

Onsager の 2次元イジングモデル厳密解の論文を読む その3

2017.10.5 鈴木 実

7 DUAL TRANSFORMATION

この節はわかりにくい。Onsagerはこの節の冒頭でKramers-Wannier (K-W)[2]の双対関係について言及しているので、まず、K-Wの双対関係について述べてからOnsagerの論文に入りたい。すでにこの節の内容については別のエントリー[1]で一度述べたので、ここでは少し違う切り口から考えてみよう。最初にK-Wの論文に遡って双対関係の由来を知っておこう。

* * * * *

K-Wの論文に書いてあるように、彼らは2次元イジングモデルの厳密解は行列の固有値問題を解くに帰結すると指摘しているものの、その固有値を求めることはできなかった。しかし、その過程で興味深い発見をしている。K-Wの興味深い発見、つまり双対関係については後で述べることにして、少し寄り道になるが、K-Wの論文の関係する部分を要約して書き留めておこう。双対関係を理解するために必要になる。

2次元イジングモデルを解くためにK-Wが考えた方法は、2次元格子を1周n個のスピンのからなる無限長の螺旋構造に見立てることである。螺旋が十分長い場合は、スピンを1個あるいは1層積み重ねても出発点の影響は考慮しなくてもよいという考えに立脚している。

以下、K-Wの論文は次のように進む。螺旋に付け加えられた最後の1個をn番目とする。そうして端から連続したn+1個のスピンのが $\mu_n, \mu_{n-1}, \dots, \mu_1, \mu_0$ となる確率を $P(\mu_n, \mu_{n-1}, \dots, \mu_1, \mu_0)$ 、同じく端からn個のスピンのが $\mu_n, \mu_{n-1}, \dots, \mu_1$ となる確率を $A(\mu_n, \dots, \mu_1)$ とする。そうすると、

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

が成り立つ。ここで、確率の解釈については以前のエントリー[3]に書いた。

$$\sum_{\mu_0} P(\mu_n, \dots, \mu_1, \mu_0) = A(\mu_n, \dots, \mu_1) \tag{2}$$

であるから、

$$\sum_{\mu_0} \exp[K\mu_n(\mu_{n-1} + \mu_0)]A(\mu_{n-1}, \dots, \mu_0) = \lambda A(\mu_n, \dots, \mu_1) \tag{3}$$

が成り立つ。いま、 $A(\mu_n, \dots, \mu_1)$ を基底とみなせば、この関係式から行列 \mathcal{A} を定義することができる。 $A(\mu_n, \dots, \mu_1)$ は 2^n 次元であるから、この行列も 2^n 次行列になる。

K-W論文では $n=5$ の \mathcal{A} を具体的に示しているが、長いのでここでは $n=4$ の例を示そう。 A を $A(++++)$ のように表し、+を0、-を1として2進数で表し、

++++, +++-, ++-+, +-+-, +---, -+++...

を, $0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ とする. そうすると, 式 (3) から,

$$\begin{aligned}
e^{2K} A(++++) + A(+++-) &= \lambda A(++++) \\
e^{2K} A(++-+) + A(++--) &= \lambda A(+++-) \\
e^{2K} A(+--+) + A(+--+) &= \lambda A(++-+) \\
e^{2K} A(+---) + A(+---) &= \lambda A(++--) \\
A(-+++) + e^{-2K} A(-++-) &= \lambda A(+--+) \\
A(-+-+) + e^{-2K} A(-+--) &= \lambda A(+--+) \\
A(- -++) + e^{-2K} A(- -+-) &= \lambda A(+---) \\
A(- - -+) + e^{-2K} A(- - - -) &= \lambda A(+---)
\end{aligned}$$

となるので, $\alpha = e^{2K}$, $\beta = e^{-2K}$ において, $A(-++-)$ は $A(+---)$ と同じであることに注意すると,

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \alpha & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \beta & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

と行列表現される.

\mathcal{A} は 2^n 次行列であるから, 2^n 個の固有値 λ_i をもつ. λ_i に属する固有ベクトルを $A_i(\mu_n, \dots, \mu_1)$ としよう. μ_n, \dots, μ_1 の組を (μ_n, \dots, μ_1) と表すことにすると, (μ_n, \dots, μ_1) は 2^n 次元の座標と考えることができる. そうすると, $A_i(\mu_n, \dots, \mu_1)$ は 2^n 次元のベクトルとみなすことができる. その場合は 2^n 次元のベクトルの成分の間の関係を示す式と理解される. このベクトル空間には 2^n 個の 1 次独立な基底ベクトルが存在する. このような 2^n 次元のベクトルの見方からすると, 式 (3) は (μ_n, \dots, μ_1) 成分は $A(\mu_n, \dots, \mu_1)$, それ以外は 0 であるような基底ベクトルを用いた行列表現を定める式とみなすことができる. K-W 論文では, この行列から分配関数が得られ, この行列の固有値が 1 スピン当りの分配関数を与えることが示されている.

さて, 式 (3) は, μ_0, \dots, μ_n のうちから, あるいはもつと直接的には, μ_0 と μ_n のうちから μ_0 による総和をとることにより得られる $A(\mu_{n-1}, \dots, \mu_0)$ と $A(\mu_n, \dots, \mu_1)$ の関係式である. 総和を取るのには, ベクトルの成分が n 個であるのに対し変数が $n+1$ 個あるからである. したがって, 式 (3) に付随する数学的な関係式として, μ_n で総和をとる関係式も存在する. 2^n 次元のベクトル $A(\mu_n, \dots, \mu_1)$ のかわりに $B(\mu_n, \dots, \mu_1)$ というベクトルを用いると, 式 (3) で A を B に置き換えた

$$\sum_{\mu_n} \exp[K\mu_n(\mu_{n-1} + \mu_0)] B(\mu_{n-1}, \dots, \mu_0) = \lambda B(\mu_n, \dots, \mu_1) \quad (5)$$

という形がまず考えられる. ただし, この式はそのままでは成り立たない. というのは, まず, 左辺で μ_n で総和をとっているのだから, 右辺の座標成分は μ_n を含まれない $(\mu_{n-1}, \dots, \mu_0)$ でなければならないからである. 左辺をそのままにして右辺のみ $B(\mu_{n-1}, \dots, \mu_0)$ と変えた場合は, この式は成り立たないので, 左辺の座標成分は (μ_n, \dots, μ_1) と変えなければならない. 結局, 式 (3) に付随する関係式は,

$$\sum_{\mu_n} \exp[K\mu_n(\mu_{n-1} + \mu_0)] B(\mu_n, \dots, \mu_1) = \lambda B(\mu_{n-1}, \dots, \mu_0) \quad (6)$$

となる. 式 (3) はベクトルの成分を $(\mu_{n-1}, \dots, \mu_0)$ から (μ_n, \dots, μ_1) へシフトする関係式であるのに対し, 式 (6) は逆にベクトルの成分を (μ_n, \dots, μ_1) から $(\mu_{n-1}, \dots, \mu_0)$ へシフトする関係式である.

この式の物理的な解釈は自ずから明らかではない。原論文でも説明は必ずしも十分ではない。K-W の論文ではこのような暗い部分がある。ここでは式 (3) に付随する関係式と考えよう。 $A(\mu_n, \dots, \mu_1)$ と $B(\mu_n, \dots, \mu_1)$ が双対的な関係にあることはこの後で示す例を見ればわかる。

式 (6) で、 $B(\mu_{n-1}, \dots, \mu_0)$ を基底とすれば、式 (3) の場合と同様に、この関係式によって、 \mathcal{A} と同様に、 2^n 次正方行列 \mathcal{B} を定義することができる。したがって、この行列の固有値 λ_p は 2^n 個存在する。実際のところは、 \mathcal{B} は \mathcal{A} の転置行列であり、両者の固有値は一致する。その和 $\sum \lambda_p$ はスピン 1 個当りの分配関数となる。 $B(\mu_{n-1}, \dots, \mu_0)$ は $A(\mu_{n-1}, \dots, \mu_0)$ に双対なベクトルで内積が定義される。 \mathcal{A} の λ_p に属する固有ベクトルを $A(\mu_{n-1}, \dots, \mu_0)$ 、 \mathcal{B} の λ_q に属する固有ベクトルを $B(\mu_{n-1}, \dots, \mu_0)$ とすると、 $p \neq q$ のとき、 $A(\mu_{n-1}, \dots, \mu_0)$ と $B(\mu_{n-1}, \dots, \mu_0)$ は直交する。

式 (4) についても、 $n = 4$ の場合の具体的な成分の関係は

$$\begin{aligned}
e^{2K} B(++++) + e^{-2K} B(-+++) &= \lambda B(++++) \\
B(++++) + B(-+++) &= \lambda B(+++-) \\
e^{2K} B(+++-) + e^{-2K} B(-++-) &= \lambda B(++-+) \\
B(+++-) + B(-++-) &= \lambda B(++--) \\
e^{2K} B(++-) + e^{-2K} B(-+-) &= \lambda B(+--+) \\
B(++-) + B(-+-) &= \lambda B(+--+) \\
e^{2K} B(+--+) + e^{-2K} B(-+--) &= \lambda B(+--+) \\
B(+--+) + B(-+--) &= \lambda B(+---)
\end{aligned}$$

である。したがって、行列表現は

$$\mathcal{B} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha & 0 & 0 & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha & \beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7)$$

となる。これから明らかになるのは、 \mathcal{B} が \mathcal{A} の転置行列になっていることである。つまり、式 (3) と式 (6) は双対の関係にある。

K-W は行列 \mathcal{A} が適当なユニタリ行列 T を用いた相似変換 $T^{-1}\mathcal{A}T$ により、転置行列に変換できることを示している。上の例では

$$T = \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (8)$$

となり, これを用いて,

$$\begin{aligned}
& T^{-1} \mathcal{A} T = T \mathcal{A} T \\
& = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \alpha + \beta + 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha + \beta - 2 \\ \alpha - \beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha - \beta \\ 0 & \alpha + \beta + 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha + \beta - 2 & 0 \\ 0 & \alpha - \beta & 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha - \beta & 0 \\ 0 & 0 & \alpha + \beta + 2 & 0 & 0 & \alpha + \beta - 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha - \beta & 0 & 0 & \alpha - \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha + \beta + 2 & \alpha + \beta - 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha - \beta & \alpha - \beta & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
& = \frac{e^{2K} - e^{-2K}}{2} \begin{pmatrix} \coth K & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tanh K \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \coth K & 0 & 0 & 0 & 0 & \tanh K & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \coth K & 0 & 0 & \tanh K & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \coth K & \tanh K & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (9)
\end{aligned}$$

となるが,

$$\coth K = e^{2K^*} \quad (10)$$

とおくと,

$$T^{-1} \mathcal{A} T = \sinh 2K \begin{pmatrix} e^{2K^*} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-2K^*} \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & e^{2K^*} & 0 & 0 & 0 & 0 & e^{-2K^*} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{2K^*} & 0 & 0 & e^{-2K^*} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{2K^*} & e^{-2K^*} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (11)$$

である. 式 (4) および式 (7) をそれぞれ $\mathcal{A}(K)$ および $\mathcal{B}(K)$ とおけば,

$$T^{-1} \mathcal{A}(K) T = \sinh 2K \mathcal{B}(K^*) = \sinh 2K {}^t \mathcal{A}(K^*) \quad (12)$$

という関係が成り立つことがわかる. 式 (9) から式 (11) に変形するとき用いた変換式 (10) は「その 1」の変換式 (23) と同じであり, もともとは WK の双対関係の構築の際に出てきた変換式であることがわかる. この関係式は, ユニタリー行列 T を用いて \mathcal{A} を相似変換した行列は \mathcal{B} の K を K^* に置き換えて $\sinh 2K$ 倍したものに等しいことを示している. あるいは, \mathcal{B} の代わりに \mathcal{A} の転置行列と言ってもよい.

$\mathcal{A}(K)$ の固有値を $\lambda(K)$ とすると, 転置行列にしても固有値は変わらないから, 式 (11) は

$$\lambda(K) = \sinh 2K \lambda(K^*) \quad (13)$$

であることを意味する. 式 (O-17) の $\tanh 2K \cosh 2K^* = 1$ を辺々掛けて少し整理すると,

$$\frac{\lambda(K)}{\cosh 2K} = \frac{\lambda(2K^*)}{\cosh 2K^*} \quad (14)$$

という関係式が得られる。λ に特異点があれば、この式から両辺の特異点は一致するので、 $K = K^*$ に存在することがわかる。固有値の特異点は分配関数の特異点、すなわち転移点であるから、この関係から転移点を定義する関係式が得られることになる。

もう1つの見方として、温度を考えてみる。温度を0から ∞ へ上げて行くと、 $K = J/kB$ は ∞ から0に減少する。一方、 K^* は逆に式(10)から0から ∞ に増加する。温度を上げていってある温度で特異点に達すると、そこで対応する K と K^* が決まる。つまり、分配関数に特異点がある場合は必ず特異点の対となり K と K^* に対応する。分配関数が1個しかない場合、その温度は $K = K^*$ でなければならず、 K と K^* の間の関係式に代入して転移点が求められる、ということを示している。

K-W は、式(9)に示されるように、分配関数を導く行列に適当な変換行列（今の場合は実対称ユニタリ行列式(8)で相似変換を施した行列は、行列を転置してから K を K^* に置き換えて $\sinh 2K$ を掛けたものに等しくなることを見出している。相似変換や転置により固有値は変わらないから、固有値を（したがって、分配関数を） K で表す場合と K^* で表す場合が存在し相互の関係が明確で互いに変換することが可能である。つまり、両者は双対関係にあり、式(10)によって K と K^* は相互に変換することができる。この関係式が Kramers-Wannier の star 変換と言われる。この変換は、式(9)の行列成分に式(7)の行列成分と同じ関数形を要請することによって式(11)とすることによって必然的に導かれる。しかも、この変換が演算子 C を導入する過程でも使用されるということは大変興味深い。

ただし、以上のことは K-W が (16×16) の有限な行列で天下り的に示したことである。Onsager がこの節で述べていることは、そういう dual な変換が演算子の基底の自己同型変換であり、転移点も一般的に定義できるといことで、より直接的であると述べている。

もう1つ K-W が見出した興味深い関係を以下に述べる。この関係は n が奇数の場合に見られるので、 $n = 3$ の場合で例を示そう。まず、 $n = 3$ の場合の式(3)は

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \alpha & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha & 1 \\ 0 & 0 & \beta & 1 \\ \beta & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (15)$$

という行列になる。これに、やや天下りであるが、次のユニタリ行列を用いて相似変換を施す。

$$T_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (16)$$

その結果、

$$T_1^{-1} \mathcal{A} T_1 = \begin{pmatrix} \beta & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta & 1 \\ 0 & 0 & \alpha & 1 \\ \alpha & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (17)$$

という行列になる。これは、式(15)の行列の行を置換したものであるが、見方を変えると、 T の変換を施すことによって、 \mathcal{A} の K が $-K$ になるということを示す。相似変換では固有値は変わらないから K が $-K$ に変わっても固有値は変化しないことを示している。つまり、分配関数は変わらないことを示す。

K-W は、まず、固有値を求める行列の0でない成分が1、 e^{2K} 、 e^{-2K} のみであり、かつ、 K を $-K$ に変えることが、式(16)のようなユニタリ行列 T_1 で相似変換 ($T_1^{-1} \mathcal{A} T_1$) することと同等であること（つまり式(17))を見出したのである。この式の K は Onsager の論文の H と考えて良い。 K と $-K$ は強磁性と反強磁性に対応する。相似変換では行列の固有値は変わらないから、このことは、2次元イジングモデルでは強磁性と反強

磁性が分配関数が同一であり形式的な対称性を有していることを示している。一方は他方の熱的な揺らぎとなりキュリー点において両者の分配関数は一致することになる。

以上が、Onsager がこの節で K-W の論文について言及している部分である。このことを踏まえて、Onsager の論文を追っていこう。

* * * * *

ということで、Onsager の論文に戻ると、まず、この節のタイトルおよび冒頭で述べている K-W の双対変換 (dual transformation) とは、式 (11) で表される行列を用いてこの論文における行列 V に施される変換のことである。その変換とは、基底変換でもあるが、この論文においては、その基底に対応するのがこの節で述べている演算子であり、変換は基底演算子間の自己同型写像に相当すると Onsager は前置きしている。自己同型写像が具体的に何に相当するのかは後で示す。

まず、次の演算子の 2 つの集合がある。

$$s_1 s_2, s_2 s_3, \dots, s_n s_1 : C_1, C_2, \dots, C_n \quad (\text{O-33})$$

この 2 組の演算子をその 2 組の演算子のどれかに重複無く置換することにより、この演算子の全部あるいはいずれかの部分で表現された物理量は変換されて、一般には、異なる値になる。変換する物理量、あるいは変換する置換の種類によっては、変わらない場合もあるし、あるいは全く異なるものに変換されてしまうこともある。

たとえば、3次元のベクトルを考えるとわかりやすいかもしれない。式 (O-33) の演算子を、 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ と $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ と見立てると、演算子の置換はベクトルの関係では座標変換に相当する。ベクトルの大きさはこの場合保たれる。座標系を右手系を保つように回転した場合は、ベクトルは方向を変えるが、大きさは保たれる。また、角運動量などのベクトル外積を含む量は同じ大きさで、一般に方向は変わるが物理量の値は不変である。これらのベクトルは座標系の回転とともにベクトルが回転するためにこのように大きさが保存される。なぜそうなるのかというと、ベクトル成分の演算関係が保存されるからである。これは式 (O-33) の演算子の代数で言えば、演算子相互の順番や交換関係に対応する。このように演算子相互の順番と交換関係を保存しながら演算子を置換するような変換をこの論文では自己同型変換と呼んでいる。あるいはこのような関係を対称性とも呼んでいる。この論文で満たされている対称性は回転鏡映 (dihedral) 対称性である。¹このような関係が満たされる条件で演算子を置換すれば、そのとき表現される物理量は保存されるか、あるいは一定の関係を満たすように変化する、ということになる。そのような関係を念頭に置けばわかりやすくなると思われる。

具体的に計算する量は

$$V = (2 \sinh 2H)^{n/2} \exp(H'A) \exp(H*B) \quad (\text{O-29})$$

$$A = \sum_{j=1}^n s_j s_{j+1}, \quad B = \sum_{j=1}^n C_j \quad (\text{O-27, O-23})$$

である。式 (O-33) に現れる演算子の交換関係は $s_j s_{j+1}$ と C_j を次のように交互に配置して、隣の演算子との間が非可換 (反交換)、それ以外は可換とすると、 s_i と C_j の本来の交換関係と同等であることがわかる。

$$s_n s_1, C_1, s_1 s_2, C_2, s_2 s_3, \dots, s_{n-1} s_n, C_n, s_n s_{n+1}, \dots, \quad (\text{O-35})$$

そうすると、 $s_j s_{j+1}$ あるいは C_j を

$$s_j s_{j+1} \rightarrow s_{j+k} s_{j+k+1}, \quad C_j \rightarrow C_{j+k} \quad (\text{18})$$

のように cyclic に置換しても s_j と C_j の間の交換関係は変わらないし、 A と B は変化しない。したがって、明らかに V は変化しない。また、

$$s_j s_{j+1} \rightarrow s_{j-k} s_{j-k-1}, \quad C_j \rightarrow C_{j-k} \quad (\text{19})$$

¹ n 回回転対称軸を持ち、かつ回転軸を含む面に関する鏡映対称性を有する対称性を回転鏡映対称性という。

としても同様に V は変化しない.

ここで次のように考えてみよう. s_j と C_j を交互に円周上に等間隔に配置すると, 上の演算子の置換はそれぞれ n 回回転対称, n 回回転鏡映 (回映) の操作を意味し, V はこの 2 つの対称性を満たすということを示す.

式 (O-35) の交換関係を満たした演算子の置換ではまだ他に $s_j s_{j+1}$ と C_j を交換する置換がある. これは, たとえば,

$$s_j s_{j+1} \rightarrow C_j, \quad C_j \rightarrow s_{j-1} s_j \quad (20)$$

とする置換である. これは式 (O-35) において, 自分の左側の演算子に置き換わるという置換である. この場合は, $s_j s_{j+1}$ と C_j が全部置き換わる. したがって, $s_j s_{j+1}$ と C_j は可換ではないから, V は異なる値に変化する. このような置換は他に,

$$s_j s_{j+1} \rightarrow C_{j+k}, \quad C_j \rightarrow s_{j-1+k} s_{j+k} \quad (21)$$

や

$$s_j s_{j+1} \rightarrow C_{-j+k}, \quad C_j \rightarrow s_{-(j-1)+k} s_{-j+k} \quad (22)$$

などがある. まとめて記述すると式 (O-36) になる. これらの置換により,

$$A \rightarrow B, \quad B \rightarrow A \quad (23)$$

のように A と B が交換される. したがって, 式 (O-35) の交換関係を満たした置換は A と B が変化しない場合と交換される場合の 2 種類しかない, ということになる. つまり, 式 (5) の自己同型変換により, 式 (O-29) の V は

$$V \rightarrow (2 \sinh 2H)^{n/2} \exp(H'B) \exp(H^*A) \quad (24)$$

に変換される. それ以外の自己同型変換で V は変化しない. この変換をもう 1 回施すと V は元に戻る. 変換された式 (24) は A と B の係数が違うのみで, $V_2 V_1$ の定数倍とみなすことができる (結果的にそうであることがわかる). このような関係は等価な量を表す二つの表現であって双対 (dual) であると言える. したがって, 式 (O-36) は V に関する 1 つの双対変換 (dual transformation) を提供する.

* * * * *

$V = V_2 V_1$ の場合を, 式 (O-29) から

$$V(H', H) = (2 \sinh 2H)^{n/2} \exp(H'A) \exp(H^*B) \quad (25)$$

と書くことにする. 一方, $V' = V_1 V_2$ と定義して,

$$V'(H', H) = (2 \sinh 2H)^{n/2} \exp(H^*B) \exp(H'A) \quad (26)$$

と書くことにしよう. 指数部で, A の係数を第 1 引数, B の係数の star 変換を第 2 引数にする. (この論文では, V_1 と V_2 の定義が後半で逆になっているので注意しておく. 本筋には関係ない.) 式 (25) と式 (26) は同じように見えるが, A と B は可換ではないから等しくはない.

A と B が交換される自己同型変換を \mathcal{R} という演算子で表すことにしよう. そうすると,

$$\begin{aligned} \mathcal{R}[V(H', H)] &= (2 \sinh 2H)^{n/2} \exp(H'B) \exp(H^*A) \\ &= \frac{(2 \sinh 2H)^{n/2}}{(2 \sinh 2H'^*)^{n/2}} (2 \sinh 2H'^*)^{n/2} \exp(H'B) \exp(H^*A) \\ &= (\sinh 2H)^{n/2} (\sinh 2H')^{n/2} V'(H^*, H'^*) \end{aligned} \quad (27)$$

となる. ここで, 第 2 式から第 3 式への変形では, 式 (O-17) を用いた.

$$\gamma = (\sinh 2H \sinh 2H')^{n/2} \quad (28)$$

とおくと,

$$\mathcal{R}[V(H', H)] = \gamma V'(H^*, H'^*) \quad (29)$$

という関係式が導かれる.

また $V_1 V_2$ と $V_2 V_1$ 同じ分配関数を与えなければならないから, その固有値は等しい. このことは, V_1 と V_2 が実対称行列であること, すなわち,

$${}^t V_1 = V_1, \quad {}^t V_2 = V_2 \quad (30)$$

が成り立つことから直接示すことができる. まず, 転置行列の固有値は元の行列の固有値と同じである. このことは, 行列 A が行列 T を用いて対角化できるとき, D を対角行列として,

$$D = {}^t(T^{-1} A T) = {}^t T {}^t A {}^t T^{-1} = P^{-1} {}^t A P \quad (31)$$

となることから明らかである. ただし, $P = {}^t T^{-1}$ である. また, このとき, 対角部分が相互に一致するから固有値の対角部分における並びも一致する. 式 (O-23) および式 (O-29) の A および B は対称行列であるから, $V_2 = e^{H'A}$ と $V_1 = e^{H'B}$ も対称行列になる (付録 A を参照). 対称行列の積は対称行列である.

$$V_1 V_2 = {}^t V_1 {}^t V_2 = {}^t (V_2 V_1) \quad (32)$$

したがって, $V_1 V_2$ は $V_2 V_1$ の転置行列である. したがって, $V_1 V_2$ と $V_2 V_1$ の固有値は一致するのである. つまり, $V(H', H)$ と $V'(H', H)$ の固有値は一致する. このことは, 分配関数は, 行列から求めるときの単位が $V_1 V_2$ でも $V_2 V_1$ でも同じにならなければならないという理由から既に述べた [1].

$V(H', H)$ と $V'(H', H)$ を行列で表現した場合を考えよう. 具体的には付録 A で詳しく述べるが, 基本的なスピンの状態を基底ベクトルにした場合, $e^{H'A}$ は対角行列, $e^{H'B}$ は 0 でない成分が 1 である対称単項行列である. したがって, $V(H', H)$ および $V'(H', H)$ は -1 および 1 を 0 でない成分とする単項行列である.

自己同型変換 \mathcal{R} を行列 R を用いて, $R^{-1} V R$ と相似変換として表すことにすれば, 式 (29) は

$$R^{-1} V(H', H) R = \gamma V'(H^*, H'^*) \quad (33)$$

となる. \mathcal{R} 操作を 2 回繰り返せば, あるいは偶数回繰り返せば元に戻るから

$$R^{-1} V'(H^*, H'^*) R = \gamma^{-1} V(H', H) \quad (34)$$

が成り立つ. これは

$$V(H', H) R^2 = R^2 V(H', H) \quad (35)$$

とすることもできる. $V(H', H)$ は成分が連続的に変化する行列であり, R は H' や H に無関係だから, このような任意の行列と可換な行列は単位行列 E しかない. したがって,

$$R^2 = E \quad (36)$$

である. これから R はまず実対称ユニタリ-行列 (直交行列) である. R の列ベクトルを \mathbf{r}_i とすると, 式 (36) は

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{b}_j = \delta_{ij} \quad (37)$$

であることを意味する. 具体的なベクトル成分は基底に依存するが, 上で述べたスピン状態の基底を用いれば, \mathbf{r}_i は 1 つの成分のみが 1 でそれ以外は 0 となる. つまり, R は置換行列である. これからわかることは, $R^{-1} V'(H^*, H'^*) R$ は $V'(H^*, H'^*)$ の行と列を置換した行列で対角化した時に対応する固有値が置換した行列を表すということである. ここで, $V'(H^*, H'^*)$ は $V(H^*, H'^*)$ の転置行列であるから, したがって, $V(H', H)$ と $V(H^*, H'^*)$ の対応する固有値 λ の間には式 (33) から,

$$\lambda(H', H) = \gamma \lambda(H^*, H'^*) \quad (38)$$

という関係が成り立つことがわかる. この式は, 原論文の式 (O-38) である.

原論文には、式 (O-37) の下に定義式がないまま、 $V(H', H)$ と $V'(H', H)$ が出てくるが、定義は式 (25) および式 (26) の通りである。この式にある $(1 + C)$ は、演算子で考えた場合、演算子が作用する固有関数が偶の場合にはこの式が成り立つが、奇の場合には成り立たないということを式で表している。式 (25) は原論文の第 1 式であり、式 (26) で、 H' を H^* に、 H を H'^* に置き換えたのが第 2 式である。第 2 式では、式 (O-17) の $\sinh 2H' \sinh 2H'^* = 1$ という関係と $(H^*)^* = H$ という関係²を用いた。

原論文 p.123 の右コラム最後の段落で、Onsager が KW の演算子と言及しているのは、 $n = 4$ の場合は式 (4) である。それが、Onsager の論文の演算子を使うと、

$$\exp(Hs_{n-1}s_n)(\sinh 2H)^{1/2} \exp(H^*C_n)T \quad (39)$$

となる。この式では、KW の論文に合わせて相互作用のエネルギーを上下方向と左右方向を同じにしているので、 H' が H になっているが、これは特に問題ない (KW の論文では両方が K になっている)。式の最後の演算子 T については置換演算子と書いてあり、特に具体的な定義がないが、螺旋を $2\pi/n$ 回転させる演算子ということから、添字の j を 1 つ増減する演算子と考えられる。

式 (1) の $\exp[K(\mu_n\mu_{n-1} + K\mu_n\mu_0)]$ を本論文の演算子である $s_{j-1}s_j$ と C_j を用いて表した式である。

ここで、次の自己同型変換を施す (これは式 (22) で $k = n$ の場合に相当する)。

$$s_j s_{j+1} \rightarrow C_{n-j}, \quad C_j \rightarrow s_{n-j+1} s_{n-j}, \quad (40)$$

そうすると、具体的には次のような変換が起こる。

$$\begin{array}{cccccc} C_{n-1} & s_{n-1}s_n & C_n & s_n s_1 & C_1 & s_1 s_2 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ s_2 s_1 & C_1 & s_1 s_n & C_n & s_n s_{n-1} & C_{n-1} \end{array} \quad (41)$$

これを見ると、変換前はスピンの位置が 1 つずつ増えるのに対し、変換後は 1 つずつ減っていくことがわかる。螺旋構造で考えれば、番号の大きいほうにはすでにスピンの配列されていて、番号の少ないほうに、すなわち下のほうにスピンを加えて螺旋構造を作る作り方に対応している。つまり、KW の論文で言えば固有ベクトル B に対応していることになる。

Onsager が示している次の式 (係数を除く) は、演算子 T の働きが十分明らかではないが、その意味を少し考えてみよう。

$$\exp(Hs_{n-1}s_n) \exp(H^*C_n)T = \exp(Hs_{n-1}s_n)T \exp(H^*C_1) \quad (42)$$

これを式 (40) の変換を施すと、

$$\exp(HC_1) \exp(H^*s_1s_n)T' = \exp(HC_1)T' \exp(H^*s_n s_{n-1}) \quad (43)$$

²式 (10) から、

$$\frac{\cosh^2 H + \sinh^2 H}{\sinh H \cosh H} = e^{2H^*} + e^{-2H^*}$$

両辺に ± 2 して、

$$\frac{(\cosh H + \sinh H)^2}{\sinh H \cosh H} = (e^{H^*} + e^{-H^*})^2$$

$$\frac{(\cosh H - \sinh H)^2}{\sinh H \cosh H} = (e^{H^*} - e^{-H^*})^2$$

辺々割って

$$e^{2H} = \coth H^*$$

となる。これは式 (10) と比較することにより、

$$(H^*)^* = H$$

であることを意味する。

変換後の T は T' と変えた, T は左に作用して添字を 1 つ上げる作用をすると理解できる. これが螺旋を $2\pi/n$ 回転させるのと同じという意味であろう. 上の 2 つの式で T および T' に関係するところを比較してみると,

$$\exp(H^* C_n) T = T \exp(H^* C_1) \quad (44)$$

$$\exp(H^* s_1 s_n) T' = T' \exp(H^* s_n s_{n-1}) \quad (45)$$

となる. これを見ると, T と T' の作用による添字の増減が逆になっているので,

$$T' = T^{-1} \quad (46)$$

であることがわかる. 演算子 T の使い方が十分明らかではないが, 自己同型変換では T も T^{-1} されることになる. いずれにせよ, ここの部分は Onsager 論文の自己同型変換が KW 論文の 2 つの固有ベクトルの間の関係とそこから派生する 2 つの行列 \mathcal{A} と \mathcal{B} に対応することを示したということになる.

* * * * *

上で述べたように場合において, $V_2 V_1$ の行列を作ると, その後の議論は同じであるから, 結局, 式 (O-38) (本稿の式 (38)) で H' を H に置き換えた式

$$\lambda(H) = \gamma \lambda(H^*) \quad (47)$$

が結果的に得られる. KW は, 本稿の前半, 式 (14) 以下の部分で述べたように, 分配関数の特異点が 1 個の場合には, 特異点が $K = K^*$ で起こらざるを得ないので, その条件で決定する温度が転移点を与えるという論理展開をした. 式 (47) においても同じ論理展開が可能である. したがって, $H' = H$ の場合, 同じような結論が得られる. H' と H が違っていても, 高温では熱エネルギーによって整列状態の乱れが起りやすく, そのような場合, 縦と横のスピン間相互作用の差は小さくほとんど無視できるだろうから, $H' = H$ とみなしてもよいので, KW と同じ結論が得られる. すなわち, 転移温度は

$$H = H^* \quad (48)$$

として, この方程式を T について解くことから得られる.

Onsager がこのことをわざわざここで書いているのは, イジングモデルへの取り組み方が, Onsager の周期的モデルでも KW の螺旋モデルでも同じ結果が得られることを示すためである. しかも, 螺旋モデルは分配関数を組み立てるのに一つの仮定をしているのに対し, Onsager のモデルは正統的で明快であるので, KW の論文にある種保証を与えているようでもある. $H' = H$ の場合に, KW の結果と比較したのはそういう意味がある.

一方, $H' \neq H$ の場合, 成り立つ式は式 (38) で, 変数が 2 個あり, 特異点の存在のみから転移点を求めるのは無理がある. たとえば, n が十分大きくなる極限において, 式 (38) を見ると, 左辺において H' のある値が特異点だったとしても, それを自己同型変換 (あるいは双対変換) した右辺で同じ関数の対応する引数 H^* が特異点になる保証はない. その逆も同じである. Onsager はこのことをこの節の最後から 1 つ前の段落で述べている. しかし, Onsager は転移点を別の方法でこの論文の後の部分で導いている. その方法は, イジングモデルの 2 次元スピン格子における分配関数の具体的な解析解に依存している. 分配関数の具体的な関数を求め, その連続性を吟味することにより, 結果的に

$$H' = H^* \quad (\text{O-39b})$$

という転移温度を求める方程式を得ている.

しかし, 具体的な関数に依存することをせずに, また特異点に注目しなくても, 転移温度を求めることも可能である. 前にも述べたように [1], 相転移は秩序状態の有無を分ける温度である. 双対変換は一般的な意味で

の座標変換とみなすことができるので、双対変換で物理量が不変であれば対称性が高い、すなわち非秩序状態である。一方、双対変換で変化すれば対称性が低い、すなわち秩序状態である。これから、 V_2V_1 を双対変換したときに、不変となる条件を探せばよい。そうすると、式 (33) から上の式 (O-39b) と同じ条件が得られる。ここで、 $\sinh H \sinh H^* = 1$ から $\gamma = 1$ となることを用いた。このように、相転移温度を得る方程式を得ることができる。ただし、式 (33) で右辺は $V'(H', H)$ になるのみでこれは $V(H', H)$ の転置行列であって厳密には一致しないが、一致する上の必要条件である。

なお、式 (48) から、

$$\tanh H = e^{-2H} \quad (49)$$

となり、これから、

$$H = \frac{1}{2} \ln \cot \frac{\pi}{8} \quad (O-39a)$$

が得られる³。

ここで述べた双対変換は、2次元格子だけではなく、トポロジーの問題における研究テーマになると本節の最後に Onsager は述べている。実際、そのような研究展開もなされているようである。

付録 A 分配関数の行列表現

KW の論文では、分配関数を求めるのに行列表現を多用しているが、Onsager 論文では主として基底関数、あるいは固有関数を用いている。基底関数は、たとえば、点群の指標テーブルを求めるときなどに用いるが、あまり一般的ではないので、一方に行列表現で考えることも理解を助けると思われる。そこで、この付録では、分配関数を計算する際に使う行列表現はどのように定義され、具体的にどのような形になるのか、ということを書き留めておこう。

KW 論文や Onsager 論文でイジングモデルが取扱われる際に特徴的なことは、分配関数を行列で表現する方法である。これは1次元イジングモデルの場合は、分配関数が行列の積の形に直接結びつくので、簡単であるが、2次元の場合には必ずしも直感的にわかりやすくない。ここでは、分配関数が直接行列の積の形になることを具体的に確認しておこう。

0 磁場 1次元イジングモデルの場合

まず、磁場 0 の場合の1次元イジングモデルの場合を考える。

$$Z = \sum_{\mu_1, \dots, \mu_n = \pm 1} e^{\sum_j H \mu_j \mu_{j+1}} = \sum e^{H \mu_1 \mu_2} e^{H \mu_2 \mu_3} \dots e^{H \mu_n \mu_1} \quad (A-1)$$

ここで周期的境界条件を用いて、 $\mu_{n+j} = \mu_j$ とする。このとき、 $e^{H \mu_1 \mu_2}$ を2次元行列の (μ_1, μ_2) 成分と考えると、 $\sum_{\mu_2} e^{H \mu_1 \mu_2} e^{H \mu_2 \mu_3}$ は2つの行列 $\{e^{H \mu_1 \mu_2}\}$ と $\{e^{H \mu_2 \mu_3}\}$ の積である。以下同様にして、行列の積であるこ

³式 (49) を変形して

$$\frac{e^{2H} - 1}{e^{2H} + 1} = e^{-2H}$$

となるので、これを e^{2H} について解くと、

$$e^{2H} = 1 + \sqrt{2}$$

である。一方、 $\tan \pi/4 = 1$ であるので、 $\tan \pi/8 = y$ とおくと、三角関数の倍角の公式から $1 = 2y/(1 - y^2)$ となり、

$$y = \tan \pi/8 = -1 + \sqrt{2} = 1/(1 + \sqrt{2})$$

となつて、 $e^{2H} = \cot \pi/8$ が得られる。

とが示せる。ここで、

$$V = \{e^{H\mu_i\mu_j}\} = \begin{pmatrix} e^H & e^{-H} \\ e^{-H} & e^H \end{pmatrix} \quad (\text{A-2})$$

とすると、

$$\sum_{\mu_2, \dots, \mu_n} e^{H\mu_1\mu_2} e^{H\mu_2\mu_3} \dots e^{H\mu_n\mu_1} = (V^n)_{\mu_1\mu_1} \quad (\text{A-3})$$

となる。ここで、添字 $\mu_1\mu_1$ を付け加えたのは対角成分のみを表すという意味である。したがって、

$$Z = \sum_{\mu_1} (V^n)_{\mu_1\mu_1} = \text{Tr } V^n \quad (\text{A-4})$$

となる。V の固有値は $2 \sinh H$ と $2 \cosh H$ であるから、結局、

$$Z = 2^n (\cosh^n H + \sinh^n H) \quad (\text{A-5})$$

という結果が得られる。

有限磁場 1 次元イジングモデルの場合

次に磁場がある場合を考えよう。そのとき分配関数は

$$Z = \sum_{\mu_1, \dots, \mu_n} e^{\sum_j (H\mu_j\mu_{j+1} + K\mu_j)} = \sum e^{H\mu_1\mu_2} e^{K\mu_2} e^{H\mu_2\mu_3} e^{K\mu_3} \dots e^{H\mu_n\mu_1} e^{K\mu_1} \quad (\text{A-6})$$

となる。この式を次のように書き換える。

$$Z = \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_n \\ \mu'_1, \dots, \mu'_n}} e^{H\mu_1\mu'_2} \delta_{\mu'_2\mu_2} e^{K\mu_2} e^{H\mu_2\mu'_3} \delta_{\mu'_3\mu_3} e^{K\mu_3} \dots e^{H\mu_n\mu'_1} \delta_{\mu'_1\mu_1} e^{K\mu_1} \quad (\text{A-7})$$

これは μ'_1, \dots, μ'_n について総和を取ると式 (A-6) に等しくなることがわかる。実際、式 (A-7) を見ると、 $e^{H\mu_1\mu'_2}$ は 2 次元行列の (μ_1, μ'_2) 成分、 $\delta_{\mu'_2\mu_2} e^{K\mu_2}$ は行列の (μ'_2, μ_2) 成分である。したがって、 μ'_2 で総和をとると、 $e^{H\mu_1\mu'_2} \delta_{\mu'_2\mu_2} e^{K\mu_2}$ は 2 つの行列の積の (μ_1, μ_2) 成分である。ここで、

$$V_1 = \{e^{H\mu_j\mu_{j+1}}\} = \begin{pmatrix} e^H & e^{-H} \\ e^{-H} & e^H \end{pmatrix} \quad (\text{A-8})$$

$$V_2 = \{\delta_{\mu_j\mu_{j+1}} e^{K\mu_{j+1}}\} = \begin{pmatrix} e^K & 0 \\ 0 & e^{-K} \end{pmatrix} \quad (\text{A-9})$$

とすると、

$$Z = \text{Tr } (V_1 V_2)^n \quad (\text{A-10})$$

である。

相互作用のない 1 列スピンの場合

次に、相互作用がない場合を考えてみよう。この場合は行列表現を用いなくても普通に分配関数が計算できるので、結果を比較することができる。相互作用のない 1 次元の場合は独立な n 個のスピンの場合、分配関数は磁場が存在する場合、

$$Z = \sum_{\mu_1, \dots, \mu_n} e^{\sum_j K\mu_j} = \sum e^{K\mu_1} e^{K\mu_2} \dots e^{K\mu_n} \quad (\text{A-11})$$

と表される。これを次のように書き換える。

$$Z = \sum_{\substack{\mu'_1, \dots, \mu'_n \\ \mu_1, \dots, \mu_n}} e^{K\mu_1} \delta_{\mu_1 \mu'_1} a_{\mu'_1 \mu_2} e^{K\mu_2} \delta_{\mu_2 \mu'_2} a_{\mu'_2 \mu_3} \dots e^{K\mu_n} \delta_{\mu_n \mu'_n} a_{\mu'_n \mu_1} \quad (\text{A-12})$$

ただし、ここで、 $a_{\mu'_1 \mu_2} = 1$ である。実際、この式は μ'_1, \dots, μ'_n に関する総和を行うと元の式になることがわかる。この式で、 $e^{K\mu_1} \delta_{\mu_1 \mu'_1}$ と $a_{\mu'_1 \mu_2}$ はそれぞれ次の行列の成分である。すなわち、

$$\{e^{K\mu_1} \delta_{\mu_1 \mu'_1}\} = \begin{pmatrix} e^K & 0 \\ 0 & e^{-K} \end{pmatrix} \quad (\text{A-13})$$

$$\{a_{\mu'_1 \mu_2}\} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A-14})$$

ということになる。この2つの行列は μ'_1 の総和により行列の積となり、これを V で表すと、

$$V = \sum_{\mu'_1} e^{K\mu_1} \delta_{\mu_1 \mu'_1} = \begin{pmatrix} e^K & 0 \\ 0 & e^{-K} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^K & e^K \\ e^{-K} & e^{-K} \end{pmatrix} \quad (\text{A-15})$$

となる。もともと、 $e^{K\mu_j}$ は添字が1個のみで、行列成分と考えれば片方の添字のみに依存する特殊な行列の成分になる。したがって、 $e^{K\mu_j}$ を行列表現すれば、その成分は μ_j のみに依存し、 μ_{j+1} には依存しない。上の式はこの通りになっている。

一方、 μ_j と μ_{j+1} のスピンの間の相互作用 $e^{K\mu}$ を行列にすると、明らかにそれは V に一致する。つまり、 V は相互作用エネルギーが一方のスピンのみによって決まる場合の行列を表している。

行列 V の固有値は $2 \cosh K$ および 0 であることがすぐわかる。したがって、分配関数 Z は、 μ_1, \dots, μ_n に関する V^n の総和により

$$Z = \text{Tr } V^n = \text{Tr} \left[T^{-1} \begin{pmatrix} e^K & e^K \\ e^{-K} & e^{-K} \end{pmatrix} T \right]^n = \text{Tr} \begin{pmatrix} e^K + e^{-K} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}^n = 2^n \cosh^n K \quad (\text{A-16})$$

となる⁴。ただし、 T は次の行列である。

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ e^{-2K} & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A-17})$$

ちなみに、 n 個の独立なスピンの分配関数は1個のスピンの分配関数 Z_1 の n 乗である。明らかに $Z_1 = e^K + e^{-K}$ であるから、 $Z = Z_1^n = (e^K + e^{-K})^n = 2^n \cosh^n K$ となり、式 (A-16) と一致するのである。

2次元イジングモデルの場合

最後に、2次元イジングモデルで出てくる

$$Z = \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_n \\ \mu'_1, \dots, \mu'_n}} e^{\sum_j (H\mu_j \mu_{j+1} + K\mu_j \mu'_j)} = \sum_{\substack{\mu_1, \dots, \mu_n \\ \mu'_1, \dots, \mu'_n}} e^{H\mu_1 \mu_2} e^{K\mu_1 \mu'_1} \dots e^{H\mu_n \mu_1} e^{K\mu_n \mu'_n} \quad (\text{A-18})$$

の行列表現について考えてみよう。Onsager 論文では行列表現を用いていない。

⁴ここでは、 $\text{Tr } AB = \text{Tr } BA$ という関係を用いた。

1 対のスピン

まず, $e^{\mu_1 \mu_2}$ の行列表現を考えてみよう. これを行列表現するには, μ_1 と μ'_1 あるいは μ_2 と μ'_2 のような添字の組み合わせが必要であるが, μ'_1 あるいは μ'_2 がない. したがって, これは式 (A-11) の場合と同類である. 式 (A-11) と同様な行列表現をしようとしても, μ_1 と μ_2 が指数関数の引数となっていてそれぞれが因数に分解できないので, 同じ手法が使えない. そこでここでは, 次のように書き換える.

$$e^{H\mu_1\mu_2} = \exp\left(\sum_{\mu'_1, \mu'_2} H\mu_1\delta_{\mu_1\mu'_1}\mu_2\delta_{\mu_2\mu'_2}\right) = \prod_{\mu'_1, \mu'_2} e^{H\mu_1\delta_{\mu_1\mu'_1}\mu_2\delta_{\mu_2\mu'_2}} \quad (\text{A-19})$$

総和および総乗は μ'_1 と μ'_2 の全ての組み合わせに関する和または積である. この式で, $\mu_1\delta_{\mu_1\mu'_1}$ と $\mu_2\delta_{\mu_2\mu'_2}$ はそれぞれ 2 次正方行列の成分である. さらに, $\mu_1\delta_{\mu_1\mu'_1}$ と $\mu_2\delta_{\mu_2\mu'_2}$ は 2 つの行列の独立した任意の成分の積であるから, 2 つの行列の直積の成分とみなすことができる. これを直積の記号 \otimes を用いて,

$$e^{H\mu_1\delta_{\mu_1\mu'_1}\mu_2\delta_{\mu_2\mu'_2}} = e^{H\{\mu_1\delta_{\mu_1\mu'_1}\} \otimes \{\mu_2\delta_{\mu_2\mu'_2}\}} \quad (\text{A-20})$$

と書くことにしよう. さらに, 行列の直積に合わせて, 添字の μ_1, μ_2 と μ'_1, μ'_2 を直積にして, $\mu_1 \otimes \mu_2$ と $\mu'_1 \otimes \mu'_2$ と書くことにすると, 式 (A-20) は行列の直積 $\{\mu_1\delta_{\mu_1\mu'_1}\} \otimes \{\mu_2\delta_{\mu_2\mu'_2}\}$ の $(\mu_1 \otimes \mu_2, \mu'_1 \otimes \mu'_2)$ 成分とみなすことができる. 見やすくするために, 行列 $\{\mu_1\delta_{\mu_1\mu'_1}\}$ と $\{\mu_2\delta_{\mu_2\mu'_2}\}$ を $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2$ と書くことにしよう. μ_i は行, μ'_i は列を表す. すなわち,

$$\mathbf{s}_1 = \mathbf{s}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A-21})$$

である. そうすると,

$$H\mu_1\mu_2 = \sum_{\mu'_1 \otimes \mu'_2} H(\mathbf{s}_1 \otimes \mathbf{s}_2)_{\mu_1 \otimes \mu_2, \mu'_1 \otimes \mu'_2} \quad (\text{A-22})$$

となる. さらに, $\mathbf{s}_1 \otimes \mathbf{s}_2$ は対角行列で, 対角行列の \exp は対角成分の \exp を対角成分とする行列であるから,

$$e^{H\mu_1\mu_2} = \prod_{\mu'_1 \otimes \mu'_2} [e^{H(\mathbf{s}_1 \otimes \mathbf{s}_2)}]_{\mu_1 \otimes \mu_2, \mu'_1 \otimes \mu'_2} = [e^{H(\mathbf{s}_1 \otimes \mathbf{s}_2)}]_{\mu_1 \otimes \mu_2, \mu_1 \otimes \mu_2} \quad (\text{A-23})$$

となる. $\mathbf{s}_1 \otimes \mathbf{s}_2$ が対角行列であるから, $\mu'_1 \otimes \mu'_2 = \mu_1 \otimes \mu_2$ のときのみ, すなわち, $\mu'_1 = \mu_1$ および $\mu'_2 = \mu_2$ のときのみ 0 でなく, 残った対角項のうち, $(\mu_1 \otimes \mu_2, \mu_1 \otimes \mu_2)$ 成分は左辺に一致する. 具体的に $e^{H\mathbf{s}_1 \otimes \mathbf{s}_2}$ を示すと,

$$\begin{aligned} e^{H\mathbf{s}_1 \otimes \mathbf{s}_2} &= \exp \left[H \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] = \exp \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \begin{bmatrix} \left(\begin{matrix} e^H & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-H} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-H} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^H \end{matrix} \right) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A-24})$$

となる. したがって, スピン 2 個からなる系の分配関数は

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\mu_1, \mu_2} e^{H\mu_1\mu_2} = \sum_{\mu_1, \mu_2} [e^{H(\mathbf{s}_1 \otimes \mathbf{s}_2)}]_{\mu_1 \otimes \mu_2, \mu_1 \otimes \mu_2} \\ &= \sum_{\mu_1 \otimes \mu_2} [e^{H(\mathbf{s}_1 \otimes \mathbf{s}_2)}]_{\mu_1 \otimes \mu_2, \mu_1 \otimes \mu_2} = \text{Tr} e^{H\mathbf{s}_1 \otimes \mathbf{s}_2} = 2(e^H + e^{-H}) \end{aligned} \quad (\text{A-25})$$

ということになる.

基底ベクトル

式 (A-21) の行列の成分は $\mu_1\mu'_1$ であり、その値は $\mu'_1 = \pm 1$ と $\mu_1 = \pm 1$ の組み合わせで決まる。一方、この行列成分を定義する基底ベクトルが存在する。つまり、基底ベクトルにスピン演算子の行列 \mathbf{s} を基底ベクトルに作用させたときの値である。1 個のスピンの場合の基底ベクトルは「その 1」の式 (14) と (15) で述べたように、

$$\begin{pmatrix} \mu(1) \\ \mu(-1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

のようになる。前者はそれぞれ $\mu = +1$ と $\mu = -1$ に対応する。

1 対のスピンの場合、すなわち、 $\mathbf{s}_1 \otimes \mathbf{s}_2$ の成分を決定する基底ベクトルは上の 2 つの基底ベクトルの直積、すなわち、

$$\begin{pmatrix} \mu_1(1) \\ \mu_1(-1) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \mu_2(1) \\ \mu_2(-1) \end{pmatrix} \quad (\text{A-26})$$

と表される。この基底ベクトルは $(\pm\mu_1, \pm\mu_2)$ の全ての状態を表すことができる。具体的にこの基底ベクトルの例を示すと、 $(\mu_1, \mu_2) = (+1, +1), (+1, -1), (-1, +1), (-1, -1)$ に対応して、

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

となる。直積をこのように展開してしまうと、具体的なスピンの状態が直感的にわかりにくい。たとえば、上の例は直積で表した基底ベクトルでは、それぞれ、

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

に対応している。明らかに直積表現は直感的によりわかりやすいというメリットがある。

2 対のスピン

スピンの 3 個あって 2 対のスピン間相互作用がある場合、すなわち $e^{H\mu_1\mu_2} e^{H\mu_2\mu_3}$ の場合について考えてみよう。スピン 1 対の場合と同様にして、対応する行列は

$$e^{H\mathbf{s}_1 \otimes \mathbf{s}_2} e^{H\mathbf{s}_2 \otimes \mathbf{s}_3} \quad (\text{A-27})$$

となる。このように 1 対のスピンを行列の直積で表わす行列表現において、2 対あるいはそれ以上の場合について、基底ベクトルを式 (A-24) のように考えるとそのままでは具合が悪い。なぜなら、直積のブロックが行列とベクトルで同じスピンに対応していないと、 \mathbf{s}_i は μ_j ($j \neq i$) に対しては値を返さないからである。したがって、スピンの行列とスピンの基底ベクトルが対応していないといけない。そのため、2 次の単位行列 \mathbf{E} を用いて、スピン行列のブロックが対応するような構造をとるようにすればよい。上の場合は、

$$e^{H\mathbf{s}_1 \otimes \mathbf{s}_2 \otimes \mathbf{E}} e^{H\mathbf{E} \otimes \mathbf{s}_2 \otimes \mathbf{s}_3} \quad (\text{A-28})$$

とすればよいことがわかる。この場合のスピンの基底ベクトルは

$$\begin{pmatrix} \mu_1(1) \\ \mu_1(-1) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \mu_2(1) \\ \mu_2(-1) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \mu_3(1) \\ \mu_3(-1) \end{pmatrix} \quad (\text{A-29})$$

となる。

これでもよいかもしれないが、もう少し簡潔に表現することを考えてみよう。この表現のほうが論文に出て
いる一般的な表現になる。そのため、 \mathbf{s}_j の定義を次のようにする。すなわち、

$$\begin{aligned}\mathbf{s}_1 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{E} \otimes \mathbf{E} \\ \mathbf{s}_2 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{E} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{E} \\ \mathbf{s}_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \mathbf{E} \otimes \mathbf{E} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (\text{A-30})$$

のように、 \mathbf{s}_j の場合は 3 個の直積のブロックのうち、第 j 番目のブロックをスピン行列にしてそれ以外を単位
行列にする。そうすると、式 (A-29) は

$$e^{H\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2} e^{H\mathbf{s}_2\mathbf{s}_3} \quad (\text{A-31})$$

のように簡単になる。同様に、 n 個のスピンの場合には

$$e^{H\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2} e^{H\mathbf{s}_2\mathbf{s}_3} \dots e^{H\mathbf{s}_n\mathbf{s}_1} = e^{H(\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2 + \mathbf{s}_2\mathbf{s}_3 + \dots + \mathbf{s}_n\mathbf{s}_1)} \quad (\text{A-32})$$

となるのである。

n 個のスピン系

n 個のスピン系を考える。まず、 $s_j s_{j+1}$ の行列表現を考えよう。上のスピンの直積行列 \mathbf{s}_j を用いると、

$$\begin{aligned}\mathbf{s}_j &= \mathbf{E} \otimes \dots \otimes \mathbf{E} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{E} \otimes \mathbf{E} \otimes \dots \otimes \mathbf{E} \\ \mathbf{s}_{j+1} &= \mathbf{E} \otimes \dots \otimes \mathbf{E} \otimes \mathbf{E} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{E} \otimes \dots \otimes \mathbf{E} \\ \mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1} &= \mathbf{E} \otimes \dots \otimes \mathbf{E} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{E} \otimes \dots \otimes \mathbf{E}\end{aligned}\quad (\text{A-33})$$

のように書ける。直積の積はブロックごとの行列の積の直積になる。ちなみに、直積の和は簡単にはならない。
ほとんどのブロックが等しい場合は、同類項のような計算が可能である。たとえば、

$$\mathbf{s}_j + \mathbf{s}_{j+1} = \mathbf{E} \otimes \dots \otimes \mathbf{E} \otimes \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \otimes \mathbf{E} \otimes \dots \otimes \mathbf{E} \quad (\text{A-34})$$

となる。

行列表示するとき用いる基底ベクトル $\boldsymbol{\mu}$ は直積の表示を用いて、

$$\boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_1(1) \\ \mu_1(-1) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \mu_2(1) \\ \mu_2(-1) \end{pmatrix} \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} \mu_n(1) \\ \mu_n(-1) \end{pmatrix} \quad (\text{50})$$

と書ける。ここで、 $\begin{pmatrix} \mu_j(1) \\ \mu_j(-1) \end{pmatrix}$ は $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ または $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ である。例えば、 $(\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)$ の 1 番目の基底ベクトルは、

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

2 番目の基底ベクトルは,

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

n 番目の基底ベクトルは,

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

のようになる. これは, 別の表記をした場合,

$$++\cdots+,$$

$$++\cdots-,$$

$$--\cdots-$$

となる. あるいは, 2 進数表記では,

$$00\cdots 0,$$

$$00\cdots 1,$$

$$11\cdots 1$$

となる.

直積ベクトルの内積は, それぞれのブロックごとに内積を作った後で全部の積をとればよい. 直積行列が直積ベクトルに作用するときは, それぞれのブロックで行列がベクトルに作用し, 結果のベクトルの直積を求めればよい. たとえば,

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_1 \left[\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] &= \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \left[\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \\ &= - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

というようになる.

さて, $s_j s_{j+1}$ の行列表現は式 (A-33) のように, 直積を用いると, j 番目と $j+1$ 番目のブロックにのみ $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ が現れ, それ以外は単位ベクトルとなって,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

と表される. したがって, $\mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1}$ の行列成分は行と列に相当する固有ベクトルにより,

$$(\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_n)_{s_j s_{j+1}} (\mu'_1, \mu'_2, \cdots, \mu'_n) = {}^t \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (51)$$

と表される. 基底ベクトルは単位直交系であるから, 対角成分以外はすべて 0 となり, $s_j s_{j+1}$ はスピンの状態を変えないので, j 行 j 列と $j+1$ 行 $j+1$ 列成分のみ 1 または -1 となりそれ以外は 0 となる. これが $s_j s_{j+1}$ の基底ベクトルによる行列表示である.

次に, $e^{H \mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1}}$ の基底ベクトルによる行列表現について考えてみよう. $\mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1}$ は対角行列であるから, $e^{H \mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1}}$ も対角行列である. $\mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1}$ の対角成分を λ とすれば, $e^{H \mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1}}$ の対角成分は $e^{H\lambda}$ である. 式 (A-24) は 2 つのスピンの場合の例である.

$e^{K \mu_j \mu'_j}$ については既に「その 2」で述べた.

付録 B $e^{H'A}$ および e^{H*B} の行列表現

$V_2 = e^{H'A}$ と $V_1 = \gamma e^{H*B}$ を行列表現したときに、それぞれが対称行列であることを示す。

付録 A から $e^{H' \mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1}}$ は対角行列であるから、 $e^{\sum H' \mathbf{s}_j \mathbf{s}_{j+1}}$ も明らかに対角行列である。したがって、 V_2 を行列表現すると対角行列になる。すなわち V_2 対称行列である。

一方、 V_1 に関しては、 $B = \sum C_j$ の行列表現を見る必要がある。 s_j と同様に C_j を行列の直積で表現したものを \mathbf{C}_j とする。この行列は、直積の j 番目のブロックのみがパウリ行列の σ_x でそれ以外は単位行列になる。すなわち、

$$\mathbf{C}_j = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B-1})$$

となる。対称行列の直積は対称行列であるというので終わりであるが、上の場合を少し具体的に考えてみよう。 \mathbf{C}_j を 2^n 次の正方行列に直すと次のようになる。まず、 2^{n-j-1} 次の正方行列で成分が全て 0 のブロックを A 、同じ次数の正方行列の単位行列を B として 2×2 のブロック行列で A を対角位置に、非対角位置に B をおいた 2^{n-j} 次の正方行列を C とする。この C ブロックを対角位置に 2^j 個並べた行列が対応する 2^n 次の行列である。この行列は明らかに対称行列である。

\mathbf{C}_j は対称行列である。対称行列の和、積は対称行列であるから、 $\mathbf{B} = \sum_j \mathbf{C}_j$ も対角行列である。したがって、 $e^{\sum_j \mathbf{C}_j}$ も対称行列である。すなわち、 V_1 をスピン基底ベクトルで行列表現した場合、対称行列となる。

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
- [2] H. A. Kramers and G. H. Wannier, “Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition”, Phys. Rev. **60**, 252-262 (1941).
- [3] 2016/12/31 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/Krammers_Wannier_1.pdf