

Onsager の 2次元イジングモデル厳密解の論文を読む その 4

2017.10.6 鈴木 実

8 FUNDAMENTAL VECTOR SYSTEMS

Onsager 論文では行列ベクトル表示ではなく、固有関数あるいはそれを結合した関数に演算子を作用させる表示を用いている。この節では、この論文で中心的な役割を果たす s_j と C_j 演算子の作用する関数について具体的に説明している。

ところで、Onsager は s_j と C_j 演算子などの演算子を四元数演算子 (quaternion) といい、それが作用する関数をベクトル基底 (vector basis)、固有関数を固有ベクトルと表記している。

この節では固有ベクトルに演算子を Onsager と同じ表記を用いて、 Φ を演算子、 ϕ をベクトル (関数) と表したときに、演算結果は

$$(\Phi, \phi) \tag{1}$$

のように表すことにする。この演算結果はベクトル (関数) である。以下、Onsager 論文と同じようにベクトルあるいは固有ベクトルということにしよう。

* * * * *

s_j の固有ベクトル

式 (O-30) は s_j に関係する部分を再掲すると、

$$(s_j, \psi(\mu_1, \dots, \mu_j, \dots, \mu_n)) = \mu_j \psi(\mu_1, \dots, \mu_j, \dots, \mu_n) \tag{2}$$

である。すでにこの式は μ_j が固有値、 ψ が固有関数になっていることを示しているが、正規直交基底ベクトルという意味の関数と考えれば、これが全てのスピンの組み合わせの数 2^n 種類の個々の状態を表し、かつ、スピン状態が、 $\mu'_1, \dots, \mu'_j, \dots, \mu'_n$ であるとき、 $\mu_1, \dots, \mu_j, \dots, \mu_n$ の関数として、 $\mu_1 = \mu'_1, \dots, \mu_j = \mu'_j, \dots, \mu_n = \mu'_n$ のときに 1、それ以外は 0 となるような関数が適当であるということがわかる。そうすると、 $\mu_1, \dots, \mu_j, \dots, \mu_n$ は離散的であるから、Onsager は δ 関数と書いているが、ディラックの δ 関数よりは、クロネッカーの δ がこの関数に合致している。ここでは、表記が少し違うが、クロネッカーの δ の意味としよう。これを具体的に書くと、

$$(s_j, \delta(\mu_1 - \mu'_1, \dots, \mu_j - \mu'_j, \dots, \mu_n - \mu'_n)) = \mu_j \delta(\mu_1 - \mu'_1, \dots, \mu_j - \mu'_j, \dots, \mu_n - \mu'_n) \tag{O-40}$$

であることがわかる。この種類の δ 関数は明らかに 2^n 個存在する。

このような関数の正規化については、 x, y, z の連続関数 $\psi(x, y, z)$ の場合を参考にすればよい。その場合、正規化条件は一般に、

$$\iiint_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, y, z)|^2 = 1 \tag{3}$$

である。いまの場合変数は μ_j で離散的であるから、 $\mu_1, \dots, \mu_j, \dots, \mu_n$ が変数の場合は、

$$\sum_{\mu_1, \dots, \mu_j, \dots, \mu_n = \pm 1} |\psi(\mu_1, \dots, \mu_j, \dots, \mu_n)|^2 = 1 \tag{4}$$

としてよい。この式の総和は、 $\mu_1, \dots, \mu_j, \dots, \mu_n$ の全ての場合、すなわち 2^n の場合の総和である。

以上の正規化の定義に従えば、 $\delta(\mu_1, \dots, \mu_n)$ の正規化係数は簡単に得られる。 $|\delta(\mu_1, \dots, \mu_n)|^2$ は 2^n の μ_1, \dots, μ_n の組み合わせの中で 1 となる場合は 1 つであり、それ以外は全て 0 である。したがって、正規化係数は 1 である。

次に、 $\mu_j \neq \mu'_j$ のときに $\mu_j \mu'_j = -1$ 、 $\mu_j = \mu'_j$ のときに $\mu_j \mu'_j = 1$ となることに注意すると、明らかに、

$$\delta(\mu_1 - \mu'_1, \dots, \mu_j - \mu'_j, \dots, \mu_n - \mu'_n) = \alpha(1 + \mu_1 \mu'_1) \cdots (1 + \mu_j \mu'_j) \cdots (1 + \mu_n \mu'_n) \quad (\text{O-42})$$

とおくことができる。正規化係数は、

$$\sum_{\mu_1, \dots, \mu_j, \dots, \mu_n = \pm 1} |\alpha(1 + \mu_1 \mu'_1) \cdots (1 + \mu_j \mu'_j) \cdots (1 + \mu_n \mu'_n)|^2 = 1 \quad (5)$$

より、 $\mu_j \neq \mu'_j$ のときに $1 + \mu_j \mu'_j = 0$ 、 $\mu_j = \mu'_j$ のときに $1 + \mu_j \mu'_j = 2$ となることに注意すると、

$$(\alpha^2 2^n)^2 = 1 \quad (6)$$

となる。これより、 $\alpha = 2^{-n}$ となり、結局、

$$\delta(\mu_1 - \mu'_1, \dots, \mu_n - \mu'_n) = 2^{-n}(1 + \mu_1 \mu'_1) \cdots (1 + \mu_n \mu'_n) \quad (\text{O-42})$$

となる。

C_j の固有ベクトル

次に、 C_j の固有ベクトルを考えよう。 C_j は μ_j の符号を反転させる作用であるから、 $\mu_1, \dots, \mu_j, \dots, \mu_n$ の積としての $\mu_1^{\nu_1} \cdots \mu_j^{\nu_j} \cdots \mu_n^{\nu_n}$ が固有関数となり、固有値は $(-1)^{\nu_j}$ であることがわかる。すなわち、

$$(C_j, (\mu_1^{\nu_1} \cdots \mu_j^{\nu_j} \cdots \mu_n^{\nu_n})) = (-1)^{\nu_j} (\mu_1^{\nu_1} \cdots \mu_j^{\nu_j} \cdots \mu_n^{\nu_n}) \quad (\text{O-41})$$

が成り立つ。正規化係数 α は正規化条件

$$\begin{aligned} & \sum_{\mu_1, \dots, \mu_j, \dots, \mu_n = \pm 1} \alpha^2 |\mu_1^{\nu_1} \cdots \mu_j^{\nu_j} \cdots \mu_n^{\nu_n}|^2 \\ &= \sum_{\mu_1, \dots, \mu_j, \dots, \mu_n = \pm 1} \alpha^2 |1|^2 = 2^n \alpha^2 = 1 \end{aligned} \quad (7)$$

より、

$$\alpha = 2^{-n/2} \quad (8)$$

となる。

B の固有関数と固有値

次に、 A と B の固有ベクトルを考えよう。Onsager 論文に合わせて、最初に B の固有ベクトルを考えよう。 $\mu_j = \pm 1$ であるから、式 (O-41) の固有ベクトルで、 ν_j としては 0 と 1 を考えれば十分である。すなわち、固有ベクトルは $\mu_1, \dots, \mu_j, \dots, \mu_n$ の中から重複を許さないで k 個選んでその積を考えることに等しい。これを、Onsager 論文と同じく、

$$(\mu_{j_1} \mu_{j_2} \cdots \mu_{j_k}) \quad (9)$$

と書くことにする。\$C_1, \dots, C_n\$ のうち \$(\mu_{j_1} \mu_{j_2} \dots \mu_{j_k})\$ の符号を反転させる \$C_j\$ の数は \$k\$ 個であるから、\$B = \sum C_j\$ が作用した後で符号反転して \$-(\mu_{j_1} \mu_{j_2} \dots \mu_{j_k})\$ となるのが \$k\$ 個、符号が変わらないのが \$n - k\$ 個、これを全部加えると、負符号の個数を差し引いて \$n - 2k\$ 個が残る。すなわち、

$$(B, (\mu_{j_1} \mu_{j_2} \dots \mu_{j_k})) = (n - 2k)(\mu_{j_1} \mu_{j_2} \dots \mu_{j_k}) \quad (\text{O-43a})$$

となる。

上の式の固有値は、個々の \$\mu_{j_i}\$ には依存せず、\$k\$ のみで決まる。つまり、\$\mu_{j_i}\$ の次数が同じならこの方程式を満たすということである。すなわち、このような同じ次数の固有ベクトルは \$n\$ 個の \$\mu_j\$ から \$k\$ 個を選ぶ組み合わせだけ、すなわち、

$$\binom{n}{k}$$

だけ存在する。

さらに、このような固有ベクトルは \$k = 0\$ から \$n\$ まで存在する。一次独立なその個数は、

$$\sum_{k=0}^n \binom{n}{k} = (1 + 1)^n = 2^n \quad (\text{O-43b})$$

である。その全てが固有ベクトルであるから、それに対応する固有値を対角位置に並べれば、固有値変数を \$\lambda\$ として、特性方程式は

$$|B - \lambda| = \prod_{k=0}^n \prod \binom{n}{k} [(n - 2k) - \lambda] = \prod_{k=0}^n [(n - 2k) - \lambda]^{\binom{n}{k}} = 0 \quad (\text{O-43b})$$

となる。

A の固有関数と固有値

\$A\$ の固有ベクトルは、隣接スピン間で方向が変化するところで \$s_j s_{j+1}\$ が \$-1\$ になるので、その個数を調べるところから得られる。一方、tier 内の \$n\$ 個のスピンは周期的境界条件を満たしているので、スピンの向きが変わる境界は偶数個でなければならない。その個数を \$2k\$ としよう。同じスピンの向きのブロックを \$\mu_1\$ から始めて \$\mu_{j_1}\$ まで、次が \$\mu_{j_1+1}\$ から \$\mu_{j_2}\$ まで、というように最後は \$\mu_{j_{2k}+1}\$ から \$\mu_{j_2}\$ までとする。対の種類は、\$s_1 s_2, s_2 s_3, \dots\$、など全部で \$n\$ 個ある。そのうち、スピンが反転して \$s_j s_{j+1}\$ が \$-1\$ となる個数が \$2k\$ 個、反転しない対が \$n - 2k\$ 個存在する。したがって、\$s_j s_{j+1}\$ を式 (O-42) 固有ベクトルに作用させると、\$n\$ 個のうち \$(n - 2k)\$ 個が固有値 \$+1\$、\$2k\$ 個が \$-1\$ となる。\$A = \sum s_j s_{j+1}\$ を作用させた場合は、以上の式を全て加えればよい。したがって、固有値 \$n - 4k\$ が得られる。

\$\mu_1\$ から \$\mu_{j_1}\$ までのスピンを \$\mu_j = 1\$ とすると、式 (O-42) より固有ベクトルは係数を除いて、

$$\prod_{j=1}^{j_1} (1 + \mu_j) \prod_{j=j_1+1}^{j_2} (1 - \mu_j) \dots \prod_{j=j_{2k}+1}^n (1 + \mu_j) \quad (\text{O-43c})$$

となる。これを用いて、上の固有値を考慮すると、結局、

$$\left(A, \left(\prod_{j=1}^{j_1} (1 + \mu_j) \prod_{j=j_1+1}^{j_2} (1 - \mu_j) \dots \prod_{j=j_{2k}+1}^n (1 + \mu_j) \right) \right) = (n - 4k) \left(\prod_{j=1}^{j_1} (1 + \mu_j) \prod_{j=j_1+1}^{j_2} (1 - \mu_j) \dots \prod_{j=j_{2k}+1}^n (1 + \mu_j) \right) \quad (\text{O-44a})$$

となる。

特性方程式を得るために、固有値 $n - 4k$ をもつ固有ベクトルの数を求めよう。まず、 n 個の対から $2k$ 個選ぶ組み合わせだけ反転する対の組み合わせがある。また、 $2k$ は n を超えられないから、 $k \leq \lfloor \frac{n}{2} \rfloor$ である（等号は n が偶数）。さらに、スピンの向きが 2 種類あるから、全体として固有値 $n - 4k$ をもつ固有ベクトルの数は

$$2 \binom{n}{2k}$$

種類存在する。これが対角項に並ぶので特性方程式は、

$$|A - \lambda| = \prod_{k=1}^n (n - 4k - \lambda)^{2 \binom{n}{2k}} \quad (\text{O-44b})$$

ということになる。

この特性方程式の次数は $\sum 2 \binom{n}{2k} = \lfloor \frac{n}{2} \rfloor 2 \binom{n}{2k}$ となるが、これが確かに 2^n 次であることを調べてみよう。まず、 n が偶数である場合には、次式が成り立つことを利用する。

$$\sum_{l=0}^n \binom{n}{l} = \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \binom{n}{2k} + \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor - 1} \binom{n}{2k+1} \quad (12)$$

そうすると、

$$\begin{aligned} & \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} 2 \binom{n}{2k} \\ &= \sum_{l=0}^n \binom{n}{l} - \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor - 1} \binom{n}{2k+1} + \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \binom{n}{2k} \\ &= \sum_{l=0}^n \binom{n}{l} + \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor - 1} (-1)^{2k+1} \binom{n}{2k+1} + \sum_{k=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \binom{n}{2k} \\ &= (1+1)^n + (1-1)^n = 2^n \end{aligned} \quad (13)$$

ということで確かに次数は 2^n 次となる。 n が奇数の場合は、式 (12) の右辺第 2 項の総和の上限が $\lfloor \frac{n}{2} \rfloor$ に変わり、次の式でも対応する部分が同様に変わり、同じ結果が得られる。

* * * * *

p.124 の最後の部分で、 A のスペクトルと述べているのは固有値の集合である。 A の固有値は $n - 4k$ 、 B の固有値は $n - 2k$ である。したがって、 B の固有値で k が偶数のものは A の固有値と一致する。 B の固有ベクトルで k が偶数なら C で全ての μ_j が反転しても全体としての固有ベクトルは符号反転しないから偶関数になる。

A は奇関数でも偶関数でも固有値が同じで、 B の偶固有関数の固有値とも一致するので、これを固有関数の偶奇を含めた表記にすると、

$$(1 - C)A \sim (1 + C)A \sim (1 + C)B \quad (14)$$

となるが、 B の奇の固有関数では奇数次になって固有値も異なるので、偶奇を含めた表記では $(1 - C)B$ は異なるという。

* * * * *

次の節は式の数が多いので、今回はここで区切っておこう。