3}(3a_2^2a_{10} + 6a_2a_4a_8 + 3a_2a_6^2 + 3a_4^2a_6) + \frac{1}{4}(4a_2^3a_8 + 12a_2^2a_4a_6 + 4a_2a_4^3) + \frac{1}{5}(5a_2^4a_6 + 10a_2^3a_4^2)$$
$$+ \frac{1}{6}6a_2^5a_4 + \frac{1}{7}a_2^7 = \frac{2944656}{7},$$

となる．これから，

$$a_{14} = 364315$$

という結果が得られる．

$\ln\lambda$ がスピン１個当りの分配関数であることに注意すると，ヘルムホルツの自由エネルギー F，エネルギー（内部エネルギー）U，比熱 C は原子数 N 個の場合，

$$
\begin{aligned}
F &= U - TS = -Nk_\mathrm{B}T\ln\lambda \\
U &= F - T\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}T} = Nk_\mathrm{B}T^2\frac{\mathrm{d}(\ln\lambda)}{\mathrm{d}T} \\
C &= \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}T}
\end{aligned}
\tag{O-110}
$$

となり，$\ln\lambda$ の T による偏微分で表される．以下では $\ln\lambda$ の T による偏微分を $H = J/k_\mathrm{B}T = J\beta$ と $H' = J'/k_\mathrm{B}T = J'\beta$ に関する偏微分で表す．$\beta = 1/k_\mathrm{B}T$ は逆温度である．そうすると，

$$
\begin{aligned}
U &= -\frac{\partial(N\ln\lambda)}{\partial\beta} = -N\frac{\partial\ln\lambda}{\partial H}\frac{\partial H}{\partial\beta} - N\frac{\partial\ln\lambda}{\partial H'}\frac{\partial H'}{\partial\beta} = -NJ\frac{\partial\ln\lambda}{\partial H} - NJ'\frac{\partial\ln\lambda}{\partial H'} \\
&= -Nk_\mathrm{B}T(H\frac{\partial\ln\lambda}{\partial H} - H'\frac{\partial\ln\lambda}{\partial H'})
\end{aligned}
\tag{O-111a}
$$

となる．比熱 C の場合は，

$$
\begin{aligned}
C &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}T}(-NJ\frac{\partial\ln\lambda}{\partial H} - NJ'\frac{\partial\ln\lambda}{\partial H'}) \\
&= N\left[-J\frac{\partial^2\ln\lambda}{\partial H^2}(-\frac{J}{k_\mathrm{B}T^2}) - J'\frac{\partial^2\ln\lambda}{\partial H\partial H'}(-\frac{J}{k_\mathrm{B}T^2}) - J\frac{\partial^2\ln\lambda}{\partial H'\partial H}(-\frac{J'}{k_\mathrm{B}T^2}) - J'\frac{\partial^2\ln\lambda}{\partial H'^2}(-\frac{J'}{k_\mathrm{B}T^2})\right] \\
&= k_\mathrm{B}N\left(J^2\beta^2\frac{\partial^2\ln\lambda}{\partial H^2} + JJ'\beta^2\frac{\partial^2\ln\lambda}{\partial H'\partial H} + JJ'\beta^2\frac{\partial^2\ln\lambda}{\partial H\partial H'} + J'^2\beta^2\frac{\partial^2\ln\lambda}{\partial H'^2}\right) \\
&= k_\mathrm{B}N\left(H^2\frac{\partial^2\ln\lambda}{\partial H^2} + 2HH'\frac{\partial^2\ln\lambda}{\partial H'\partial H} + H'^2\frac{\partial^2\ln\lambda}{\partial H'^2}\right)
\end{aligned}
\tag{O-111b}
$$

* * * * *

H^* は H の関数とみなすことができる．そうすると，式 (O-17) から，$\sinh 2H \sinh 2H^* = 1$ を微分することにより，

$$
\frac{\mathrm{d}H^*}{\mathrm{d}H} = -\frac{\cosh 2H \sinh 2H^*}{\sinh 2H \cosh 2H^*} \tag{23}
$$

となる．これに，式 (O-17) の $\cosh 2H^* \tanh 2H = 1$ を代入すると，

$$
\frac{\mathrm{d}H^*}{\mathrm{d}H} = -\sinh 2H^* \tag{24}
$$

となる．これに，式 (O-17) の $\sinh 2H \sinh 2H^* = 1$ を代入すると，

$$
\frac{\mathrm{d}H^*}{\mathrm{d}H} = -\sinh 2H^* = -\frac{1}{\sinh 2H} \tag{25}
$$

となる．

* * * * *

1 スピン当りの分配関数 $\ln\lambda$ は γ で表されることから，その微分に関する以下の関係式を事前に導いておこう．

式 (O-89a) の双曲余弦定理

$$
\cosh\gamma = \cosh 2H' \cosh 2H^* - \sinh 2H' \sinh 2H^* \cos\omega \tag{O-89a}
$$

を H' で微分して，

$$\sinh\gamma\frac{\partial\,\gamma}{\partial H'} = 2\sinh 2H'\cosh 2H^* - 2\cosh 2H'\sinh 2H^*\cos\omega \tag{26}$$

となるが，この式右辺は式 (O-89b) の右辺に等しい．したがって，

$$\sinh\gamma\frac{\partial\,\gamma}{\partial H'} = 2\sinh\gamma\cos\delta^* \tag{27}$$

となり，

$$\frac{\partial\,\gamma}{\partial H'} = 2\cos\delta^* \tag{O-112-1}$$

が得られる.「その 9」の図 1 に示す双曲三角形に示すように，$2H'$ と $2H^*$，δ' と δ^* を同時に交換しても同じ関係が満たされる．したがって，式 (O-112-1) より，

$$\frac{\partial\,\gamma}{\partial H^*} = 2\cos\delta' \tag{O-112-2}$$

が成り立つ.

次に，式 (26) を H' で微分する.

$$\cosh\gamma\left(\frac{\partial\,\gamma}{\partial H'}\right)^2 + \sinh\gamma\frac{\partial^2\gamma}{\partial H'^2} = 4\cosh 2H'\cosh 2H^* - 4\sinh 2H'\sinh 2H^*\cos\omega \tag{28}$$

この式右辺に式 (O-89a) を代入する.

$$\cosh\gamma\left(\frac{\partial\,\gamma}{\partial H'}\right)^2 + \sinh\gamma\frac{\partial^2\gamma}{\partial H'^2} = 4\cosh\gamma \tag{29}$$

式 (O-112-1) を代入すると，

$$4\cosh\gamma\cos^2\delta^* + \sinh\gamma\frac{\partial^2\gamma}{\partial H'^2} = 4\cosh\gamma \tag{30}$$

となる．しがたって，

$$\frac{\partial^2\gamma}{\partial H'^2} = 4\sin^2\delta^*\coth\gamma \tag{O-112-3}$$

である．この式においても双曲三角形の対称性を適用して，

$$\frac{\partial^2\gamma}{\partial H^{*2}} = 4\sin^2\delta'\coth\gamma \tag{O-112-4}$$

が成り立つ.

次に，式 (26) を H^* で微分すると，

$$\cosh\gamma\frac{\partial\,\gamma}{\partial H'}\frac{\partial\,\gamma}{\partial H^*} + \sinh\gamma\frac{\partial^2\gamma}{\partial H^*\partial H'} = 4\sinh 2H'\sinh 2H^* - 4\cosh 2H'\cosh 2H^*\cos\omega. \tag{31}$$

これに双曲余弦定理の式 (O-89a) を代入すると，

$$\begin{aligned}\cosh\gamma\frac{\partial\,\gamma}{\partial H'}\frac{\partial\,\gamma}{\partial H^*\partial H'} + \sinh\gamma\frac{\partial^2\gamma}{\partial H'^2} &= 4\sinh 2H'\sinh 2H^* - 4\cos\omega(\cosh\gamma + \sinh 2H'\sinh 2H^*\cos\omega)\\ &= 4\sinh 2H'\sinh 2H^*\sin^2\omega - 4\cos\omega\cosh\gamma.\end{aligned} \tag{32}$$

双曲正弦定理 (O-89c) から得られる $\sinh 2H' = (\sinh\gamma/\sin\omega)\sin\delta'$ および $\sinh 2H^* = (\sinh\gamma/\sin\omega)\sin\delta^*$ を代入して，

$$\cosh\gamma\frac{\partial\,\gamma}{\partial H'}\frac{\partial\,\gamma}{\partial H^*} + \sinh\gamma\frac{\partial^2\gamma}{\partial H^*\partial H'} = 4\sin\delta'\sin\delta^*\sinh^2\gamma - 4\cos\omega\cosh\gamma. \tag{33}$$

したがって，

$$\begin{aligned}
\sinh\gamma\frac{\partial^2\gamma}{\partial H^*\partial H'} &= 4\sin\delta'\sin\delta^*\sinh^2\gamma - 4\cosh\gamma(\cos\omega + \cosh\delta'\cos\delta^*)\\
&= -4\sin\delta'\sin\delta^* + 4\sin\delta'\sin\delta^*\cosh^2\gamma - 4\cosh\gamma(\cos\omega + \cosh\delta'\cos\delta^*)\\
&= -4\sin\delta'\sin\delta^* + 4\cosh\gamma(\sin\delta'\sin\delta^*\cosh\gamma - \cos\omega - \cosh\delta'\cos\delta^*) \qquad (34)
\end{aligned}$$

ここで，次の第 2 双曲余弦定理

$$\cosh\gamma = \frac{\cos\omega + \cos\delta'\cos\delta^*}{\sin\delta'\sin\delta^*} \qquad (35)$$

から，

$$\cos\omega = -\cos\delta'\cos\delta^* + \sin\delta'\sin\delta^*\cosh\gamma \qquad (36)$$

となるので，これを式 (34) の右辺に代入すると，右辺第 2 項は 0 になる．したがって，

$$\frac{\partial^2\gamma}{\partial H^*\partial H'} = -\frac{4\sin\delta'\sin\delta^*}{\sinh\gamma} \qquad \text{(O-112-5)}$$

が得られる．

＊　＊　＊　＊　＊

熱力学的性質を表す物理量は，式 (111a) と式 (111b) で表されているように，ln λ の H と H' に関する 1 次および 2 次微分係数で与えられる．すでに，γ の H と H' に関する 1 次と 2 次の微分係数は上で導かれたので，以下では，いよいよ ln λ の H と H' に関する 1 次微分係数と 2 次微分係数を導くことにしよう．

式 (O-106) を H' で偏微分して式 (O-112-1) を代入すると，

$$\frac{\partial\ln\lambda}{\partial H'} = \frac{1}{\pi}\int_0^\pi \cos\delta^*\mathrm{d}\omega \qquad \text{(O-113a-1)}$$

である．

次に，式 (O-106) を H' で偏微分して式 (O-112-1) を代入すると，

$$\frac{\partial\ln\lambda}{\partial H} = \coth 2H + \frac{1}{\pi}\int_0^\pi \cos\delta'\,\frac{\partial H^*}{\partial H}\,\mathrm{d}\omega \qquad (37)$$

となる．これに式 (25)，および $\cosh 2H^* = \coth 2H$（「その 1」[5] の式 (44)）を代入すると，

$$\frac{\partial\ln\lambda}{\partial H} = \cosh 2H^* - \frac{\sinh 2H^*}{\pi}\int_0^\pi \cos\delta'\,\mathrm{d}\omega \qquad \text{(O-113a-2)}$$

となる．

＊　＊　＊　＊　＊

次に，式 (O-113a-1) を H' で偏微分する．

$$\frac{\partial^2\ln\lambda}{\partial H'^2} = -\frac{1}{\pi}\int_0^\pi \sin\delta^*\,\frac{\partial\delta^*}{\partial H'}\,\mathrm{d}\omega. \qquad (38)$$

ここで，式 (O-89b) を再掲しよう．

$$\sinh\gamma\cos\delta^* = \sinh 2H'\cosh 2H^* - \cosh 2H'\sinh 2H^*\cos\omega \qquad \text{(O-89b)}$$

この式を H' で偏微分すると，

$$\cosh\gamma \frac{\partial \gamma}{\partial H'} \cos\delta^* - \sinh\gamma \sin\delta^* \frac{\partial \delta^*}{\partial H'} = 2\cosh 2H' \cosh 2H^* - 2\sinh 2H' \sinh 2H^* \cos\omega \tag{39}$$

となる．左辺に式 (O-112-1) を代入し，右辺は式 (O-89a) の双曲余弦定理の右辺そのものであるから，それを代入すると，

$$2\cosh\gamma \cos^2\delta^* - \sinh\gamma \sin\delta^* \frac{\partial \delta^*}{\partial H'} = 2\cosh\gamma \tag{40}$$

となり，これから，

$$\sin\delta^* \frac{\partial \delta^*}{\partial H'} = -2\sin^2\delta^* \coth\gamma \tag{41}$$

なるので，これを式 (38) に代入すると，

$$\frac{\partial^2 \ln\lambda}{\partial H'^2} = \frac{2}{\pi}\int_0^\pi \sin^2\delta^* \ \coth\gamma \, \mathrm{d}\omega. \tag{O-113b-1}$$

となる．

* * * * *

式 (O-113a-2) を H' で偏微分しよう．

$$\frac{\partial^2 \ln\lambda}{\partial H' \partial H} = -\frac{1}{\pi}\sinh 2H^* \int_0^\pi (-\sin\delta')\frac{\partial \delta'}{\partial H'} \, \mathrm{d}\omega \tag{42}$$

次に，つぎの双曲余弦定理が式 (O-89b) から対称性によって導かれる[7]．

$$\sinh\gamma \cos\delta' = \cosh 2H' \sinh 2H^* - \sinh 2H' \cosh 2H^* \cos\omega \tag{43}$$

[7] この関係式は式 (O-89b) から対称性を用いて次のように導くこともできる．式 (O-89b) は，

$$\sinh\gamma \cos\delta^* = \sinh 2H' \cosh 2H^* - \cosh 2H' \sinh 2H^* \cos\omega$$

である．「その 9」の図 1 の双曲三角形 OD$'$D* を裏返す．そうすると，式 (O-89b) において δ' と δ^*，$2H'$ と $2H^*$ を交換した式も成り立たなければならない．したがって，

$$\sinh\gamma \cos\delta' = \cosh 2H' \sinh 2H^* - \sinh 2H' \cosh 2H^* \cos\omega$$

が成り立つ．

対称性を使わなくても，次のようにして導くことができる．双曲余弦定理 (O-89a) から

$$\cosh 2H' = \cosh\gamma \cosh 2H^* - \sinh\gamma \sinh 2H^* \cos\delta' \tag{A1}$$

$$\cosh\gamma = \cosh 2H' \cosh 2H^* - \sinh 2H' \sinh 2H^* \cos\omega \tag{A2}$$

である．式 (A2) の両辺に，$\cosh 2H^*/\sinh 2H^*$ を掛ける．

$$\frac{\cosh\gamma \cosh 2H^*}{\sinh 2H^*} = \frac{\cosh 2H' \cosh^2 2H^*}{\sinh 2H^*} - \sinh 2H' \cosh 2H^* \cos\omega$$

この式の左辺の分子に式 (A1) の右辺第 1 項を代入すると，

$$\frac{\cosh 2H' + \sinh\gamma \sinh 2H^* \cos\delta'}{\sinh 2H^*} = -\frac{\cosh 2H' \cosh^2 2H^*}{\sinh 2H^*} - \sinh 2H' \cosh 2H^* \cos\omega$$

となり，左辺を通分して，

$$\frac{\cosh 2H'}{\sinh 2H^*} + \sinh\gamma \cos\delta' = -\frac{\cosh 2H' \cosh^2 2H^*}{\sinh 2H^*} - \sinh 2H' \cosh 2H^* \cos\omega$$

であるから，少し整理すると，

$$\begin{aligned}\sinh\gamma \cos\delta' &= \frac{\cosh 2H'}{\sinh 2H^*}(\cosh^2 2H^* - 1) - \sinh 2H' \cosh 2H^* \cos\omega \\ &= \cosh 2H' \sinh 2H^* - \sinh 2H' \cosh 2H^* \cos\omega\end{aligned}$$

となる．

この式を H' で偏微分すると，

$$\cosh\gamma\cos\delta'\frac{\partial\gamma}{\partial H'}-\sinh\gamma\sin\delta'\frac{\partial\delta'}{\partial H'}=2\sinh 2H'\sinh 2H^*-2\cosh 2H'\cosh 2H^*\cos\omega, \tag{44}$$

この式の右辺第 2 項に，双曲余弦定理 (O-89a) の右辺第 1 項を代入すると，

$$\cosh\gamma\cos\delta'\frac{\partial\gamma}{\partial H'}-\sinh\gamma\sin\delta'\frac{\partial\delta'}{\partial H'}=2\sinh 2H'\sinh 2H^*-2\cos\omega(\cosh\gamma+\sinh 2H'\sinh 2H^*\cos\omega), \tag{45}$$

左辺第 1 項に式 (O-112-1) を代入し，右辺を整理すると，

$$2\cosh\gamma\cos\delta'\cos\delta^*-\sinh\gamma\sin\delta'\frac{\partial\delta'}{\partial H'}=2\sinh 2H'\sinh 2H^*\sin^2\omega-2\cos\omega\cosh\gamma, \tag{46}$$

この式の左辺第 1 項に第 2 双曲余弦定理の式 (35) を代入し，右辺第 1 項に双曲正弦定理の式 (O-89c) から $\sinh 2H'=\sin\delta'\sinh\gamma/\sin\omega$，$\sinh 2H^*=\sin\delta^*\sinh\gamma/\sin\omega$ を代入すると，

$$2\cosh\gamma(\cosh\gamma\sin\delta'\sin\delta^*-\cos\omega)-\sinh\gamma\sin\delta'\frac{\partial\delta'}{\partial H'}=2\sin\delta'\sin\delta^*\sinh^2\gamma-2\cos\omega\cosh\gamma, \tag{47}$$

これを整理すると，

$$2\sin\delta'\sin\delta^*(\cosh^2\gamma-\sinh^2\gamma)-2\cosh\gamma\cos\omega-\sinh\gamma\sin\delta'\frac{\partial\delta'}{\partial H'}=-2\cos\omega\cosh\gamma, \tag{48}$$

となり，最終的に，

$$\frac{\partial\delta'}{\partial H'}=2\frac{\sin\delta^*}{\sinh\gamma} \tag{49}$$

が得られる．これを式 (44) に代入すると，

$$\frac{\partial^2\ln\lambda}{\partial H'\partial H}=\frac{2}{\pi}\sinh 2H^*\int_0^\pi\frac{\sin\delta'\sin\delta^*}{\sinh\gamma}\,\mathrm{d}\omega \tag{O-113b-2}$$

が得られる．

* * * * *

式 (O-113a-2) を H で偏微分すると，

$$\frac{\partial^2\ln\lambda}{\partial H^2}=2\sinh 2H^*\frac{\partial H^*}{\partial H}-\frac{2}{\pi}\cosh 2H^*\frac{\partial H^*}{\partial H}\int_0^\pi\cos\delta'\,\mathrm{d}\omega+\frac{1}{\pi}\sinh 2H^*\int_0^\pi\sin\delta'\frac{\partial\delta'}{\partial H}\,\mathrm{d}\omega. \tag{50}$$

次に式 (45) を H で偏微分すると，

$$\cosh\gamma\cos\delta'\frac{\partial\gamma}{\partial H}-\sinh\gamma\sin\delta'\frac{\partial\delta'}{\partial H}=2(\cosh 2H'\cosh 2H^*-\sinh 2H'\sinh 2H^*\cos\omega)\frac{\partial H^*}{\partial H}. \tag{51}$$

ここで，左辺の $\partial\gamma/\partial H=(\partial\gamma/\partial H^*)(\partial H^*/\partial H)$ に，式 (O-112-2) と式 (25) を代入し，右辺に式 (O-89a) の右辺と式 (25) を代入すると，

$$-2\cosh\gamma\cos^2\delta'\sinh 2H^*-\sinh\gamma\sin\delta'\frac{\partial\delta'}{\partial H}=-2\sinh 2H^*\cosh\gamma \tag{52}$$

となる．これを整理して，

$$\frac{\partial\delta'}{\partial H}=2\sinh 2H^*\coth\gamma\sin\delta' \tag{53}$$

となる．この式と式 (25) を式 (50) に代入することにより，

$$\frac{\partial^2\ln\lambda}{\partial H^2}=2\sinh^2 2H^*\left(-1+\frac{1}{\pi}\coth 2H^*\int_0^\pi\cos\delta'\,\mathrm{d}\omega+\frac{1}{\pi}\int_0^\pi\sin^2\delta'\coth\gamma\,\mathrm{d}\omega\right) \tag{O-113b-3}$$

という式が成り立つ．

$*\ *\ *\ *\ *$

式 (O-113) の積分を用いれば式 (O-111) により，熱力学的な全エネルギー U および比熱 C を計算することができる．式 (O-113) は双曲三角形の角と辺の大きさで表されているが，これはヤコビの楕円関数を用いることによりさらに簡略化することができる．その方法は Appendix に述べられている．

定性的には，Fig. 4 の双曲三角形から理解することができる．式 (O-113a) の積分は全ての H および H' に関して連続有限である．実際，$0 \leq \omega \leq \pi$ に対して，δ' と δ^* は 0 からたかだか π までしか変化しない．具体的な δ^* の ω 依存性に関しては Fig. 5 に示されている．

転移点，すなわち $H' = H^*$ において，式 (O-113b) の 3 つの式は発散する．これは次のように考えれば良い．Fig.4 からわかるように，$H' = H^*$ の場合は双曲三角形の辺 $\gamma(\omega)$ が $\omega = 0$ で 0 になる．すなわち，$\gamma(0) = 0$ である．したがって，$\omega = 0$ 近傍では γ を挟む 2 つの角は $\pi/2$ となる．すなわち，$\delta^* \sim \delta' \sim \pi/2$ である．一方，$\omega = 0$ かつ $H' = H^*$ で $\gamma = 0$ となるから，$\sinh\gamma = 0$ である．これから，式 (O-113b) には $\sin\delta'/\sinh\gamma$, $\sin\delta^*/\sinh\gamma$ が含まれるので被積分関数は $O(\omega^{-1})$ で発散し，積分は発散する．

一方，$H' \neq H^*$ で

$$\gamma(\omega) \geq \gamma(0) = 2|H' - H^*| > 0 \tag{54}$$

であり，Fig. 4 から，δ' と δ^* は $\omega = 0$ で 0 または π であるから，

$$\sin\delta' = \sin\delta^* = 0 \tag{55}$$

である．したがって，式 (O-113b) の被積分関数は $\omega = 0$ においても有限である．

16.1　正方対称の場合の比熱

一般の場合の熱力学的性質を計算する前に，まず正方格子（正方対称）の場合，すなわち，$H' = H$ の場合の性質を求めておこう．この場合は熱力学関数は簡単になる．

式 (O-109c-1) から出発しよう．まず，この式を

$$\ln\frac{\lambda}{2\cosh 2H} = \frac{1}{2\pi^2}\iint\left[\ln\left(\frac{1}{2\kappa\cos\omega_1} - 2\cos\omega_2\right) + \ln(2\kappa\cos\omega_1)\right]\mathrm{d}\omega_1\mathrm{d}\omega_2 \tag{56}$$

と変形する．ここで，被積分項の第 1 項で，

$$\frac{1}{2\kappa\cos\omega_1} = 2\cosh x \tag{57}$$

とおく．この式から x を解くと，

$$x = \ln\left[\frac{1 \pm \sqrt{1 - 16\kappa^2\cos^2\omega_1}}{4\kappa\cos\omega_1}\right] \tag{58}$$

となる[8]．この式の被積分項第 1 項に式 (O-107) を適用し，第 2 項をそのまま ω_2 で積分すると，

$$\begin{aligned}\ln\frac{\lambda}{2\cosh 2H} &= \frac{1}{2\pi}\left\{\int_0^\pi \ln\left[\frac{1 \pm \sqrt{1 - 16\kappa^2\cos^2\omega_1}}{4\kappa\cos\omega_1}\right]\mathrm{d}\omega_1 + \int_0^\pi \ln(2\kappa\cos\omega_1)\mathrm{d}\omega_1\right\} \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_0^\pi \ln\left[\tfrac{1}{2}(1 \pm \sqrt{1 - 16\kappa^2\cos^2\omega_1})\right]\mathrm{d}\omega_1\end{aligned} \tag{59}$$

[8]式 (59) で

$$\frac{1}{4\kappa\cos\omega_1} = y$$

とおくと，$\mathrm{e}^x + \mathrm{e}^{-x} = 2$ であるから，$\mathrm{e}^{2x} - 2y\mathrm{e}^x + 1 = 0$ より，$\mathrm{e}^{y \pm \sqrt{y^2-1}}$ となるから，

$$x = \ln(y \pm \sqrt{y^2 - 1})$$

となり，式 (60) が得られる．

となる．ここで，式 (O-109a) の関係で $H' = H$ としてから，k_1，k_1'，k_1'' を次のように置く．

$$k_1 = 4\kappa = 2\sinh 2H/\cosh^2 2H, \tag{O-114-1}$$

$$k_1'' = \pm\sqrt{1-k_1^2} = 2\tanh^2 2H - 1, \tag{O-114-2}$$

$$k_1' = |k_1'| \tag{O-114-3}$$

k'' には複号がついているが，これは転移温度 $1/H_c$ よりも低温の場合に正の値をとり，$1/H_c$ よりも高温の場合に負の値をとる．なお，式 (O-114-2) は脚注のようにして導かれる[9]．式 (59) に $4\kappa = k_1$ を代入し，積分値が正であることを考えて複号を正の符号にとり，$\omega_1 = \pi/2 - \varphi$ と変数変換すると，

$$\ln\frac{\lambda}{2\cosh 2H} = \frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi}\ln\left[\tfrac{1}{2}(1+\sqrt{1-k_1^2\sin^2\varphi})\right]\mathrm{d}\varphi \tag{O-115}$$

となる[10]．

式 (O-115) を H で偏微分すると，

$$\frac{\partial\ln\lambda}{\partial H} - \frac{2\sinh 2H}{\cosh 2H} = \frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi}\frac{-k_1\dfrac{\partial k_1}{\partial H}\sin^2\varphi}{\left(1+\sqrt{1-k_1^2\sin^2\varphi}\right)\sqrt{1-k_1^2\sin^2\varphi}}\mathrm{d}\varphi \tag{60}$$

となる．次に，式 (O-109a) および式 (O-114-1) から，

$$\frac{1}{\kappa}\frac{\partial\kappa}{\partial H} = \frac{1}{k_1}\frac{\partial k_1}{\partial H} = 2\coth 2H(1-2\tanh^2 2H) \tag{61}$$

という関係が得られる[11]．この関係を用いると，式 (60) の右辺被積分項は分子分母に $(1-\sqrt{1-k_1^2\sin^2\varphi})$ をかけて，

$$\begin{aligned}&\frac{-k_1\dfrac{\partial k_1}{\partial H}\sin^2\varphi\,(1-\sqrt{1-k_1^2\sin^2\varphi})}{k_1^2\sin^2\varphi\sqrt{1-k_1^2\sin^2\varphi}}\\ &= -\frac{1}{k_1}\frac{\partial k_1}{\partial H}\left[\frac{1}{\sqrt{1-k_1^2\sin^2\varphi}}-1\right] = -2\coth 2H(1-2\tanh^2 2H)\left[\frac{1}{\sqrt{1-k_1^2\sin^2\varphi}}-1\right]\end{aligned} \tag{62}$$

となる．したがって，式 (60) の右辺は，

$$\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}\coth 2H(2\tanh^2 2H-1)\frac{1}{\sqrt{1-k_1^2\sin^2\varphi}}\,\mathrm{d}\varphi - \coth 2H(2\tanh^2 2H-1) \tag{63}$$

---

[9]

$$\begin{aligned}1-k_1^2 &= 1-\left(\frac{2\tanh 2H}{\cosh 2H}\right)^2 = 1-4\frac{2\tanh^2 2H}{\cosh^2 2H} = 1-4\tanh^2 2H(1-\tanh^2 2H) = 1-4\tanh^2 2H+4\tanh^4 2H\\ &= (1-2\tanh^2 2H)^2\end{aligned}$$

[10] この変数変換で積分範囲は $-\pi/2 \sim \pi/2$ であるが，被積分関数は周期 π の関数であるから，積分範囲を $0 \sim \pi$ にすることができる．

[11] 実際，式 (O-109a) から

$$\kappa = \frac{\tanh 2H}{2\cosh 2H} = \frac{\sinh 2H}{2\cosh^2 2H}$$

である．これを微分して，

$$\begin{aligned}\frac{\partial\kappa}{\partial H} &= \frac{\cosh^3 2H - 2\sinh^2 2H\cosh 2H}{2\cosh^4 2H} = \frac{\cosh^3 2H - 2(\cosh^2 2H-1)\cosh 2H}{\cosh^4 2H} = \frac{2\cosh 2H - \cosh^3 2H}{\cosh^4 2H}\\ &= \frac{1}{\cosh 2H}(2\,\mathrm{sech}^2 2H - 1) = \frac{1}{\cosh 2H}[2(1-\tanh^2 2H)-1] = \frac{1}{\cosh 2H}(1-2\tanh^2 2H)\end{aligned}$$

となるから，式 (O-114-1) より，式 (61) が得られる．

となる．式 (60) の左辺第 2 項を右辺に移項し，式 (63) の第 2 項に加えると，

$$2\tanh 2H - \coth 2H(2\tanh^2 2H - 1) = \coth 2H \tag{64}$$

となることと，式 (63) の定積分は，

$$\int_0^{\pi} \frac{\mathrm{d}\varphi}{\sqrt{1-k_1^2\sin^2\varphi}} = 2K_1 \tag{65}$$

となり，

$$K_1 = \int_0^{\pi/2} \frac{\mathrm{d}\varphi}{\sqrt{1-k_1^2\sin^2\varphi}} \tag{66}$$

は第 1 種完全楕円積分であることと，式 (O-114-2) から $k_1'' = 2\tanh^2 2H - 1$ とおくことにより，

$$\frac{\partial \ln\lambda}{\partial H} = \frac{2}{\pi}\coth 2H k_1'' K_1 + \coth 2H = \coth 2H(1+\frac{2}{\pi}k_1''K_1) \tag{67}$$

となり，結果として，

$$U = -NJ\frac{\partial \ln\lambda}{\partial H} = -NJ\coth 2H(1+\frac{2}{\pi}k_1''K_1) \tag{O-116}$$

が得られる．

＊ ＊ ＊ ＊ ＊

次に比熱 C を与える式を導こう．まず，式 (O-114-2) より，

$$\frac{\partial k_1''}{\partial H} = 4\tanh 2H\,\mathrm{sech}^2 2H\cdot 2 = 8\tanh 2H\,\mathrm{sech}^2 2H \tag{68}$$

である．式 (67) より，

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \ln\lambda}{\partial H^2} &= -2\,\mathrm{cosech}^2 2H(1+\frac{2}{\pi}k_1''K_1) + \coth 2H(\frac{2}{\pi}\frac{\partial k_1''}{\partial H}K_1 + \frac{2}{\pi}k_1''\frac{\partial K_1}{\partial H}) \\ &= -2\,\mathrm{cosech}^2 2H(1+\frac{2}{\pi}k_1''K_1) + \frac{16}{\pi}K_1\,\mathrm{sech}^2 2H\tanh 2H + \frac{2}{\pi}k_1''\frac{\partial K_1}{\partial H}\coth 2H\end{aligned} \tag{69}$$

となる．第 1 種完全楕円積分 K_1 の H に関する微分については，式 (66) を微分して，

$$\begin{aligned}\frac{\partial K_1}{\partial H} &= \int_0^{\pi/2}\frac{k_1\dfrac{\partial k_1}{\partial H}\sin^2\varphi}{(1-k_1^2\sin^2\varphi)^{3/2}}\mathrm{d}\varphi = \int_0^{\pi/2}\frac{(\dfrac{1}{k_1}\dfrac{\partial k_1}{\partial H})(-1+k_1^2\sin^2\varphi+1)}{(1-k_1^2\sin^2\varphi)^{3/2}}\mathrm{d}\varphi \\ &= 2\coth 2H(1-2\tanh^2 2H)\left\{-\int_0^{\pi/2}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\sqrt{1-k_1^2\sin^2\varphi}} + \int_0^{\pi/2}\frac{\mathrm{d}\varphi}{(1-k_1^2\sin^2\varphi)^{3/2}}\right\}\end{aligned}$$

式 (O-114-2) および式 (68) を代入して，

$$= 2k_1''\coth 2H\left\{K_1 - \int_0^{\pi/2}\frac{\mathrm{d}\varphi}{(1-k_1^2\sin^2\varphi)^{3/2}}\right\} \tag{70}$$

とすることができる．一方，[3] の p.150 から，

$$\int_0^{\varphi}\frac{\mathrm{d}\varphi}{(1-k_1^2\sin^2\varphi)^{3/2}} = \frac{1}{k_1'^2}\left[E(\varphi,k) - \frac{k_1^2\sin 2\varphi}{2\sqrt{1-k_1^2\sin^2\varphi}}\right] \tag{71}$$

$$\int_0^{\pi/2}\frac{\mathrm{d}\varphi}{(1-k_1^2\sin^2\varphi)^{3/2}} = \frac{1}{k_1'^2}E(\frac{\pi}{2},k_1) = \frac{1}{k_1'^2}E_1 \tag{72}$$

である．ただし，

$$E_1 = \int_0^{\pi/2} \sqrt{(1 - k_1^2 \sin^2 \varphi)} \mathrm{d}\varphi \tag{73}$$

は第 2 種完全楕円積分である．したがって，式 (70) と式 (72) より，

$$\frac{\partial K_1}{\partial H} = 2k_1'' \coth 2H (K_1 - \frac{1}{k_1''^2} E_1) \tag{74}$$

となる．これを式 (69) に代入すると，

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \ln \lambda}{\partial H^2} &= -2 \,\mathrm{cosech}^2\, 2H (1 + \frac{2}{\pi} k_1'' K_1) + \frac{16}{\pi} K_1 \,\mathrm{sech}^2\, 2H + \frac{2}{\pi} \coth 2H k_1'' (2k_1'') \coth 2H (K_1 - \frac{1}{k_1''^2} E_1) \\ &= \frac{2}{\pi} \coth^2 2H (-\pi \,\mathrm{sech}^2\, 2H - 2 \,\mathrm{sech}^2\, 2H k_1'' K_1 + 8K_1 \frac{\sinh^2 2H}{\cosh^4 2H} + 2k_1''^2 K_1 - 2E_1)\end{aligned}$$

式 (O-114-2) より，$2 \,\mathrm{sech}^2 = 1 - k''^2$，$2 \tanh^2 = k'' + 1$ などを代入して，

$$\begin{aligned} &= \frac{2}{\pi} \coth^2 2H [-\frac{\pi}{2}(1 - k_1'') - (1 - k_1'') k_1'' K_1 + 2K_1 - 2K_1 k_1''^2 + 2k_1''^2 K_1 - 2E_1] \\ &= \frac{2}{\pi} \coth^2 2H [-\frac{\pi}{2}(1 - k_1'') - (1 - k_1'') k_1'' K_1 + 2K_1 - 2E_1] \\ &= \frac{2}{\pi} \coth^2 2H [2K_1 - 2E_1 - (1 - k_1'')(\frac{\pi}{2} + k_1'' K_1)] \end{aligned} \tag{75}$$

となる．これから，

$$\begin{aligned} C &= N k_{\mathrm{B}} \frac{\partial^2 \ln \lambda}{\partial H^2} \\ &= \frac{2N k_{\mathrm{B}}}{\pi} \coth^2 2H [2K_1 - 2E_1 - (1 - k_1'')(\frac{\pi}{2} + k_1'' K_1)] \end{aligned} \tag{O-117}$$

が得られる．

原論文の式 (O-119) は $\ln \lambda$ を数値計算するための展開式である．電子計算機がない当時は収束の速い展開式を導くことが非常に重要だった．その内容については，APPENDIX の節で述べる．

* * * * *

$H = H^*$ は転移点を示す（実際には $1/H$）．この場合，すでに述べたように，

$$H = H^* = H_{\mathrm{c}} = \frac{1}{2} \ln \cot \frac{\pi}{8} \tag{76}$$

である．これから，$k_1 = 1$，$k_1' = 0$，$\tanh 2H_{\mathrm{c}} = 1/\sqrt{2}$ となり，[12]図 1 に示されるように，$K_1 = \infty$，$K_1' = 0$ となるから，式 (O-117) より，比熱 C は転移点 $H = H_{\mathrm{c}}$ で無限大に発散し，式 (O-116) より，エネルギーは一定値 $-NJ \coth 2H$ になる．

[12]実際，$\mathrm{e}^{2H_{\mathrm{c}}} = \cot(\pi/8)$，$\mathrm{e}^{-2H_{\mathrm{c}}} = \tan(\pi/8)$ であるから，

$$\mathrm{e}^{2H_{\mathrm{c}}} + \mathrm{e}^{-2H_{\mathrm{c}}} = \cot(\frac{\pi}{8}) + \tan(\frac{\pi}{8}) = \frac{\cos^2 \frac{\pi}{8} + \sin^2 \frac{\pi}{8}}{\cos \frac{\pi}{8} \sin \frac{\pi}{8}} = \frac{2}{\sin \frac{\pi}{4}} = 2\sqrt{2}$$

$$\mathrm{e}^{2H_{\mathrm{c}}} - \mathrm{e}^{-2H_{\mathrm{c}}} = \cot(\frac{\pi}{8}) - \tan(\frac{\pi}{8}) = \frac{\cos^2 \frac{\pi}{8} - \sin^2 \frac{\pi}{8}}{\cos \frac{\pi}{8} \sin \frac{\pi}{8}} = \frac{2 \cos \frac{\pi}{4}}{\sin \frac{\pi}{4}} = 2$$

であるから，$\cosh 2H_{\mathrm{c}} = \sqrt{2}$，$\sinh 2H_{\mathrm{c}} = 1$，$\tanh 2H_{\mathrm{c}} = 1/\sqrt{2}$ となり，

$$\begin{aligned} k_1 &= \frac{2 \sinh 2H_{\mathrm{c}}}{\cosh^2 2H_{\mathrm{c}}} = 1 \\ 1 - k_1^2 &= 1 - \frac{4 \sinh^2 2H_{\mathrm{c}}}{\cosh^4 2H_{\mathrm{c}}} = 1 - 4 \tanh^2 2H_{\mathrm{c}} (1 - \tanh^2 2H_{\mathrm{c}}) = (1 - \tanh^2 2H_{\mathrm{c}})^2 \\ k_1'' &= \sqrt{1 - k_1''^2} = 2 \tanh^2 2H_{\mathrm{c}} - 1 = 0 \end{aligned}$$

となる．

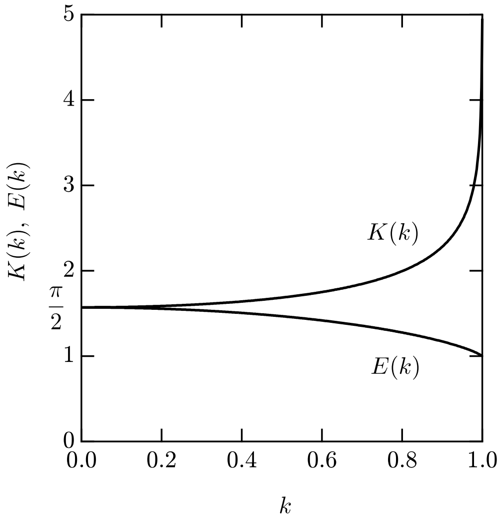


図 1: 第 1 種完全楕円積分 $K(k)$，および第 2 種完全楕円積分 $E(k)$．計算プログラムについては付録参照．

転移点における解析的ふるまいは式 (O-117) により K_1 で決まる．$k \simeq 1$ における K_1 の振る舞いは，

$$K_1 \simeq \ln \frac{4}{k_1'} \tag{77}$$

である[13]．つぎに，$\tanh H_\mathrm{c} = 1/\sqrt{2}$ であることを利用すると，

$$\begin{aligned}
k_1' &= 2\tanh^2 H - 1 = 2\tanh^2 H - 2\tanh^2 H_\mathrm{c} \simeq 2\frac{\sinh^2 2H}{\cosh^2 2H_\mathrm{c}} - \frac{\sinh^2 2H_\mathrm{c}}{\cosh^2 2H_\mathrm{c}} \\
&= 2\frac{(\sinh 2H + \sinh 2H_\mathrm{c})(\sinh 2H + \sinh 2H_\mathrm{c})}{\cosh^2 2H_\mathrm{c}} \\
&= 2\frac{(\sinh 2H + \sinh 2H_\mathrm{c}) 2\cosh(H+H_\mathrm{c})\sinh(H-H_\mathrm{c})}{\cosh^2 2H_\mathrm{c}} \simeq 8\frac{\sinh 2H_\mathrm{c}\cosh(2H_\mathrm{c})\sinh(H-H_\mathrm{c})}{\cosh^2 2H_\mathrm{c}} \\
&\simeq 4\sqrt{2}(H-H_\mathrm{c})
\end{aligned}$$

[13] [6] の p.50 には $K = \frac{K'}{\pi}\ln\frac{1}{q}$ という式が示されている．この式は k が 0 に近い時に急速に収束するので，k が 1 に近づく場合は次のように k を k' に置き換えればよい．そうすると，K と K' は入れ替わり，その他の関連する式は次のように書き換えられる．すなわち，

$$K = \frac{K'}{\pi}\ln\frac{1}{q}, \tag{A1}$$

$$q = l + 2l^5 + 15l^9 + 150l^{13} + 1707l^{17} + \cdots, \tag{A2}$$

$$l = \frac{1-(1-k'^2)^{1/4}}{2[1+(1-k'^2)^{1/4}]} \tag{A3}$$

となる．$k = k_1$ が 1 に近い時，$k_1' = \sqrt{1-k_1^2}$ は 0 に近くなるから l は $k_1 \simeq 1$ で次のように近似できる．

$$l \simeq \frac{1-k_1^{1/2}}{2(1+k_1^{1/2})} = \frac{1-k_1}{2(1+k_1^{1/2})^2} = \frac{1-k_1^2}{2(1+k_1^{1/2})^2(1+k)} \simeq \frac{k_1'^2}{2(1+k_1^{1/2})^2(1+k_1)} = \frac{k_1'^2}{16}$$

となり，$l \ll 1$ であるから，$q \simeq l$ となり，これと $K'(1) = \pi/2$(図 1) を代入すると式 (**??**) が得られる．

なお，[3] の p.228 には $k \to 1-0$ のときに，

$$K(k) \to \frac{1}{2}\ln\frac{1}{1-k}$$

となっている．これからは

$$K(k) \to \frac{1}{2}\ln\frac{1}{1-k} = \frac{1}{2}\ln\frac{1+k}{1-k^2} = \ln\frac{\sqrt{2}}{k'}$$

となり，式 (**??**) と差が存在するが発散するので実質的に問題はない．[7] の P.199 では，上の 2 つの場合が併記されている．

となる．これを式 (77) に代入すると $H \sim H_{\mathrm{c}}$ では，

$$K_1 \sim \ln \frac{1}{\sqrt{2}|H-H_{\mathrm{c}}|} \tag{O-120-1}$$

となる．また，式 (O-117) で，$E_1(1)=1$，$k''=0$，$H_{\mathrm{c}}=\frac{1}{2}\ln\cot\frac{\pi}{8}$ とおくことにより，

$$\frac{C}{Nk_{\mathrm{B}}} \sim \frac{2}{\pi}(\ln\cot\frac{\pi}{8})^2(K_1-1-\frac{\pi}{4}) \tag{O-120-2}$$

が得られる．

臨界点の諸物理量として，式 (76) から，

$$H_{\mathrm{c}} = J/k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}} = \frac{1}{2}\ln\cot\frac{\pi}{8} = 0.440 \tag{O-121-1}$$

である．次に，式 (O-115) から，臨界点で $k_1=1$ であるので，

$$\begin{aligned}\ln(\frac{\lambda_{\mathrm{c}}}{2\cosh 2H_{\mathrm{c}}}) &= \frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi}\ln\tfrac{1}{2}(1+|\cos\varphi|)\mathrm{d}\varphi = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/2}\ln\tfrac{1}{2}(1+\cos\varphi)\mathrm{d}\varphi \\ &= \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/2}\ln\cos^2\frac{\varphi}{2}\mathrm{d}\varphi = \frac{4}{\pi}\int_0^{\pi/4}\ln\cos\theta\mathrm{d}\theta \end{aligned} \tag{78}$$

となるが，$G=0.915965\ldots$ をカタラン (Catalan) 定数とすると ([8] の p.41)，

$$\int_0^{\pi/4}\ln(2\cos\theta)\mathrm{d}\theta = -\int_0^{\pi/4}\ln(2\sin\theta)\mathrm{d}\theta = \frac{G}{2} \tag{79}$$

であるから[14]，式 (79) を式 (78) に代入し，$\cosh 2H_{\mathrm{c}}=\sqrt{2}$ を用いると，

$$F_{\mathrm{c}}/Nk_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}} = \ln\lambda_{\mathrm{c}} = \frac{1}{2}\ln 2 + \frac{2}{\pi}G \tag{O-121-2}$$

となる．また，式 (O-116) で，転移点で $\cosh 2H_{\mathrm{c}}=\sqrt{2}$，$k''=0$ であるから，

$$-U_{\mathrm{c}}/NJ = \sqrt{2} \tag{O-121-3}$$

となる．一方，$F=U-ST$ の関係から，$T=T_{\mathrm{c}}$ では $S=(U-F)/T_{\mathrm{c}}$ となり，

$$\frac{S_{\mathrm{c}}}{Nk_{\mathrm{B}}} = \frac{U_{\mathrm{c}}-F_{\mathrm{c}}}{Nk_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}}} = \frac{-\sqrt{2}NJ+Nk_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}}\ln\lambda_{\mathrm{c}}}{k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}}N} = -\sqrt{2}\frac{J}{k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}}}+\ln\lambda_{\mathrm{c}} = -\sqrt{2}H_{\mathrm{c}}+\ln\lambda_{\mathrm{c}} = 0.306\cdots \tag{O-121-4}$$

という関係式および数値が得られる．

[14] [8] の p.54 から，

$$\frac{\tan^{-1}x}{x} = 1-\frac{x^2}{3}+\frac{x^4}{5}-\cdots = \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\frac{x^{2n}}{2n+1}$$

したがって，

$$\int_0^1\frac{\tan^{-1}x}{x}\mathrm{d}x = 1-\frac{1}{3^2}+\frac{1}{5^2}-\cdots = \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\frac{1}{(2n+1)^2} = G$$

である．部分積分して，

$$-\int_0^1\frac{\ln x}{1+x^2}\mathrm{d}x = G$$

$x=\tan\theta$ を代入すると，

$$G = -\int_0^{\pi/4}\ln\tan\theta\ \mathrm{d}\theta = -\int_0^{\pi/4}\ln\sin\theta\ \mathrm{d}\theta + \int_0^{\pi/4}\ln\cos\theta\ \mathrm{d}\theta \tag{A4}$$

である．一方，

$$\int_0^{\pi/4}\ln\sin\theta\ \mathrm{d}\theta + \int_0^{\pi/4}\ln\cos\theta\ \mathrm{d}\theta = \int_0^{\pi/4}\ln\sin\theta\ \mathrm{d}\theta + \int_{\pi/4}^{\pi/2}\ln\sin\theta\ \mathrm{d}\theta = \int_0^{\pi/2}\ln\sin\theta\ \mathrm{d}\theta = -\frac{\pi}{2}\ln 2 \tag{A5}$$

であるから，式 (A4) と式 (A5) から，

$$\int_0^{\pi/4}\ln\cos\theta\ \mathrm{d}\theta = \frac{1}{2}G-\frac{\pi}{4}\ln 2, \qquad \int_0^{\pi/4}\ln\sin\theta\ \mathrm{d}\theta = -\frac{1}{2}G-\frac{\pi}{4}\ln 2$$

が得られる．

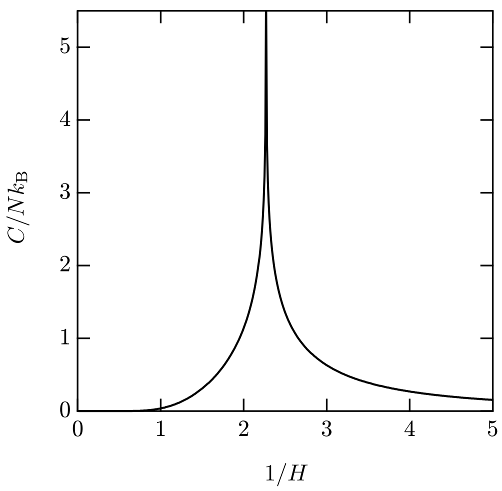


図 2: ２次元イジングモデルにおける比熱の温度依存性．横軸は温度 $1/H$．転移点は $1/H_{\mathrm{c}} = 2.269189\cdots$ である．

＊　＊　＊　＊　＊

式 (116) を用いて Fig. 6 のデータを計算してみよう．計算は PC を用いて簡単に計算できる．完全楕円積分の数値計算は文献 [9] の PASCAL で書かれたアルゴリズムを C に変換したものである．アルゴリズムは APPENDIX の内容にも通ずる．

スピン間相互作用が異方的な場合，すなわち $H \neq H'$ の場合の計算は次回に回す．

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 10」(2017/12/18 のエントリー).
`http://totoha.web.fc2.com/Onsager_paper10.pdf`

[3] 森口繁一，宇田川☒久，一松信,「数学公式 I」（岩波書店）, 1971 年.

[4] H. A. Kramers and G. H. Wannier, “Statitics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part II.”, Phys. Rev. **60**, 263-276 (1941) の p.264 の式 (45).

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

[6] 森口繁一，宇田川☒久，一松信,「数学公式 III」（岩波書店）, 1971 年.

[7] 戸田盛和「楕円関数入門」（日本評論社）, 2001 年.

[8] 森口繁一，宇田川☒久，一松信,「数学公式 II」（岩波書店）, 1971 年.

[9] 山内二郎，宇野利雄，一松信「電子計算機のための数値計算法 III」（培風館）, 1972 年, p.258

付録

図 2 を計算した C プログラムを示す．完全楕円積分を計算するアルゴリズムは [9] を用いた．

```
/*  specific_heat.c  */
/*  M. Suzuki 2018.1.25  */
/*  algorhythm 「電子計算機のための数値計算法 III」 p.255  */


#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <string.h>
#include <math.h>

int QKKEE(double *p)
// p[0]=k, p[1]=kk, p[2]=ee, p[3]=kkbis, p[4]=eebis, p[5]=q, p[6]=qbis;
{
      double k, k2, kbis, skbis, eps, eps4, q, lnq, qbis, q2, q3, th32;
      double kk, kkbis, ee, eebis;
      double pi=3.14159265359;
      double piov2, piov6, pi2;
      int flag=0;
      piov2=pi/2.0;
      piov6=pi/6.0;
      pi2=pi*pi;
      k=p[0];
      k2=k*k;
      if(k2>=0.5)
      {
            k2=1-k2;
            flag=1;
      }
      if(k2==0)
      {
            p[5]=0;
            p[6]=1.0;
            p[1]=piov2;
            p[3]=1e124;
            p[2]=piov2;
            p[4]=1.0;
            return 0;
      }
      kbis=sqrt(1-k2);
      skbis=sqrt(kbis);
      eps=0.5*k2/(2*(1+skbis*(1+kbis)+kbis)-k2);
      eps4=pow(eps, 4);
```

```
        q=((15.0*eps4+2.0)*eps4+1.0)*eps;
        lnq=log(q);
        qbis=exp(pi2/lnq);
        q2=q*q;
        q3=q2*q;
        th32=(((q2*q3+1.0)*q3+1.0)*q*2.0+1.0);
        th32*=th32;
        kk=piov2*th32;
        kkbis=-0.5*lnq*th32;
        ee=(piov6/th32)*(1.0+th32*th32*(2.0-k2)
                    -((((144.0*q2+168.0)*q2+96.0)*q2+72)*q2+24.0)*q2);
        eebis=kkbis*(1.0-ee/kk)+1.0/th32;
        if(flag==1)
        {
              p[1]=kkbis;
              p[2]=eebis;
              p[3]=kk;
              p[4]=ee;
              p[5]=qbis;
              p[6]=q;
        }
        else
        {
              p[1]=kk;
              p[2]=ee;
              p[3]=kkbis;
              p[4]=eebis;
              p[5]=q;
              p[6]=qbis;
        }
        return 0;
}

int main()
{
        FILE *fp;
        char *filenameout="C_H.txt";
        char buffer[100];
        int i, n;
        double p[7];
        double T, H, dT, Tstart, Tend;
        double pi, k1, k1pp, K1, E1, C, z;

        pi=M_PI;
        n=500;
        Tstart=0;
```

```
	Tend=5;
	dT=(Tend-Tstart)/n;
	fp=fopen(filenameout, "w");
	for(i=1;i<n+1;i++)
	{
		T=Tstart+dT*i;
		H=1/T;
		z=tanh(2*H);
		k1pp=2*z*z-1;
		k1=sqrt(1-k1pp*k1pp);
		p[0]=k1;
		QKKEE(p);
		K1=p[1];
		E1=p[2];
		C=H/tanh(2*H);
		C*=C;
		C*=2*K1-2*E1-(1-k1pp)*(0.5*pi+k1pp*K1);
		printf("%lf\t%lf\n", T, C);
		fprintf(fp, "%lf\t%lf\n", T, C);
	}
	fclose(fp);
}
```