Onsagerの2次元イジングモデル厳密解の論文を読む　その2

2017.8.14　　鈴木　実

5　THE RECTANGULAR ISING MODEL

前節のような，両端が繋がれている1次元スピン列を考える．これはFig. 2のような輪になる．この輪を1層として1層ずつ平行に重ねる．そうすると，全体として筒状になる．この筒状格子は，最上層のスピン列の上に同じ n 個のスピンからなるringをスピンの上に次のスピンが来るように n 個同時に重ねて構成する．これをcylindrical crystal modelと呼ぶ．

論文では縦の列をchainと言い，横の層をtierと言っている．n 本の縦のchainが平行に（つまりスピンが格子状に整列するように）並べ，n 本目のchainが最初のchainの横に並び筒状の2次元スピン格子を形成する．j 番目のchainの一番上のスピンは最後に載せられたtierのスピンでこれを μ_j とする．したがって，最後に重ねられたtierのスピン配置は

$$\mu_1,\ \mu_2,\ \cdots,\ \mu_{n-1},\ \mu_n$$

となる．このスピン配置をそのまま書くのは大変なので，ひとまとめにして (μ) と書くことにする．つまり，

$$(\mu) = (\mu_1,\ \mu_2,\ \cdots,\ \mu_{n-1},\ \mu_n)$$

として，一番上のtierのスピン配置を表すことにする．

さて，1つ下のtierのスピン配置を (μ') と書くことにしよう．tierが1層増えることにより，追加されるエネルギーは下のtierのスピンとの相互作用エネルギー u_1 と追加されたtier内のスピン間相互作用エネルギー u_2 である．u_1 は (μ) と (μ') の間の相互作用エネルギーであるので，これを $u_1((\mu),(\mu'))$ と書くと，

$$u_1((\mu),(\mu')) = -J\sum_{j=1}^{n}\mu\mu' = -k_{\mathrm{B}}TH\sum_{j=1}^{n}\mu\mu' \tag{O-21}$$

である．J はchain方向のスピン間相互作用エネルギーである．さらに，

$$H = J/k_{\mathrm{B}}T = \beta J \tag{1}$$

である．

一方，最上層のtier内スピン間相互作用エネルギー u_2 は (μ) のみで決まるから (μ) のみの関数となり，これを $u_2((\mu))$ と書くと，

$$u_2((\mu)) = -J'\sum_{j=1}^{n}\mu_j\mu_{j+1} = -k_{\mathrm{B}}TH'\sum_{j=1}^{n}\mu_j\mu_{j+1} \tag{O-25}$$

である．ここで，J' はtier層内のスピン間相互作用エネルギーである．一般的に，J と J' は異なるとする．さらに，

$$H' = J'/k_{\mathrm{B}}T = \beta J' \tag{2}$$

とした．

したがって，最上層のtierを追加することにより増加したエネルギーは $E = u_1 + u_2$ であり，k 番目の層の

エネルギーを E_k，全体のエネルギーを E_T と書くと，$E_T=\sum_k E_k$ であるから，分配関数 Q は

$$
\begin{aligned}
Q &= \sum_{(\mu^{(k)})} \exp(-\beta E_T) = \sum_{(\mu^{(k)})} \exp(-\beta \sum_k E_k) = \sum_{(\mu^{(k)})} \prod_k \exp(-\beta E_k) \\
&= \sum_{(\mu^{(k)})} \prod_k \exp(-\beta u_1 - \beta u_2) = \sum_{(\mu^{(k)})} \prod_k \exp(H \sum_{j=1}^{n} \mu\mu' + H' \sum_{j=1}^{n} \mu_j \mu_{j+1}) \\
&= \sum_{(\mu^{(k)})} \prod_k V
\end{aligned}
\tag{3}
$$

となる．総和は各 tier のスピン配列の全てのスピンの組み合わせを考え，それをさらに全ての層について異なる組み合わせを考えて，全部の組み合わせについて和を取る．ここで，

$$V = \exp(H \sum_{j=1}^{n} \mu\mu' + H' \sum_{j=1}^{n} \mu_j \mu_{j+1}) \tag{4}$$

$$= \exp(H \sum_{j=1}^{n} \mu\mu') \exp(H' \sum_{j=1}^{n} \mu_j \mu_{j+1}) \tag{5}$$

$$= V_1 V_2 \tag{6}$$

である．ただし，

$$V_1 = \exp(H \sum_{j=1}^{n} \mu\mu') = \prod_{j=1}^{n} \mathrm{e}^{H\mu_j\mu'_j} \tag{7}$$

$$V_2 = \exp(H' \sum_{j=1}^{n} \mu_j \mu_{j+1}) = \prod_{j=1}^{n} \mathrm{e}^{H'\mu_j\mu'_{j+1}} \tag{8}$$

である．各 tier で，V，あるいは V_1，V_2 は式の形が同じであるから，式 (6) では層ごとに区別することはしない．この V は下の (μ') と自分の層の (μ) が決まれば決定する．つまり，(μ) を成分を表す添字であると考えると，tier の次元は n 個のスピンの合成座標の次元である 2^n であるから，V は 2^n 次の行列とみなすことができる．したがって，(μ') に関して全てのスピンの組み合わせについて総和をとることは，対象とする tier における行列 V とその下の tier の行列 V の積を表す．このようにして最下層と最上層の tier の総和を除いて全ての tier のスピンの組み合わせの総和をとればそれは V^{N-1} を意味する．つまりこれは，1 次元の場合と同様に，2 次元スピン配列の場合も，分配関数を行列の積として表すことができるということを意味する．したがって，分配関数計算の単位となる行列 V の固有値を求めれば 2 次元イジングモデルの分配関数を計算できる，ということがこれからわかる．

tier の最上層と最下層をそのままにしておいて落ち着きが悪い場合は次のようにすればよい．まず，$N+1$ 層の tier を追加し，これが第 1 層の tier に一致するとしよう．そうすると，全体としては N を法とする周期的境界条件が成立する．そこで，最下層の tier に関する全てのスピンの組み合わせについて総和をとると，分配関数は $\mathrm{Tr}\, V^N$ となる．このようにする境界条件はトーラスモデルと呼ばれる．しかし，本論文ではそこまでしていない．つまり，実際に計算するのは分配関数の対数であるので，$\ln V$ の定数倍となるだけで全部を計算する必要はなく，tier 1 層の分配関数を求めるだけで十分である．

ここまでは，単なる物理量の計算であったので，変数は相互に可換である．そのため，式 (4) と式 (5) はどちらの方向にも変形可能である．つまり，$V=V_1V_2$ という変形が一般的に成り立つ．しかし，この段階で 1 次元モデルのように演算子を導入しよう．つまり，V_1V_2 の状態に演算子を導入する．そうすると，$V=V_1V_2$ の変形は一般的には成立しなくなるので注意が必要である．

V_1 のうち，μ'_j と μ_j に関係する部分 $V_1^{(j)}$ を μ'_j と μ_j の座標を成分とする行列で表すと，$V_1=\prod V_1^{(j)}$ である．$V_1^{(j)}$ は式 (O-8) と同様にして，

$$V_1^{(j)} = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{H} & \mathrm{e}^{-H} \\ \mathrm{e}^{-H} & \mathrm{e}^{H} \end{pmatrix} \tag{9}$$

となることがわかる．1 次元の場合と同じ演算子 C を用い，今度はそれが μ_j にしか作用しないので C_j と書くと，上の式は

$$V_1^{(j)} = (\mathrm{e}^H + \mathrm{e}^{-H} C_j) \tag{10}$$

と表すことができる．したがって，式 (O-15) の関係から，

$$V_1 = \prod_{j=1}^{n} (\mathrm{e}^H + \mathrm{e}^{-H} C_j) = (2 \sinh 2H)^{n/2} \mathrm{e}^{H^* B} \tag{O-22}$$

となる．ただし，

$$B = \sum_{j=1}^{n} C_j \tag{O-23}$$

である．式 (O-22) の変形は演算子が C_j のみで互いに可換であるから可能である．

V_2 にも次のようにスピン演算子 s_j を導入しよう．格子位置 $1, \cdots, n$ のスピンが $\mu_1, \cdots, \mu_n$ の値を持つ状態で，s_j が関数 $\psi(, \cdots, \mu_j, \cdots, \mu_n)$ 作用する場合を考えた時，s_j は値 μ_j をとる．あるいは，論文のように

$$(s_j, \psi(, \cdots, \mu_j, \cdots, \mu_n)) = \mu_j \psi(, \cdots, \mu_j, \cdots, \mu_n) \tag{O-26}$$

と書いても良い．このようなスピン演算子 s_j を用いて式 (8) の V_2 を表すと，

$$V_2 = \exp(H' \sum_{j=1}^{n} s_j s_{j+1}) = \mathrm{e}^{H' A} \tag{O-28}$$

となる．ただし，

$$A = \sum_{j=1}^{n} s_j s_{j+1} \tag{O-27}$$

となる．結局，固有値を求める対象となる行列は

$$V = V_2 V_1 = (2 \sinh 2H)^{n/2} \mathrm{e}^{H' A} \mathrm{e}^{H^* B} \tag{O-29}$$

ということになる．全体の分配関数は

$$\cdots V_1 V_2 V_1 V_2 V_1 V_2 V_1 V_2 \cdots$$

であるから，$V_1 V_2$ でも $V_2 V_1$ でも構わない．実際は，$V_1^{1/2} V_2 V_1^{1/2}$ を計算することになる．

ここまでで，演算子 $C_1, \cdots, C_n$，および $s_1, \cdots, s_n$ が導入された．対角化すべき V を考えると，その中には，s_j に関しては，$s_j s_{j+1}$ となっていて s_j に関して線形ではない．線形ではない場合，C_j や s_j などの演算子を用いるだけでは対角化は困難であろう．したがって，演算子の基底として $C_1, \cdots, C_n$，および $s_1, \cdots, s_n$ を用いるだけでは難しいと考えられる．そこで，V を対角化するための演算子の基底として，$C_1, \cdots, C_n$，および $s_1, \cdots, s_n$ から構成される新しい演算子を作り，A と B が新しい演算子の線形結合で表されるようにしよう，と Onsager は考えたということである．

6 QUATERNION ALGEBRA

前節で導入された演算子 s_j および C_j について式 (O-30) ではこれらの演算子が関数 $\psi(\mu_1, \cdots, \mu_j, \cdots, \mu_n)$ に作用しているが，このとき ψ は例えば μ_j の関数として μ_j^0 を含んでいても構わない．その場合でも，

$$(s_j, \psi) = \mu_j \psi$$

が成り立つ．スピンの値は μ_j となっているが，すでに値が決まっていると考える．C_j も同様で，もし，ψ に含まれる μ_j が μ_j^0 なら，あるいは μ_j の偶数乗なら (C_j, ψ) は変わらない，ということになる．つまり，$\mu_1, \cdots, \mu_j, \cdots, \mu_n$ という n 個のスピン配列の状態に作用し，C_j はその状態のスピンを反転し，s_j はそのスピン状態の値を返すということである．

このような演算子が $\mu_1, \cdots, \mu_j, \cdots, \mu_n$ に作用することになると，このスピン配列が取りうる全ての状態が構成できることになる．その数はそれぞれのスピンが ± 1 を取るので全部で 2^n 種類存在する．これが 1 つのベクトル空間を形成して，関数 $\psi(\mu_1, \cdots, \mu_j, \cdots, \mu_n)$ はその上に定義されるということになる．

Onsager は式 (O-31) で示したように，s_j，C_j，s_jC_j が四元数代数を満足すると述べている．つまり，1，s_j，C_j，の間の演算を行うと必然的に s_jC_j が入ってくる．しかし，それ以上演算を続けても，負号を除いて，新しい演算子は出てこない．すなわち，1，s_j，C_j，および s_jC_j は四元数的である．四元数代数は，一般にハミルトンの四元数 (1，i，j，k) のように (i，j，k はここだけの使用),

$$i^2 = -1, \quad j^2 = -1, \quad k^2 = -1, \tag{11}$$

$$ij = k, \quad jk = i, \quad ki = j, \tag{12}$$

$$ij = -ji, \quad jk = -kj, \quad ki = -ik \tag{13}$$

という演算を満たす．ところが，1，s_j，C_j は対応してみると符号が合わないところもある．このような場合，虚数単位などを導入して合わせることもできるが，そうしてはいないのは，多分そうすることにあまり意義を見出さなかったようだ．つまり，この符号の不一致はこの後の展開にはあまり影響がないということである．それよりも，$s_j^2 = 1$，$C_j^2 = 1$，$(s_jC_j)^2 = -1$，となることが重要で，その意味では，後でわかるように，-1 よりも 1 になるほうが重要だったと思われる．なお，添字が違う演算子は互いに可換である．

演算子 (1，s_j，C_j，s_jC_j) および (-1，$-s_j$，$-C_j$，$-s_jC_j$) の集合が群を構成すること，およびその規約表現が次のようになることについては別のエントリーですでに述べた [1].

$$\mathbf{D}_2(1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}_2(s_j) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}_2(C_j) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}_2(s_jC_j) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{14}$$

演算子 1，s_j，C_j，s_jC_j が作用する関数を定義する空間は 2^n 次元ベクトル空間で，その次元に着目すれば，演算子は一般性を拡張して，このような単一の演算子の n 個の直積とすることができる．このように拡張された演算子も四元数代数を満たすのはあきらかである．ちなみに，s_j あるいは C_j は拡張された場合には，

$$1 \times 1 \times \cdots \times s_j \times \cdots \times 1$$

$$1 \times 1 \times \cdots \times C_j \times \cdots \times 1$$

ということになる．このような直積で，j 番目の場所には (1，s_j，C_j，s_jC_j) のうちの 1 つが入るので，このような直積の演算子は全部で 4^n 個あることがわかる．しかも，このような定義の仕方から，この演算子は一義的である．既に述べたように [1]，拡張した演算子は，その演算子自身が逆元になっている．したがって，その演算子とそれに負号を付した演算子が類 (class) を形成する．ただし，(1) と (-1) は例外である．((1) と (-1) はそれ自身が類を形成する．) 式 (14) から明らかなように，1 つのブロックの表現は (1) を除いて全て跡が 0 である．ここで，直積の跡は跡の積に等しい ($\mathrm{Tr}\,(AB) = \mathrm{Tr}\,A\,\mathrm{Tr}\,B$ である) ことに注意すると，(1) を除いた拡張した演算子の表現の積は 0 である．このような拡張演算子の既約表現は，

$$\mathbf{D}_2 \times \mathbf{D}_2 \times \cdots \times \mathbf{D}_2 = \mathbf{D}_2^n \tag{15}$$

となり，この行列表現は 2^n 次であることがわかる．

このようにして得られる拡張した演算子は，まず行列表現したときにユニタリーである．次に，4^n 個あるこの拡張された演算子は一次独立である．このことを示しておこう．まず，式 (14) により，直積のブロックは

s_jC_j 以外はそれ自身が逆行列で，かつ対称行列であるからユニタリー行列である．s_jC_j のブロックは転置行列が逆行列であるからこの行列もユニタリー行列である．同じ形式の行列の直積 ($\otimes$) の間の積は，対応する行列の積の直積である ($(A\otimes B)(C\otimes D) = AC\otimes BD$)．つまり，拡張された演算子の行列表現はユニタリーである．また，拡張された演算子の行列表現の跡は，単位演算子以外，0 であることが示される．これは，ブロックの演算子が単位演算子以外は 0 であることから明らかである．

次に，この演算子が一次独立であることは，この演算子がそれ以外の演算子の 1 次結合で表すことができない，ということである．これを示すために，2^n 次行列の成分をベクトルの成分と考えてみよう．このベクトルの成分の並びを r 行 s 列とすると，成分の添字は 11, 12, 21, 22 という順番になって，それが直積の場合は最初は $(11\cdots 11)$ から始まり次は $(11,\cdots,11,12)$，最後は $(22,\cdots,22,22)$ という具合に指数が決まる．このようなベクトルは，行が 2^n，列が 2^n の自由度があり，全体で $2^n\times 2^n = 2^{2n}$ の自由度のベクトル，つまり 2^{2n} 次元のベクトルと同等である．このようなベクトルの内積は，もとの拡張演算子 Q の表現を式 (14) の表記を用いて $\mathbf{D}(Q)$ と表すことにすると，

$$(\mathbf{D}(Q_1),\mathbf{D}(Q_2)) = \sum_{r=1}^{2^n}\sum_{s=1}^{2^n}\mathbf{D}(Q_1)_{rs}\mathbf{D}(Q_2)_{rs} \tag{16}$$

となる．以上のことから，拡張演算子 Q_1 と Q_2 のベクトル内積を考えると，

$$(\mathbf{D}(Q_1),\mathbf{D}(Q_2)) = \sum_{r=1}^{2^n}\sum_{s=1}^{2^n}\mathbf{D}(Q_1)_{rs}\mathbf{D}(Q_2)_{rs} = \sum_{r=1}^{2^n}\sum_{s=1}^{2^n}\mathbf{D}(Q_1)_{rs}\overline{\mathbf{D}(Q_2)}_{sr} = \sum_{r=1}^{2^n}\mathbf{D}(Q_1Q_2^{-1})_{rr} = \mathrm{Tr}\ \mathbf{D}(Q_3) \tag{17}$$

ということになる（原論文ではこの式の表記が少し乱れている）．ただし，$Q_3 = Q_1Q_2^{-1}$ である．一方，拡張された演算子は単位演算子以外すべて跡は 0 である．つまり，このベクトルは直交する．これから，4^n 個の基底ベクトルは一次独立であることがわかる．すなわち，どのベクトルも他のベクトルの 1 次結合では表せない．つまり，これはどの拡張演算子の行列表現も他の拡張演算子の行列表現の 1 次結合では表せないことを意味する．逆に，4^n 個の拡張演算子は 2^n 次の行列で表現することができて，さらに拡張された演算子は四元数代数を満足することから，四元数代数を満足する 2^n 次の行列に等価であることがこれから示される．行列表現を用いるか，あるいは四元数演算子を用いるかは利便性の問題である．

*　*　*　*　*

直積により 4^n 個の拡張演算子が導入されたが，以下の計算に用いられるのはその一部分である．求めるのは式 (O-23) の固有値であり，そこに含まれるのは A と B である．A には s_js_{j+1} という s_j に関して 2 次の項の和であり，B は C_j のみが含まれる．したがって，全体として s_j の奇数次の項は現れない．このような s_j の偶数次の演算子（つまりは 4^n 個の拡張演算子のいずれかに一致する）は全体の演算子の半分である．このことは，

$$C = C_1C_2\cdots C_n \tag{O-32}$$

という演算子を考えたときに，この C と可換である演算子と非可換な演算子の分類と一致する．実際，s_j と非可換である C_j は必ず C に 1 個含まれるので，s 演算子が偶数個含まれれば C と可換になることは明らかである．

演算子を行列表現するときに，一般には基底関数を用いる．ある基底関数に演算子を作用させたときに結果が基底関数の 1 次結合になることで行列表現の成分が決まる．たとえば，次の式 (O-30) において，

$$\begin{aligned}(s_j,\psi(,\cdots,\mu_j,\cdots,\mu_n)) &= \mu_j\psi(,\cdots,\mu_j,\cdots,\mu_n)\\ (C_j,\psi(,\cdots,\mu_j,\cdots,\mu_n)) &= \psi(,\cdots,-\mu_j,\cdots,\mu_n)\end{aligned} \tag{O-30}$$

という演算関係が成立する．$\psi(\mu_1,\cdots,\mu_n)$ を基底関数と理解すると，第 1 式は自分自身で表されるので対角項，第 2 式は μ_j の次数により自分自身かあるいは他の項になる．これから行列表現の成分が決定される．こ

のような基底関数は 2^n 個存在する (表現は $2^n \times 2^n$ の行列である)．こうした基底関数の 1 つに式 (O-32) の C を作用させると，次の 2 種類の結果が考えられる．

$$(C, \psi) = \psi \tag{18}$$

$$(C, \psi) = -\psi \tag{19}$$

この結果に応じて基底関数は even と odd の 2 種類に分類できる．基底関数としては，$\mu_j^2 = 1$ であることに注意すると，μ_j が関数に入る形には $\mu_j^0 = 1$ と μ_j の 2 種類しかない．j は 1 から n まであるので，基底関数は全部で 2^n 個存在するのがわかる．even は μ_j $(J = 0, \cdots, n)$ から偶数個選ぶ組み合わせの数であるから 2^{n-1} 個ある[1]．したがって，この半分の基底関数を使えば，(O-30) のような変換で odd は odd に，even は even にしか変わらないから，表現は簡約できることになる．

以上のようにして基底関数は even と odd に分類される．それぞれに対応する演算子は両方同じで，

$$s_1 s_2,\ s_2 s_3,\ \cdots, s_{n-1} s_n :\quad C_1,\ C_2,\ \cdots,\ C_{n-1} \tag{20}$$

となり，$n-1$ 対となって 1 つ減る．これは，odd の場合には $C = -1$，even の場合には $C = 1$ となって，C_n が独立でなくなるからである．一方，$s_j s_{j+1}$ に関しては，μ_1 から μ_{n-1} が与えられれば，even か odd により，μ_n は自動的に決まる．したがって，$s_n s_{n+1}$ は必要なくなるからである．

このように，even 関数と odd 関数を考えることにより，関数の自由度が 1 つ減るのは良いことであるが，しかし，式 (O-23) の B と，式 (O-27) の A の扱いで不便が生じる．A は even と odd の違いで変わらないが，B は式 (O-23) に含まれる C_n のために even と odd の違いにより符号が変わることになる．このようなことは都合が悪いので，本論文の以下の部分では対称性を重んじて，用いる演算子を式 (15) の代わりに次の式 (O-33) を用いる．

$$s_1 s_2,\ s_2 s_3,\ \cdots, s_n s_1 :\quad C_1,\ C_2,\ \cdots,\ C_n \tag{O-33}$$

そして，付加条件として

$$C = C_1 C_2 \cdots C_n = C = \begin{cases} 1; & \text{(even functions)} \\ -1; & \text{(odd functions)} \end{cases} \tag{O-34}$$

を課すことにしている．このようにしても等価になることは明らかであろう．本論文では，式 (O-34) の第 1 式に $s_j s_{j+1}$ に関する条件があるが，これは自動的に成り立つ恒等式であって条件ではない．しかし，対称的な条件が成り立っていることは全体として整合性があることを示している．

式 (O-33) に現れる演算子の交換関係は次のように交互に配置することにより，明確になる．

$$s_n s_1,\ C_1,\ s_1 s_2,\ C_2,\ s_2 s_3,\ \cdots, s_{n-1} s_n,\ C_n\ s_n s_{n+1},\ \cdots, \tag{O-35}$$

つまり，このように配置すれば，隣接する演算子とは非可換，それ以外は可換になる．これは次の節で重要な論理展開に使われる．

[1]odd の基底関数の数は，n 個の (μ_j^0, μ_j^1) ブロックから μ_j^1 を選ぶ組み合わせであるから，

$$\sum_{l=0}^{[n/2]} \binom{n}{2l-1}$$

である．この値は次のような二項係数を利用して求める．

$$(1-1)^n = \binom{n}{0} - \binom{n}{1} + \binom{n}{2} - \cdots + (-1)^n \binom{n}{n} = 0$$

この式は，偶数の基底関数の数が正の係数を有する二項係数の和であり，奇数の基底関数の数が負の係数を有する二項係数の和であって，その和が 0 であることは，両者が等しく，2^{n-1} であることを示す．

参考文献

[1] 2017/5/27 の entry 「Onsager 論文の四元数演算子が構成する群の既約表現」
http://totoha.web.fc2.com/Onsager_1.pdf