

非自明な境界条件をもつ 2次元イジング模型

素粒子理論研究室

05819311 木村 仁郎

概要

本研究においてはまず、2次元イジング模型 (Onsager 模型) の分配関数の求め方を復習する。さらに反周期的境界条件における2次元イジング模型の分配関数の求め方を復習し、連続極限における単位格子あたりの自由エネルギーを計算する。また反周期的境界条件において高温と低温の間に分配関数双対性が存在がするかを議論する。そして、2次元ゲージイジング模型とそのテンポラルゲージをとった場合について分配関数と相関関数、ゲージの実現性を議論する。

目次

第1章	はじめに	2
第2章	Onsager 模型	4
第3章	反周期的境界条件の2次元イジング模型	11
3.1	反周期的境界条件の分配関数	11
3.2	各境界条件における自由エネルギー	14
3.3	内部エネルギーと比熱	16
第4章	双対性	18
4.1	2次元正方格子イジング模型の双対性	18
4.2	反周期的境界条件における双対性	20
第5章	まとめ	25
付録A	ゲージイジング模型	27
A.1	テンポラルゲージ分配関数	27
A.2	ゲージイジング模型の相関関数	28
A.3	テンポラルゲージの実現性	30

第1章 はじめに

1944年、2次元イジング模型は Onsager によって厳密に解かれた [1]。それ以来、相転移や臨界現象の理論の主要な柱となっている。Onsager 模型の分配関数の解法や臨界現象の考察は多岐にわたり研究されている。それらは1949年の Kaufman の転送行列とスピノールを用いた方法 [2] や1962年の Kasteleyn のダイマー法 [3][4] などにあげられる。本研究ではそれらのうち、Kaufman の方法を単純化した Kastening の解法に焦点を当て復習することからはじめた。Kastening は複素回転群 $SO(2m, \mathbb{C})$ の2つの交換する表現を転送行列として導入し、2次元イジング模型の解を導いた。この定式化によれば、分配関数の導出はその転送行列の固有値を求めることに帰着する。

近年では、 NbSe_3 でメビウスの帯やフィギュア 8 がマイクロレベルで実現されている (図 1.1)[5]。メビウスの帯やクラインの壺はトポロジカルに興味深い境界条件をもっている。この結晶の実現によりそれらは単に数学的なモデルではなく物理的に実現可能なものとなった。その分配関数や臨界現象等の研究も既に以前から取り組まれていた [6]。

同様に、方向をもったメビウスの帯の上でイジング模型を考えることもまた興味深いことである。かりに絶対温度 0 度の基底状態で一つの方向にスピンの全て揃ったとするとある場所で不自然な境界が存在する (図 1.2)。そこでこの境界条件を実現させるために反周期的境界条件

$$S_{m+1} = -S_1$$

を課す必要がでてくる。

これまでに、ダイマー法や転送行列法によって、様々な境界条件に従うイジング系の分配関数や自由エネルギーが計算されている。本研究で

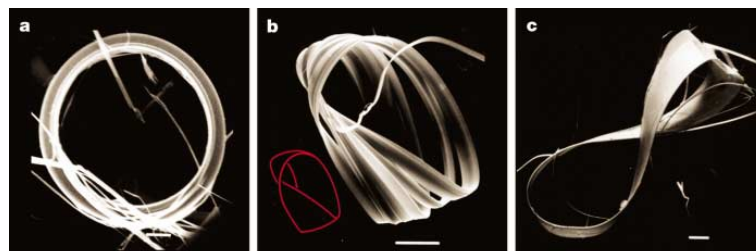


図 1.1: a. 円環 b. メビウスの帯 c. フィギュア 8 (Tanda et al.[5])

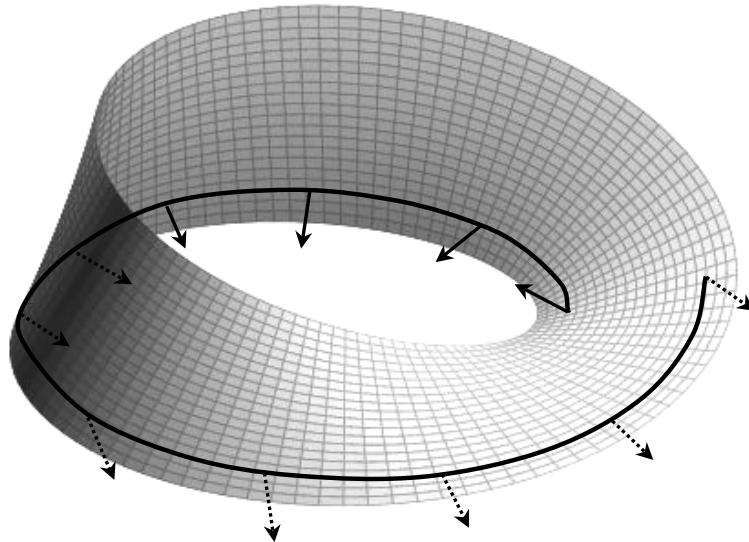


図 1.2: 方向をもったメビウスの帯

は Kastening の方法に沿って、メビウスの帯への足がかりとなる反周期的境界条件に従う系を研究することにする。この系の自由エネルギーや内部エネルギー、比熱が周期的境界条件に従う系のそれとどれだけ異なるかを有限系と熱力学的極限の下での両方で議論する。

本論ではさらに 2 次元イジング模型における分配関数の自己双対性を導く。ここでは正方格子を扱い、厳密な臨界温度が得られる。結合を $a = J/kT$ として、分配関数が高温側 (a) から展開したものと低温側 (a^*) から展開したもので本質的に等しくなるというのが自己双対性である。周期的境界条件に従うイジング模型の場合、双対性関係式

$$\frac{Z(a^*)}{\sinh^{\frac{N}{2}}(2a^*)} = \frac{Z(a)}{\sinh^{\frac{N}{2}}(2a)}$$

が導かれる。これを使うことにより臨界点 a_C が

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

で与えられる。

さらに、反周期的境界条件を課した場合、同様に自己双対性の関係式が存在するかを議論する。

第2章 Onsager 模型

Kastening の解法では周期的境界条件の解から反周期的境界条件の解にそれほど手数をかけずに移ることができる。Onsager 模型は様々な方法で解かれているがこの章と次章にわたって Kastening の解法を復習する。

$l \times m$ のサイトをもつ正方格子の 2 次元イジング模型 (図 2.1) のエネルギーは

$$E = E_a + E_b \quad (2.1)$$

で与えられる。このとき

$$E_a = J_a \sum_{\lambda=1}^l \sum_{\mu=1}^m s_{\lambda\mu} s_{\lambda+1,\mu} \quad (2.2)$$

$$E_b = J_b \sum_{\lambda=1}^l \sum_{\mu=1}^m s_{\lambda\mu} s_{\lambda,\mu+1} \quad (2.3)$$

で $\beta^{-1} = kT$ である。 j_a と j_b は負の値をもつエネルギーパラメーターである。1 列目と $l+1$ 列目は、それと 1 行目と $m+1$ 行目をそれぞれ同一

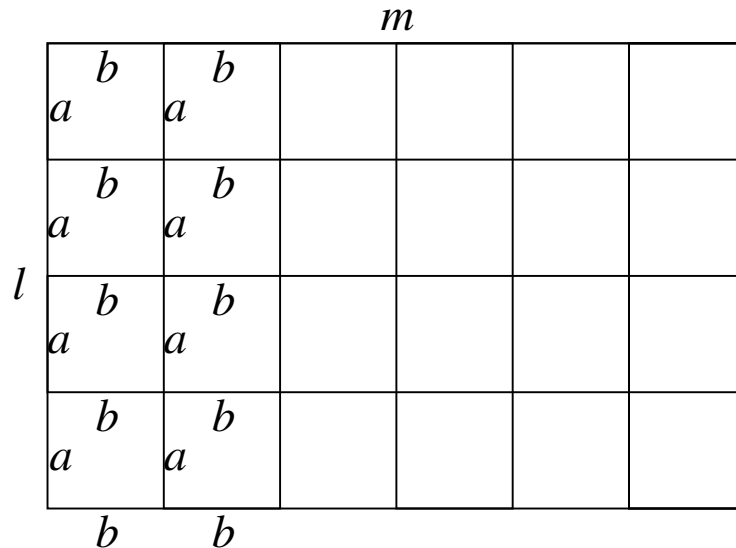


図 2.1: 縦方向が結合 a で横方向が結合 b の $l \times m$ 格子

と見なす。つまり、格子はトーラスの上に張り付いているものと考えられる。スピン変数 $s_{\lambda\mu}$ は ± 1 をとる。そして、 $a = -\beta J_a$ 、 $b = -\beta J_b$ と

定義して分配関数は

$$Z(a, b) = \sum_{s_{11}} \cdots \sum_{s_{lm}} \exp(-\beta E) \quad (2.4)$$

で与えられる。 $2^n \times 2^n$ の転送行列 \mathbf{T} を用いれば $Z(a, b) = \text{Tr} \mathbf{T}^m$ と表され、 \mathbf{T} は

$$\langle \pi | \mathbf{T} | \pi' \rangle = \prod_{\mu=1}^m \exp(as_{\mu} s'_{\mu} + bs_{\mu} s_{\mu+1}) \quad (2.5)$$

で定義されている。このとき $v = 1, \dots, l$ で $\pi_{\lambda} = \{s_{\lambda 1}, \dots, s_{\lambda m}\}$ である。 \mathbf{T} は2つの行列の積で $\mathbf{T} = \mathbf{V}_b \mathbf{V}'_a$ とかけ、 \mathbf{V}'_a と \mathbf{V}_b は

$$\langle \pi | \mathbf{V}'_a | \pi' \rangle = \prod_{\mu=1}^m \exp(as_{\mu} s'_{\mu}) \quad (2.6)$$

$$\langle \pi | \mathbf{V}_b | \pi' \rangle = \prod_{\mu=1}^m \delta_{s_{\mu} s'_{\mu}} \exp(bs_{\mu} s_{\mu+1}) \quad (2.7)$$

と定義している。パウリ行列 σ_x 、 σ_y 、 σ_z と 2×2 の単位行列 $\mathbf{1}$ の直積を用いてスピン行列は

$$\mathbf{X}_{\mu} = \underbrace{\mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}}_{\mu-1} \otimes \sigma_x \otimes \underbrace{\mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}}_{m-\mu} \quad (2.8)$$

$2^m \times 2^m$ のエルミート行列で表現できる。 \mathbf{Y}_{μ} と \mathbf{Z}_{μ} も同様に σ_y と σ_z でそれぞれ表される。 $\sinh(2\bar{a})\sinh(2a) = 1$ によって定義される $\bar{a} > 0$ で

$$\mathbf{V}'_a = [2\sinh(2a)]^{lm/2} \mathbf{V}_a \quad (2.9)$$

とかけ、このとき

$$\mathbf{V}_a = \prod_{\mu=1}^n \exp(\bar{a} \mathbf{X}_{\mu}) \quad (2.10)$$

$$\mathbf{V}_b = \prod_{\mu=1}^m \exp(b \mathbf{Z}_{\mu} \mathbf{Z}_{\mu+1}) \quad (2.11)$$

である。 $Z_{m+1} = Z_1$ としていることに注意したい。すると転送行列は

$$\mathbf{T} = [2\sinh(2a)]^{lm/2} \mathbf{V}_a \mathbf{V}_b \quad (2.12)$$

と表現される。対角和には周期的な特徴があるので分配関数は

$$Z(a, b) = [2\sinh(2a)]^{lm/2} \text{Tr} \mathbf{V}^m \quad (2.13)$$

と書き直される。 \mathbf{V} はエルミート行列で

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}_{a/2} \mathbf{V}_b \mathbf{V}_{a/2} \quad (2.14)$$

であり、ここで

$$\mathbf{V}_{a/2} = \prod_{\mu=1}^n \exp(\bar{a}\mathbf{X}_\mu/2) \quad (2.15)$$

としている。また $\mathbf{V}_{a/2}^2 = \mathbf{V}_a$ である。 \mathbf{V} の 2^m 個の固有値が Λ_k であるとする

$$Z(a, b) = [2\sinh(2a)]^{lm/2} \sum_{\mu=1}^{2^m} \Lambda_k^m \quad (2.16)$$

である。ゆえに \mathbf{V} の固有値を見つけることがここからの課題である。

ここで

$$\{\Gamma_\lambda, \Gamma_\mu\} = 2\delta_{\lambda\mu} \quad (2.17)$$

に従う行列を

$$\Gamma_{2\mu-1} = \mathbf{X}_1 \cdots \mathbf{X}_{\mu-1} \mathbf{Z}_\mu \quad (2.18)$$

$$\Gamma_{2\mu} = \mathbf{X}_1 \cdots \mathbf{X}_{\mu-1} \mathbf{Y}_\mu \quad (2.19)$$

と $2m$ 個 ($\mu = 1, \dots, m$) 定義する。さらに行列

$$\mathbf{U}_X = \mathbf{X}_1 \cdots \mathbf{X}_n = i^n \Gamma_1 \Gamma_2 \cdots \Gamma_{2n}, \quad \mathbf{U}_X^2 = \mathbf{1} \quad (2.20)$$

を定義する。 \mathbf{U}_X は全ての Γ_λ と反交換して $\{\Gamma_\lambda, \mathbf{U}_X\} = 0$ である。いま、(2.11) 式と (2.15) 式に現れる成分は

$$\mathbf{X}_\mu = -\frac{i}{2} [\Gamma_{2\mu}, \Gamma_{2\mu-1}], \quad \mu = 1, \dots, m \quad (2.21)$$

$$\mathbf{Z}_\mu \mathbf{Z}_{m+1} = -\frac{i}{2} [\Gamma_{2\mu+1}, \Gamma_{2\mu}], \quad \mu = 1, \dots, m-1 \quad (2.22)$$

$$\mathbf{Z}_m \mathbf{Z}_1 = \frac{i}{2} \mathbf{U}_X [\Gamma_1, \Gamma_{2m}] \quad (2.23)$$

と書くことができる。ここまでの過程は Kaufman のアプローチ [2] に従う Huang の方法 [7] と通じている。そして続いては、 Γ_μ の積からなる \mathbf{U}_X と双線形の組み合わせ $\Gamma_\alpha \Gamma_\beta$ のみを含んだ (2.11) 式と (2.15) 式で (2.14) 式の \mathbf{V} について議論していく。 \mathbf{V} の組み合わせは 2 つの交換する代数を導く。

射影子を

$$\mathbf{P}^\pm = \frac{1}{2} (\mathbf{1} \pm \mathbf{U}_X) \quad (2.24)$$

とおくと、行列

$$\mathbf{J}_{\alpha\beta} = \frac{i}{4} [\Gamma_\alpha, \Gamma_\beta] \quad (2.25)$$

$$\mathbf{J}_{\alpha\beta}^\pm = \mathbf{P}^\pm \mathbf{J}_{\alpha\beta} \quad (2.26)$$

が定義され、さらに

$$\mathbf{J}_{\alpha\beta} = \mathbf{J}_{\alpha\beta}^+ + \mathbf{J}_{\alpha\beta}^- \quad (2.27)$$

$$\mathbf{U}_X \mathbf{J}_{\alpha\beta}^\pm = \pm \mathbf{J}_{\alpha\beta}^\pm \quad (2.28)$$

の関係が成り立つ。 $\mathbf{J}_{\alpha\beta}^{\pm} = -\mathbf{J}_{\beta\alpha}^{\pm}$ であるから、 $\mathbf{J}_{\alpha\beta}^{+}$ や $\mathbf{J}_{\alpha\beta}^{-}$ の種の互いに独立した $m(2m-1)$ の行列が存在することになる。これらの行列は2つの交換する部分に分かれ、さらに恒等式

$$[\mathbf{J}_{\alpha\beta}^{\pm}, \mathbf{J}_{\gamma\delta}^{\pm}] = i(\delta_{\alpha\gamma}\mathbf{J}_{\beta\delta}^{\pm} + \delta_{\beta\delta}\mathbf{J}_{\alpha\gamma}^{\pm} - \delta_{\alpha\delta}\mathbf{J}_{\beta\gamma}^{\pm} - \delta_{\beta\gamma}\mathbf{J}_{\alpha\delta}^{\pm}) \quad (2.29)$$

が成り立つ。したがって (2.22) ~ (2.23) 式は (2.25) ~ (2.28) 式で書き直されて

$$\mathbf{X}_{\mu} = 2(\mathbf{J}_{2\mu,2\mu-1}^{+} + \mathbf{J}_{2\mu,2\mu-1}^{-}), \quad \mu = 1, \dots, m \quad (2.30)$$

$$\mathbf{Z}_{\mu}\mathbf{Z}_{\mu+1} = (\mathbf{J}_{2\mu+1,2\mu}^{+} + \mathbf{J}_{2\mu+1,2\mu}^{-}), \quad \mu = 1, \dots, m-1 \quad (2.31)$$

$$\mathbf{Z}_m\mathbf{Z}_1 = -2\mathbf{U}_X(\mathbf{J}_{1,2m}^{+} + \mathbf{J}_{1,2m}^{-}) = -2(\mathbf{J}_{1,2m}^{+} + \mathbf{J}_{1,2m}^{-}) \quad (2.32)$$

となる。ゆえに、(2.15) 式の $\mathbf{V}_{a/2}$ は $\mathbf{J}_{\alpha\beta}^{\pm}$ をつかって表現すると

$$\mathbf{V}_{a/2} = \prod_{\mu=1}^n \exp[\bar{a}(\mathbf{J}_{2\mu,2\mu-1}^{+} + \mathbf{J}_{2\mu,2\mu-1}^{-})] = \mathbf{V}_{a/2}^{+} \mathbf{V}_{a/2}^{-} \quad (2.33)$$

となる。このとき

$$\mathbf{V}_{a/2}^{\pm} = \prod_{\mu=1}^n \exp(\bar{a}\mathbf{J}_{2\mu,2\mu-1}^{\pm}) \quad (2.34)$$

である。さらにまた、(2.11) 式の \mathbf{V}_b は

$$\mathbf{V}_b = \exp[-2b(\mathbf{J}_{1,2m}^{+} - \mathbf{J}_{1,2m}^{-})] \prod_{\mu=1}^{m-1} \exp[2b(\mathbf{J}_{2\mu+1,2\mu}^{+} + \mathbf{J}_{2\mu+1,2\mu}^{-})] = \mathbf{V}_b^{+} \mathbf{V}_b^{-} \quad (2.35)$$

となる。このとき

$$\mathbf{V}_b^{\pm} = \exp(\mp 2b\mathbf{J}_{1,2m}^{\pm}) \prod_{\mu=1}^{m-1} \exp(2b\mathbf{J}_{2\mu+1,2\mu}^{\pm}) \quad (2.36)$$

とおいた。そして、(2.14) 式で定義された \mathbf{V} は

$$\mathbf{V}^{\pm} = \mathbf{V}_{a/2}^{\pm} \mathbf{V}_b^{\pm} \mathbf{V}_{a/2}^{\pm}, \quad [\mathbf{V}^{+}, \mathbf{V}^{-}] = 0 \quad (2.37)$$

ということから $\mathbf{V} = \mathbf{V}^{+}\mathbf{V}^{-}$ となる。次のような要素をもつ $M \times M$ の行列 $J_{\alpha\beta}$ を

$$(J_{\alpha\beta})_{ij} = -i(\delta_{\alpha i}\delta_{\beta j} - \delta_{\beta i}\delta_{\alpha j}) \quad (2.38)$$

と定義する。ここでギリシャ文字とラテン文字の添え字は 1 から M の値をとる。 $j_{\alpha\beta} = -j_{\beta\alpha}$ であるから $M(M-1)/2$ の独立した行列になる。これらは $M = 2m$ としたとき、(2.29) 式と同様の代数関係にしたがっている。 $c_{\alpha\beta}$ が任意の複素数である行列 $S = \exp(ic_{\alpha\beta}J_{\alpha\beta})$ をいま考える。 S は $S^T = S^{-1}$ で $\det S = 1$ である複素 $M \times M$ 行列の $\text{SO}(M, \mathbb{C})$ 群を成し

ている。(2.37) 式の \mathbf{V}^\pm 、(2.34) 式の $\mathbf{V}_{a/2}^\pm$ と (2.36) 式の \mathbf{V}_b^\pm と同様に、 $\text{SO}(2m, \mathbb{C})$ の行列を

$$\mathbf{V}^\pm = \mathbf{V}_{a/2}^\pm \mathbf{V}_b^\pm \mathbf{V}_{a/2}^\pm \quad (2.39)$$

と定義して、このとき

$$\mathbf{V}_{a/2}^\pm = \prod_{\mu=1}^n \exp(\bar{a} J_{2\mu, 2\mu-1}^\pm) \quad (2.40)$$

であり、また

$$\mathbf{V}_b^\pm = \exp(\mp 2b J_{1, 2m}^\pm) \prod_{\mu=1}^{m-1} \exp(2b J_{2\mu+1, 2\mu}^\pm) \quad (2.41)$$

と定義する。 \bar{a} と b は実数であるから、行列 $\mathbf{V}_{a/2}^\pm$ 、 \mathbf{V}_b^\pm と \mathbf{V}^\pm は直交しているだけでなくエルミートでもある。そして、 \mathbf{V}^\pm は実数の固有値だけを持ち、完全規格直交系の固有ベクトルをもっている。

いま、 \mathbf{V}^\pm は S_\pm によって対角化できて $\mathbf{V}_S^\pm = S_\pm \mathbf{V}^\pm S_\pm^{-1}$ とすることができる。これによって、

$$\mathbf{V}_S^\pm = \exp\left(\sum_{\mu=1}^m \gamma_{\{2\mu-1\}, \{2\mu-2\}} J_{2\mu, 2\mu-1}\right) \quad (2.42)$$

が得られる。ここで、 γ_k は

$$\cosh \gamma_k = \cosh 2\bar{a} \cosh 2b - \cos \frac{\pi k}{m} \sinh 2\bar{a} \sinh 2b \quad (2.43)$$

によって定義される。 $b = 0$ で $\gamma_k = 2\bar{a}$ と定義して、さらに b のほかの値においても解析接続をすることによって γ_k の符号を決定する。 $k = 1, \dots, 2m-1$ で $\gamma_k > 0$ ということである。また一方 $k = 0$ においては

$$\gamma_0 = 2(\bar{a} - b) \quad (2.44)$$

ということである。この γ_k と γ_0 の下では $\bar{a} > b$ でも $\bar{a} < b$ でも同等にすべての γ_k を扱えることが確約される。つまり、温度と無関係なのである。ここで \mathbf{V}_S^\pm が 2×2 ブロック毎の対角成分のみであることに注意したい。 \mathbf{V}_S^\pm を対角化させることはありふれたことであるが、(2.42) 式によって与えられる形が本来の目的にそった最も便利な形である。行列 S_\pm は $\text{SO}(2n, \mathbb{C})$ の要素であり、したがって $S_\pm = \exp(ic_{\alpha\beta}^\pm J_{\alpha\beta})$ と書かれる。いま、同じパラメーター $c_{\alpha\beta}^\pm$ を使って $(2^m \times 2^m)$ 次元の変換行列を

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \mathbf{S}^+ \mathbf{S}^- \\ \mathbf{S}^\pm &= \exp(ic_{\alpha\beta}^\pm \mathbf{J}_{\alpha\beta}) \end{aligned} \quad (2.45)$$

と定義し、

$$\mathbf{V}_S = \mathbf{S} \mathbf{V} \mathbf{S}^{-1} = \mathbf{S}_+ \mathbf{V}^+ \mathbf{S}_+^{-1} \mathbf{S}_- \mathbf{V}^- \mathbf{S}_-^{-1} \equiv \mathbf{V}_S^+ \mathbf{V}_S^- \quad (2.46)$$

と書く。 \bar{a} 、 b 、 $c_{\alpha\beta}^{\pm}$ が含まれる \mathbf{V}_S^{\pm} を定義する因子と $\mathbf{J}_{\alpha\beta}$ は、 \bar{a} 、 b 、 $c_{\alpha\beta}^{\pm}$ が含まれる V_S^{\pm} と、 $J_{\alpha\beta}$ に同じ構造をもっている。いま、 Baker-Campbell-Hausdorff の公式

$$\exp(A)\exp(B) = \exp\left(A + B + \frac{1}{2}[A, B] + \frac{1}{12}\left\{[A, [A, B]] + [[A, B], B]\right\} + \dots\right) \quad (2.47)$$

を使って、 \mathbf{V}_S^{\pm} の指数関数中の積を求める。すると、

$$\mathbf{V}_S^{\pm} = \exp\left[\sum_{\mu=1}^m \gamma_{\{2\mu-1\}}^{\{2\mu-2\}} \mathbf{J}_{2\mu, 2\mu-1}\right] \quad (2.48)$$

となり、したがって

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_S &= \exp\left[\sum_{\mu=1}^m (\gamma_{2\mu-1} \mathbf{J}_{2\mu, 2\mu-1} + \gamma_{2\mu-2} \mathbf{J}_{2\mu, 2\mu-1})\right] \\ &= \exp\left[\frac{1}{4} \sum_{\mu=1}^m (\gamma_{2\mu-1} (\mathbf{1} + \mathbf{U}_X) \mathbf{X}_{\mu} + \gamma_{2\mu-2} (\mathbf{1} - \mathbf{U}_X) \mathbf{X}_{\mu})\right] \end{aligned} \quad (2.49)$$

となる。 \mathbf{V}_S^{\pm} を対角化するために、新たに同様の変換 $\mathbf{V}_Y = \mathbf{R}_Y \mathbf{V}_S \mathbf{R}_Y^{-1}$ を定義する。 \mathbf{R}_Y とその逆は

$$\mathbf{R}_Y^{\pm 1} = 2^{-n/2} \prod_{\mu=1}^m (\mathbf{1} \pm i \mathbf{Y}_{\mu}) \quad (2.50)$$

で与えられる。 $\mathbf{R}_Y \mathbf{X}_{\mu} \mathbf{R}_Y^{-1} = \mathbf{Z}_{\mu}$ なので、この変換は \mathbf{V}_S を

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_Y &= \mathbf{R}_Y \mathbf{V}_S \mathbf{R}_Y^{-1} \\ &= \exp\left[\frac{1}{4} \sum_{\mu=1}^m (\gamma_{2\mu-1} (\mathbf{1} + \mathbf{U}_Z) \mathbf{Z}_{\mu} + \gamma_{2\mu-2} (\mathbf{1} - \mathbf{U}_Z) \mathbf{Z}_{\mu})\right] \end{aligned} \quad (2.51)$$

とする。 $\mathbf{U}_Z = \mathbf{Z}_1 \cdots \mathbf{Z}_m$ である。

行列 \mathbf{V}_Y は対角的であるが、まだその要素を決める必要がある。 \mathbf{U}_Z は $+1$ と -1 が同じ数だけ存在する対角行列である。もし偶数 (奇数) の \mathbf{Z}_{μ} が因子 -1 を与えるなら、 \mathbf{U}_Z の行列要素は $+1(-1)$ である。つまり、(i) もし偶数 (奇数) の \mathbf{Z}_{μ} が因子 -1 をあたえるなら、 $(\mathbf{1} + \mathbf{U}_Z)/2$ の行列要素は $1(0)$ である。(ii) もし奇数 (偶数) の \mathbf{Z}_{μ} が因子 -1 をあたえるなら、 $(\mathbf{1} - \mathbf{U}_Z)/2$ の行列要素は $-1(0)$ である。したがって、 \mathbf{V} の 2^m 個の固有値は 2^{m-1} 個の固有値

$$\exp\left(\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^m (\pm) \gamma_{2\mu-1}\right) \quad (2.52)$$

と、 2^{m-1} 個の固有値

$$\exp\left(\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^m (\pm) \gamma_{2\mu-2}\right) \quad (2.53)$$

の二つの形で導かれる。ここで (\pm) の符号において、(2.52) 式では $(-)$ が偶数の組み合わせで和を作り、(2.53) 式では奇数の組合せで和を作る。これを 偶数 (e) と奇数 (o) で表す。(2.16) 式により分配関数 Z はこの固有値の全ての和によって与えられるので

$$Z(a, b) = [2\sinh(2a)]^{lm/2} \left\{ \sum_e \exp\left(\frac{l}{2} \sum_{\mu=1}^m (\pm) \gamma_{2\mu-1}\right) + \sum_o \exp\left(\frac{l}{2} \sum_{\mu=1}^m (\pm) \gamma_{2\mu-2}\right) \right\} \quad (2.54)$$

$$= \frac{1}{2} [2\sinh(2a)]^{lm/2} \left[\prod_{k=1}^m \left[2\cosh\left(\frac{m}{2} \gamma_{2k-1}\right) \right] + \prod_{k=1}^m \left[2\sinh\left(\frac{m}{2} \gamma_{2k-1}\right) \right] + \prod_{k=1}^m \left[2\cosh\left(\frac{m}{2} \gamma_{2k-2}\right) \right] - \prod_{k=1}^m \left[2\sinh\left(\frac{m}{2} \gamma_{2k-2}\right) \right] \right] \quad (2.55)$$

と求まる。

第3章 反周期的境界条件の2次元イジング模型

メビウスの帯上でのイジング模型への足がかりとして反周期的境界条件のイジング模型をこの章では解いていく。前章に引き続いて、Kasteningの解法に従って分配関数を求める。さらに物理量が周期的境界条件に比べてどう変化するかを議論する。

3.1 反周期的境界条件の分配関数

$l \times m$ のサイトをもつ正方格子の2次元イジング模型のエネルギーは

$$-\beta E = a \sum_{\mu=1}^m \left(\sigma_a s_{l\mu} s_{1\mu} + \sum_{\lambda=1}^{l-1} s_{\lambda\mu} s_{\lambda+1,\mu} \right) + b \sum_{\lambda=1}^l \left(\sigma_b s_{\lambda m} s_{\lambda 1} + \sum_{\mu=1}^{m-1} s_{\lambda\mu} s_{\lambda,\mu+1} \right) \quad (3.1)$$

で定義される。ここで $a, b > 0$ でスピン変数 $s_{\lambda\mu}$ は ± 1 の値をとる。 $(\sigma_a, \sigma_b) = (1, 1)$ 、 $(\sigma_a, \sigma_b) = (1, -1)$ 、 $(\sigma_a, \sigma_b) = (-1, 1)$ 、 $(\sigma_a, \sigma_b) = (-1, -1)$ は各境界条件、周期的 - 反周期的 (pa)、反周期的 - 周期的 (ap)、反周期的 - 反周期的 (aa) にそれぞれ対応している。いま、分配関数は

$$Z_{\alpha\beta}^{(l,m)}(a,b) = \sum_{s_{\lambda\mu}=\pm 1} \exp(-\beta E) \quad (3.2)$$

とかけ、 $\alpha\beta$ は pp、pa、ap または aa を表している。ここで新たに \mathbf{X}_μ (\mathbf{Y}_μ 、 \mathbf{Z}_n も同様) を次のように定義する。

$$\mathbf{X}_\mu = \underbrace{\mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}}_{\mu-1} \otimes \sigma_x \otimes \underbrace{\mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}}_{m-\mu} \quad (3.3)$$

σ_x はパウリ行列で $\mathbf{1}$ は 2×2 の単位行列である。すると分配関数は

$$Z_{\alpha\beta}^{(l,m)}(a,b) = [2\sinh(2a)]^{lm/2} \text{Tr}(\mathbf{QV}^l) \quad (3.4)$$

となる。ここで a 方向に周期的なら $\mathbf{Q} = \mathbf{1}$ で、反周期的なら $\mathbf{Q} = \mathbf{U}_X \equiv \mathbf{X}_1 \mathbf{X}_2 \cdots \mathbf{X}_n$ をとる。また

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}_{a/2} \mathbf{V}_b \mathbf{V}_{a/2} \quad (3.5)$$

$$\mathbf{V}_{a/2} = \prod_{\mu=1}^m \exp(\bar{a} \mathbf{X}_\mu / 2) \quad (3.6)$$

$$\mathbf{V}_b = \exp(\sigma_b b \mathbf{Z}_\mu \mathbf{Z}_{\mu+1}) \prod_{\mu=1}^{m-1} \exp(b \mathbf{Z}_\mu \mathbf{Z}_{\lambda+1}) \quad (3.7)$$

である。 \bar{a} は $\sinh 2a \sinh 2\bar{a} = 1$ で定義される。 b 方向に周期的なら $\sigma_b = 1$ で反周期的なら $\sigma_b = -1$ である。便利のために射影演算子といくつかの行列を導入して

$$\mathbf{J}_{\alpha\beta}^\pm = \mathbf{P}^\pm \mathbf{J}_{\alpha\beta} \quad (3.8)$$

$$\mathbf{P}^\pm = \frac{1}{2}(\mathbf{1} \pm \mathbf{U}_X) \quad (3.9)$$

$$\mathbf{J}_{\alpha\beta} = \frac{i}{4}[\Gamma_\alpha, \Gamma_\beta] \quad (3.10)$$

$$\Gamma_{2\mu-1} = \mathbf{X}_1 \cdots \mathbf{X}_{\mu-1} \mathbf{Z}_\mu \quad (3.11)$$

$$\Gamma_{2\mu} = \mathbf{X}_1 \cdots \mathbf{X}_{\mu-1} \mathbf{Y}_\mu \quad (3.12)$$

とすると、分配関数は

$$Z_{\alpha\beta}^{(l,m)}(a,b) = [2\sinh(2a)]^{lm/2} \text{Tr}(\mathbf{Q}_a \mathbf{V}_\beta^l) \quad (3.13)$$

ここで

$$\mathbf{Q}_{\{a\}} = \mathbf{P}_+ \pm \mathbf{P}_- \quad (3.14)$$

$$\mathbf{V}_\beta = \mathbf{V}_\beta^+ \mathbf{V}_\beta^- = \mathbf{V}_b^- \mathbf{V}_\beta^+ \quad (3.15)$$

$$\mathbf{V}_\beta^\pm = \mathbf{V}_{a/2}^\pm \mathbf{V}_{b\beta}^\pm \mathbf{V}_{a/2}^\pm \quad (3.16)$$

$$\mathbf{V}_{a/2}^\pm = \prod_{\mu=1}^m \exp(\bar{a} \mathbf{J}_{2\mu, 2\mu-1}^\pm) \quad (3.17)$$

$$\mathbf{V}_{b\beta}^\pm = \exp(\mp 2b \mathbf{J}_{1, 2m}^\pm) \prod_{\mu=1}^m \exp(2b \mathbf{J}_{2\mu+1, 2\mu}^\pm) \quad (3.18)$$

$$\mathbf{V}_{ba}^\pm = \exp(\pm 2b \mathbf{J}_{1, 2m}^\pm) \prod_{\mu=1}^m \exp(2b \mathbf{J}_{2\mu+1, 2\mu}^\pm) \quad (3.19)$$

である。 γ_k は

$$\cosh \gamma_k = \cosh 2\bar{a} \cosh 2b - \cos \frac{\pi k}{m} \sinh 2\bar{a} \sinh 2b \quad (3.20)$$

で定義され、 $1 \leq k \leq m$ で $\gamma_k > 0$ 、 $\gamma_0 = 2(\bar{a} - b)$ である。 b 方向に反周期的境界条件では偶数 (e) と奇数 (o) を伴う γ_k が変わり、一方、 a 方向

に反周期的境界条件では分配関数の半数の項で符号を変える。この先分配関数に現れる指数関数の和の項を

$$\Sigma_{ee}^{(l,m)}(a,b) = \sum_e \exp\left(\frac{l}{2} \sum_{\mu=1}^m (\pm) \gamma_{2\mu-2}\right) \quad (3.21)$$

$$\Sigma_{eo}^{(l,m)}(a,b) = \sum_e \exp\left(\frac{l}{2} \sum_{\mu=1}^m (\pm) \gamma_{2\mu-1}\right) \quad (3.22)$$

$$\Sigma_{oe}^{(l,m)}(a,b) = \sum_o \exp\left(\frac{l}{2} \sum_{\mu=1}^m (\pm) \gamma_{2\mu-2}\right) \quad (3.23)$$

$$\Sigma_{oo}^{(l,m)}(a,b) = \sum_o \exp\left(\frac{l}{2} \sum_{\mu=1}^m (\pm) \gamma_{2\mu-1}\right) \quad (3.24)$$

と定義する。ここで Σ_{xy} の一つ目の指数 x は和記号の下の指数で、指数関数の中において和の組み合わせで偶数 (奇数) マイナス符号をとるということである。二つ目の指数 y は γ_k の指数が偶数 (奇数) であることを表す。また、双曲線関数の積を

$$C_o^{(l,m)}(a,b) = [2\sinh(2a)]^{lm/2} \prod_{k=1}^m \left[2\cosh\left(\frac{l}{2}\gamma_{2k-1}\right)\right] \quad (3.25)$$

$$S_o^{(l,m)}(a,b) = [2\sinh(2a)]^{lm/2} \prod_{k=1}^m \left[2\sinh\left(\frac{l}{2}\gamma_{2k-1}\right)\right] \quad (3.26)$$

$$C_e^{(l,m)}(a,b) = [2\sinh(2a)]^{lm/2} \prod_{k=1}^m \left[2\cosh\left(\frac{l}{2}\gamma_{2k-2}\right)\right] \quad (3.27)$$

$$S_e^{(l,m)}(a,b) = [2\sinh(2a)]^{lm/2} \prod_{k=1}^m \left[2\sinh\left(\frac{l}{2}\gamma_{2k-2}\right)\right] \quad (3.28)$$

さらに、

$$S_o^{(2l,m)}(a,b) = S_o^{(l,m)}(a,b)C_o^{(l,m)}(a,b) \quad (3.29)$$

$$S_e^{(2l,m)}(a,b) = S_e^{(l,m)}(a,b)C_e^{(l,m)}(a,b) \quad (3.30)$$

であることに注意したい。結局、上付きの指数 (l, m) と変数 (a, b) を簡略化して、様々な境界条件における分配関数

$$\begin{aligned} Z_{pp} &= [2\sinh(2a)]^{lm/2} (\Sigma_{eo} + \Sigma_{oe}) \\ &= \frac{1}{2} (C_o + S_o + C_e - S_e) \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} Z_{pa} &= [2\sinh(2a)]^{lm/2} (\Sigma_{ee} + \Sigma_{oo}) \\ &= \frac{1}{2} (C_o - S_o + C_e + S_e) \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} Z_{ap} &= [2\sinh(2a)]^{lm/2} (\Sigma_{eo} + \Sigma_{oe}) \\ &= \frac{1}{2} (C_o + S_o - C_e + S_e) \end{aligned} \quad (3.33)$$

$$\begin{aligned} Z_{aa} &= [2\sinh(2a)]^{lm/2} (\Sigma_{ee} + \Sigma_{oo}) \\ &= \frac{1}{2} (-C_o + S_o + C_e + S_e) \end{aligned} \quad (3.34)$$

が求まった。

3.2 各境界条件における自由エネルギー

前節では周期的 - 周期的、周期的 - 反周期的、反周期的 - 周期的、反周期的 - 反周期的の各境界条件における分配関数を求めた。ここからは、これらの分配関数より各境界条件での自由エネルギーを求めていく。まずは周期的 - 周期的の境界条件について自由エネルギーを計算し、それに沿って、他の境界条件についても計算していく。1 スピンあたりの自由エネルギーは $-\log Z/(\beta lm)$ で、

$$\begin{aligned} -\beta f_{pp} &= \frac{1}{lm} \log Z_{pp} \\ &= \frac{1}{lm} \log \frac{1}{2} (C_o + S_o + C_e - S_e) \\ &= \frac{1}{2} \log(2\sinh 2a) \\ &\quad + \frac{1}{lm} \log \frac{1}{2} \left[\prod_i (e^{\alpha_i} + e^{-\alpha_i}) + \prod_i (e^{\alpha_i} - e^{-\alpha_i}) \right. \\ &\quad \quad \left. + \prod_j (e^{\alpha_j} + e^{-\alpha_j}) - \prod_j (e^{\alpha_j} - e^{-\alpha_j}) \right] \\ &= \frac{1}{2} \log(2\sinh 2a) \\ &\quad + \frac{1}{lm} \log \frac{1}{2} \left[\prod_i e^{\alpha_i} (1 + e^{-2\alpha_i}) + \prod_i e^{\alpha_i} (1 - e^{-2\alpha_i}) \right. \\ &\quad \quad \left. + \prod_j e^{\alpha_j} (1 + e^{-2\alpha_j}) - \prod_j e^{\alpha_j} (1 - e^{-2\alpha_j}) \right] \end{aligned}$$

である。いま $\alpha_k = l\gamma_k/2$ であり、 $i = 1, 3, \dots, 2m-1$ の奇数、 $j = 0, 2, \dots, 2m-2$ の偶数であるとした。後に (3.36) 式、(3.41)、(3.42)、(3.43) 式で分かるように l の極限では主要な項である第 1 項と第 2 項に周期的境界条件と反周期的境界条件の違いは現れない。そのために l に従って十分に早く消える項を復活させてその違いを見てみる。テーラー展開

$$\log(a+x) = \log a \left(1 + \frac{x}{a}\right) = \log a + \frac{x}{a} - \frac{1}{2} \left(\frac{x}{a}\right)^2 \dots \quad (a \gg x) \quad (3.35)$$

を用いて、熱力学的極限 $m \rightarrow \infty$ をとると、

$$-\beta f_{\text{pp}} = \frac{1}{2} \log(2\sinh 2a) + \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{2m} \sum_{k=1}^m \gamma_{2k-1} + \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{lm} \sum_{k=1}^m e^{-l\gamma_{2k-2}} \quad (3.36)$$

となる。ここで、

$$\gamma(v) = \gamma_{2k-1} \quad (3.37)$$

$$v = \frac{\pi}{m}(2k-1) \quad (3.38)$$

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^m \gamma_{2k-1} = \frac{m}{2\pi} \int_0^{2\pi} dv \gamma(v) \quad (3.39)$$

を使えば、

$$-\beta f_{\text{pp}} = \frac{1}{2} \log(2\sinh 2a) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dv \gamma(v) + \frac{1}{l\pi} \int_0^\pi dv e^{-l\gamma(v)} \quad (3.40)$$

となる。ここで γ は (2.43) 式で定義され、 $\gamma(2\pi - v) = \gamma(v)$ であることに注意したい。これまでの過程に沿って、同様に他の境界条件の 1 スピンあたりの自由エネルギーを計算すると

$$\begin{aligned} -\beta f_{\text{pa}} &= \frac{1}{2} \log(2\sinh 2a) + \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{2m} \sum_{k=1}^m \gamma_{2k-2} + \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{lm} \sum_{k=1}^m e^{-l\gamma_{2k-1}} \\ &= \frac{1}{2} \log(2\sinh 2a) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dv \gamma(v) + \frac{1}{l\pi} \int_0^\pi dv e^{-l\gamma(v)} \end{aligned} \quad (3.41)$$

$$\begin{aligned} -\beta f_{\text{ap}} &= \frac{1}{2} \log(2\sinh 2a) + \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{2m} \sum_{k=1}^m \gamma_{2k-1} - \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{lm} \sum_{k=1}^m e^{-l\gamma_{2k-2}} \\ &= \frac{1}{2} \log(2\sinh 2a) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dv \gamma(v) - \frac{1}{l\pi} \int_0^\pi dv e^{-l\gamma(v)} \end{aligned} \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} -\beta f_{\text{aa}} &= \frac{1}{2} \log(2\sinh 2a) + \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{2m} \sum_{k=1}^m \gamma_{2k-2} - \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{lm} \sum_{k=1}^m e^{-l\gamma_{2k-1}} \\ &= \frac{1}{2} \log(2\sinh 2a) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dv \gamma(v) - \frac{1}{l\pi} \int_0^\pi dv e^{-l\gamma(v)} \end{aligned} \quad (3.43)$$

と求まる。いま、(3.39) 式のように極限をとって和を積分に変える過程で (3.37) 式と (3.38) 式の $(2k-1)$ を $(2k-2)$ に変えたが m の極限をとるので奇数と偶数の違いは無いとした。(3.36) 式と (3.41) 式では和を奇数でとるか偶数でとるかの違いしかない。これはさらに高次の項まで求め

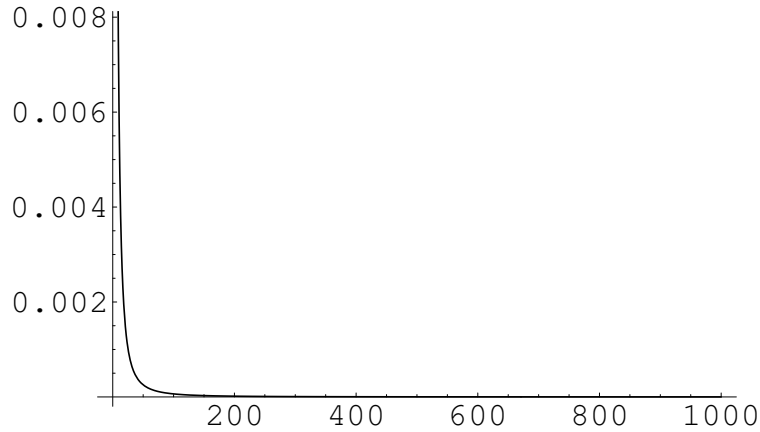


図 3.1: 臨界温度での $-\beta\Delta f_{p-a}$ のグラフ 横軸: l 縦軸: $-\beta\Delta f_{p-a}$

でも同じことである。このことは反周期的境界条件を課してつなげた方向 (m) で無限極限をとっているので、反周期的境界条件の効果は物理的に何も起こらないということを示している。(3.40) 式と (3.42) 式、(3.43) 式を比較すると自由エネルギーに差

$$-\beta\Delta f_{p-a} = -\beta(f_{pp} - f_{ap}) = \frac{2}{l\pi} \int_0^\pi d\nu e^{-l\gamma(\nu)} \quad (3.44)$$

が現れる。このことから反周期的境界条件を課してつなげた方向 (l) を有限に保つと、物理的な違いが存在することがわかる。それは図 3.1 のように十分はやく収束する。

3.3 内部エネルギーと比熱

前節までで、周期的境界条件と反周期的境界条件との違いにより l にしたがう微小な差が自由エネルギーにはあることが分かった。さらに、その差が及ぼす内部エネルギーと比熱について議論していく。ここからは、簡単のために等方的な格子 ($b = a$) を扱っていく。したがって $\gamma(\nu)$ は、(3.20) 式より

$$\cosh\gamma_k = \cosh 2a \coth 2a - \cos \nu \quad (3.45)$$

と定義される。

1 スピンあたりの内部エネルギーは

$$u = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta f) \quad (3.46)$$

だから、境界条件による差は

$$\begin{aligned}\Delta u &= \frac{\partial}{\partial \beta}(\beta \Delta f) \\ &= \frac{4}{\pi} j \cosh 2a (\coth^2 2a - 2) \int_0^\pi dv \frac{e^{-l\gamma(v)}}{\sinh \gamma}\end{aligned}\quad (3.47)$$

である。特に後の 4.1 節でも示されるように臨界温度では

$$\cosh 2a_c = \sqrt{2}, \quad \sinh 2a_c = 1 \quad (3.48)$$

となることがわかっている。したがって

$$\Delta u = 0 \quad (3.49)$$

となり、臨界点付近では内部エネルギーに違いが無いことが分かる。

また、比熱は

$$C = \frac{\partial u}{\partial T} \quad (3.50)$$

であるから、境界条件による差を計算すると

$$\begin{aligned}\Delta C &= \frac{8}{\pi} ka^2 \left[\cosh^2 2a (\coth^2 2a - 2)^2 \int_0^\pi dv \frac{e^{-l\gamma(v)}}{\sinh^2 \gamma} (l + \coth \gamma) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\sinh^3 2a} (\sinh^2 2a \cosh^2 2a + 2) \int_0^\pi dv \frac{e^{-l\gamma(v)}}{\sinh \gamma} \right]\end{aligned}\quad (3.51)$$

となる。比熱自身が無限大となる臨界温度付近であっても、周期的か反周期的かの境界条件によって比熱に有限の差があることが分かった。

第4章 双対性

2次元正方格子イジング模型に自己双対性があることはよく知られている [9]。

この章では反周期的境界条件にしたときにこの自己双対性が同じように現れるかを議論する。

4.1 2次元正方格子イジング模型の双対性

2次元イジング模型において分配関数の双対性を導く [8]。ここでは正方格子 ($b = a$) を扱い、厳密な臨界温度が得られる。分配関数 Z が高温側から展開したものと低温側から展開したものが本質的に等しくなるというのが双対性である。

まず、次式の分配関数を考える。

$$Z(a) = \sum_{\sigma_N=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_1=\pm 1} \exp \left\{ a \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \right\} \quad (4.1)$$

ここで、 $a = J/kT$ で、 $\langle ij \rangle$ は近接するサイト i と j の組の組について和をとることを表し、 N は格子点の数である。高温で a が小さいとき $Z(a)$ はべき乗展開ができる。イジング変数 σ のとる値は ± 1 だから

$$\exp(a\sigma) = \cosh a + \sigma \sinh a \quad (4.2)$$

となる。すると

$$\begin{aligned} Z(a) &= \sum_{\sigma_N=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_1=\pm 1} \prod_{\langle ij \rangle} (\cosh a + \sigma_i \sigma_j \sinh a) \\ &= (\cosh a)^{2N} \sum_{\sigma_N=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_1=\pm 1} \prod_{\langle ij \rangle} (1 + \sigma_i \sigma_j \tanh a) \end{aligned} \quad (4.3)$$

となる。これから $Z(a)/\cosh^{2N} a$ を $\tanh a$ で展開していく。ここで零にならない寄与

$$\sum_{\sigma=\pm 1} \sigma = 0, \quad \sum_{\sigma=\pm 1} 1 = 2 \quad (4.4)$$

に注意する。したがって $\prod(1 + \sigma_i \sigma_j \tanh a)$ を展開したとき、スピン変数を含まない項のみの寄与が残る。格子点 i と j を結ぶ格子上の辺を「ボンド」と呼ぶことにして、 $\sigma_i \sigma_j \tanh a$ の値を持つと見なせる。このボンドは

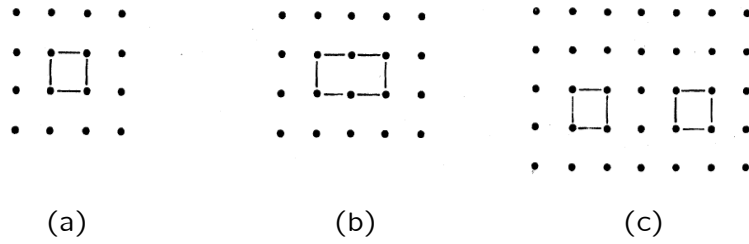


図 4.1: 高温展開での低次の項 (Kogut[8])

多角形を作る時のみ σ_i が 2 乗となって消え、寄与が残る。初めの 4 つの低次項は図 4.1 で表され、分配関数は

$$Z(a)(\cosh a)^{-2N} \cdot 2^{-2N} = 1 + N(\tanh a)^4 + 2N(\tanh a)^6 + \frac{1}{2}N(N-5)(\tanh a)^8 + \dots \quad (4.5)$$

となる。各項の N を含む係数は各多角形の描き方の数である。

次に $Z(a)$ の低温展開を考える。温度零度でスピンは全て一方向に揃っているの、反転したスピンの数で展開していく。 $T=0$ の基底状態にスピンが全て「上向き」の配位を選ぶ。1 つのスピンが反転した時、4 つのボンドが負になる。2 つの隣合うスピンが反転した時、6 つのボンドが負になる。さらに 2 つの離れたスピンが反転していたら、8 つのボンドが負になる。初めの 4 つの低次項は図 4.2 に示される。また $T=0$ でスピンが全て「下向き」の配位をとったものも同様の議論ができる。したがってその配位の数数を数えれば、分配関数は

$$\frac{1}{2}Z(a)e^{-2Na} = 1 + Ne^{-8a} + 2Ne^{-12a} + \frac{1}{2}N(N-5)e^{-16a} + \dots \quad (4.6)$$

となる。このように高温展開と低温展開の対応は明瞭となった。これは、低温展開での反転したスピンをプラケット(正方形)で囲めば、低温展開の図の描き方は高温展開のものと同等になっているということである。この関係を確認するには結合定数 a^* を

$$\tanh a = \exp(-2a^*) \quad (4.7)$$

と定義すればよい。(4.5) 式と (4.6) 式を比べると

$$\frac{Z(a^*)}{(e^{2a^*})^N} = \frac{Z(a)}{2^N(\cosh^2 a)^N} \quad (4.8)$$

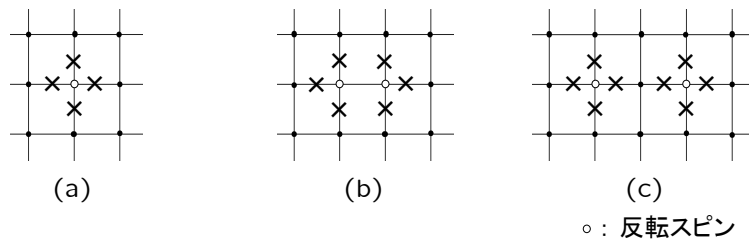


図 4.2: 低温展開での低次の項

の関係が与えられる。(4.7)式は値の大きい a^* から小さい a への(またその逆でもある)射影を定義している。(4.7)式にはさらに見かけ以上のものがある。双曲線関数を変換させれば

$$\sinh(2a) \sinh(2a^*) = 1 \quad (4.9)$$

と書ける。したがって(4.8)式は

$$\frac{Z(a^*)}{\sinh^{\frac{N}{2}}(2a^*)} = \frac{Z(a)}{\sinh^{\frac{N}{2}}(2a)} \quad (4.10)$$

と書き直せる。これらの式がイジング模型における高温の特性と低温の特性の間の特別な対称性を示す双対性の射影を定義している。そしてもし模型が唯一の臨界点を持つならそれが $a = a^*$ の点であるといえることができる。(4.9)式は臨界点

$$\sinh^2(2a_c) = 1 \quad (4.11)$$

を示し、また

$$e^{2a_c} = \sqrt{2} + 1 \quad (4.12)$$

を示している。この臨界点はイジング模型が解かれるよりも以前に見出されていた[9]。

4.2 反周期的境界条件における双対性

2次元イジング模型において縦方向のサイトの数が l で横方向のサイトの数が m である正方格子を考える。つまり、サイト(スピン)の数は $N = l \times m$ で、ボンドの数は $2N$ である。縦方向は周期的境界条件をもち、横方向には反周期的境界条件をもたせる。反周期的境界条件とは周期的なスピン環の $m+1$ 番目のスピン成分と1番目のスピン成分が正負逆転していることである。即ち、

$$\sigma_{m+1} = -\sigma_1 \quad (4.13)$$

ということである。したがって、エネルギーは

$$E = -a \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + a \sum_{\langle pq \rangle} \sigma_p \sigma_q \quad (4.14)$$

と変わる。ここで、 $\langle pq \rangle$ は m と $m+1=1$ にまたがって隣り合う l 個のスピンを表し、 $\langle ij \rangle$ はそれ以外の全ての隣り合うスピンを表す。

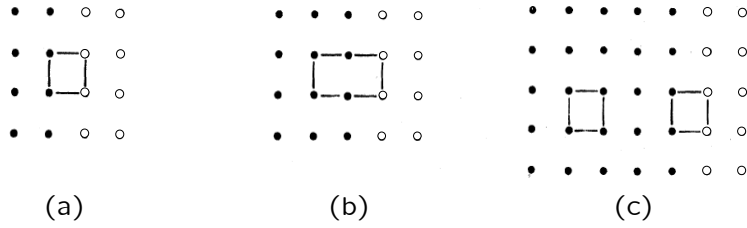


図 4.3: 反周期的境界条件高温展開での低次の項 (Kogut[8])

始めに高温展開を考える。このとき分配関数 Z を展開すると

$$\begin{aligned}
 Z(a) &= \sum_{\sigma_N=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_1=\pm 1} \exp \left\{ a \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - a \sum_{\langle pq \rangle} \sigma_p \sigma_q \right\} \\
 &= \sum_{\sigma_N=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_1=\pm 1} \prod_{\langle ij \rangle, \langle pq \rangle} (\cosh a + \sigma_i \sigma_j \sinh a) (\cosh a - \sigma_p \sigma_q \sinh a) \\
 &= (\cosh a)^{2N} \sum_{\sigma_N=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_1=\pm 1} \prod_{\langle ij \rangle, \langle pq \rangle} (1 + \sigma_i \sigma_j \tanh a) (1 - \sigma_p \sigma_q \tanh a)
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

となる。周期的境界条件の高温展開のときと同様にボンドで多角形を作る寄与のみがスピン変数をもたずに残る。このとき m と $m+1$ にまたがるボンドは多角形を作るのに必ず偶数個必要である (図 4.3)。したがってその寄与は周期的境界条件のときと変わらない。分配関数の高温展開は周期的境界条件のときと変わらず (4.5) 式のままである。

次に低温展開を考える。温度零度では周期的境界条件においてスピンのすべて同じ方向に揃ったものが基底状態であった。反周期的境界条件においても同様である。いま、反周期的境界条件で境界にあるボンドは負になる。このボンドが負になったものを「フラストレーション」と呼ぶことにする。このフラストレーションの数を f とするとエネルギーは

$$E = -a(2N - f) + af = -2a(N - f) \tag{4.16}$$

である。境界にある 1 列 l 個にフラストレーションが生じたこの状態が最低エネルギー状態でエネルギーは $E = -2a(N - l)$ になる (図 4.4)。また横方向 1 列目のスピンのすべて反転したものは 1 列目と 2 列目のサイト間に

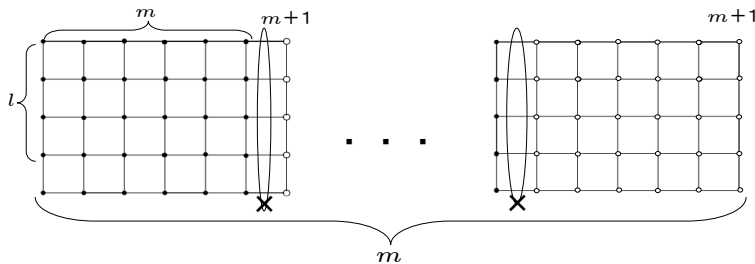


図 4.4: $2m$ 重の低温展開基底状態

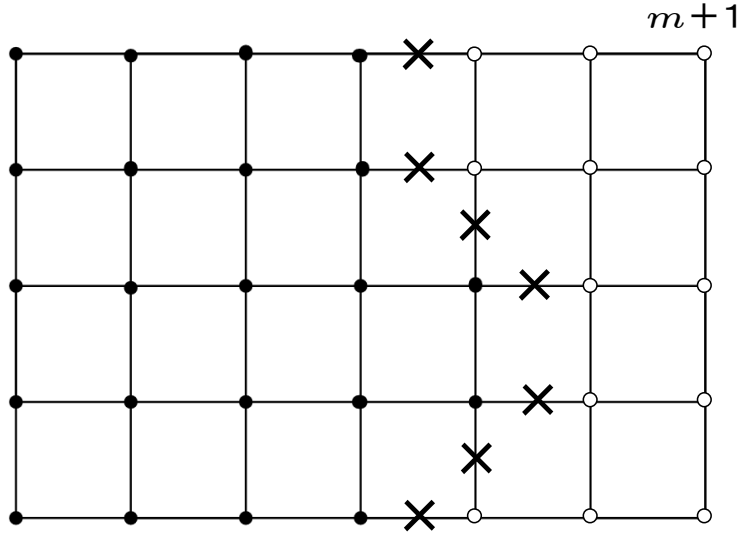


図 4.5: 1 つ侵入

同じく l 個のフラストレーションが生じる。同様に 1 列目と 2 列目のスピ
ンが全て反転したものは 2 列目と 3 列目のサイト間に l 個のフラストレ
ーションが生じる。これを周り巡って、 m 列目まで続けるとスピ
ンが全て下向きになる。これは周期的境界条件における全スピン上向きとそれに
対するもう一方の基底状態という関係と同様である。全スピン下向きの
側から見ても上述と同様のことが議論できるので $E = -2a(N-l)$ の基底
状態は $2m$ 重に縮退していることになる。これは境界の描き方が $2m$ 通り
あるということと同等である。この $2m$ は低温展開の共通の係数である。
次に第一励起状態を議論したい。境界にある列の上に反転したスピ
ンが 1 つ侵入したとき図 (4.5)、フラストレーションは 2 個増えてエネルギー
は $E = -2a(N-l) + 4a$ となりこれが第一励起状態である。この侵入は l
通りある。また、境界の列の上に連なった反転スピ
ンが侵入してもフラ
ストレーションは同じく 2 個増えて、エネルギーは $E = -2a(N-l) - 4a$
である。この反転スピ
ンの「チェーン」は一周すると境界線が
一列ずれた
上述の新たな基底状態になるので、一周しないところまでである。すなわ
ち $l-1$ 種のチェーンが存在する。それぞれのチェーンは縦のサイトの数 l
だけ棲む場所がある。つまり、第一励起状態の数は $2ml(l-1)$ である。三
番目のエネルギー状態は $E = -2a(N-l) + 8a$ である。境界と接さないサ
イトに反転したスピ
ンが 1 つ存在すると、周りのボンド 4 本がフラスト
レーションになる図 (4.6)。境界と接さないサイトの数は m 列から 2 列引
いて $l(m-2)$ である。また境界上にチェーン状の反転スピ
ンが 2 つ隣接
せずに侵入 (図 4.7) しても $E = -2a(N-l) + 8a$ である。組み合わせを考
えてこの侵入のパターンを数えると $ml(l-1)(l-2)(l-3)/6$ となる。さ
らに境界上にチェーンが侵入しそのうえにチェーンが載っている場合 (図
4.8) も $E = -2a(N-l) + 8a$ である。このパターンは $ml(l-1)l(l+1)/3$

となっている。以上より、低温展開の分配関数は

$$Z = 2me^{2a(N-l)} \left[1 + l(l-1)e^{-4a} + \left\{ l(m-2) + \frac{1}{4}l(l-1)(l^2-l+2) \right\} e^{-8a} + \dots \right] \quad (4.17)$$

となる。

周期的境界条件から反周期的境界条件に変えたとき、高温展開の分配関数に変わりはない。しかし低温展開の分配関数は次数と係数がともによりと変わり、(4.5)式と(4.17)式の間には、周期的境界条件のときに存在したような自己双対性は存在しないことが分かる。

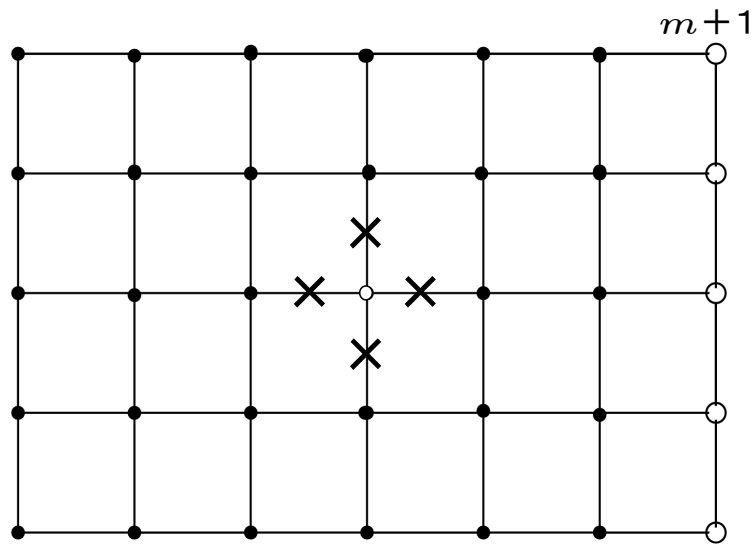


図 4.6: 反転スピナー

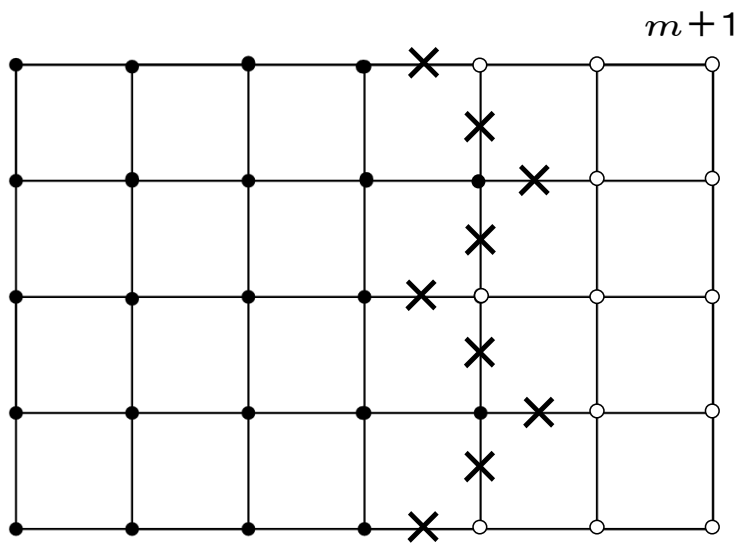


図 4.7: 2つの鎖が侵入

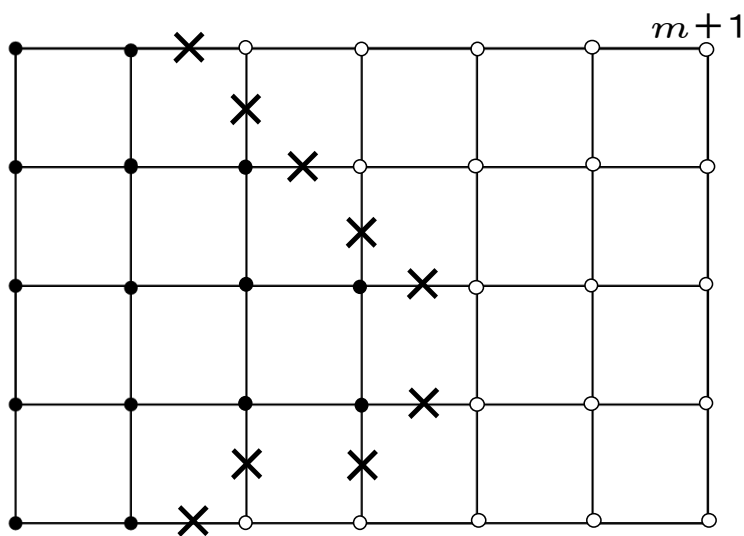


図 4.8: 2段侵入

第5章 まとめ

周期的境界条件と反周期的境界条件の2次元イジング模型での自由エネルギーや内部エネルギー、比熱に熱力学的極限では違いが無いことが分かった。

反周期的境界条件を課してつなげた方向 (l) を有限に保つと、自由エネルギーに (3.44) 式の違いが存在することがわかった。内部エネルギーには (3.47) 式の違いがあり、比熱には (3.51) 式の違いがあることが分かった。また、臨界温度付近では (3.49) 式のように差が無いことが分かった。

周期的境界条件では高温-低温自己双対性があったが、反周期的境界条件では自己双対性がないことが分かった。

今回はメビウスの帯へのステップとして反周期的境界条件について研究してきた。今後の課題としては、これをさらに発展させ境界条件をメビウスの帯に変えたときにそのトポロジ-的な境界条件の変化によって物理量にどのような違いが生じてくるかを研究したい。

謝辞

本論文を作成するにあたり、時間と労力の多くを割いていただき、全面的にご指導いただいた南方先生に厚く感謝いたします。研究に大きく協力してくれた赤石さん、内波君、高山君をはじめとする研究室の仲間にも感謝します。また、研究生生活を応援してくれた家族にも深く感謝します。

大学院進学にあたり深い理解を注いでくれた亡き祖母に本論文を捧げます。

付録A ゲージイジング模型

A.1 テンポラルゲージ分配関数

2次元平面におけるユークリッド時空を考える [8]。いま各サイト (格子点) を j として、 μ を空間方向の、 τ を時間方向のそれぞれ単位格子ベクトルとする。 (j, μ) と $(j + \mu, -\mu)$ は同じリンク (格子) を指している。このとき、局所的にゲージ不変な作用は

$$S = -J \sum_j \sigma_3(j, \mu) \sigma_3(j + \mu, \tau) \sigma_3(j + \mu + \tau, -\mu) \sigma_3(j + \nu, -\tau) \quad (\text{A.1})$$

とラティス上で最小の四角形 (プラケット) を形成する 4 辺 (リンク) 上のイジングスピン ($\sigma_3 = \pm 1$) の積によって作られる。

この作用が局所的ゲージ不変であることを確かめるには各サイトに対する演算子 $G(j)$ を施せばよい。 $G(j)$ はサイト j から出ている全てのリンク上のスピンをフリップさせる演算子である。この演算によってフリップするスピンは各プラケットにおいて 2 個あるので作用 S は不変のままである。

テンポラル・ゲージ

$$\sigma_3(j, \tau) = 1 \quad (\text{A.2})$$

をとり、サイトの数が時間方向に l 個、空間方向に m 個で周期的境界条件をもつ 2次元平面で考える。このときの分配関数

$$Z = \sum_{spinconfig} e^{-S} \quad (\text{A.3})$$

を計算する。テンポラル・ゲージをとると作用は

$$S = -J \sum_n \sigma_3(j, \mu) \sigma_3(j + \tau, \mu) \quad (\text{A.4})$$

と時間軸格子上のイジングスピンは固定されて、あたかもそのイジングスピンを省いたような形になる。恒等式

$$\begin{aligned} \exp(\beta \sigma_3 \sigma_3) &= \cosh \beta + \sigma_3 \sigma_3 \sinh \beta \\ &= \cosh \beta (1 + \sigma_3 \sigma_3 \tanh \beta) \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

が成り立つので分配関数は

$$Z = \sum_{spinconfig} \prod_j \cosh \beta (1 + \sigma_3(j, \mu) \sigma_3(j + \tau, \mu) \tanh \beta) \quad (\text{A.6})$$

となる。スピンの配位について

$$\sum_{\sigma_3=\pm 1} \sigma_3 = 0, \quad \sum_{\sigma_3=\pm 1} \sigma_3^2 = \sum_{\sigma_3=\pm 1} 1 = 2 \quad (\text{A.7})$$

とリンクの積に注意すると、 $\sigma_3(j)\sigma_3(j+\tau)$ が一空間リンク上で、時間軸の格子1個がすべて集まったとき(時間軸が一周したとき)にのみ σ_3 はすべて打ち消し合い、 $\tanh\beta$ の寄与が生じる。他に寄与が生じるのは同様にリンクの積が全て1のときである。したがって、一空間リンク上での分配関数は

$$Z_1 = 2^l \cosh^l \beta (1 + \tanh^l \beta) \quad (\text{A.8})$$

である。空間方向のリンクの数はサイトの数と等しく m 個である。それぞれの空間リンクは独立であるから、最終的に全体の分配関数は

$$Z = Z_1^m = [2^l (\cosh^l \beta + \sinh^l \beta)]^m \quad (\text{A.9})$$

となる。

A.2 ゲージイジング模型の相関関数

次に、このゲージイジング模型のテンポラルゲージの下での相関関数を求める。

テンポラル・ゲージ

$$\sigma_3(j, \tau) = 1 \quad (\text{A.10})$$

をとり、サイトの数が時間方向に l 個、空間方向に m 個で周期的境界条件をもつ2次元平面で考える。このとき、時間方向の長さ T 、空間方向の長さが R の長方形ループ C

$$\prod_C \sigma_3 = \sigma_3(0, 0; \mu) \sigma_3(0, 1; \mu) \cdots \sigma_3(0, R; \mu) \times \sigma_3(T, 0; \mu) \sigma_3(T, 1; \mu) \cdots \sigma_3(T, R; \mu) \quad (\text{A.11})$$

(時間軸格子上のイジングスピンは固定されている) について相関関数

$$\left\langle \prod_C \sigma_3 \right\rangle = \sum_{\text{spinconfig}} \prod_C \sigma_3 e^{-S} / Z \quad (\text{A.12})$$

を計算する。テンポラル・ゲージをとると作用は

$$S = -J \sum_j \sigma_3(j, \mu) \sigma_3(j + \tau, \mu) \quad (\text{A.13})$$

と時間軸格子上のイジングスピンは固定されて、あたかもそれを省いたような形になる。恒等式

$$\begin{aligned} \exp(\beta \sigma_3 \sigma_3) &= \cosh \beta + \sigma_3 \sigma_3 \sinh \beta \\ &= \cosh \beta (1 + \sigma_3 \sigma_3 \tanh \beta) \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

が成り立つので相関関数は

$$\left\langle \prod_C \sigma_3 \right\rangle = \sum_{spinconfig} \prod_C \sigma_3 \prod_j \cosh \beta (1 + \sigma_3(j, \mu) \sigma_3(j + \tau, \mu) \tanh \beta) \quad (\text{A.15})$$

となる。スピンの配位について

$$\sum_{\sigma_3=\pm 1} \sigma_3 = 0, \quad \sum_{\sigma_3=\pm 1} \sigma_3^2 = \sum_{\sigma_3=\pm 1} 1 = 2 \quad (\text{A.16})$$

であり、リンクの積に注意して計算すれば、分子で寄与が残るのは $\sigma_3(n)$ が全て打ち消し合ったときである。 $\prod_C \sigma_3$ を打ち消すにはその長方形の中をブラケットで埋めてやればよい。その寄与は $\tanh^{T \times R} \beta$ である。また、周期的境界条件であるからドーナツの時間方向の裏側を埋めても寄与は生じ、 $\tanh^{(l-T) \times R} \beta$ となる。さらに長方形の外側 (m の外側) では分配関数と同様に $(1 + \tanh^l \beta)$ の寄与が $m - R$ 個出てくる。したがって相関関数の分子は

$$(2 \cosh \beta)^{l \times m} (\tanh^{T \times R} \beta + \tanh^{(l-T) \times R} \beta) (1 + \tanh^l \beta)^{m-R} \quad (\text{A.17})$$

となる。分配関数の計算結果

$$Z = [2^l (\cosh^l \beta + \sinh^l \beta)]^m \quad (\text{A.18})$$

を引用して、最終的に相関関数は

$$\left\langle \prod_C \sigma_3 \right\rangle = \frac{(\tanh^{T \times R} \beta + \tanh^{(l-T) \times R} \beta)}{(1 + \tanh^l \beta)^R} \quad (\text{A.19})$$

となる。

ここで高温の場合を考える。このとき、 β は十分に小さく収束半径を満たす。 $\tanh \beta \simeq \beta$ と近似できる。また、長方形ループの時間方向の長さ T は二次元平面の時間の長さ l に比べて十分小さいはずである。長方形の面積を $A = T \times R$ とし、これらを使って相関関数は近似され、

$$\left\langle \prod_C \sigma_3 \right\rangle \simeq \tanh^A \beta = \exp\{(\ln \tanh \beta) A\} \quad (\text{A.20})$$

と面積則になっていることが分かる。

次に低温領域を考える。結合を表す β が 5 より大きくなってくると (A.20) 式の近似は粗くなっていく。極低温でも成り立つ模型を考えたい。そこで時間方向に細長く伸びた磁区を考える。 $\lambda \times 1, (\lambda \gg 1)$ の長方形でひものようなものである。このひもの両端には $\sigma_3(j, \mu) \sigma_3(j + \tau, \mu) = -1$ となる「フラストレーション」が生じる。このフラストレーションは両端の二つであるから一本につき $e^{-4\beta}$ の寄与がある。このひもが独立して (重なることなく) 生じるとき、分配関数は

$$Z = e^{n\beta} (1 + ne^{-4\beta} + \dots) \quad (\text{A.21})$$

である。 $T \times R$ の長方形ループの相関関数は

$$\left\langle \prod_C \sigma_3 \right\rangle = e^{n\beta} \{1 + (n - 4A)e^{-4\beta} + \dots\} / Z \simeq \exp(-4Ae^{-4\beta}) \quad (\text{A.22})$$

となる。ここで $n = l \times m, A = (T - 1) \times R$ とした。このことから、低温領域でも面積則にしたがっていることが分かる。

A.3 テンポラルゲージの実現性

局所的にゲージ不変な作用は (A.1) 式と同様に

$$S = - \sum_{n, \mu\nu} \sigma_3(n, \mu) \sigma_3(n + \mu, \nu) \sigma_3(n + \mu + \nu, -\mu) \sigma_3(n + \nu, -\nu) \quad (\text{A.23})$$

である。この作用はラティス上で最小の四角形(プラケット)を形成する4本の辺(リンク)の上の Ising スピン ($\sigma_3 = \pm 1$) の積によって作られる。この作用が局所的ゲージ不変であることを確かめるには各サイト(格子点)に対する演算子 $G(j)$ を施せばよい。 $G(j)$ はサイト j から出ている全てのリンク上のスピンをフリップさせる演算子である。この演算によってフリップするスピンは各プラケットにおいて2個あるので作用 S は不変のままである。

このゲージ変換においてテンポラル・ゲージ

$$\sigma_3(j, \tau) = 1 \quad (\text{A.24})$$

が常に実現可能かを議論する。

第一に周期的境界条件の下でテンポラル・ゲージが実現可能かを考える。時間軸方向に周期的境界条件があれば時間軸が円を成していることと同等である。任意の空間座標 x を選び、その時間軸上のリンク上に下向きスピンの2つあり、残りは全て $+1$ のときゲージ不変の演算子 G を各サイトに作用させて2つの下向きスピンの隣り合うようにすることが出来る。これにもう一度演算子を作用させれば、下向きスピンは消えてテンポラル・ゲージが実現する。一方、時間軸上のリンクに下向きスピンの1つあり、残り全てがプラスのときは演算子を作用させても負の配位がとなりに逃げ続けるだけであり、テンポラル・ゲージが実現することは決してない。これらのことは負の配位が2つのときは偶数のときに拡張され、1つのときは奇数のときに拡張される。

次に固定された境界条件の下でテンポラル・ゲージが実現可能かを考える。固定された境界条件では時間軸に端があり、演算子によって隣に逃げた下向きスピンの巡り戻ってくることは無いので、端のところでは下向きスピンを消すことが可能である。これは負の配位の数が奇数でも偶数でもいえることである。したがって、テンポラル・ゲージは実現する。

参考文献

- [1] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [2] B. Kaufman, Phys. Rev. **76**, 1232 (1949).
- [3] P.W. Kasteleyn, Math. Phys. **4** 287 (1963).
- [4] P.W. Kasteleyn, Physica **27** 1209(1961).
- [5] S. Tanda, T. Tsuneta, Y. Okajima, K. Inagaki, K. Yamaya, and N. Hatakenaka Nature **417**, 397 (2002).
- [6] K. Kaneda and Y. Okabe, Phys. Rev. Lett. **86**, 2134 (2001)
- [7] K. Huang, *Statistical Mechanics* , 2nd ed. (Willey)
- [8] J. B. Kogut, Rev. Mod. Phys. **51**, 659 (1979)
- [9] H. A. Kramers and G. H. Wannier, Phys. Rev. **60**, 252 (1941).