

平成 18 年度 卒業論文
2 次元 Ising モデルの厳密解

理学部 物理学科
03RP023 田村 亮

概要

強磁性体は低温においては原子の持つ磁気モーメントが相互作用によって、ある1つの方向にそろう(秩序相)。このときこの物質は磁化を持ち磁石となる。温度を上げていくとある温度(Curie点)で相転移を起こし、原子の持つ磁気モーメントはそれぞれランダムな方向を向くため磁化は消失し(無秩序相)、磁石ではなくなる。これより、強磁性体は秩序相から無秩序相への転移が起こる物質である。この性質を最も簡単に示すモデルが Ising モデルである。Ising モデルでは格子状に配列した粒子を考え、その粒子がスピンを持っているとしスピンは上向き、下向きのどちらかの2つの状態をとる。このとき、最近接スピン間には相互作用が働いていて相互作用によるエネルギーはスピンの向きが同じ向きするとき $-\frac{J}{2}$ 、逆向きするとき $\frac{J}{2}$ とする。この簡略化されたモデルは強磁性体と同様の秩序 - 無秩序転移を起こすことで知られる。

この Ising モデルは1次元、2次元(外場なし)の場合は厳密に解くことができるが、3次元および外場が存在する2次元モデルは解くことができない。また、1次元の場合は非常に簡単に解くことができるが、2次元の場合は面倒である。本論文では無限系の2次元 Ising モデルを厳密に解くことを議論する。

2次元 Ising モデルの厳密解の解法の歴史は、

1944	Onsager	Lie 代数を用いる方法
1949	Kaufman	スピノルを用いる方法
1950	Nambu	"
1952	Kac , Ward	組み合わせの方法
1955	Potts , Ward	"
1964	Schultz , Mattis , Lieb	第2量子化の方法

である。このどの解法でも同じ結果を与える。ここでは第2量子化の方法、組み合わせの方法の2通りを用いて、Helmholtz の自由エネルギー、内部エネルギー、比熱、相関関数、自発磁化の表式を求めた。これにより、2次元 Ising モデルでは実際に秩序 - 無秩序転移が起こりその相転移は2次相転移であることを確認することができた。また、臨界指数についても評価した。

目次

1	はじめに	4
2	1次元 Ising モデル	6
2.1	1次元 Ising モデルの転送行列の構成	6
2.2	Helmholtz の自由エネルギー、内部エネルギー、比熱	7
2.3	磁場が0の場合の相関関数	9
3	第2量子化を用いる方法	13
3.1	2次元 Ising モデルの転送行列の構成	13
3.2	V の対角化	16
3.3	分配関数と Helmholtz の自由エネルギー	24
4	dimer 統計を用いる方法	31
4.1	Ising モデルの高温展開	31
4.2	Pfaffian の導入	33
4.3	正方格子の dimer 統計	41
4.3.1	dimer 統計とは	41
4.3.2	境界条件が自由端の場合	41
4.3.3	環状な境界条件の場合	52
4.3.4	トーラス状な境界条件の場合	58
4.4	Ising モデルの dimer 統計	73
4.4.1	dimer 統計と Ising モデルとの対応	73
4.4.2	自由端の場合	74
4.4.3	環状の境界条件の場合	84
4.4.4	トーラス状の境界条件の場合	89
4.5	Helmholtz の自由エネルギーの計算	93
4.5.1	行列 H_n 、 tH_n 、 \tilde{H}_n 、 ${}^t\tilde{H}_n$ の導入	93
4.5.2	トーラス状の境界条件の Ising モデルの Helmholtz の自由エネルギー	99
4.6	dimer 統計と Ising モデルとの対応2	106
5	物理量の表記および温度依存性	110
5.1	$J_1 = J_2$ の場合	110
5.1.1	Helmholtz の自由エネルギー	110
5.1.2	内部エネルギー	112
5.1.3	比熱	114
5.1.4	自由エネルギー、内部エネルギー、比熱の温度依存性	116
5.2	異方的な場合の Helmholtz の自由エネルギーの温度依存性と転移温度	119
5.3	内部エネルギー	122

5.3.1	内部エネルギーの表記	122
5.3.2	$T > T_c$ の場合の u_2 の計算	127
5.3.3	$T < T_c$ の場合の u_2 の計算	134
5.3.4	温度依存性	144
5.4	比熱	146
5.4.1	$T > T_c$ の場合の比熱	146
5.4.2	$T < T_c$ の場合の比熱	151
5.4.3	温度依存性	156
6	相関関数	162
6.1	dimer 統計の方法による相関関数	162
6.1.1	相関関数の導入	162
6.1.2	逆行列 A^{-1}	164
6.1.3	相関関数 $\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1,2} \rangle$	170
6.1.4	相関関数 $\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1,1+m} \rangle$	173
6.2	第 2 量子化を用いる方法による相関関数	178
7	自発磁化	190
7.1	Wiener-Hopf Sum Equations	190
7.2	Szegő の定理	198
7.3	自発磁化の表記および温度依存性	206
8	まとめと今後の展望	212
付録 A	$\exp[a\sigma^i] = I \cosh a + \sigma^i \sinh a$ の証明	215
付録 B	$e^{i\pi S^+ S^-} = e^{i\pi \sigma^+ \sigma^-} = -2S^z$ の証明	217
付録 C	スピン演算子の性質	218
付録 D	V_q の評価	224
付録 E	恒等式 $\int_0^\pi \ln(2 \cosh \varepsilon - 2 \cos x) dx = \pi \varepsilon$ の導出	230
付録 F	$\frac{dK(k)}{dk}$ について	233
付録 G	完全楕円積分の $k \rightarrow 1$ の極限の振る舞い	234
付録 H	$\frac{\partial}{\partial k} \Pi_1(\nu, k)$ について	237
付録 I	$\frac{\partial \Pi_1(\nu, k)}{\partial \nu}$ について	238
付録 J	$-i\theta = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} (e^{in\theta} - e^{-in\theta})$ の証明	240

1 はじめに

2次元 Ising モデルとは $1/2$ のスピンの図 1 のように N 行 M 列の正方格子に並んでおり、相互作用は最近接スピン間の交換相互作用および磁場との Zeemann 相互作用のみを考えたモデルである。このモデルのハミルトニアン \mathcal{H} は、

$$\mathcal{H}(\sigma_{1,1}, \dots, \sigma_{N,M}) = -h \sum \sigma_{n,m} - \frac{J_1}{2} \sum \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m} - \frac{J_2}{2} \sum \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1} \quad (1.1)$$

と書ける。ここで、相互作用は縦方向と横方向の最近接スピン間では異なるとし、縦方向、横方向の相互作用の強さをそれぞれ J_1 、 J_2 とおく。Bohr 磁子は 1 とする。これは強磁性体のモデルである。また、 $\sigma_{n,m}$ は第 n 行 m 列のスピン変数であり、 ± 1 の値をとる。これより、分配関数は、

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma_{11}=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_{NM}=\pm 1} \exp\left(\frac{\beta J_1}{2} \sum \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m}\right) \exp\left(\frac{\beta J_2}{2} \sum \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1} + \beta h \sum \sigma_{n,m}\right) \\ &= \sum_{\sigma_{11}=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_{NM}=\pm 1} \exp\left(K_1 \sum \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m}\right) \exp\left(K_2 \sum \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1} + H \sum \sigma_{n,m}\right) \end{aligned} \quad (1.2)$$

となる。ただし、

$$K_1 \equiv \frac{\beta J_1}{2} \quad K_2 \equiv \frac{\beta J_2}{2} \quad H \equiv \beta h \quad (1.3)$$

とおいた。また、これ以降用いる表記として、

$$z_1 \equiv \tanh K_1 \quad (1.4)$$

$$z_2 \equiv \tanh K_2 \quad (1.5)$$

を定義する。

境界条件としては、以下の場合が考えられる。

- 1) 境界が自由端となっている場合は n 、 m の和は $1 \sim N-1$ 、 $1 \sim M-1$ をとればよい。
- 2) 格子がトーラス状となっている場合は、境界において、

$$\sigma_{n,M+1} = \sigma_{n,1} \quad (1.6)$$

$$\sigma_{N+1,m} = \sigma_{1,m} \quad (1.7)$$

となり、 n 、 m の和は $1 \sim N$ 、 $1 \sim M$ をとる。

磁場が 0 の場合 ($h = 0$) のこのモデルの厳密解は L.Onsager [1] によって Lie 代数を用いて初めて解かれた。その後様々な解法が開発されたが、磁場がかかっている 2次元 Ising モデルの厳密解は現在までに得られていない。また、自発磁化は C.N.Yang [2] により求められた。本論文では Lie 代数を用いずに第 2 量子化を用いる方法および、dimer 統計を用いる方法で厳密解を求め物理量の性質を議論する。

本論文の構成を述べる。第 2 章では 1次元 Ising モデルの厳密解を求め、物理量の温度依存性を評価する。第 3 章では第 2 量子化を用いた方法により 2次元 Ising モデルの Helmholtz の自由エネルギーを求める。第 4 章では dimer 統計を用いた方法により 2次元 Ising モデルの Helmholtz の自由エネルギーを求める。第 5

章では求められた Helmholtz の自由エネルギーを用い内部エネルギー、比熱を求め、温度依存性を評価する。また、転移温度の評価も行う。第 6 章では横方向のスピンの相関関数を求め、温度依存性を評価する。第 7 章では自発磁化を求め、温度依存性を評価する。最後に、第 8 章では本論文のまとめと今後の展望について述べる。

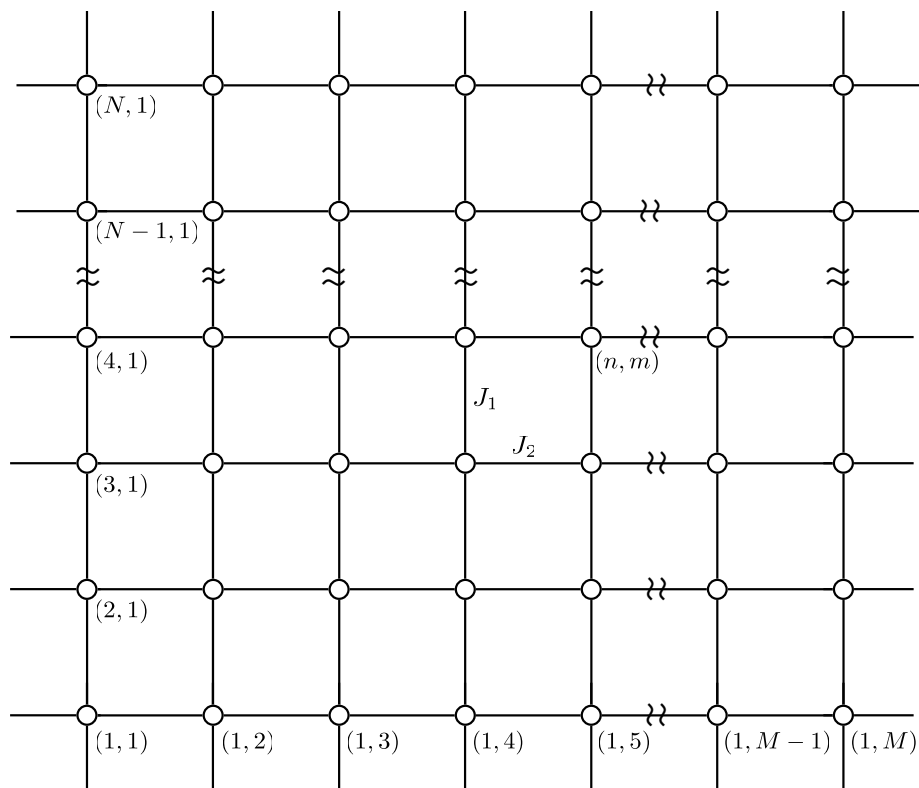


図 1 2次元 Ising モデルの格子

2 1次元 Ising モデル

2次元 Ising モデルを考える前に、ここでは1次元 Ising モデルについて議論する。ここで構成される転送行列は2次元 Ising モデルにも応用できる。まず、2.1節では転送行列の考え方を導入し、転送行列を用いて分配関数を表す。次に、2.2節では磁場が0である場合の物理量である Helmholtz の自由エネルギー、内部エネルギー、比熱の表式を求める。また、磁場が0である場合の物理量の温度依存性を評価し、1次元 Ising モデルでは相転移が起こらないことを示す。最後に、2.3節では磁場が0である場合の相関関数および、スピン間の相関距離を求め、長距離秩序が生じないことを示す。

2.1 1次元 Ising モデルの転送行列の構成

N 個のスピンによる1次元 Ising モデルについて考える。境界条件は、

$$\sigma_{N+1} = \sigma_1 \quad (2.1.1)$$

と環状のものを考える。このハミルトニアンは(1.1)において $K_2 = 0$ としたものであるから、分配関数は、

$$\mathcal{Z} = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \exp\left(K_1 \sum_n \sigma_n \sigma_{n+1}\right) \exp\left(H \sum_n \sigma_n\right) \quad (2.1.2)$$

となる。和の取り方を変更すると、

$$\mathcal{Z} = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N, \sigma'_1, \dots, \sigma'_N} [\exp(K_1 \sigma'_1 \sigma_2)] [\exp(H \sigma_2) \delta_{\sigma_2 \sigma'_2}] \cdots [\exp(K_1 \sigma'_N \sigma_1)] [\exp(H \sigma_1) \delta_{\sigma_1 \sigma'_1}] \quad (2.1.3)$$

となる。このとき、

$$\langle \sigma_i | V_1 | \sigma_j \rangle = \exp(K_1 \sigma_i \sigma_j) \equiv (V_1)_{\sigma_i \sigma_j} \quad (2.1.4)$$

$$\langle \sigma_i | V_1 | \sigma_j \rangle = \exp(H \sigma_i) \delta_{\sigma_i \sigma_j} \equiv (V_2)_{\sigma_i \sigma_j} \quad (2.1.5)$$

とおく。これより、行列 V_1 、 V_2 は、

$$V_1 = \begin{matrix} & \sigma_j = +1 & \sigma_j = -1 \\ \begin{matrix} \sigma_i = +1 \\ \sigma_i = -1 \end{matrix} & \begin{pmatrix} e^{K_1} & e^{-K_1} \\ e^{-K_1} & e^{K_1} \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (2.1.6)$$

$$V_2 = \begin{matrix} & \sigma_j = +1 & \sigma_j = -1 \\ \begin{matrix} \sigma_i = +1 \\ \sigma_i = -1 \end{matrix} & \begin{pmatrix} e^H & 0 \\ 0 & e^{-H} \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (2.1.7)$$

となる。この行列 V_1 、 V_2 を用いると、分配関数は、

$$\mathcal{Z} = \text{tr}(V_1 V_2)^N \quad (2.1.8)$$

$$= \text{tr}\left(V_2^{\frac{1}{2}} V_1 V_2^{\frac{1}{2}}\right)^N \equiv \text{tr} V \quad (2.1.9)$$

と書ける。この V を転送行列 (transfer matrix) という。ここで、 V_1 、 V_2 は対称行列なので、

$${}^t V = {}^t \left(V_2^{\frac{1}{2}} V_1 V_2^{\frac{1}{2}}\right) = \left(V_2^{\frac{1}{2}} V_1 V_2^{\frac{1}{2}}\right) = V \quad (2.1.10)$$

となり V も対称行列となっている。

また、 V 、 V_1 、 V_2 はすべて 2×2 の行列であるから、これらはパウリの行列を用いて表すことができる。パウリの行列を $(\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ とすると、 V_1 、 V_2 は、

$$V_1 = Ie^{K_1} + \sigma^x e^{-K_1} = e^{K_1} (I + \sigma^x e^{-2K_1}) \quad (2.1.11)$$

$$V_2 = I \cosh H + \sigma^z \sinh H \quad (2.1.12)$$

となる。ただし、 I は 2×2 の単位行列である。ここで、任意の a 、 σ^i ($i = x, y, z$) に対し一般に付録 A より、

$$\exp [a\sigma^i] = I \cosh a + \sigma^i \sinh a \quad (2.1.13)$$

が成立する。よって、この関係を用いれば V_2 は、

$$V_2 = \exp (H\sigma^z) \quad (2.1.14)$$

となる。また、 V_1 を簡単化するため、

$$\tanh K_1^* \equiv e^{-2K_1} \quad (2.1.15)$$

$$\tanh K_1 = e^{-2K_1^*} \quad (2.1.16)$$

とおくと、

$$\begin{aligned} V_1 &= (\tanh K_1^*)^{-\frac{1}{2}} (I + \sigma^x \tanh K_1^*) \\ &= (\sinh K_1^* \cosh K_1^*)^{-\frac{1}{2}} (I \cosh K_1^* + \sigma^x \sinh K_1^*) \\ &= \left(\frac{1}{2} \sinh 2K_1^* \right)^{-\frac{1}{2}} \exp (K_1^* \sigma^x) \\ &= (2 \sinh 2K_1)^{\frac{1}{2}} \exp (K_1^* \sigma^x) \end{aligned} \quad (2.1.17)$$

と書ける。ただし、 $\sinh 2K_1 \sinh 2K_1^* = 1$ となることを用いた。

したがって、1次元の場合の転送行列 $V = V_2^{\frac{1}{2}} V_1 V_2^{\frac{1}{2}}$ を形成する V_1 、 V_2 は、

$$V_1 = (2 \sinh 2K_1)^{\frac{1}{2}} \exp (K_1^* \sigma^x) \quad (2.1.18)$$

$$V_2 = \exp (H\sigma^z) \quad (2.1.19)$$

とも書くことができる。

2.2 Helmholtz の自由エネルギー、内部エネルギー、比熱

行列 V の固有値が λ_+ 、 λ_- であり、 $\lambda_+ > \lambda_-$ が成立している場合、分配関数は、

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \text{tr} \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}^N \\ &= \lambda_+^N + \lambda_-^N \\ &= \lambda_+^N \left\{ 1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right\} \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

となる。 $\lambda_-/\lambda_+ < 1$ であるから $N \rightarrow \infty$ の極限では、

$$\mathcal{Z} = \lambda_+^N \quad (2.2.2)$$

となる。ここで、行列 V は (2.1.6)、(2.1.7) の表式を用いると、

$$V = \begin{pmatrix} e^{K_1+H} & e^{-K_1} \\ e^{-K_1} & e^{K_1-H} \end{pmatrix} \quad (2.2.3)$$

となるから、 V の固有値 λ を求めると、

$$\begin{vmatrix} e^{K_1+H} - \lambda & e^{-K_1} \\ e^{-K_1} & e^{K_1-H} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$\lambda = e^{K_1} \cosh H \pm \sqrt{e^{2K_1} \cosh^2 H - 2 \sinh 2K_1} \quad (2.2.4)$$

となる。よって、大きい方の固有値 λ_+ は、

$$\lambda_+ = e^{K_1} \cosh H + \sqrt{e^{2K_1} \cosh^2 H - 2 \sinh 2K_1} \quad (2.2.5)$$

となるため、分配関数は、

$$\mathcal{Z} = e^{K_1} \cosh H + \sqrt{e^{2K_1} \cosh^2 H - 2 \sinh 2K_1} \quad (2.2.6)$$

となる。また、1 スピンあたりの Helmholtz の自由エネルギーは、

$$F = -k_B T \ln \lambda_+ \quad (2.2.7)$$

となるから、

$$F = -k_B T \ln \left[e^{K_1} \cosh H + \sqrt{e^{2K_1} \cosh^2 H - 2 \sinh 2K_1} \right] \quad (2.2.8)$$

となる。

これ以降、磁場が 0 の場合 ($H = 0$) について考える。このとき、1 スピンあたりの Helmholtz の自由エネルギーは、

$$F = -k_B T \ln (2 \cosh K_1) \quad (2.2.9)$$

となる。また、1 スピンあたりの内部エネルギーは、

$$\begin{aligned} U &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \mathcal{Z} \\ &= -\frac{J_1}{2} \tanh K_1 \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

となる。最後に、1 スピンあたりの比熱は、

$$\begin{aligned} C &= \frac{\partial U}{\partial T} \\ &= \frac{J_1^2}{4k_B T^2 \cosh^2 K_1} \end{aligned} \quad (2.2.11)$$

となる。

磁場のない場合の自由エネルギー F 、内部エネルギー U 、比熱 C の温度依存性はそれぞれ図 2、図 3、図 4 となる。図より内部エネルギー U 、比熱 C は有限温度では常に有限であり、また連続である。すなわち自由エネルギーの 1 階微分および 2 階微分に特異性は生じず、1 次元 Ising モデルでは相転移は起こらないことが分かる。

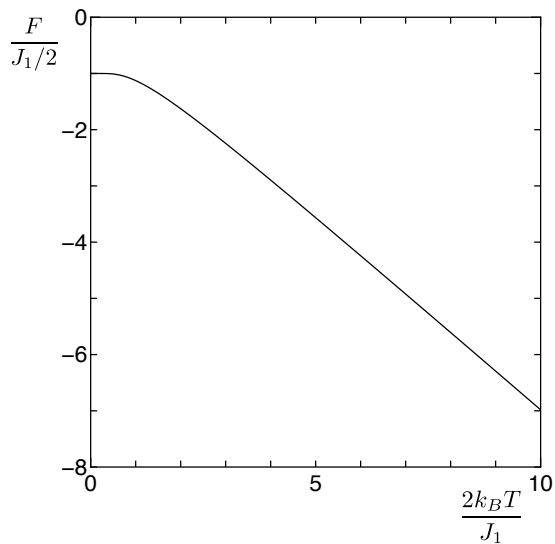


図2 自由エネルギー F の温度依存性

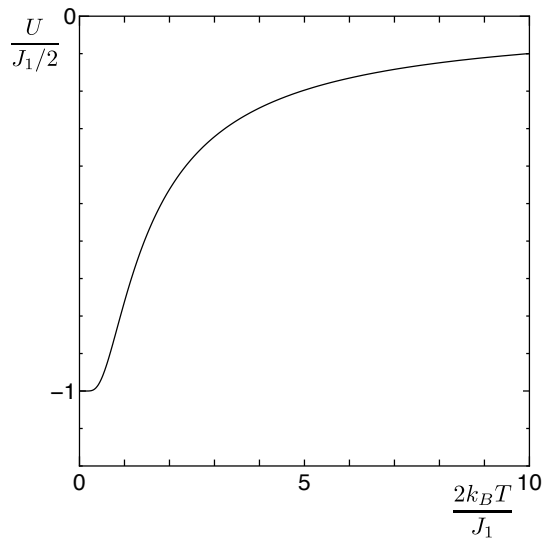


図3 内部エネルギー U の温度依存性

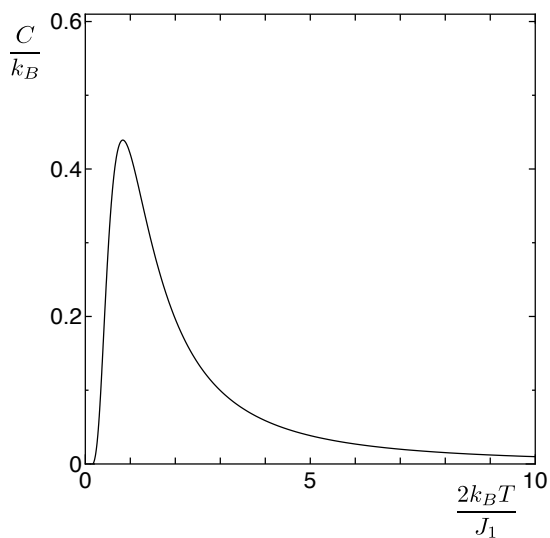


図4 比熱 C の温度依存性

2.3 磁場が0の場合の相関関数

i 番目の格子点のスピンと j 番目の格子点のスピンの間の相関関数 $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ は、

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \sigma_i \sigma_j \exp \left(K_1 \sum_n \sigma_n \sigma_{n+1} \right) \quad (2.3.1)$$

で与えられる。一般に相関関数は i, j に独立には依存せず、距離にのみ依存するので $|i - j|$ に依存する。そのため、これ以降議論を $j > i$ の場合に限ったとしても、 $j < i$ の場合にも同様の相関関数となる。よって、

$j > i$ の場合を考えることとする。すると、 $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ は、

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_i \sigma_j \rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \prod_{n=1}^{i-1} \exp(K_1 \sigma_n \sigma_{n+1}) \sigma_i \prod_{n=i}^{j-1} \exp(K_1 \sigma_n \sigma_{n+1}) \sigma_j \prod_{n=j}^N \exp(K_1 \sigma_n \sigma_{n+1}) \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \left\{ \prod_{n=1}^{i-1} (V_1)_{\sigma_n \sigma_{n+1}} \right\} \sigma_i \left\{ \prod_{n=i}^{j-1} (V_1)_{\sigma_n \sigma_{n+1}} \right\} \sigma_j \left\{ \prod_{n=j}^N (V_1)_{\sigma_n \sigma_{n+1}} \right\} \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} \left\{ \prod_{n=1}^{i-2} (V_1)_{\sigma_n \sigma_{n+1}} \right\} \left\{ (V_1)_{\sigma_{i-1} \sigma_i} \sigma_i (V_1)_{\sigma_i \sigma_{i+1}} \right\} \\
&\quad \times \left\{ \prod_{n=i-1}^{j-2} (V_1)_{\sigma_n \sigma_{n+1}} \right\} \left\{ (V_1)_{\sigma_{j-1} \sigma_j} \sigma_j (V_1)_{\sigma_j \sigma_{j+1}} \right\} \left\{ \prod_{n=j-1}^N (V_1)_{\sigma_n \sigma_{n+1}} \right\} \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{tr} V_1^{i-2} (V_1 \sigma^z V_1) V_1^{j-i-2} (V_1 \sigma^z V_1) V_1^{N-j} \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{tr} V_1^{i-1} \sigma^z V_1^{j-i} \sigma^z V_1^{N-j+1} \tag{2.3.2}
\end{aligned}$$

となる。ただし、 σ^z はパウリの行列の z 成分である。ここで、 $H = 0 (h = 0)$ のとき、 V_1 の固有値は、

$$\lambda_{\pm} = e^{K_1} \pm e^{-K_1} \tag{2.3.3}$$

となる。 V_1 を対角化する直行行列 U は、

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \tag{2.3.4}$$

$$U^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \tag{2.3.5}$$

となる。 V_1 を対角化した行列を \tilde{V}_1 とおくと、

$$\tilde{V}_1 = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} \tag{2.3.6}$$

となり、

$$U^{-1} V_1 U = \tilde{V}_1 \tag{2.3.7}$$

$$V_1 = U \tilde{V}_1 U^{-1} \tag{2.3.8}$$

となる。これより、

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_i \sigma_j \rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{tr} (U \tilde{V}_1 U^{-1})^{i-1} \sigma^z (U \tilde{V}_1 U^{-1})^{j-i} \sigma^z (U \tilde{V}_1 U^{-1})^{N-j+1} \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{tr} U \tilde{V}_1^{i-1} U^{-1} \sigma^z U \tilde{V}_1^{j-i} U^{-1} \sigma^z U \tilde{V}_1^{N-j+1} U^{-1} \tag{2.3.9}
\end{aligned}$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned}
U^{-1} \sigma^z U &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma^x \tag{2.3.10}
\end{aligned}$$

となるので、

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_i \sigma_j \rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{tr} U \tilde{V}_1^{i-1} \sigma^x \tilde{V}_1^{j-i} \sigma^x \tilde{V}_1^{N-j+1} U^{-1} \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{tr} \tilde{V}_1^{N-j+i} \sigma^x \tilde{V}_1^{j-i} \sigma^x \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{tr} \begin{pmatrix} \lambda_+^{N-j+i} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{N-j+i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_+^{j-i} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{j-i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{\lambda_+^N} \left(\lambda_+^{N-j+i} \lambda_-^{j-i} + \lambda_+^{j-i} \lambda_-^{N-j+i} \right) \\
&= \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^{j-i} + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \left(\frac{\lambda_+}{\lambda_-} \right)^{j-i}
\end{aligned} \tag{2.3.11}$$

となる。 $\lambda_-/\lambda_+ < 1$ であるから、 $N \rightarrow \infty$ の極限で、

$$\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \rightarrow 0 \tag{2.3.12}$$

となる。すなわち、

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^{j-i} \tag{2.3.13}$$

$$= (\tanh K_1)^{j-i} \tag{2.3.14}$$

となる。

よって、一般には $|j - i|$ の関数となり、

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = (\tanh K_1)^{|j-i|} \tag{2.3.15}$$

となる。この温度依存性は図 5 となる。これより相関関数は $T = 0$ で 1 の値をとり、温度の上昇とともに単調に減少する。したがって、温度の上昇によりスピン間の相関は小さくなることが分かる。また、より遠いスピン間の相関関数の方が温度の上昇とともに早く減衰することが分かる。

次に、相関距離 ξ は、

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \propto e^{-|j-i|/\xi} \tag{2.3.16}$$

で定義されるので、1次元 Ising モデルでは、

$$\xi = \frac{1}{\ln(\coth K_1)} \tag{2.3.17}$$

となる。この低温極限 ($\beta \gg 1$) の振る舞いについて考える。 $e^{-\beta J_1} \ll 1$ であるから、

$$\begin{aligned}
\ln(\coth K_1) &= \ln \left(\frac{e^{\frac{\beta J_1}{2}} + e^{-\frac{\beta J_1}{2}}}{e^{\frac{\beta J_1}{2}} - e^{-\frac{\beta J_1}{2}}} \right) \\
&= \ln \left(\frac{1 + e^{-\beta J_1}}{1 - e^{-\beta J_1}} \right) \\
&\cong \ln(1 + 2e^{-\beta J_1}) \\
&\cong 2e^{-\beta J_1}
\end{aligned} \tag{2.3.18}$$

と近似できる。したがって、

$$\xi \cong \frac{e^{\beta J_1}}{2} \quad (2.3.19)$$

となる。相関距離の温度依存性は図 6 となる。相関距離は $T = 0$ で指数関数的な発散をし、温度上昇とともに単調に減少する。また、有限温度において相関距離は有限の値をとるため、1次元 Ising モデルでは長距離秩序は生じないことが分かる。

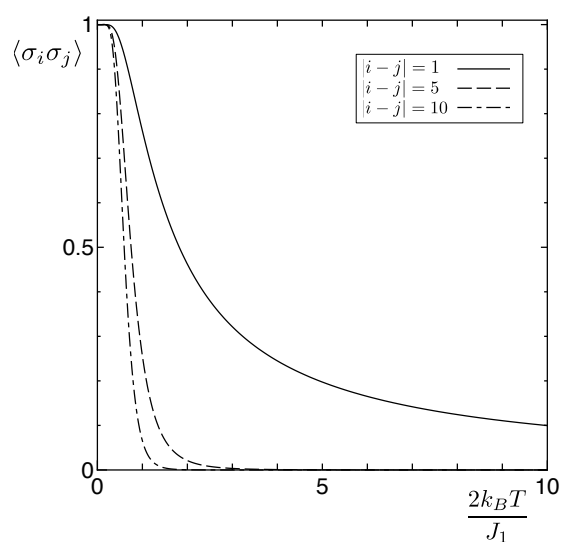


図 5 相関関数 $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ の温度依存性

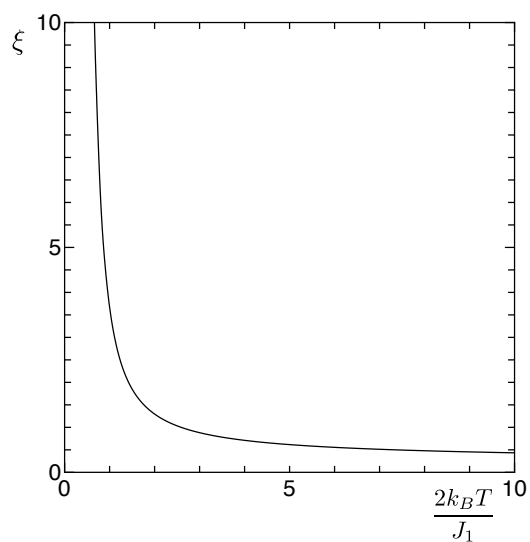


図 6 相関距離 ξ の温度依存性

3 第2量子化を用いる方法

第2量子化を用いて2次元 Ising モデルの Helmholtz の自由エネルギーを求める。この方法は T.D.Schlutz、D.C.Mattis、E.H.Lieb [3] によりなされた。まず、3.1 節では1次元 Ising モデルの転送行列を応用し2次元 Ising モデルの転送行列を求める。次に、3.2 節では3.1 節で求めた転送行列の対格化を行う。その際スピン演算子を Jordan-Wigner 変換 [4, pp.206–207] を用いてフェルミ粒子の生成消滅演算子に変換する。最後に、3.3 節では対格化された転送行列の最大固有値を評価し、それを用いて分配関数および Helmholtz の自由エネルギーを求める。

3.1 2次元 Ising モデルの転送行列の構成

1つのスピンに対して2通り状態が存在するので、横列 (スピン数 M 個) では、 2^M の配列が存在することになる。ここで、1つのスピンに対するパウリの行列 (2×2) を横列でのパウリの行列 ($2^M \times 2^M$) に一般化することを考える。まず、演算子 A が定義されたヒルベルト空間を $|a\rangle$ 、演算子 \mathcal{A} が定義されたヒルベルト空間を $|\alpha\rangle$ とするとき、 $A \otimes \mathcal{A}$ を、

$$\langle \beta b | A \otimes \mathcal{A} | a \alpha \rangle = \langle b | A | a \rangle \langle \beta | \mathcal{A} | \alpha \rangle \quad (3.1.1)$$

で定義する。これより、 $\mathcal{A} = I$ (単位行列) の場合 $A \otimes I$ は A よりも大きなヒルベルト空間を形成する。この \otimes を直積という。例えば、 A, I が 2×2 の行列であれば、 $A \otimes I$ は $2^2 \times 2^2$ の行列となる。つまり、横列 m 番目のスピンに対するパウリの行列 ($\sigma_m^x, \sigma_m^y, \sigma_m^z$) は、

$$\sigma_m^x = \overbrace{I \otimes \cdots \otimes I \otimes \sigma^x \otimes I \otimes \cdots \otimes I}^{M \text{ 個}} \quad (3.1.2)$$

$$\sigma_m^y = \overbrace{I \otimes \cdots \otimes I \otimes \sigma^y \otimes I \otimes \cdots \otimes I}^{M \text{ 個}} \quad (3.1.3)$$

$$\sigma_m^z = \overbrace{I \otimes \cdots \otimes I \otimes \sigma^z \otimes I \otimes \cdots \otimes I}^{M \text{ 個}} \quad (3.1.4)$$

$$1, \dots, m, \dots, M \quad (3.1.5)$$

となる。

ここで、2次元 Ising モデルのハミルトニアンは (1.1) であるから、分配関数は、

$$\mathcal{Z} = \sum_{\sigma_{11}=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_{NM}=\pm 1} \exp\left(K_1 \sum \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m}\right) \exp\left(K_2 \sum \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1} + H \sum \sigma_{n,m}\right) \quad (3.1.6)$$

となり、1次元の場合と同様に和の取り方を変更し、

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = & \sum_{\sigma_{1,1} \sigma'_{1,1} \cdots \sigma_{N,M} \sigma'_{N,M}} \left[\exp\left(K_1 \sum_m \sigma_{1,m} \sigma'_{2,m}\right) \right] \left[\exp\left(K_2 \sum_m \sigma_{1,m} \sigma'_{1,m+1} + H \sum_m \sigma_{1,m}\right) \prod_m \delta_{\sigma_{1,m} \sigma'_{1,m}} \right] \times \\ & \cdots \times \left[\exp\left(K_1 \sum_m \sigma_{N,m} \sigma'_{1,m}\right) \right] \left[\exp\left(K_2 \sum_m \sigma_{N,m} \sigma'_{N,m+1} + H \sum_m \sigma_{N,m}\right) \prod_m \delta_{\sigma_{N,m} \sigma'_{N,m}} \right] \end{aligned} \quad (3.1.7)$$

とする。このとき、

$$\langle \sigma_{i,1} \cdots \sigma_{i,M} | V_1 | \sigma_{j,1} \cdots \sigma_{j,M} \rangle = \exp \left(K_1 \sum_m \sigma_{i,m} \sigma_{j,m} \right) \equiv (V_1)_{\sigma_{i,m} \sigma_{j,m}} \quad (3.1.8)$$

$$\langle \sigma_{i,1} \cdots \sigma_{i,M} | V_2 | \sigma_{j,1} \cdots \sigma_{j,M} \rangle = \exp \left(K_2 \sum_m \sigma_{i,m} \sigma_{j,m+1} + H \sum_m \sigma_{i,m} \right) \prod_m \delta_{\sigma_{i,m} \sigma_{j,m}} \quad (3.1.9)$$

$$\equiv (V_2)_{\sigma_{i,m} \sigma_{j,m}} \quad (3.1.10)$$

とおく。これにより、分配関数は、

$$\mathcal{Z} = \text{tr} (V_1 V_2)^N = \text{tr} \left\{ V_2^{\frac{1}{2}} V_1 V_2^{\frac{1}{2}} \right\}^N \equiv \text{tr} V^N \quad (3.1.11)$$

となる。この行列 V が 2 次元 Ising モデルの転送行列である。

まず、 V_1 について考える。 V_1 は、

$$(V_1)_{\sigma_{i,m} \sigma_{j,m}} = \prod_m \exp(K_1 \sigma_{i,m} \sigma_{j,m}) \quad (3.1.12)$$

であるが、右辺の成分は 1 次元の場合の拡張として、

$$\exp(K_1 \sigma_{i,m} \sigma_{j,m}) = \left\{ (2 \sinh 2K_1)^{\frac{1}{2}} \exp(K_1^* \sigma_m^x) \right\}_{\sigma_{i,m} \sigma_{j,m}} \quad (3.1.13)$$

となる。したがって、

$$\begin{aligned} V_1 &= \prod_m (2 \sinh 2K_1)^{\frac{1}{2}} \exp(K_1^* \sigma_m^x) \\ &= (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \exp \left(K_1^* \sum_m \sigma_m^x \right) \end{aligned} \quad (3.1.14)$$

となる。

次に、 V_2 について考える。 V_2 は、

$$(V_2)_{\sigma_{i,m} \sigma_{j,m}} \equiv \prod_m \exp(K_2 \sigma_{i,m} \sigma_{j,m+1} + H \sigma_{i,m}) \prod_m \delta_{\sigma_{i,m} \sigma_{j,m}} \quad (3.1.15)$$

であるが、右辺の成分は 1 次元の場合の拡張として、

$$\exp(K_2 \sigma_{i,m} \sigma_{j,m+1} + H \sigma_{i,m}) \prod_m \delta_{\sigma_{i,m} \sigma_{j,m+1}} = \left(\exp(K_2 \sigma_m^z \sigma_{m+1}^z + H \sigma_m^z) \right)_{\sigma_{i,m} \sigma_{j,m}} \quad (3.1.16)$$

となる。したがって、

$$V_2 = \prod_m \exp(K_2 \sigma_m^z \sigma_{m+1}^z + H \sigma_m^z) \quad (3.1.17)$$

$$= \exp \left(K_2 \sum_m \sigma_m^z \sigma_{m+1}^z + H \sum_m \sigma_m^z \right) \quad (3.1.18)$$

となる。ここで簡単のために V_2 を磁場に依存しない項と依存する項に分け、改めてそれぞれを V_2 、 V_3 とおくと、

$$V_2 = \exp \left(K_2 \sum_m \sigma_m^z \sigma_{m+1}^z \right) \quad (3.1.19)$$

$$V_3 = \exp \left(H \sum_m \sigma_m^z \right) \quad (3.1.20)$$

とすることができる。

ここで、以後計算がしやすいように、

$$\sigma_m^x \rightarrow -\sigma_m^z \quad (3.1.21)$$

$$\sigma_m^z \rightarrow \sigma_m^x \quad (3.1.22)$$

と正準変換すると、行列 V_1 、 V_2 、 V_3 は、

$$V_1 = (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \exp \left(-K_1^* \sum_m \sigma_m^z \right) \quad (3.1.23)$$

$$V_2 = \exp \left(K_2 \sum_m \sigma_m^x \sigma_{m+1}^x \right) \quad (3.1.24)$$

$$V_3 = \exp \left(H \sum_m \sigma_m^x \right) \quad (3.1.25)$$

となる。

また、スピン 1/2 のスピン演算子 S_m と Pauli の行列 σ_m の関係は、

$$S_m = \frac{1}{2} \sigma_m \quad (3.1.26)$$

であるから、 V_1 、 V_2 、 V_3 をスピン演算子で表すと、

$$V_1 = (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \exp \left(-2K_1^* \sum_m S_m^z \right) \quad (3.1.27)$$

$$V_2 = \exp \left(4K_2 \sum_m S_m^z S_{m+1}^z \right) \quad (3.1.28)$$

$$V_3 = \exp \left(2H \sum_m S_m^z \right) \quad (3.1.29)$$

となる。ここで、スピン演算子の昇降演算子 S^\pm は、

$$S^\pm = S^x \pm iS^y \quad (3.1.30)$$

で定義される。これより、

$$\begin{aligned} S^+ S^- &= (S^x + iS^y)(S^x - iS^y) \\ &= (S^x)^2 - i[S^x, S^y] + (S^y)^2 \\ &= (S^x)^2 + (S^y)^2 + S^z \end{aligned} \quad (3.1.31)$$

$$\begin{aligned} S^- S^+ &= (S^x - iS^y)(S^x + iS^y) \\ &= (S^x)^2 + i[S^x, S^y] + (S^y)^2 \\ &= (S^x)^2 + (S^y)^2 - S^z \end{aligned} \quad (3.1.32)$$

となり、

$$\{S^+, S^-\}_+ = 1 \quad (3.1.33)$$

という関係が成立することより、

$$\begin{aligned} S^+ S^- + S^- S^+ &= 1 \\ 2 \{ (S^x)^2 + (S^y)^2 \} &= 1 \\ (S^x)^2 + (S^y)^2 &= \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (3.1.34)$$

となる。したがって、

$$S^+ S^- - \frac{1}{2} = (S^x)^2 + (S^y)^2 + S^z - \frac{1}{2} = S^z \quad (3.1.35)$$

となる。よって、 V_1 は、

$$V_1 = (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \exp \left[-2K_1^* \sum_m \left(S^+ S^- - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (3.1.36)$$

となる。

3.2 V の対角化

Jordan-Wigner 変換を用いてスピン演算子をフェルミ粒子の生成消滅演算子に、

$$a_j \equiv (-2)^{j-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^- \quad (3.2.1)$$

$$a_j^\dagger \equiv (-2)^{j-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^+ \quad (3.2.2)$$

と変換する。この変換については付録 C で述べる。これを用いて、 V_1 、 V_2 を書き直すと、 V_1 は (付録 C.19)、 V_2 は (付録 C.52) により、

$$V_1 = (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \exp \left[-2K_1^* \sum_m \left(a_m^\dagger a_m - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (3.2.3)$$

$$V_2 = \exp \left[K_2 \sum_m (a_m^\dagger - a_m) (a_{m+1}^\dagger + a_{m+1}) \right] \quad (3.2.4)$$

となる。ただし、

$$\mathcal{N} \equiv \sum_{m=1}^M S_m^+ S_m^- = \sum_{m=1}^M a_m^\dagger a_m = \sum_{m=1}^M n_m \quad (3.2.5)$$

においたとき、付録 C により

$$a_{M+1} = -a_1 \quad a_{M+1}^\dagger = -a_1^\dagger \quad \mathcal{N} \text{ が偶数のとき} \quad (3.2.6)$$

$$a_{M+1} = a_1 \quad a_{M+1}^\dagger = a_1^\dagger \quad \mathcal{N} \text{ が奇数のとき} \quad (3.2.7)$$

という関係が成立する。よって、 \mathcal{N} が偶数の場合の転送行列を V^+ 、 \mathcal{N} が奇数の場合の転送行列を V^- と書くこととする。ここで、 V_1 、 V_2 はこのように、 a_j 、 a_j^\dagger を用いて表せたが、 V_3 は簡単にならない。このため、外場 (h) が存在すると厳密に解くことはできない。よって、これ以降は外場のない場合 ($h = 0$) を考えること

とし、 V_3 は無視する。このとき、

$$\begin{aligned}
V^\pm &= (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \exp \left[\frac{1}{2} K_2 \sum_m (a_m^\dagger - a_m) (a_{m+1}^\dagger + a_{m+1}) \right] \\
&\quad \times \exp \left[-2K_1^* \sum_m \left(a_m^\dagger a_m - \frac{1}{2} \right) \right] \\
&\quad \times \exp \left[\frac{1}{2} K_2 \sum_m (a_m^\dagger - a_m) (a_{m+1}^\dagger + a_{m+1}) \right] \tag{3.2.8}
\end{aligned}$$

となる。

次に、 a_m 、 a_m^\dagger を、

$$a_m = \frac{1}{\sqrt{M}} e^{-i\pi/4} \sum_q e^{iqm} \eta_q \tag{3.2.9}$$

$$a_m^\dagger = \frac{1}{\sqrt{M}} e^{i\pi/4} \sum_q e^{-iqm} \eta_q^\dagger \tag{3.2.10}$$

とフーリエ展開する。このとき、 η_q 、 η_q^\dagger は、

$$\left\{ \eta_q, \eta_{q'}^\dagger \right\}_+ = \delta_{qq'} \tag{3.2.11}$$

$$\left\{ \eta_q, \eta_{q'} \right\}_+ = \left\{ \eta_q^\dagger, \eta_{q'}^\dagger \right\}_+ = 0 \tag{3.2.12}$$

という関係を満たす。ここで、

$$\begin{aligned}
\mathcal{N} &= \sum_{m=1}^M a_m^\dagger a_m \\
&= \sum_{m=1}^M \sum_{q, q'} \frac{1}{M} e^{-i(q-q')m} \eta_q^\dagger \eta_{q'} \\
&= \sum_{q, q'} \delta_{q, q'} \eta_q^\dagger \eta_{q'} \\
&= \sum_q \eta_q^\dagger \eta_q \tag{3.2.13}
\end{aligned}$$

となり、 \mathcal{N} は η 粒子の個数を表していることが分かる。これより、 q のとりうる値について考える。

1) \mathcal{N} が偶数の場合

生成演算子が満たす関係より、

$$\begin{aligned}
a_{M+1} &= -a_1 \\
\frac{1}{\sqrt{M}} e^{-i\pi/4} \sum_q e^{iq(M+1)} \eta_q &= -\frac{1}{\sqrt{M}} e^{-i\pi/4} \sum_q e^{iq} \eta_q \\
e^{iq(M+1)} &= -e^{iq} \\
e^{iqM} &= -1 \tag{3.2.14}
\end{aligned}$$

となる必要があり、 q のとりうる値は、

$$q = \pm \frac{\pi}{M}, \pm \frac{3\pi}{M}, \pm \frac{5\pi}{M}, \dots, \pm \frac{(M-1)\pi}{M} \tag{3.2.15}$$

の M 個となる。

2) \mathcal{N} が奇数の場合

生成演算子が満たす関係より、

$$\begin{aligned} a_{M+1} &= a_1 \\ \frac{1}{\sqrt{M}} e^{-i\pi/4} \sum_q e^{iq(M+1)} \eta_q &= \frac{1}{\sqrt{M}} e^{-i\pi/4} \sum_q e^{iq} \eta_q \\ e^{iq(M+1)} &= e^{iq} \\ e^{iqM} &= 1 \end{aligned} \quad (3.2.16)$$

となる必要があり、 q のとりうる値は、

$$q = 0, \pm \frac{2\pi}{M}, \pm \frac{4\pi}{M}, \dots, \pm \frac{(M-2)\pi}{M}, \pi \quad (3.2.17)$$

の M 個となる。

したがって、 V^\pm は η_q, η_q^\dagger を用いると、付録 D より、

$$V^\pm = (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \prod_{0 \leq q \leq \pi} V_q \quad (3.2.18)$$

となる。ただし、 $\prod_{0 \leq q \leq \pi}$ の q は、 \mathcal{N} の偶奇によって (3.2.15)、(3.2.17) のどちらかの組をとるものとする。 V_q は $q \neq 0, \pi$ では、

$$V_q = (V_{2q})^{\frac{1}{2}} V_{1q} (V_{2q})^{\frac{1}{2}} \quad (3.2.19)$$

$$V_{1q} = \exp \left[-2K_1^* \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} - 1 \right) \right]$$

$$V_{2q} = \exp \left[2K_2 \{ \cos q \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) + \sin q \left(\eta_q \eta_{-q} + \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \right) \} \right] \quad (3.2.20)$$

であり、 $q = 0, \pi$ では、

$$V_0 = \exp \left[-2(K_1^* - K_2) \left(\eta_0^\dagger \eta_0 - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (3.2.21)$$

$$V_\pi = \exp \left[-2(K_1^* + K_2) \left(\eta_\pi^\dagger \eta_\pi - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (3.2.22)$$

である。

ここで、 $q \neq q'$ の場合 $V_q, V_{q'}$ は可換となる。これは、 $V_q, V_{q'}$ が互いに反可換な 2 次の演算子により構成されているためである。そのため、 V_q はそれぞれ別々に対角化できる。また、 V_0, V_π はすでに対角化されているので、 $q \neq 0, \pi$ の場合について対角化すればよい。そこで、

$$|\Phi_0\rangle = |0\rangle : \eta \text{ 粒子の真空状態} \quad (3.2.23)$$

$$|\Phi_q\rangle = \eta_q^\dagger |0\rangle : \eta_q \text{ 粒子が 1 つ存在する状態} \quad (3.2.24)$$

$$|\Phi_{-q}\rangle = \eta_{-q}^\dagger |0\rangle : \eta_{-q} \text{ 粒子が 1 つ存在する状態} \quad (3.2.25)$$

$$|\Phi_{-qq}\rangle = \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle : \eta_q, \eta_{-q} \text{ 粒子が 1 つずつ存在する状態} \quad (3.2.26)$$

という4つの状態を導入する。ただし、 $|0\rangle$ は η_q 、 η_{-q} の真空状態を表す状態であるとする、

$$\eta_q|0\rangle = 0 \quad (3.2.27)$$

$$(\eta_q|0\rangle)^\dagger = \langle 0|\eta_q^\dagger = 0 \quad (3.2.28)$$

を満たす。

このとき、 $|\Phi_q\rangle$ 、 $|\Phi_{-q}\rangle$ は V_q の固有ケットベクトルである。これは、 $|\Phi_q\rangle$ 、 $|\Phi_{-q}\rangle$ が $\eta_q\eta_{-q}$ 、 $\eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger$ 、 $\eta_q^\dagger\eta_q + \eta_{-q}^\dagger\eta_{-q}$ の固有ケットベクトルであることからわかる。まず、 $\eta_q\eta_{-q}$ に対しては、

$$\begin{aligned} \eta_q\eta_{-q}|\Phi_q\rangle &= \eta_q\eta_{-q}\eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= -\eta_q\eta_q^\dagger\eta_{-q}|0\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.2.29)$$

$$\begin{aligned} \eta_q\eta_{-q}|\Phi_{-q}\rangle &= \eta_q\eta_{-q}\eta_{-q}^\dagger|0\rangle \\ &= \eta_q(1 - \eta_q^\dagger\eta_{-q})|0\rangle \\ &= \eta_q|0\rangle - \eta_q\eta_q^\dagger\eta_{-q}|0\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.2.30)$$

となるので、この状態は $\eta_q\eta_{-q}$ の固有状態であり、その固有値は0である。次に $\eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger$ に対しては、

$$\begin{aligned} \eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger|\Phi_q\rangle &= \eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger\eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.2.31)$$

$$\begin{aligned} \eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger|\Phi_{-q}\rangle &= \eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger\eta_{-q}^\dagger|0\rangle \\ &= -\eta_q^\dagger\eta_{-q}^\dagger\eta_{-q}^\dagger|0\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.2.32)$$

となるので、この状態は $\eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger$ の固有状態であり、その固有値は0である。最後に、 $\eta_q^\dagger\eta_q + \eta_{-q}^\dagger\eta_{-q}$ に対しては、

$$\begin{aligned} (\eta_q^\dagger\eta_q + \eta_{-q}^\dagger\eta_{-q})|\Phi_q\rangle &= (\eta_q^\dagger\eta_q + \eta_{-q}^\dagger\eta_{-q})\eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= \eta_q^\dagger\eta_q\eta_q^\dagger|0\rangle + \eta_{-q}^\dagger\eta_{-q}\eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= \eta_q^\dagger(1 - \eta_q^\dagger\eta_q)|0\rangle - \eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger\eta_{-q}|0\rangle \\ &= \eta_q^\dagger|0\rangle - \eta_q^\dagger\eta_q^\dagger\eta_q|0\rangle \\ &= \eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= |\Phi_q\rangle \end{aligned} \quad (3.2.33)$$

$$\begin{aligned} (\eta_q^\dagger\eta_q + \eta_{-q}^\dagger\eta_{-q})|\Phi_{-q}\rangle &= (\eta_q^\dagger\eta_q + \eta_{-q}^\dagger\eta_{-q})\eta_{-q}^\dagger|0\rangle \\ &= \eta_q^\dagger\eta_q\eta_{-q}^\dagger|0\rangle + \eta_{-q}^\dagger\eta_{-q}\eta_{-q}^\dagger|0\rangle \\ &= -\eta_q^\dagger\eta_{-q}^\dagger\eta_q|0\rangle + \eta_{-q}^\dagger(1 - \eta_{-q}^\dagger\eta_{-q})|0\rangle \\ &= \eta_{-q}^\dagger|0\rangle - \eta_{-q}^\dagger\eta_{-q}^\dagger\eta_{-q}|0\rangle \\ &= \eta_{-q}^\dagger|0\rangle \\ &= |\Phi_{-q}\rangle \end{aligned} \quad (3.2.34)$$

となるので、この状態は $\eta_q^\dagger\eta_q + \eta_{-q}^\dagger\eta_{-q}$ の固有状態であり、その固有値は1である。

したがって、 $q \neq 0, \pi$ では、

$$V_q|\Phi_q\rangle = \exp(2K_2 \cos q)|\Phi_q\rangle \quad (3.2.35)$$

$$V_q|\Phi_{-q}\rangle = \exp(2K_2 \cos q)|\Phi_{-q}\rangle \quad (3.2.36)$$

となる。すなわち、 $|\Phi_q\rangle$ 、 $|\Phi_{-q}\rangle$ は V_q の固有状態であり、固有値は $\exp(2K_2 \cos q)$ であることがわかる。

次に、残った $|\Phi_{-qq}\rangle$ 、 $|\Phi_0\rangle$ によって張られる空間での転送行列 V_q の行列要素を求める。まず、 V_{1q} の行列要素を求めると、

$$\begin{aligned} V_{1q}|\Phi_{-qq}\rangle &= \exp\left[-2K_1^* \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} - 1\right)\right] \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle \\ &= \exp(-2K_1^*) \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle \\ &= \exp(-2K_1^*) |\Phi_{-qq}\rangle \end{aligned} \quad (3.2.37)$$

$$\begin{aligned} V_{1q}|\Phi_0\rangle &= \exp\left[-2K_1^* \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} - 1\right)\right] |0\rangle \\ &= \exp(2K_1^*) |0\rangle \\ &= \exp(2K_1^*) |\Phi_0\rangle \end{aligned} \quad (3.2.38)$$

となる。ただし、

$$\begin{aligned} \eta_q^\dagger \eta_q \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle &= (1 - \eta_q \eta_q^\dagger) \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle \\ &= \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle + \eta_q \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle \\ &= \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle \end{aligned} \quad (3.2.39)$$

$$\begin{aligned} \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \eta_q^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle &= (1 - \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger) \eta_q^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle \\ &= \eta_q^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle - \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle \\ &= \eta_q^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle \end{aligned} \quad (3.2.40)$$

となることを用いた。また、

$$\langle \Phi_0 | \Phi_{-qq} \rangle = \langle 0 | \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle = 0 \quad (3.2.41)$$

となるので、

$$\langle \Phi_{-qq} | V_{1q} | \Phi_{-qq} \rangle = \exp(-2K_1^*) \quad (3.2.42)$$

$$\langle \Phi_0 | V_{1q} | \Phi_0 \rangle = \exp(2K_1^*) \quad (3.2.43)$$

$$\langle \Phi_0 | V_{1q} | \Phi_{-qq} \rangle = 0 \quad (3.2.44)$$

$$\langle \Phi_{-qq} | V_{1q} | \Phi_0 \rangle = 0 \quad (3.2.45)$$

となる。したがって、 V_{1q} は $|\Phi_{-qq}\rangle$ 、 $|\Phi_0\rangle$ によって張られる空間では、

$$V_{1q} = \begin{pmatrix} \exp(-2K_1^*) & 0 \\ 0 & \exp(2K_1^*) \end{pmatrix} \quad (3.2.46)$$

と対角行列で表される。

次に $(V_{2q})^{\frac{1}{2}}$ の行列要素を求める。そのために、

$$b_q^- = \eta_q \eta_{-q} \quad (3.2.47)$$

$$b_q^+ = \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \quad (3.2.48)$$

という演算子を導入する。まず、 b_q^- の $|\Phi_{-qq}\rangle$ 、 $|\Phi_0\rangle$ に対する行列要素は、

$$\begin{aligned}\langle\Phi_{-qq}|b_q^-|\Phi_{-qq}\rangle &= \langle 0|\eta_q\eta_{-q}\eta_q\eta_{-q}\eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= -\langle 0|\eta_q\eta_q\eta_{-q}\eta_{-q}\eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= 0\end{aligned}\tag{3.2.49}$$

$$\begin{aligned}\langle\Phi_0|b_q^-|\Phi_{-qq}\rangle &= \langle 0|\eta_q\eta_{-q}\eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= \langle 0|\eta_q(1-\eta_{-q}^\dagger\eta_{-q})\eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= \langle 0|\eta_q\eta_q^\dagger|0\rangle - \langle 0|\eta_q\eta_{-q}^\dagger\eta_{-q}\eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= \langle 0|(1-\eta_q^\dagger\eta_q)|0\rangle + \langle 0|\eta_{-q}^\dagger\eta_q\eta_{-q}\eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= 1\end{aligned}\tag{3.2.50}$$

$$\begin{aligned}\langle\Phi_{-qq}|b_q^-|\Phi_0\rangle &= \langle 0|\eta_q\eta_{-q}\eta_q\eta_{-q}|0\rangle \\ &= 0\end{aligned}\tag{3.2.51}$$

$$\begin{aligned}\langle\Phi_0|b_q^-|\Phi_0\rangle &= \langle 0|\eta_q\eta_{-q}|0\rangle \\ &= 0\end{aligned}\tag{3.2.52}$$

となる。また、 b_q^+ の $|\Phi_{-qq}\rangle$ 、 $|\Phi_0\rangle$ に対する行列要素は、

$$\begin{aligned}\langle\Phi_{-qq}|b_q^+|\Phi_{-qq}\rangle &= \langle 0|\eta_q\eta_{-q}\eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger\eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= -\langle 0|\eta_q\eta_{-q}\eta_{-q}^\dagger\eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger\eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= 0\end{aligned}\tag{3.2.53}$$

$$\begin{aligned}\langle\Phi_0|b_q^+|\Phi_{-qq}\rangle &= \langle 0|\eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger\eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= 0\end{aligned}\tag{3.2.54}$$

$$\begin{aligned}\langle\Phi_{-qq}|b_q^+|\Phi_0\rangle &= \langle 0|\eta_q\eta_{-q}\eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= \langle 0|\eta_q(1-\eta_{-q}^\dagger\eta_{-q})\eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= \langle 0|\eta_q\eta_q^\dagger|0\rangle - \langle 0|\eta_q\eta_{-q}^\dagger\eta_{-q}\eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= \langle 0|(1-\eta_q^\dagger\eta_q)|0\rangle + \langle 0|\eta_q\eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger\eta_{-q}|0\rangle \\ &= 1\end{aligned}\tag{3.2.55}$$

$$\begin{aligned}\langle\Phi_0|b_q^+|\Phi_0\rangle &= \langle 0|\eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger|0\rangle \\ &= 0\end{aligned}\tag{3.2.56}$$

となる。したがって、 b_q^+ 、 b_q^- は $|\Phi_{-qq}\rangle$ 、 $|\Phi_0\rangle$ によって張られる空間では、

$$b_q^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\tag{3.2.57}$$

$$b_q^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\tag{3.2.58}$$

という行列となる。

次に、 $\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q}$ の $|\Phi_{-qq}\rangle$ 、 $|\Phi_0\rangle$ によって張られる空間での行列表示を求めると、

$$\langle \Phi_0 | (\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q}) | \Phi_0 \rangle = 0 \quad (3.2.59)$$

$$\langle \Phi_{-qq} | (\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q}) | \Phi_0 \rangle = 0 \quad (3.2.60)$$

$$\langle \Phi_0 | (\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q}) | \Phi_{-qq} \rangle = 0 \quad (3.2.61)$$

$$\begin{aligned} \langle \Phi_{-qq} | (\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q}) | \Phi_{-qq} \rangle &= \langle 0 | \eta_q \eta_{-q} \eta_q^\dagger \eta_q \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger | 0 \rangle + \langle 0 | \eta_q \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger | 0 \rangle \\ &= -\langle 0 | \eta_{-q} \eta_q (1 - \eta_q \eta_q^\dagger) \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger | 0 \rangle + \langle 0 | \eta_q (1 - \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q}) \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger | 0 \rangle \\ &= -\langle 0 | \eta_{-q} \eta_q \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger | 0 \rangle + \langle 0 | \eta_q \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger \eta_q \eta_q^\dagger | 0 \rangle + \langle 0 | \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger \eta_q \eta_q^\dagger | 0 \rangle \\ &= 2 \langle 0 | (1 - \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q}) (1 - \eta_q^\dagger \eta_q) | 0 \rangle \\ &= 2 \end{aligned} \quad (3.2.62)$$

となり、

$$\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \sigma_q^z + 1 \quad (3.2.63)$$

という行列となる。また、 $\eta_q \eta_{-q} + \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger$ は、

$$\eta_q \eta_{-q} + \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger = b_q^+ + b_q^- = \sigma_q^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.2.64)$$

という行列となる。

これより、

$$\begin{aligned} (V_{2q})^{\frac{1}{2}} &= \exp [K_2 \{ (\sigma_q^z + 1) \cos q + \sigma_q^x \sin q \}] \\ &= \exp(K_2 \cos q) \exp(K_2 \sigma_q^{z'}) \\ &= \exp(K_2 \cos q) (\cosh K_2 + \sigma_q^{z'} \sinh K_2) \\ &= \exp(K_2 \cos q) \{ \cosh K_2 + (\cos q \sigma_q^z + \sin q \sigma_q^x) \sinh K_2 \} \\ &= \exp(K_2 \cos q) \begin{pmatrix} \cosh K_2 + \sinh K_2 \cos q & \sinh K_2 \sin q \\ \sinh K_2 \sin q & \cosh K_2 - \sinh K_2 \cos q \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.2.65)$$

となる。ただし、

$$\sigma_q^{z'} \equiv \cos q \sigma_q^z + \sin q \sigma_q^x \quad (3.2.66)$$

とおき、式変形の途中で付録 A の結果を用いた。

よって、 V_q は $|\Phi_{-qq}\rangle$ 、 $|\Phi_0\rangle$ によって張られる空間では、

$$\begin{aligned} V_q &= (V_{2q})^{\frac{1}{2}} V_{1q} (V_{2q})^{\frac{1}{2}} \\ &= \exp(2K_2 \cos q) \begin{pmatrix} \cosh K_2 + \sinh K_2 \cos q & \sinh K_2 \sin q \\ \sinh K_2 \sin q & \cosh K_2 - \sinh K_2 \cos q \end{pmatrix} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} \exp(-2K_1^*) & 0 \\ 0 & \exp(2K_1^*) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cosh K_2 + \sinh K_2 \cos q & \sinh K_2 \sin q \\ \sinh K_2 \sin q & \cosh K_2 - \sinh K_2 \cos q \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.2.67)$$

$$= \exp(2K_2 \cos q) \begin{pmatrix} A_q & C_q \\ C_q & B_q \end{pmatrix} \quad (3.2.68)$$

となる。ただし、

$$A_q = \exp(-2K_1^*)(\cosh K_2 + \sinh K_2 \cos q)^2 + \exp(2K_1^*)(\sinh K_2 \sin q)^2 \quad (3.2.69)$$

$$B_q = \exp(-2K_1^*)(\sinh K_2 \sin q)^2 + \exp(2K_1^*)(\cosh K_2 - \sinh K_2 \cos q)^2 \quad (3.2.70)$$

$$\begin{aligned} C_q &= \exp(-2K_1^*)(\cosh K_2 + \sinh K_2 \cos q) \sinh K_2 \sin q + \exp(2K_1^*) \sinh K_2 \sin q (\cosh K_2 - \sinh K_2 \cos q) \\ &= \sinh K_2 \sin q \left\{ \left(e^{2K_1^*} + e^{-2K_1^*} \right) \cosh K_2 - \left(e^{2K_1^*} - e^{-2K_1^*} \right) \sinh K_2 \cos q \right\} \\ &= (2 \sinh K_2 \sin q) (\cosh 2K_1^* \cosh K_2 - \sinh 2K_1^* \sinh K_2 \cos q) \end{aligned} \quad (3.2.71)$$

である。このように $|\Phi_{-qq}\rangle$ 、 $|\Phi_0\rangle$ で張られる空間では V_q は対角行列ではないので V_q の固有値を求めるにはこれを対角化する必要がある。そこで、

$$|\Psi_0\rangle = \sin \phi_q |\Phi_{-qq}\rangle + \cos \phi_q |\Phi_0\rangle \quad (3.2.72)$$

$$|\Psi_{-qq}\rangle = \cos \phi_q |\Phi_{-qq}\rangle - \sin \phi_q |\Phi_0\rangle \quad (3.2.73)$$

という状態を導入する。 V_q の $|\Psi_0\rangle$ 、 $|\Psi_{-qq}\rangle$ で張られる空間での行列要素は、

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | V_q | \Psi_0 \rangle &= \exp(2K_2 \cos q) \begin{pmatrix} \sin \phi_q & \cos \phi_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_q & C_q \\ C_q & B_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin \phi_q \\ \cos \phi_q \end{pmatrix} \\ &= \exp(2K_2 \cos q) (\sin^2 \phi_q A_q + \sin \phi_q \cos \phi_q C_q + \sin \phi_q \cos \phi_q C_q + \cos^2 \phi_q B_q) \\ &= \exp(2K_2 \cos q) \left\{ \frac{1}{2} (A_q + B_q) - \frac{1}{2} \cos 2\phi_q (A_q - B_q) + \sin 2\phi_q C_q \right\} \end{aligned} \quad (3.2.74)$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{-qq} | V_q | \Psi_{-qq} \rangle &= \exp(2K_2 \cos q) \begin{pmatrix} \cos \phi_q & -\sin \phi_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_q & C_q \\ C_q & B_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \phi_q \\ -\sin \phi_q \end{pmatrix} \\ &= \exp(2K_2 \cos q) (\cos^2 \phi_q A_q - \cos \phi_q \sin \phi_q C_q - \cos \phi_q \sin \phi_q C_q + \sin^2 \phi_q B_q) \\ &= \exp(2K_2 \cos q) \left\{ \frac{1}{2} (A_q + B_q) + \frac{1}{2} \cos 2\phi_q (A_q - B_q) - \sin 2\phi_q C_q \right\} \end{aligned} \quad (3.2.75)$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{-qq} | V_q | \Psi_0 \rangle &= \langle \Psi_0 | V_q | \Psi_{-qq} \rangle \\ &= \exp(2K_2 \cos q) \begin{pmatrix} \sin \phi_q & \cos \phi_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_q & C_q \\ C_q & B_q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \phi_q \\ -\sin \phi_q \end{pmatrix} \\ &= \exp(2K_2 \cos q) (\sin \phi_q \cos \phi_q A_q - \sin^2 \phi_q C_q + \cos^2 \phi_q C_q - \cos \phi_q \sin \phi_q B_q) \\ &= \exp(2K_2 \cos q) \left\{ \frac{1}{2} \sin 2\phi_q (A_q - B_q) + \cos 2\phi_q C_q \right\} \end{aligned} \quad (3.2.76)$$

となるので、まとめると、

$$V_q = \exp(2K_2 \cos q) \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(A_q + B_q) - \frac{1}{2} \cos 2\phi_q (A_q - B_q) + \sin 2\phi_q C_q & \frac{1}{2} \sin 2\phi_q (A_q - B_q) + \cos 2\phi_q C_q \\ \frac{1}{2} \sin 2\phi_q (A_q - B_q) + \cos 2\phi_q C_q & \frac{1}{2}(A_q + B_q) + \frac{1}{2} \cos 2\phi_q (A_q - B_q) - \sin 2\phi_q C_q \end{pmatrix} \quad (3.2.77)$$

となる。 V_q を対角化するには、この非対角要素が0となればよいので、 ϕ_q は、

$$\tan 2\phi_q = \frac{2C_q}{B_q - A_q} \quad (3.2.78)$$

を満たさなければならない。これより、

$$\begin{aligned} \sin 2\phi_q &= \sqrt{\frac{\tan^2 2\phi_q}{\tan^2 2\phi_q + 1}} \\ &= \frac{C_q}{\sqrt{C_q^2 + \frac{1}{4}(B_q - A_q)^2}} \end{aligned} \quad (3.2.79)$$

となるので、対角項は、

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(A_q + B_q) - \frac{1}{2} \cos 2\phi_q (A_q - B_q) + \sin 2\phi_q C_q &= \frac{1}{2}(A_q + B_q) + \sin 2\phi_q \left\{ C_q + \frac{1}{4C_q} (B_q - A_q)^2 \right\} \\ &= \frac{1}{2}(A_q + B_q) + \sqrt{C_q^2 + \frac{1}{4}(B_q - A_q)^2} \end{aligned} \quad (3.2.80)$$

$$\frac{1}{2}(A_q + B_q) + \frac{1}{2} \cos 2\phi_q (A_q - B_q) - \sin 2\phi_q C_q = \frac{1}{2}(A_q + B_q) - \sqrt{C_q^2 + \frac{1}{4}(B_q - A_q)^2} \quad (3.2.81)$$

となる。これを、

$$e^{\pm \varepsilon_q} \equiv \frac{1}{2} \left[A_q + B_q \pm \sqrt{(B_q - A_q)^2 + 4C_q^2} \right] \quad (3.2.82)$$

とおくと、 V_q は、

$$V_q = \exp(2K_2 \cos q) \begin{pmatrix} e^{\varepsilon_q} & 0 \\ 0 & e^{-\varepsilon_q} \end{pmatrix} \quad (3.2.83)$$

となり対角化される。ここで、

$$\begin{aligned} e^{\varepsilon_q} + e^{-\varepsilon_q} &= A_q + B_q \\ &= e^{-2K_1^*} (\cosh K_2 + \sinh K_2 \cos q)^2 + (e^{2K_1^*} + e^{-2K_1^*}) (\sinh K_2 \sin q)^2 + e^{2K_1^*} (\cosh K_2 - \sinh K_2 \cos q)^2 \\ &= (e^{2K_1^*} + e^{-2K_1^*}) (\cosh^2 K_2 + \sinh^2 K_2) - (e^{2K_1^*} - e^{-2K_1^*}) \sinh 2K_2 \cos q \end{aligned} \quad (3.2.84)$$

となり、

$$\cosh^2 K_2 + \sinh^2 K_2 = \cosh 2K_2 \quad (3.2.85)$$

であるから、 ε_q は、

$$\cosh \varepsilon_q = \cosh 2K_2 \cosh 2K_1^* - \sinh 2K_2 \sinh 2K_1^* \cos q \quad (3.2.86)$$

の正の解である。

3.3 分配関数と Helmholtz の自由エネルギー

分配関数を求めるためには、 V_q の最大固有値を求める必要がある。これを求めるために、

$$\xi_q \equiv \cos \phi_q \eta_q + \sin \phi_q \eta_{-q}^\dagger \quad (3.3.1)$$

$$\xi_{-q} \equiv \cos \phi_q \eta_{-q} - \sin \phi_q \eta_q^\dagger \quad (3.3.2)$$

というフェルミ演算子を導入する。この演算子を $|\Psi_0\rangle$ に演算すると、

$$\begin{aligned} \xi_{-q} |\Psi_0\rangle &= (\cos \phi_q \eta_{-q} - \sin \phi_q \eta_q^\dagger) (\sin \phi_q |\Phi_{-qq}\rangle + \cos \phi_q |\Phi_0\rangle) \\ &= \cos \phi_q \sin \phi_q \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle + \cos^2 \phi_q \eta_{-q} |0\rangle - \sin^2 \phi_q \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle - \sin \phi_q \cos \phi_q \eta_q^\dagger |0\rangle \\ &= \cos \phi_q \sin \phi_q (1 - \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q}) \eta_q^\dagger |0\rangle - \sin \phi_q \cos \phi_q \eta_q^\dagger |0\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

$$\begin{aligned} \xi_q |\Psi_0\rangle &= (\cos \phi_q \eta_q + \sin \phi_q \eta_{-q}^\dagger) (\sin \phi_q |\Phi_{-qq}\rangle + \cos \phi_q |\Phi_0\rangle) \\ &= \cos \phi_q \sin \phi_q \eta_q \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle + \cos^2 \phi_q \eta_q |0\rangle + \sin^2 \phi_q \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle + \sin \phi_q \cos \phi_q \eta_{-q}^\dagger |0\rangle \\ &= -\cos \phi_q \sin \phi_q \eta_{-q}^\dagger (1 - \eta_q^\dagger \eta_q) |0\rangle + \sin \phi_q \cos \phi_q \eta_{-q}^\dagger |0\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

となるので、 $|\Psi_0\rangle$ という状態は η 粒子は存在するが ξ 粒子に対しては粒子が存在しない真空状態となること
 がわかる。また、 $\xi_{-q}^\dagger \xi_q^\dagger |\Psi_0\rangle$ を計算すると、

$$\begin{aligned}
 \xi_{-q}^\dagger \xi_q^\dagger |\Psi_0\rangle &= \left(\cos \phi_q \eta_{-q}^\dagger - \sin \phi_q \eta_q \right) \left(\cos \phi_q \eta_q^\dagger + \sin \phi_q \eta_{-q} \right) \left(\sin \phi_q |\Phi_{-qq}\rangle + \cos \phi_q |\Phi_0\rangle \right) \\
 &= \cos^2 \phi_q \sin \phi_q \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle + \cos \phi_q \sin^2 \phi_q \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle \\
 &\quad - \sin^2 \phi_q \cos \phi_q \eta_q \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle - \sin^3 \phi_q \eta_q \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle \\
 &\quad + \cos^3 \phi_q \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle + \cos^2 \phi_q \sin \phi_q \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} |0\rangle \\
 &\quad - \sin \phi_q \cos^2 \phi_q \eta_q \eta_q^\dagger |0\rangle - \sin^2 \phi_q \cos \phi_q \eta_q \eta_{-q} |0\rangle \\
 &= \cos \phi_q \sin^2 \phi_q \eta_{-q}^\dagger \left(1 - \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) \eta_q^\dagger |0\rangle - \sin^3 \phi_q \eta_q \left(1 - \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) \eta_q^\dagger |0\rangle \\
 &\quad + \cos^3 \phi_q \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle - \sin \phi_q \cos^2 \phi_q \left(1 - \eta_q^\dagger \eta_q \right) |0\rangle \\
 &= \cos \phi_q \sin^2 \phi_q \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle - \sin^3 \phi_q \left(1 - \eta_q^\dagger \eta_q \right) |0\rangle + \cos^3 \phi_q \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle - \sin \phi_q \cos^2 \phi_q |0\rangle \\
 &= \cos \phi_q |\Phi_{-qq}\rangle - \sin \phi_q |\Phi_0\rangle = |\Psi_{-qq}\rangle
 \end{aligned} \tag{3.3.5}$$

となり、 $|\Psi_{-qq}\rangle$ 状態は ξ_q 、 ξ_{-q} 粒子が存在する状態となる。次に、

$$\xi_q^\dagger |\Psi_0\rangle \equiv |\Psi_q\rangle \tag{3.3.6}$$

$$\xi_{-q}^\dagger |\Psi_0\rangle \equiv |\Psi_{-q}\rangle \tag{3.3.7}$$

とおくと $|\Psi_q\rangle$ は ξ_q 粒子が、 $|\Psi_{-q}\rangle$ は ξ_{-q} 粒子がそれぞれ 1 つ存在する状態となる。このとき、

$$\begin{aligned}
 |\Psi_q\rangle = \xi_q^\dagger |\Psi_0\rangle &= \left(\cos \phi_q \eta_q^\dagger + \sin \phi_q \eta_{-q} \right) \left(\sin \phi_q |\Phi_{-qq}\rangle + \cos \phi_q |\Phi_0\rangle \right) \\
 &= \cos \phi_q \sin \phi_q \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle + \cos^2 \phi_q \eta_q^\dagger |0\rangle \\
 &\quad + \sin^2 \phi_q \eta_{-q} \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle + \sin \phi_q \cos \phi_q \eta_{-q} |0\rangle \\
 &= \cos^2 \phi_q \eta_q^\dagger |0\rangle + \sin^2 \phi_q \left(1 - \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) \eta_q^\dagger |0\rangle \\
 &= \eta_q^\dagger |0\rangle = \eta_q^\dagger |\Phi_0\rangle = |\Phi_q\rangle
 \end{aligned} \tag{3.3.8}$$

$$\begin{aligned}
 |\Psi_{-q}\rangle = \xi_{-q}^\dagger |\Psi_0\rangle &= \left(\cos \phi_q \eta_{-q}^\dagger - \sin \phi_q \eta_q \right) \left(\sin \phi_q |\Phi_{-qq}\rangle + \cos \phi_q |\Phi_0\rangle \right) \\
 &= \cos \phi_q \sin \phi_q \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle + \cos^2 \phi_q \eta_{-q}^\dagger |0\rangle \\
 &\quad - \sin^2 \phi_q \eta_q \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger |0\rangle - \sin \phi_q \cos \phi_q \eta_q |0\rangle \\
 &= \cos^2 \phi_q \eta_{-q}^\dagger |0\rangle - \sin^2 \phi_q \left(1 - \eta_q^\dagger \eta_q \right) \eta_{-q}^\dagger |0\rangle \\
 &= \eta_{-q}^\dagger |0\rangle = \eta_{-q}^\dagger |\Phi_0\rangle = |\Phi_{-q}\rangle
 \end{aligned} \tag{3.3.9}$$

となり、 $|\Psi_q\rangle$ という ξ_q 粒子が 1 つ存在する状態は、 $|\Phi_q\rangle$ という η_q 粒子が 1 つ存在する状態と同じであること
 がわかる。また、 ξ_{-q} 粒子についても同様のことがいえる。ここで、 ξ 粒子の存在しない状態である $|\Psi_0\rangle$ お
 よび ξ_q 粒子、 ξ_{-q} 粒子が 1 つずつ存在する状態である $|\Psi_{-qq}\rangle$ は、 η 粒子が存在しない状態 $|\Phi_0\rangle$ と η_q 粒子、
 η_{-q} 粒子が 1 つずつ存在する状態 $|\Phi_{-qq}\rangle$ の重ね合わせである。したがって、 η 粒子が偶 (奇) 数個存在する状態
 は ξ 粒子が偶 (奇) 数個存在する状態に相当することがわかる。

これより、 V_q の $|\Psi_0\rangle$ 、 $|\Psi_{-qq}\rangle$ で張られる空間では、

$$V_q = \exp(2K_2 \cos q) \exp \left[-\varepsilon_q \left(\xi_q^\dagger \xi_q + \xi_{-q}^\dagger \xi_{-q} - 1 \right) \right] \tag{3.3.10}$$

となる。この各成分は、

$$\begin{aligned}\langle \Psi_0 | V_q | \Psi_0 \rangle &= \exp(2K_2 \cos q) \langle \Psi_0 | \exp[-\varepsilon_q (\xi_q^\dagger \xi_q + \xi_{-q}^\dagger \xi_{-q} - 1)] | \Psi_0 \rangle \\ &= \exp(2K_2 \cos q) e^{\varepsilon_q} \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle \\ &= \exp(2K_2 \cos q) e^{\varepsilon_q}\end{aligned}\quad (3.3.11)$$

$$\begin{aligned}\langle \Psi_{-qq} | V_q | \Psi_0 \rangle &= \exp(2K_2 \cos q) e^{\varepsilon_q} \langle \Psi_{-qq} | \Psi_0 \rangle \\ &= 0\end{aligned}\quad (3.3.12)$$

$$\begin{aligned}\langle \Psi_{-qq} | V_q | \Psi_{-qq} \rangle &= \exp(2K_2 \cos q) \langle \Psi_{-qq} | \exp[-\varepsilon_q (\xi_q^\dagger \xi_q + \xi_{-q}^\dagger \xi_{-q} - 1)] | \Psi_{-qq} \rangle \\ &= \exp(2K_2 \cos q) e^{-\varepsilon_q} \langle \Psi_{-qq} | \Psi_{-qq} \rangle \\ &= \exp(2K_2 \cos q) e^{-\varepsilon_q}\end{aligned}\quad (3.3.13)$$

$$\begin{aligned}\langle \Psi_0 | V_q | \Psi_{-qq} \rangle &= \exp(2K_2 \cos q) e^{-\varepsilon_q} \langle \Psi_0 | \Psi_{-qq} \rangle \\ &= 0\end{aligned}\quad (3.3.14)$$

となり (3.2.83) の成分と一致している。ただし、

$$\xi_q^\dagger \xi_q \xi_{-q}^\dagger \xi_{-q}^\dagger = (1 - \xi_q \xi_q^\dagger) \xi_{-q}^\dagger \xi_{-q}^\dagger = \xi_{-q}^\dagger \xi_{-q}^\dagger \quad (3.3.15)$$

$$\xi_{-q}^\dagger \xi_{-q} \xi_{-q}^\dagger \xi_{-q}^\dagger = (1 - \xi_{-q} \xi_{-q}^\dagger) \xi_{-q}^\dagger \xi_{-q}^\dagger = \xi_{-q}^\dagger \xi_{-q}^\dagger \quad (3.3.16)$$

となることを用いた。

ここで、 $q = 0, \pi$ の場合の V_q は η 粒子で既に対角化されているために、

$$\begin{aligned}\eta_0 &\rightarrow \xi_0 & \eta_0^\dagger &\rightarrow \xi_0^\dagger \\ \eta_\pi &\rightarrow \xi_\pi & \eta_\pi^\dagger &\rightarrow \xi_\pi^\dagger\end{aligned}$$

と変換される必要がある。そのためには $\phi_0 = \phi_\pi = 0$ となる必要があり、 V_0, V_π は、(3.2.21)、(3.2.22) より、

$$V_0 = \exp \left[-2(K_1^* - K_2) \left(\xi_0^\dagger \xi_0 - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (3.3.17)$$

$$V_\pi = \exp \left[-2(K_1^* + K_2) \left(\xi_\pi^\dagger \xi_\pi - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (3.3.18)$$

となる。したがって、

$$\varepsilon_0 = 2(K_1^* - K_2) \quad (3.3.19)$$

$$\varepsilon_\pi = 2(K_1^* + K_2) \quad (3.3.20)$$

とおけば、 V_0, V_π の積は、

$$V_0 V_\pi = \exp \left[-\varepsilon_0 \left(\xi_0^\dagger \xi_0 - \frac{1}{2} \right) - \varepsilon_\pi \left(\xi_\pi^\dagger \xi_\pi - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (3.3.21)$$

となる。これより V^\pm は、

$$\begin{aligned}
V^\pm &= (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \prod_{0 \leq q \leq \pi} V_q \\
&= (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} V_0 V_\pi \prod_{0 < q < \pi} \exp(2K_2 \cos q) \exp \left[-\varepsilon_q \left(\xi_q^\dagger \xi_q + \xi_{-q}^\dagger \xi_{-q} - 1 \right) \right] \\
&= (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \exp \left(2K_2 \sum_{0 < q < \pi} \cos q \right) V_0 V_\pi \exp \left[-\sum_{0 < q < \pi} \varepsilon_q \left(\xi_q^\dagger \xi_q + \xi_{-q}^\dagger \xi_{-q} - 1 \right) \right] \\
&= (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \exp \left[-\varepsilon_0 \left(\xi_0^\dagger \xi_0 - \frac{1}{2} \right) - \varepsilon_\pi \left(\xi_\pi^\dagger \xi_\pi - \frac{1}{2} \right) \right] \exp \left[-\sum_{q \neq 0, \pi} \varepsilon_q \left(\xi_q^\dagger \xi_q - \frac{1}{2} \right) \right] \\
&= (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \exp \left[-\sum_q \varepsilon_q \left(\xi_q^\dagger \xi_q - \frac{1}{2} \right) \right] \tag{3.3.22}
\end{aligned}$$

となる。ただし、 $\sum_{0 < q < \pi} \cos q = 0$ となることを用いた。

ここで、 T_c を ε_0 が、

$$\varepsilon_0 > 0 \quad T > T_c \text{ のとき} \tag{3.3.23}$$

$$\varepsilon_0 < 0 \quad T < T_c \text{ のとき} \tag{3.3.24}$$

となる温度と定義する。すなわち、

$$K_1^* = K_2 \tag{3.3.25}$$

となる場合および、

$$\sinh \frac{J_1}{k_B T_c} \sinh \frac{J_2}{k_B T_c} = 1 \tag{3.3.26}$$

となる温度である。この T_c は第 5 章で臨界温度であることが分かる。したがって、 $\varepsilon_\pi > 0$ 、 $\varepsilon_q > 0 (q \neq 0, \pi)$ であるから、 $\varepsilon_q > 0 (q \neq 0)$ である。

ここで、分配関数は V^\pm の最大固有値の N 乗であるため、 V^+ 、 V^- の最大固有値を求める必要がある。

1) V^+ の最大固有値

V^+ は \mathcal{N} が偶数であるから η 粒子が偶数個存在する場合であるので、 ξ 粒子も偶数個存在する。この場合 q は (3.2.15) の組をとり、0 を含まないのですべての q に対して $\varepsilon_q > 0$ が成立する。したがって、 V^+ の固有値が最大となるのは $\xi_q^\dagger \xi_q$ が最小のときである。つまり、すべての q において、

$$\xi_q^\dagger \xi_q = 0 \quad \xi \text{ 粒子数が } 0 \text{ 個 (真空状態)} \tag{3.3.27}$$

となる場合であり、この最大固有値を Λ_{\max}^+ と書くこととすると、

$$\Lambda_{\max}^+ = (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_q \varepsilon_q \right] \tag{3.3.28}$$

となる。

2) V^- の最大固有値

V^- は \mathcal{N} が奇数であるから η 粒子が奇数個存在する場合であるので、 ξ 粒子も奇数個存在する。この場合 q は (3.2.17) の組をとり、0 を含み $\varepsilon_{q=0}$ は温度によって正負が変化する。ただし、 $\varepsilon_{q \neq 0} > 0$ が成

立している。したがって、 V^- の固有値が最大となるのは $\xi_{q \neq 0}^\dagger \xi_{q \neq 0}$ が最小となり ($q \neq 0$ では真空状態) で、 ξ_0 粒子が一つ存在するときである。つまり、

$$\xi_{q=0}^\dagger \xi_{q=0} = 1 \quad \xi_0 \text{ 粒子が 1 個} \quad (3.3.29)$$

$$\xi_{q \neq 0}^\dagger \xi_{q \neq 0} = 0 \quad \xi_{q \neq 0} \text{ 粒子が 0 個 (真空状態)} \quad (3.3.30)$$

となる場合であり、この最大固有値を Λ_{\max}^- と書くこととすると、

$$\Lambda_{\max}^- = (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{q \neq 0} \varepsilon_q \right] \exp \left[-\frac{1}{2} \varepsilon_0 \right] \quad (3.3.31)$$

となる。

このとき、 $T < T_c$ で $\varepsilon_0 < 0$ となるため、

$$\Lambda_{\max}^- = (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_q |\varepsilon_q| \right] \quad (3.3.32)$$

となる。これは $M \rightarrow \infty$ の極限において完全に Λ_{\max}^+ と縮退している。ただし、 $T > T_c$ で $\varepsilon_0 > 0$ となるため、 $\Lambda_{\max}^+ > \Lambda_{\max}^-$ となる。このため、任意の温度での V^\pm の最大固有値は Λ_{\max} は、

$$\Lambda_{\max} = \Lambda_{\max}^+ = (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_q \varepsilon_q \right] \quad (3.3.33)$$

となるのがわかる。したがって、分配関数 \mathcal{Z} は、

$$\mathcal{Z} = (2 \sinh 2K_1)^{\frac{NM}{2}} \exp \left[\frac{1}{2} N \sum_q \varepsilon_q \right] \quad (3.3.34)$$

となる。ここで、 $\sum_q \varepsilon_q$ を $M \rightarrow \infty$ の極限をとり、和を積分に置き換えると、

$$\sum_q \varepsilon_q \rightarrow \frac{M}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \varepsilon_q dq \quad (3.3.35)$$

となり、

$$\mathcal{Z} = (2 \sinh 2K_1)^{\frac{NM}{2}} \exp \left[\frac{NM}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \varepsilon_q dq \right] \quad (3.3.36)$$

となる。これより、1 スピンあたりの Helmholtz の自由エネルギー F は、

$$\begin{aligned} F &= -(k_B T \ln \mathcal{Z}) / NM \\ &= -k_B T \left[\frac{1}{2} \ln(2 \sinh 2K_1) + \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \varepsilon_q dq \right] \end{aligned} \quad (3.3.37)$$

となる。ただし、 ε_q は、

$$\cosh \varepsilon_q = \cosh 2K_2 \cosh 2K_1^* - \sinh 2K_2 \sinh 2K_1^* \cos q \quad (3.3.38)$$

で与えられる。

第5章において内部エネルギー、比熱を求めるが、そのとき扱いやすいように Helmholtz の自由エネルギーの表記を変更する。まず、付録 E により恒等式、

$$\int_0^\pi \ln(2 \cosh \varepsilon_q - 2 \cos x) dx = \pi \varepsilon_q \quad (3.3.39)$$

が成立している。これより、

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^\pi \varepsilon_q dq &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^\pi dq \int_0^\pi dx \ln(2 \cosh \varepsilon_q - 2 \cos x) \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^\pi dq \int_0^\pi dx \ln(2 \cosh 2K_2 \cosh 2K_1^* - 2 \sinh 2K_2 \sinh 2K_1^* \cos q - 2 \cos x) \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^\pi dx \int_{-\pi}^\pi dq \ln(2 \cosh 2K_2 \cosh 2K_1^* - 2 \sinh 2K_2 \sinh 2K_1^* \cos q - 2 \cos x) \end{aligned} \quad (3.3.40)$$

と変形できる。ここで、

$$\begin{aligned} \cosh 2K_1^* &= \frac{1}{2} (e^{2K_1^*} + e^{-2K_1^*}) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\tanh K_1} + \tanh K_1 \right) \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\tanh K_1} (1 + \tanh^2 K_1) \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\tanh K_1} (1 + z_1^2) \end{aligned} \quad (3.3.41)$$

$$\begin{aligned} \sinh 2K_1^* &= \frac{1}{2} (e^{2K_1^*} - e^{-2K_1^*}) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\tanh K_1} - \tanh K_1 \right) \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\tanh K_1} (1 - \tanh^2 K_1) \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{\tanh K_1} (1 - z_1^2) \end{aligned} \quad (3.3.42)$$

であり、

$$1 + z_2^2 = 1 + \tanh^2 K_2 = \frac{\cosh 2K_2}{\cosh^2 K_2} \quad (3.3.43)$$

$$1 - z_2^2 = 1 - \tanh^2 K_2 = \frac{1}{\cosh^2 K_2} \quad (3.3.44)$$

であるから、

$$\begin{aligned} &\ln(2 \cosh 2K_2 \cosh 2K_1^* - 2 \sinh 2K_2 \sinh 2K_1^* \cos q - 2 \cos x) \\ &= \ln \left[\frac{\cosh^2 K_2}{\tanh K_1} (1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2 \sinh K_2 \cosh K_2 \frac{1}{\tanh K_1} (1 - z_1^2) \cos q - 2 \cos x \right] \\ &= \ln \left[\frac{\cosh^2 K_2}{\tanh K_1} \left\{ (1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2 \tanh K_2 (1 - z_1^2) \cos q - 2 \frac{\tanh K_1}{\cosh^2 K_2} \cos x \right\} \right] \\ &= \ln \left[\frac{\cosh^2 K_2}{\tanh K_1} \left\{ (1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_2(1 - z_1^2) \cos q - 2z_1(1 - z_2^2) \cos x \right\} \right] \end{aligned} \quad (3.3.45)$$

となる。したがって、

$$\begin{aligned}
F &= -k_B T \left\{ \frac{1}{2} \ln(2 \sinh 2K_1) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \ln \left[\frac{\cosh^2 K_2}{\tanh K_1} \{ (1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2 \} \right] \right\} \\
&= -k_B T \left\{ \frac{1}{2} \ln(2 \sinh 2K_1) + \frac{1}{2} \ln \left[\frac{\cosh^2 K_2}{\tanh K_1} \right] \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \ln \left[(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2 \right] \right\} \\
&= -k_B T \left\{ \ln(2 \cosh K_1 \cosh K_2) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \ln \left[(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2 \right] \right\} \\
&\hspace{20em} (3.3.46)
\end{aligned}$$

となる。ただし、 $x \rightarrow \theta_1$ 、 $q \rightarrow \theta_2$ とした。

4 dimer 統計を用いる方法

第2量子化の方法よりも以前に行われた、dimer 統計を用いる方法により Helmholtz の自由エネルギーを求める。この方法は、M.Kac and J.C.Ward [6] および、R.B.Potts and J.C.Ward [7] により始められた。まず、4.1 節では Ising モデルのハミルトニアンを高温展開し、各項に対応する図形を導入する。次に、4.2 節では dimer 統計を議論する際に使う Pfaffian の性質 [8, pp.46–51] [9, pp.59–105] についてまとめる。4.3 節では、Pfaffian を用いて正方格子の dimer 統計の分配関数 [8, pp.51–67] の表式を求める。議論する境界条件は、自由端、環状、トラス状である。4.4 節では、4.1 節で導入されたハミルトニアンを高温展開の各項に対応する図形を M.E.Fisher によって導入される dimer 統計に使える格子 [10] に拡張し、2次元 Ising モデルの分配関数を求める。4.5 節では、4.4 節で求められた分配関数を用いて Helmholtz の自由エネルギーを求める。ここで求められる Helmholtz の自由エネルギーは 3.3 節での結果と完全に一致する。最後に、4.6 節では相関関数を求める際に使いやすい 4.4 節とは異なる P.W.Kasteleyn によって導入される dimer 統計に使える格子 [11] に拡張する。

4.1 Ising モデルの高温展開

2次元 Ising モデルの分配関数は (1.2) で与えられるが、この章では初めから磁場のない場合を考え、分配関数 \mathcal{Z} は、

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} &= \sum_{\sigma=\pm 1} \exp\left(K_1 \sum \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m} + K_2 \sum \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1}\right) \\ &= \sum_{\sigma=\pm 1} \prod_{\text{n.n.}} \exp(K_1 \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m} + K_2 \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1})\end{aligned}\quad (4.1.1)$$

となる。ただし、n.n. は最近接格子点を表す。また、各スピン対についてのボルツマン因子を、付録 A の結果を用いて、

$$\begin{aligned}\exp(K_1 \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m}) &= \cosh K_1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m} \sinh K_1 \\ &= \cosh K_1 (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m} \tanh K_1) \\ &= \cosh K_1 (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m} z_1)\end{aligned}\quad (4.1.2)$$

$$\begin{aligned}\exp(K_2 \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1}) &= \cosh K_2 + \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1} \sinh K_2 \\ &= \cosh K_2 (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1} \tanh K_2) \\ &= \cosh K_2 (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1} z_2)\end{aligned}\quad (4.1.3)$$

と書き表すと、全体の分配関数は、

$$\mathcal{Z} = (\cosh K_1 \cosh K_2)^{NM} \sum_{\sigma=\pm 1} \prod_{\text{n.n.}} (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m} z_1) (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1} z_2)\quad (4.1.4)$$

となる。ここで、(4.1.4) の右辺の各項に対応する図形を考える。Ising モデルでは最近接格子点間でのみ相互作用が生じるため、相互作用が生じているスピン間をボンドでつなぐ図形を考える。この図形の例は図 7、図 8 である。すると、(4.1.4) の右辺はボンドが全くない (すべての格子点間で相互作用がない) 図形から、すべてボンドが形成されている (すべての格子点間で相互作用している) 図形まで、とりうるすべての図形の和と

なっている。このとき、(4.1.4) では、すべての σ_i について $\sigma = \pm 1$ で和をとることになるので、

$$\sum_{\sigma_i = \pm 1} \sigma_i = 0 \quad (4.1.5)$$

$$\sum_{\sigma_i = \pm 1} \sigma_i^2 = 1 \quad (4.1.6)$$

$$\sum_{\sigma_i = \pm 1} \sigma_i^3 = 0 \quad (4.1.7)$$

$$\sum_{\sigma_i = \pm 1} \sigma_i^4 = 1 \quad (4.1.8)$$

となる。すなわち、(4.1.4) の右辺の項で同じスピン σ_i が奇数乗存在するものは0となる。したがって、各項に対応する図形ではスピン σ_i の乗数だけ格子点 i からボンドが出ているので、(4.1.4) の右辺で残る項は1つの格子点に対し結合するボンドが0本、2本、4本のどれかにより構成されるものとなる。つまり、図7のような図形は残らない。よって、

1. ボンドは最近接格子点間のみ結合できる。
2. それぞれの格子点には、偶数 (0、2、4) 本のボンドが結合している。 (4.1.9)
3. 垂直方向のボンドの数が v 、水平方向のボンドの数が h である。

という条件を満たすボンドの配置により構成される図形の数 N_{vh} とする。この条件を満たすボンドの配置の1例は図8のようになる。これを用いると、分配関数 Z は、

$$Z = (2 \cosh K_1 \cosh K_2)^{NM} \sum_{v,h} N_{vh} z_1^v z_2^h \quad (4.1.10)$$

と書ける。

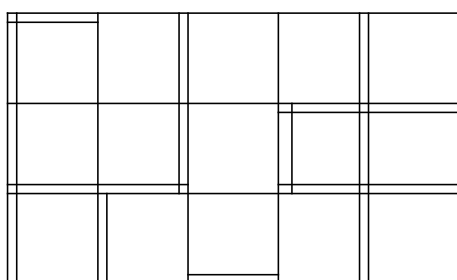


図7 高温展開した Ising モデルの1つの項に対応する図：2重線になっている格子間にボンドが形成されているとする。

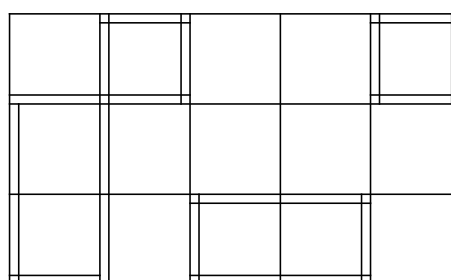


図8 高温展開した Ising モデルの1つの項に対応する図：2重線になっている格子間にボンドが形成されているとする。

4.2 Pfaffian の導入

4.1 節で求めた分配関数を表すには Pfaffian を用いると便利である。そこで本節では一般的な Pfaffian の性質をまとめる。 $2N \times 2N$ の反対称行列 A の Pfaffian とは、

$$\text{Pf}A \equiv \sum'_p \delta_p a_{p_1 p_2} a_{p_3 p_4} \cdots a_{p_{2N-1} p_{2N}} \quad (4.2.1)$$

で定義される。また、この行列 A の成分は、 $1 \leq j < k \leq 2N$ において、

$$a_{kj} = -a_{jk} \quad (4.2.2)$$

$$a_{kk} = 0 \quad (4.2.3)$$

となっている。 $(p_1, p_2, \dots, p_{2N})$ は $(1, 2, \dots, 2N)$ の順列であり、 \sum'_p は、

$$p_1 < p_2, p_3 < p_4, \dots, p_{2N-1} < p_{2N} \quad (4.2.4)$$

$$p_1 < p_3 < \cdots < p_{2N-1} \quad (4.2.5)$$

を満たす、すべての順列の和をとることを表す。 δ_p は順列 p の置換によるパリティを表す。すなわち、順列 p が偶の置換であれば $+1$ 、順列 p が奇の置換であれば -1 である。

また、(4.2.4)、(4.2.5) の制限をなくし、

$$\text{Pf}A = \frac{1}{N!2^N} \sum_p \delta_p a_{p_1 p_2} a_{p_3 p_4} \cdots a_{p_{2N-1} p_{2N}} \quad (4.2.6)$$

とすることもできる。ただし、 \sum_p はすべての順列の和をとる必要がある。

このように定義された PfA は、

$$\text{Pf}A = \pm(\det A)^{\frac{1}{2}} \quad (4.2.7)$$

という性質を持つ。

これを証明するために、まず任意の行列 A で成立する Jacobi の定理、

$$\Delta_{ii} \Delta_{jj} - \Delta_{ij} \Delta_{ji} = \Delta_{ij,ij} \det A \quad (4.2.8)$$

を導く。

証明) 任意の $n \times n$ の行列 A の成分を、

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad (4.2.9)$$

とおく。ここで、 Δ_{jk} を余因子とし、

$$\Delta_{jk} = (-1)^{j+k} \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k-1} & a_{1k+1} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{j-11} & \cdots & a_{j-1k-1} & a_{j-1k+1} & \cdots & a_{j-1n} \\ a_{j+11} & \cdots & a_{j+1k-1} & a_{j+1k+1} & \cdots & a_{j+1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nk-1} & a_{nk+1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} \quad (4.2.10)$$

とおく。ただし、これは j 行と k 列を A から除いた行列式に $(-1)^{j+k}$ をかけたものである。これを用いると、

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta_{11} & \Delta_{21} & \cdots & \Delta_{n1} \\ \Delta_{12} & \Delta_{22} & \cdots & \Delta_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta_{1n} & \Delta_{2n} & \cdots & \Delta_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \det A & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \det A & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \det A \end{pmatrix} \quad (4.2.11)$$

となる。この左辺の対角要素は、

$$\sum_{l=1}^n a_{il} \Delta_{il} = \det A \quad (4.2.12)$$

となり、非対角要素 ($k > i$) は2つの行が等しいため、

$$\sum_{l=1}^n a_{il} \Delta_{kl} = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{in} \leftarrow \text{第 } i \text{ 行} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{in} \leftarrow \text{第 } k \text{ 行} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} = 0 \quad (4.2.13)$$

となる。これより、(4.2.11) が成立する。 $k < i$ も同様にこの関係が成立する。

同様に、

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta_{11} & \Delta_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \Delta_{12} & \Delta_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ \Delta_{13} & \Delta_{23} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta_{1n} & \Delta_{2n} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \det A & 0 & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & \det A & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ 0 & 0 & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad (4.2.14)$$

となる。ここで、

$$\det AB = \det A \det B \quad (4.2.15)$$

という関係より、(4.2.14) の両辺の行列式をとると、

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Delta_{11} & \Delta_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \Delta_{12} & \Delta_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ \Delta_{13} & \Delta_{23} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta_{1n} & \Delta_{2n} & 0 & \cdots & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \det A & 0 & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & \det A & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ 0 & 0 & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} \quad (4.2.16)$$

となる。ここで、

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} = \det A \quad (4.2.17)$$

$$\begin{vmatrix} \Delta_{11} & \Delta_{21} & 0 & \cdots & 0 \\ \Delta_{12} & \Delta_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ \Delta_{13} & \Delta_{23} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta_{1n} & \Delta_{2n} & 0 & \cdots & 1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \Delta_{11} & \Delta_{21} \\ \Delta_{12} & \Delta_{22} \end{vmatrix} = \Delta_{11}\Delta_{22} - \Delta_{12}\Delta_{21} \quad (4.2.18)$$

$$\begin{vmatrix} \det A & 0 & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & \det A & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ 0 & 0 & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} = (\det A)^2 \begin{vmatrix} a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} \equiv (\det A)^2 \Delta_{12,12} \quad (4.2.19)$$

となる。ただし、 $\Delta_{ij,kl}$ は A から i, j 行、 k, l 列を除いた場合の行列式に $(-1)^{i+j+k+l}$ をかけたものと定義する。よって、(4.2.16) は、

$$(\det A)(\Delta_{11}\Delta_{22} - \Delta_{12}\Delta_{21}) = \Delta_{12,12}(\det A)^2 \quad (4.2.20)$$

となる。ここで、 $\det A \neq 0$ であるとすれば、

$$\Delta_{11}\Delta_{22} - \Delta_{12}\Delta_{21} = \Delta_{12,12}(\det A) \quad (4.2.21)$$

となる。この関係式は一般の (i, j) に対しても成立するので、

$$\Delta_{ii}\Delta_{jj} - \Delta_{ij}\Delta_{ji} = \Delta_{ij,ij}(\det A) \quad (4.2.22)$$

となり、jacobi の定理を示すことができた。(証明終)

次に、 $n \times n$ のある行列 A_n の行列式とその転置行列 ${}^t A_n$ の行列式の間を求めよう。 A_n の成分を $\{a_{ij}\}$ とし、 ${}^t A_n$ の成分を $\{b_{ij}\}$ とすると、

$$b_{ij} = a_{ji} \quad (4.2.23)$$

となる。このとき、 σ を $(1, 2, \dots, n)$ の順列とすると ${}^t A_n$ の行列式は、

$$\begin{aligned} \det {}^t A_n &= \sum_{\sigma} \delta_{\sigma} b_{1\sigma_1} b_{2\sigma_2} \cdots b_{n\sigma_n} \\ &= \sum_{\sigma} \delta_{\sigma} a_{\sigma_1 1} a_{\sigma_2 2} \cdots a_{\sigma_n n} \end{aligned} \quad (4.2.24)$$

と書ける。ここで、 $(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$ は全体として $(1, 2, \dots, n)$ であるから、 a の添字の順序を入れ替えることができ、

$$a_{\sigma_1 1} a_{\sigma_2 2} \cdots a_{\sigma_n n} = a_{1\sigma_1^{-1}} a_{2\sigma_2^{-1}} \cdots a_{n\sigma_n^{-1}} \quad (4.2.25)$$

となる。すなわち、

$$\begin{aligned} \det {}^t A_n &= \sum_{\sigma^{-1}} \delta_{\sigma^{-1}} a_{1\sigma_1^{-1}} a_{2\sigma_2^{-1}} \cdots a_{n\sigma_n^{-1}} \\ &= \sum_{\tau} \delta_{\tau} a_{1\tau_1} a_{2\tau_2} \cdots a_{n\tau_n} \end{aligned} \quad (4.2.26)$$

$$= \det A_n \quad (4.2.27)$$

となる。ただし、順列 σ^{-1} を順列 τ と置き換えた。これより、一般の行列に対して転置しても行列式は変わらないことが分かる。次に、行列 A_n が反対称行列であれば、

$$b_{ij} = -a_{ij} \quad (4.2.28)$$

となるから、 ${}^t A_n$ の行列式は、

$$\begin{aligned} \det {}^t A_n &= \sum_{\sigma} \delta_{\sigma} b_{1\sigma_1} b_{2\sigma_2} \cdots b_{n\sigma_n} \\ &= (-1)^n \sum_{\sigma} \delta_{\sigma} a_{1\sigma_1} a_{2\sigma_2} \cdots a_{n\sigma_n} \\ &= (-1)^n \det A_n \end{aligned} \quad (4.2.29)$$

となる。ただし、 δ_{σ} は順列 σ の置換のパリティである。この式に (4.2.27) を用いると、 n が奇数の場合 $\det A_n = -\det A_n$ となり、奇数次元の反対称行列の行列式は 0 となることが分かる。つまり、jacobi の定理における Δ_{ii} 、 Δ_{jj} は奇数次元の反対称行列であるから 0 となる。

次に、反対称行列における Δ_{ij} 、 Δ_{ji} の関係を求める。まず、

$$\Delta_{ij} \equiv (-1)^{i+j} \det A_{ij} \quad (4.2.30)$$

$$\Delta_{ji} \equiv (-1)^{i+j} \det A_{ji} \quad (4.2.31)$$

とおく。ただし、 A_{ij} は行列 A から i 行 j 列を取り除いた行列とする。ここで、 A は偶数次元 (n 次元) の反対称行列であるから、 A_{ij} は奇数次元の行列となる。これより、

$$\begin{aligned} \det A_{ji} &= (-1)^{n-1} \det {}^t A_{ij} \\ &= -\det A_{ij} \end{aligned} \quad (4.2.32)$$

となる。ただし、(4.2.27) を用いた。したがって、

$$\begin{aligned} \Delta_{ji} &= (-1)^{i+j} \det A_{ji} \\ &= -(-1)^{i+j} \det A_{ij} \\ &= -\Delta_{ij} \end{aligned} \quad (4.2.33)$$

となる。したがって、これらの関係を用いると、反対称行列 A における jacobi の定理は、

$$(\Delta_{ij})^2 = \Delta_{ij,ij} \det A \quad (4.2.34)$$

となる。両辺のルートをとると、

$$\Delta_{ij} = \pm (\Delta_{ij,ij} \det A)^{\frac{1}{2}} \quad (4.2.35)$$

となる。

ここで、 $i = 1$ の場合、

$$\det A = \sum_{j=1}^n a_{1j} \Delta_{1j} \quad (4.2.36)$$

であるから、(4.2.35) を代入すると、

$$\pm \det A = \sum_{j=1}^n a_{1j} (\Delta_{1j,1j} \det A)^{\frac{1}{2}} \quad (4.2.37)$$

$$\begin{aligned} \pm (\det A)^{\frac{1}{2}} &= \sum_{j=1}^n a_{1j} (\Delta_{1j,1j})^{\frac{1}{2}} \\ &= \sum_{j=1}^n a_{1j} \{(-1)^{2+2j} \det \mathcal{A}_{1j,1j}\}^{\frac{1}{2}} \\ &= \sum_{j=1}^n (-1)^{1+j} a_{1j} (\det \mathcal{A}_{1j,1j})^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (4.2.38)$$

となる。 $\mathcal{A}_{1j,1j}$ は行列 A から 1 列、 j 列、1 行、 j 行を除いたものであり反対称行列である。これより、この式は $n \times n$ 反対称行列の行列式が $(n-2) \times (n-2)$ 反対称行列の行列式の結合で書けることを表している。また、

$$\begin{aligned} \pm (\det \mathcal{A}_{1j,1j})^{\frac{1}{2}} &= \begin{cases} \sum_{k=2, k \neq j}^n a_{2k} (\Delta_{1j2k,1j2k})^{\frac{1}{2}} & j \neq 2 \\ \sum_{k=3}^n a_{3k} (\Delta_{123k,123k})^{\frac{1}{2}} & j = 2 \end{cases} \\ &= \begin{cases} \sum_{k=2, k \neq j}^n (-1)^{1+j+2+k} a_{2k} (\det \mathcal{A}_{1j2k,1j2k})^{\frac{1}{2}} & j \neq 2 \\ \sum_{k=3}^n (-1)^{1+2+3+k} a_{3k} (\det \mathcal{A}_{123k,123k})^{\frac{1}{2}} & j = 2 \end{cases} \end{aligned} \quad (4.2.39)$$

となる。これを $\frac{n}{2}$ 回繰り返すと、

$$\pm (\det A)^{\frac{1}{2}} = \sum_p' (\pm)_p a_{p_1 p_2} a_{p_3 p_4} \cdots a_{p_{2N-1} p_{2N}} \quad (4.2.40)$$

となると考えられる。ただし、 \sum_p' は、

$$p_1 < p_2, p_3 < p_4, \cdots, p_{2N-1} < p_{2N} \quad (4.2.41)$$

$$p_1 < p_3 < \cdots < p_{2N-1} \quad (4.2.42)$$

となるようなすべての順列 p で和をとることを表す。また、右辺の $(\pm)_p$ は順列 p に依存する \pm 符号である。この $(\pm)_p$ を決めるために、順列 p の制限をなくし、

$$\pm (\det A)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{N!2^N} \sum_p S(p) a_{p_1 p_2} a_{p_3 p_4} \cdots a_{p_{2N-1} p_{2N}} \quad (4.2.43)$$

とする。ここで、 $S(p)$ は順列 p のみに依存する \pm 符号であるとし、

$$S(p) \equiv \pm 1 \quad (4.2.44)$$

となる。順列 I を、

$$I = 1, 2, 3, \cdots, 2N-1, 2N \quad (4.2.45)$$

とし、この場合の $S(I)$ を、

$$S(I) \equiv +1 \quad (4.2.46)$$

と定義する。

まず、 a_{jk} により構成される行列 A を任意の順列 p' に対して、

$$a'_{jk} = a_{p'_j p'_k} \quad (4.2.47)$$

により構成される行列 A' に変換することを考える。このとき、行列式 $\det A'$ は行列式 $\det A$ の2つの行と2つの列の交換を何回か繰り返したものとなり、行列式の性質より2つの行と2つの列の交換に対して値は変わらないので、

$$\det A = \det A' \quad (4.2.48)$$

となる。ここで、

$$\pm(\det A)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{N!2^N} \sum_p S(p) a_{p_1 p_2} a_{p_3 p_4} \cdots a_{p_{2N-1} p_{2N}} \quad (4.2.49)$$

$$\pm(\det A')^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{N!2^N} \sum_p S(p) a'_{p_1 p_2} a'_{p_3 p_4} \cdots a'_{p_{2N-1} p_{2N}} \quad (4.2.50)$$

$$= \frac{1}{N!2^N} \sum_p S(p) a_{p'_{p_1} p'_{p_2}} a_{p'_{p_3} p'_{p_4}} \cdots a_{p'_{p_{2N-1}} p'_{p_{2N}}} \quad (4.2.51)$$

$$= \frac{1}{N!2^N} \sum_p S(p) a_{(p'p)_1 (p'p)_2} a_{(p'p)_3 (p'p)_4} \cdots a_{(p'p)_{2N-1} (p'p)_{2N}} \quad (4.2.52)$$

となるので、(4.2.48) が成立するためには、

$$\pm \sum_p S(p) a_{(p'p)_1 (p'p)_2} a_{(p'p)_3 (p'p)_4} \cdots a_{(p'p)_{2N-1} (p'p)_{2N}} = \sum_p S(p) a_{p_1 p_2} a_{p_3 p_4} \cdots a_{p_{2N-1} p_{2N}} \quad (4.2.53)$$

となる必要がある。ただし、 p'_{p_i} は順列 p に順列 p' を作用させたものであるから、

$$p'_{p_i} = (p'p)_i \quad (4.2.54)$$

と書いた。(4.2.53) が成立するためには、左辺で $p = p'p$ となる項で、

$$\pm S(p'p) a_{p_1 p_2} a_{p_3 p_4} \cdots a_{p_{2N-1} p_{2N}} = S(p) a_{p_1 p_2} a_{p_3 p_4} \cdots a_{p_{2N-1} p_{2N}} \quad (4.2.55)$$

となる必要があり、

$$S(p'p) = \pm S(p) \quad (4.2.56)$$

となればよい。ここで、 $p = I$ とすると、

$$S(p') = \pm 1 \quad (4.2.57)$$

となるので、

$$S(p'p) = S(p')S(p) \quad (4.2.58)$$

となる。すなわち、2つの順列の積の $S(p'p)$ は、それぞれの順列による $S(p)$ 、 $S(p')$ の積で書くことができる。

次に、 (j, k) を交換する順列を $p^{(j,k)}$ とすると、2回繰り返せば、

$$p^{(j,k)}p^{(j,k)}p = Ip = p \quad (4.2.59)$$

と元に戻るので、

$$S\left(p^{(j,k)^2}\right) = 1 \quad (4.2.60)$$

となる。また、 (j, k) を交換する順列を $p^{(j,k)}$ 、 (k, l) を交換する順列を $p^{(k,l)}$ とすると、

$$\begin{array}{ccc} j & k & l \\ a & b & c \\ & \downarrow p^{(j,k)} & \\ b & a & c \\ & \downarrow p^{(k,l)} & \\ b & c & a \\ & \downarrow p^{(j,k)} & \\ c & b & a \\ & \downarrow p^{(k,l)} & \\ c & a & b \\ & \downarrow p^{(j,k)} & \\ a & c & b \\ & \downarrow p^{(k,l)} & \\ a & b & c \end{array} \quad (4.2.61)$$

となり、

$$p^{(j,k)^3}p^{(k,l)^3} = I \quad (4.2.62)$$

となることがわかる。よって、(4.2.58) を用いれば、

$$\begin{aligned} S\left(p^{(j,k)^3}p^{(k,l)^3}\right) &= 1 \\ S\left(p^{(j,k)^3}\right)S\left(p^{(k,l)^3}\right) &= 1 \\ S\left(p^{(j,k)}\right)S\left(p^{(k,l)}\right) &= 1 \end{aligned} \quad (4.2.63)$$

となる。 $S(p) = \pm 1$ であるから、すべての (j, k) において、

$$S\left(p^{(j,k)}\right) = 1 \quad (4.2.64)$$

または、

$$S\left(p^{(j,k)}\right) = -1 \quad (4.2.65)$$

となっている必要がある。

ここで、 2×2 の反対称行列 A_2 を考える。これは、

$$A_2 = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ -a_{12} & 0 \end{pmatrix} \quad (4.2.66)$$

となる。これより、

$$\det A_2 = a_{12}^2 \quad (4.2.67)$$

$$\pm(\det A_2)^{\frac{1}{2}} = a_{12} \quad (4.2.68)$$

となる。ここで、

$$I = 1, 2 \quad (4.2.69)$$

$$p^{(1,2)} = 2, 1 \quad (4.2.70)$$

と順列を定義すると、

$$\begin{aligned} \pm(\det A_2)^{\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2} \sum_p S(p) a_{p_1 p_2} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ S(I) a_{12} + S(p^{(1,2)}) a_{21} \right\} \end{aligned} \quad (4.2.71)$$

$$= \frac{1}{2} a_{12} \left\{ S(I) - S(p^{(1,2)}) \right\} \quad (4.2.72)$$

となる。これより、

$$\pm(\det A_2)^{\frac{1}{2}} = \begin{cases} 0 & S(p^{(1,2)}) = S(I) = 1 \\ a_{12} & S(p^{(1,2)}) = -S(I) = -1 \end{cases} \quad (4.2.73)$$

となるため、

$$S(p^{(1,2)}) = -1 \quad (4.2.74)$$

となっている必要がある。これより、同じ a につく添字の交換に対して $S(p^{(j,k)}) = -1$ となることが分かった。ここで、(4.2.63) に対して (j, k) が同じ a につく添字であるとすれば、 (k, l) は異なる a につく添字となる。よって、異なる a につく添字の交換に対しても、 $S(p^{(k,l)}) = -1$ となる。

したがって、任意の (j, k) において、

$$S(p^{(j,k)}) = -1 \quad (4.2.75)$$

とすればよく、1つの交換に対して -1 が付くため、 $S(I) = +1$ より、

$$S(p) = \delta_p \quad (4.2.76)$$

となる。

よって、

$$\pm(\det A)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{N!2^N} \sum_p \delta_p a_{p_1 p_2} a_{p_3 p_4} \cdots a_{p_{2N-1} p_{2N}} \quad (4.2.77)$$

$$= \sum_p' \delta_p a_{p_1 p_2} a_{p_3 p_4} \cdots a_{p_{2N-1} p_{2N}} \quad (4.2.78)$$

となる。この右辺は (4.2.1) 右辺と同じであるから、

$$\text{Pf}A = \pm(\det A)^{\frac{1}{2}} \quad (4.2.79)$$

となることが証明された。

4.3 正方格子の dimer 統計

4.3.1 dimer 統計とは

dimer 統計では、図 9 のようにすべての格子点を 2 つずつつなぎ格子を覆い尽くす (dimer covering) すべての配置を考える。正方格子の場合この図の 2 重線となっているところにボンドが形成されている。ここで、図 9 のように、垂直方向につながるボンドの Boltzmann 因子を z_1 、水平方向につながるボンドの Boltzmann 因子を z_2 とする。このとき、 n_v を垂直方向に形成されたボンドの数、 n_h を水平方向に形成されたボンドの数とし、 N_{vh} をある n_v 、 n_h でとることのできる図形の数とする。図 9 は $n_v = 4$ 、 $n_h = 8$ のとりうる図形の 1 例である。これらの関係を用いて、dimer 統計における分配関数 Z_{DS} は、

$$Z_{DS} = \sum_{n_v} \sum_{n_h} N_{vh} z_1^{n_v} z_2^{n_h} \quad (4.3.1)$$

と定義される。この分配関数は Ising モデルの場合 (4.1.10) と似ているが Ising モデルでは 1 つの格子点に偶数本のボンドがつながる図形 (図 8) の和であるが、この場合は 1 つの格子点から必ず 1 本のみボンドがつながる図形 (図 9) の和となるため意味は異なる。この 2 つの図形の関係は 4.4 節で議論する。

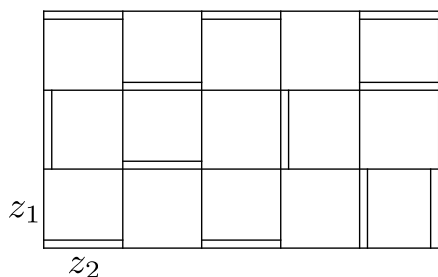


図 9 dimer covering の例

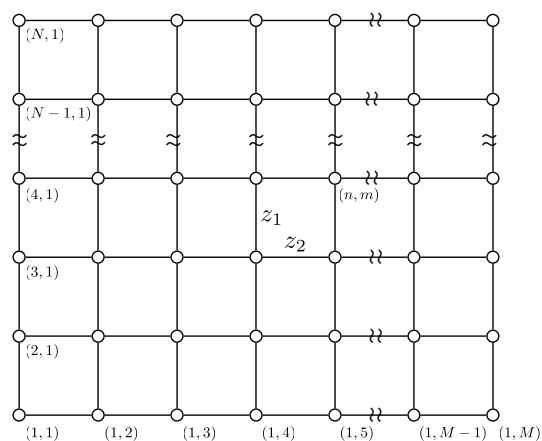


図 10 自由端の 2 次元格子

4.3.2 境界条件が自由端の場合

ここでは、境界条件が自由端の場合の dimer 統計における分配関数 Z_{DS}^{Free} を求める。結果としては、

$$Z_{DS}^{\text{Free}} = \text{Pf}A \quad (4.3.2)$$

と書けることとなる。

図 10 のような N 行 M 列の 2 次元格子を考える。図では格子点は (n, m) で表されているが、

$$(n, m) = m + (n - 1)N \quad (4.3.3)$$

と格子点に通し番号を付けることとする。dimer 統計では2つずつ格子点をつなぐことになるのだから格子点番号の順列 p は、

$$p = |p_1, p_2|p_3, p_4| \cdots |p_{NM-1}, p_{NM}| \quad (4.3.4)$$

という形で表される。ただし、 p_i は順列 p の i 番目の成分であるとし、区切られている対がボンドを形成しているとする。また、この順列 p は (4.2.4)、(4.2.5) の制限にしたがって形成するとする。このとき、 $|p_k, p_{k+1}|$ の dimer が分配関数に与える寄与を $a(p_k, p_{k+1})$ とする。ここで考えている系では、垂直方向にボンドが形成される場合 z_1 の大きさの寄与が、水平方向にボンドが形成される場合 z_2 の大きさの寄与が分配関数に加わるので、

$$a(p_k, p_{k+1}) = \begin{cases} s(p_k, p_{k+1})z_1 & |p_k, p_{k+1}| \text{ が垂直方向のボンドを形成している場合} \\ s(p_k, p_{k+1})z_2 & |p_k, p_{k+1}| \text{ が水平方向のボンドを形成している場合} \\ 0 & p_k, p_{k+1} \text{ が垂直、水平方向にボンドを形成しない場合} \end{cases} \quad (4.3.5)$$

と書くことができる。ただし、

$$|s(p_k, p_{k+1})| = 1 \quad (4.3.6)$$

であるとする。ここで、 $(p_1, p_2, \dots, p_{NM})$ は $(1, 2, \dots, NM)$ の順列であるから、 $a(p_k, p_{k+1})$ を成分とする行列を A とすると、

$$A = \begin{pmatrix} a(1, 1) & a(1, 2) & \cdots & a(1, NM) \\ a(2, 1) & a(2, 2) & \cdots & a(2, NM) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a(NM, 1) & a(NM, 2) & \cdots & a(NM, NM) \end{pmatrix} \quad (4.3.7)$$

となる。この行列 A に対する Pfaffian は、

$$\text{Pf}A = \sum'_p \delta_p a(p_1, p_2) a(p_3, p_4) \cdots a(p_{NM-1}, p_{NM}) \quad (4.3.8)$$

$$= \sum'_p \delta_p s(p_1, p_2) s(p_3, p_4) \cdots s(p_{NM-1}, p_{NM}) z_1^{n_v} z_2^{n_h} \quad (4.3.9)$$

となる。ここで、 n_v 、 n_h はある順列 p の場合の形成されている垂直方向、水平方向のボンドの数を表す。ここで、

$$|\delta_p s(p_1, p_2) s(p_3, p_4) \cdots s(p_{NM-1}, p_{NM})| = 1 \quad (4.3.10)$$

であるため、

$$\delta_p s(p_1, p_2) s(p_3, p_4) \cdots s(p_{NM-1}, p_{NM}) = \pm 1 \quad (4.3.11)$$

となることがわかる。つまり、順列 p に依存する、

$$\gamma_p \equiv \delta_p s(p_1, p_2) s(p_3, p_4) \cdots s(p_{NM-1}, p_{NM}) \quad (4.3.12)$$

がとりうる順列 p すべてにおいて同じ符号 (すべて +1 または、すべて -1) となれば、

$$\begin{aligned} \text{Pf}A &= \sum'_p (\pm 1) z_1^{n_v} z_2^{n_h} \\ &= \pm \sum_{n_v} \sum_{n_h} N_{vh} z_1^{n_v} z_2^{n_h} \\ &= \pm Z_{\text{DS}}^{\text{Free}} \end{aligned} \quad (4.3.13)$$

となることがわかる。したがって、

$$Z_{DS}^{\text{Free}} = \pm \text{Pf} A \quad (4.3.14)$$

と書けることとなる。

これより、 γ_p がとりうる順列 p すべてにおいて同じ符号となるように $s(p_k, p_{k+1})$ を決めることとする。これは任意のとりうる2つの順列 $p^{(1)}, p^{(2)}$ において、

$$\delta_{p^{(1)}} s(p_1^{(1)}, p_2^{(1)}) s(p_3^{(1)}, p_4^{(1)}) \cdots s(p_{NM-1}^{(1)}, p_{NM}^{(1)}) = \delta_{p^{(2)}} s(p_1^{(2)}, p_2^{(2)}) s(p_3^{(2)}, p_4^{(2)}) \cdots s(p_{NM-1}^{(2)}, p_{NM}^{(2)}) \quad (4.3.15)$$

となるような $s(p_k, p_{k+1})$ を求めればよい。任意のとりうる2つの順列 $p^{(1)}, p^{(2)}$ に対してこの式を満たすような $s(p_k, p_{k+1})$ を決めることができれば、任意の順列 p に対する γ_p はすべて同じ値となる。つまり、ある1つの順列に対する γ_p の値を求めれば、すべての任意の順列に対する γ_p の値が決まる。

まず、任意の2つの順列 $p^{(1)}, p^{(2)}$ が形成する図形について考えることとする。このように2つの順列により形成される図形を transition graph と呼ぶこととする。図 11 は transition graph の例である。実線は順列 $p^{(1)}$ によるボンドを、破線は順列 $p^{(2)}$ によるボンドをそれぞれ表している。この transition graph は一般に、

1. 2つのサイトが実線、破線の両方のボンドでつながれている。これを double bond と呼ぶ。
2. 実線、破線のボンドが交互に polygon を形成している。これを transition cycle と呼ぶ。

の2種類の図形により形成される。ただし、この2番目の polygon を transition cycle と呼ぶのは、 $p^{(1)}$ の順列を時計回りまたは反時計回りにボンド1本分移動すると、 $p^{(2)}$ になるためである。また、transition cycle が自身で交わることも、1つの transition graph 内で transition cycle 同士が交わることもない。transition cycle が交わるためには1つの格子点から2つの順列からそれぞれ2つずつボンドがつながる必要があるが、このようなつながり方は dimer 統計では考えないためである。

まず、順列 p は (4.2.4)、(4.2.5) の制限により形成されるが、dimer 統計を考える場合この制限では扱いにくいいため、制限を変えることとする。新しい制限として (4.2.5) のかわりに、

1. double bond では左から右の順に格子点を数え上げる。
2. transition cycle では transition cycle を時計回りに回る方向に格子点を数え上げる。

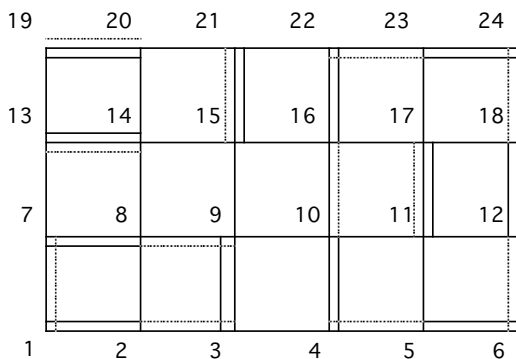


図 11 transition graph の例：実線の順列を $p^{(1)}$ 、 $\bar{p}^{(1)}$ 、破線の順列を $p^{(2)}$ 、 $\bar{p}^{(2)}$ とする。

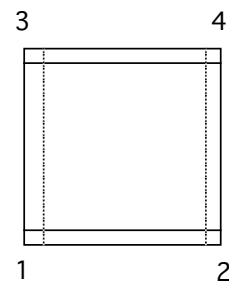


図 12 最も簡単な transition cycle：実線の順列を $p^{(1)}$ 、 $\bar{p}^{(1)}$ 、破線の順列を $p^{(2)}$ 、 $\bar{p}^{(2)}$ とする。

という制限を導入し、この制限により形成される順列を \bar{p} と表すことにする。このとき、1つの順列 p に対し、ただ1つの順列 \bar{p} が決まることとなる。この順列 p 、 \bar{p} の関係の例を図 12 の transition cycle を用いて表すと、

$$p^{(1)} = |p_1^{(1)}, p_2^{(1)} | p_3^{(1)}, p_4^{(1)} | = |1, 2|3, 4| \quad p^{(2)} = |p_1^{(2)}, p_2^{(2)} | p_3^{(2)}, p_4^{(2)} | = |1, 3|2, 4| \quad (4.3.16)$$

$$\bar{p}^{(1)} = |\bar{p}_1^{(1)}, \bar{p}_2^{(1)} | \bar{p}_3^{(1)}, \bar{p}_4^{(1)} | = |2, 1|3, 4| \quad \bar{p}^{(2)} = |\bar{p}_1^{(2)}, \bar{p}_2^{(2)} | \bar{p}_3^{(2)}, \bar{p}_4^{(2)} | = |1, 3|4, 2| \quad (4.3.17)$$

となる。

次に、 $\delta_p s(p_1, p_2) s(p_3, p_4) \cdots s(p_{NM-1}, p_{NM})$ と $\delta_{\bar{p}} s(\bar{p}_1, \bar{p}_2) s(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_{NM})$ の関係について考えることとする。 p 、 \bar{p} は dimer を構成する格子点の組である $|p_k, p_{k+1}|$ と $|\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1}|$ は同じであるが数え方が逆になる部分がある。(4.3.16)、(4.3.17)において数え方が逆になっている部分は $p^{(1)}$ 、 $\bar{p}^{(1)}$ 間では $|1, 2|$ の組、 $p^{(2)}$ 、 $\bar{p}^{(2)}$ 間では $|2, 4|$ の組である。ここで、 p では必ず $p_k < p_{k+1}$ である必要があるのに対し、 \bar{p} では transition cycle を時計回りに数え上げるため、 $\bar{p}_k > \bar{p}_{k+1}$ となる部分が存在する。この部分が(4.3.16)、(4.3.17)において数え方が逆になっている部分である。これより、

$$\begin{aligned} \bar{p}_k < \bar{p}_{k+1} \text{ では、} & \quad \bar{p}_k = p_k & \quad \bar{p}_{k+1} = p_{k+1} \\ \bar{p}_k > \bar{p}_{k+1} \text{ では、} & \quad \bar{p}_k = p_{k+1} & \quad \bar{p}_{k+1} = p_k \end{aligned}$$

となる。(4.3.16)、(4.3.17)においては上に対応するのが $|\bar{p}_3^{(1)}, \bar{p}_4^{(1)}|$ 、 $|\bar{p}_1^{(2)}, \bar{p}_2^{(2)}|$ 、下に対応するのが $|\bar{p}_1^{(1)}, \bar{p}_2^{(1)}|$ 、 $|\bar{p}_3^{(2)}, \bar{p}_4^{(2)}|$ である。ここで、

$$s(p_k, p_{k+1}) = -s(p_{k+1}, p_k) \quad (4.3.18)$$

となる場合を考えることとする。このとき、 $\bar{p}_k < \bar{p}_{k+1}$ となる部分では、

$$s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1}) = s(p_k, p_{k+1}) \quad (4.3.19)$$

となり、 $\bar{p}_k > \bar{p}_{k+1}$ となる部分では、

$$s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1}) = s(p_{k+1}, p_k) = -s(p_k, p_{k+1}) \quad (4.3.20)$$

となる。つまり、 $\bar{p}_k > \bar{p}_{k+1}$ となる部分が n 個あれば、

$$s(\bar{p}_1, \bar{p}_2) s(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_{NM}) = (-1)^n s(p_1, p_2) s(p_3, p_4) \cdots s(p_{NM-1}, p_{NM}) \quad (4.3.21)$$

となる。また、 $\bar{p}_k > \bar{p}_{k+1}$ となる部分が n 個あれば順列 p を n 回置換すると \bar{p} となるから、 δ_p 、 $\delta_{\bar{p}}$ は、

$$\delta_{\bar{p}} = (-1)^n \delta_p \quad (4.3.22)$$

という関係を持つ。したがって、

$$\begin{aligned} \gamma_{\bar{p}} &= \delta_{\bar{p}} s(\bar{p}_1, \bar{p}_2) s(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_{NM}) = (-1)^n (-1)^n \delta_p s(p_1, p_2) s(p_3, p_4) \cdots s(p_{NM-1}, p_{NM}) \\ &= \delta_p s(p_1, p_2) s(p_3, p_4) \cdots s(p_{NM-1}, p_{NM}) = \gamma_p \end{aligned} \quad (4.3.23)$$

となる。実際に図 12 の例で考えると、

$$\begin{aligned} \delta_{\bar{p}^{(1)}} s(\bar{p}_1^{(1)}, \bar{p}_2^{(1)}) s(\bar{p}_3^{(1)}, \bar{p}_4^{(1)}) &= \delta_{\bar{p}^{(1)}} s(2, 1) s(3, 4) \\ &= -\delta_{p^{(1)}} \{-s(1, 2)\} s(3, 4) \\ &= \delta_{p^{(1)}} s(1, 2) s(3, 4) = \delta_{p^{(1)}} s(p_1^{(1)}, p_2^{(1)}) s(p_3^{(1)}, p_4^{(1)}) \end{aligned} \quad (4.3.24)$$

$$\begin{aligned}
\delta_{\bar{p}^{(2)}} s(\bar{p}_1^{(2)}, \bar{p}_2^{(2)}) s(\bar{p}_3^{(2)}, \bar{p}_4^{(2)}) &= \delta_{\bar{p}^{(2)}} s(1, 3) s(4, 2) \\
&= -\delta_{\bar{p}^{(2)}} s(1, 3) \{-s(2, 4)\} \\
&= \delta_{\bar{p}^{(2)}} s(1, 3) s(2, 4) = \delta_{\bar{p}^{(2)}} s(p_1^{(2)}, p_2^{(2)}) s(p_3^{(2)}, p_4^{(2)})
\end{aligned} \tag{4.3.25}$$

となり (4.3.23) が成立していることがわかる。よって、この順列 \bar{p} により PfA は、

$$\text{PfA} = \sum_p' \delta_p a(p_1, p_2) a(p_3, p_4) \cdots a(p_{NM-1}, p_N) \tag{4.3.26}$$

$$= \sum_{\bar{p}}' \delta_{\bar{p}} a(\bar{p}_1, \bar{p}_2) a(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots a(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_N) \tag{4.3.27}$$

$$= \sum_{\bar{p}}' \delta_{\bar{p}} s(\bar{p}_1, \bar{p}_2) s(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_{NM}) z_1^{n_v} z_2^{n_h} \tag{4.3.28}$$

となる。ただし、 $\sum_{\bar{p}}'$ は新しい制限を満たすすべての順列 \bar{p} で和をとることを表す。これより、順列 p により γ_p がすべて同じ符号となる代わりに、順列 \bar{p} により、

$$\gamma_{\bar{p}} = \delta_{\bar{p}} s(\bar{p}_1, \bar{p}_2) s(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_{NM}) \tag{4.3.29}$$

がすべて同じ符号となっても分配関数は同様に Pfaffian で書けることとなる。

これより、すべての順列 \bar{p} において $\gamma_{\bar{p}}$ が同じ符号となるように、すべてのボンドに対する $s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1})$ を決めていく。ここで、すべての順列 \bar{p} において $\gamma_{\bar{p}}$ が同じ符号となるには、任意の順列 $\bar{p}^{(1)}$ 、 $\bar{p}^{(2)}$ において、

$$\delta_{\bar{p}^{(1)}} s(\bar{p}_1^{(1)}, \bar{p}_2^{(1)}) s(\bar{p}_3^{(1)}, \bar{p}_4^{(1)}) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}^{(1)}, \bar{p}_{NM}^{(1)}) = \delta_{\bar{p}^{(2)}} s(\bar{p}_1^{(2)}, \bar{p}_2^{(2)}) s(\bar{p}_3^{(2)}, \bar{p}_4^{(2)}) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}^{(2)}, \bar{p}_{NM}^{(2)}) \tag{4.3.30}$$

となればよい。また、任意の2つの順列 $\bar{p}^{(1)}$ 、 $\bar{p}^{(2)}$ が形成する図形は2つの順列 $\bar{p}^{(1)}$ 、 $\bar{p}^{(2)}$ が形成する図形と同様に double bond と transition cycle により形成される。ここで、double bond を形成するボンドの部分においてはどんな $s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1})$ に対しても (4.3.30) は成立している。例として図 11 の transition graph を考えると、

$$\begin{aligned}
\delta_{\bar{p}^{(1)}} s(\bar{p}_1^{(1)}, \bar{p}_2^{(1)}) s(\bar{p}_3^{(1)}, \bar{p}_4^{(1)}) \cdots s(\bar{p}_{23}^{(1)}, \bar{p}_{24}^{(1)}) &= \delta_{\bar{p}^{(1)}} s(2, 1) s(4, 10) s(6, 5) s(7, 8) s(9, 3) s(11, 17) \\
&\quad \times s(13, 14) s(15, 21) s(16, 22) s(18, 12) s(19, 20) s(23, 24)
\end{aligned} \tag{4.3.31}$$

$$\begin{aligned}
\delta_{\bar{p}^{(2)}} s(\bar{p}_1^{(2)}, \bar{p}_2^{(2)}) s(\bar{p}_3^{(2)}, \bar{p}_4^{(2)}) \cdots s(\bar{p}_{23}^{(2)}, \bar{p}_{24}^{(2)}) &= \delta_{\bar{p}^{(2)}} s(1, 7) s(3, 2) s(5, 4) s(8, 9) s(10, 16) s(11, 17) \\
&\quad \times s(12, 6) s(13, 14) s(15, 21) s(19, 20) s(22, 23) s(24, 18)
\end{aligned} \tag{4.3.32}$$

となる。ここで、一般に $s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1})$ の交換により順列は変化するが交換に伴う置換は偶の置換であるから、 $\delta_{\bar{p}}$ の値は変化しない。つまり、 $s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1})$ は自由に交換しても値が変わることはない。これより、transition cycle を形成するボンドを前の方に集めそれぞれの transition cycle を時計回りに回る順に並べ、double bond を形成するボンドは後ろの方に集めても値は変わらないので、

$$\begin{aligned}
\delta_{\bar{p}^{(1)}} s(\bar{p}_1^{(1)}, \bar{p}_2^{(1)}) s(\bar{p}_3^{(1)}, \bar{p}_4^{(1)}) \cdots s(\bar{p}_{23}^{(1)}, \bar{p}_{24}^{(1)}) &= \delta_{\bar{p}^{(1)}} s(2, 1) s(7, 8) s(9, 3) s(4, 10) s(16, 22) s(23, 24) \\
&\quad \times s(18, 12) s(6, 5) s(11, 17) s(13, 14) s(15, 21) s(19, 20)
\end{aligned} \tag{4.3.33}$$

$$\begin{aligned}
\delta_{\bar{p}^{(2)}} s(\bar{p}_1^{(2)}, \bar{p}_2^{(2)}) s(\bar{p}_3^{(2)}, \bar{p}_4^{(2)}) \cdots s(\bar{p}_{23}^{(2)}, \bar{p}_{24}^{(2)}) &= \delta_{\bar{p}^{(2)}} s(1, 7) s(8, 9) s(3, 2) s(10, 16) s(22, 23) s(24, 18) \\
&\quad \times s(12, 6) s(5, 4) s(11, 17) s(13, 14) s(15, 21) s(19, 20)
\end{aligned} \tag{4.3.34}$$

と書くことができる。ここで、double bond を形成する部分 (上 2 式の後ろ 4 つ) は 2 つの順列 $\bar{p}^{(1)}$ 、 $\bar{p}^{(2)}$ で同じであるから、double bond を形成する部分ではどんな $s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1})$ でも (4.3.30) が成立する。次に、transition cycle を形成する部分について考える。まず、簡単のため最も基本的な transition cycle について考える。これを elementary polygon と呼び、図に表すと図 12 のような polygon である。このとき、実線を $\bar{p}^{(1)}$ 、点線を $\bar{p}^{(2)}$ とすると、

$$\bar{p}^{(1)} = |2, 1|3, 4| \quad (4.3.35)$$

$$\bar{p}^{(2)} = |1, 3|4, 2| \quad (4.3.36)$$

となり、 $\bar{p}^{(2)}$ は $\bar{p}^{(1)}$ を 1 つ cyclic に左へずらしたものとなっている。これは明らかに一般の transition cycle についても成立し、 n 個の格子点からなる transition cycle を形成する順列 $\bar{p}^{(1)}$ 、 $\bar{p}^{(2)}$ は、

$$\bar{p}^{(1)} = |\bar{p}_1^{(1)}, \bar{p}_2^{(1)}|\bar{p}_3^{(1)}, \bar{p}_4^{(1)}|\cdots|\bar{p}_{n-1}^{(1)}, \bar{p}_n^{(1)}| \quad (4.3.37)$$

$$\bar{p}^{(2)} = |\bar{p}_2^{(1)}, \bar{p}_3^{(1)}|\bar{p}_4^{(1)}, \bar{p}_5^{(1)}|\cdots|\bar{p}_n^{(1)}, \bar{p}_1^{(1)}| \quad (4.3.38)$$

となる。 $\bar{p}^{(2)}$ から、 $\bar{p}^{(1)}$ への置換は奇の置換であるので、

$$\delta_{\bar{p}^{(1)}} = -\delta_{\bar{p}^{(2)}} \quad (4.3.39)$$

という関係が成立する。 t 個の transition cycle を含んだ transition graph に対しては、

$$\delta_{\bar{p}^{(1)}} = (-1)^t \delta_{\bar{p}^{(2)}} \quad (4.3.40)$$

となる。実際、(4.3.33)、(4.3.34) により形成される transition graph は transition cycle が 2 個ある場合であり、それぞれの順列は、

$$\bar{p}^{(1)} = |2, 1|7, 8|9, 3|4, 10|16, 22|23, 24|18, 12|6, 5|11, 17|13, 14|15, 21|19, 20| \quad (4.3.41)$$

$$\bar{p}^{(2)} = |1, 7|8, 9|3, 2|10, 16|22, 23|24, 18|12, 6|5, 4|11, 17|13, 14|15, 21|19, 20| \quad (4.3.42)$$

である。よって、 $\bar{p}^{(2)}$ を偶数回置換したものが $\bar{p}^{(1)}$ となっていることがわかり (4.3.40) が成立していることがわかる。

したがって、どんな場合でも (4.3.30) が成立するためには、 n 個の格子点からなる 1 つの transition cycle (n は偶数ならどんな数でもよい) に対して、

$$s(\bar{p}_1^{(1)}, \bar{p}_2^{(1)})s(\bar{p}_3^{(1)}, \bar{p}_4^{(1)})\cdots s(\bar{p}_{n-1}^{(1)}, \bar{p}_n^{(1)}) = -s(\bar{p}_1^{(2)}, \bar{p}_2^{(2)})s(\bar{p}_3^{(2)}, \bar{p}_4^{(2)})\cdots s(\bar{p}_{n-1}^{(2)}, \bar{p}_n^{(2)}) \quad (4.3.43)$$

となっていればよい。これは、(4.3.40)、(4.3.43) より transition graph が t 個の transition cycle を含む場合、

$$\begin{aligned} \delta_{\bar{p}^{(2)}} s(\bar{p}_1^{(2)}, \bar{p}_2^{(2)})s(\bar{p}_3^{(2)}, \bar{p}_4^{(2)})\cdots s(\bar{p}_{NM-1}^{(2)}, \bar{p}_N^{(2)}) &= (-1)^t \delta_{\bar{p}^{(1)}} (-1)^t s(\bar{p}_1^{(1)}, \bar{p}_2^{(1)})s(\bar{p}_3^{(1)}, \bar{p}_4^{(1)})\cdots s(\bar{p}_{NM-1}^{(1)}, \bar{p}_N^{(1)}) \\ &= \delta_{\bar{p}^{(1)}} s(\bar{p}_1^{(1)}, \bar{p}_2^{(1)})s(\bar{p}_3^{(1)}, \bar{p}_4^{(1)})\cdots s(\bar{p}_{NM-1}^{(1)}, \bar{p}_N^{(1)}) \end{aligned} \quad (4.3.44)$$

となるからである。

よって、すべての transition cycle に対して (4.3.43) が成立するように $s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1})$ を決めればよい。ここで、(4.3.6) より、

$$s^2(\bar{p}_k^{(1)}, \bar{p}_{k+1}^{(1)}) = 1 \quad (4.3.45)$$

となるから、(4.3.43) が成立するためには、1つの transition cycle において、

$$\prod_{k=1}^n s(\bar{p}_k^{(1)}, \bar{p}_{k+1}^{(1)}) = -1 \quad (4.3.46)$$

となる必要がある。ただし、 $\bar{p}_{n+1}^{(1)} = \bar{p}_1^{(1)}$ とする。この関係を満たす $s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1})$ が決められれば、任意の順列 \bar{p} に対する $\gamma_{\bar{p}}$ はすべて同じ値となり、分配関数は決められた $s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1})$ による (4.3.5) を成分とする行列の Pfaffian で書けることがわかる。

これより、任意の transition cycle で (4.3.46) を満たすように $s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1})$ を決めるのであるが、 $|s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1})| = 1$ であるから、ここでは $s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1})$ が実数の場合を考えることとし、

$$s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1}) = \pm 1 \quad (4.3.47)$$

であるとする。ここで、すべてのボンドに矢印をつけ $s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1})$ を表すこととする。このとき、 $s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1}) = 1$ となる方向に矢印をつける。つまり、 $\bar{p}_k \rightarrow \bar{p}_{k+1}$ に矢印が向いているボンドでは、

$$s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1}) = -s(\bar{p}_{k+1}, \bar{p}_k) \quad (4.3.48)$$

となる。したがって、transition cycle を時計回りに回る際、回る方向と同方向の矢印のボンドは $s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1}) = 1$ 、回る方向と逆方向の矢印のボンドは $s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1}) = -1$ の寄与をする。つまり、transition cycle を時計回りに数え上げる際 (4.3.46) が成立するためには、反時計回りの方向の矢印が奇数個 transition cycle に存在している必要がある。ただし、transition cycle を構成するボンドの数は偶数個であるから、時計回りの方向の矢印の数が奇数個であれば、反時計回りの方向の矢印は奇数個となり、(4.3.46) は成立する。

ここで、orientation parity という考え方を導入する。これは、transition cycle を任意の方向に1周する際、1周する方向と同じ方向の矢印からの寄与を +1、逆の方向の矢印からの寄与を -1 としたとき、transition cycle を構成するすべてのボンドの寄与の積で定義される。したがって、1周する方向と逆の方向の矢印が奇数個あれば orientation parity は -1、1周する方向と逆の方向の矢印が偶数個あれば orientation parity は +1 である。ただし、transition cycle は偶数個のボンドからなるので、1周する方向と同じ方向の矢印が奇数個 (逆の方向の矢印は奇数個) であれば orientation parity は -1、1周する方向と同じ方向の矢印が偶数個 (逆の方向の矢印は偶数個) であれば orientation parity は +1 である。これより、transition cycle の orientation parity が -1 であれば、その transition cycle は奇数個の時計回りの方向の矢印を持つこととなり、(4.3.46) が成立する。よって、すべての transition cycle の orientation parity が -1 となるように $s(\bar{p}_k^{(1)}, \bar{p}_{k+1}^{(1)})$ を次のような手順で定める。

まず、elementary polygon について orientation parity が -1 となることを要求する。このためには elementary polygon を1周するとき逆向きに矢印が1個または3個あればよいので、図13、図14の2通りの配置がある。このような elementary polygon において常にこの関係が成立するように格子に矢印を描いたものが図15である。

このとき、図15のように $s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1})$ を定義したとき一般の transition cycle (elementary polygon でない) が (4.3.46) を満たしていれば、この $s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1})$ による $a(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1})$ を成分とする行列 A の Pfaffian のすべての項は同符号となる。よって、一般の transition cycle (elementary polygon でない) が (4.3.46) を満たしていることを確かめればよい。ここで、次の2つの定理が成り立つ。

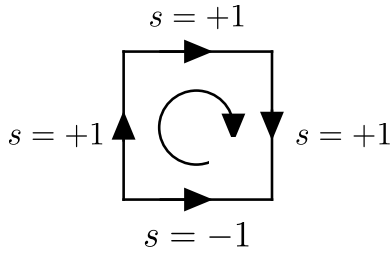


図 13 elementary polygon の例 1 : 時計回りの方向の矢印 3 個、反時計回りの方向の矢印 1 個によりこの polygon からの寄与は - 1 となる。つまり、orientation parity は -1 である。

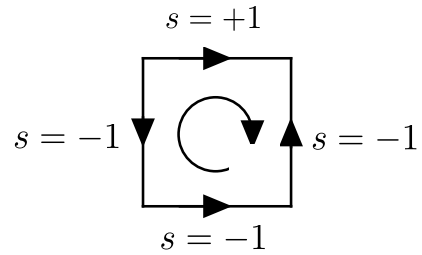


図 14 elementary polygon の例 2 : 時計回りの方向の矢印 1 個、反時計回りの方向の矢印 3 個によりこの polygon からの寄与は - 1 となる。つまり、orientation parity は -1 である。

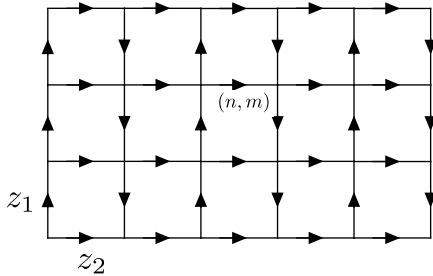


図 15 自由端の正方格子

$$\begin{cases} s(n, m; n + 1, m) = -s(n + 1, m; n, m) = (-1)^{m-1} \\ s(n, m; n, m + 1) = -s(n, m + 1; n, m) = 1 \\ s(n, m; n', m') = 0 \quad \text{最近接格子でない場合} \end{cases} \quad (4.3.49)$$

〈定理 [A]〉 : 2次元格子においてはどんな transition cycle においても、transition cycle に囲まれた格子点の数は偶数である。

証明) transition cycle に囲まれた格子点の数が奇数であると囲まれた格子点で dimer を形成する際、形成されない格子点が存在してしまう。よって、transition cycle 内で dimer が形成されるには transition cycle に囲まれた格子点の数が偶数でなければならない。(証明終)

〈定理 [B]〉 : どんな polygon(transition cycle である必要はない) に対しても polygon に囲まれた格子点の数が偶数なら、polygon の時計回り方向の矢印の数は奇数 (orientation parity -1) であり、polygon に囲まれた格子点の数が奇数なら、polygon の時計回り方向の矢印の数は偶数 (orientation parity +1) である。

証明) Γ_n を n 個の elementary polygon からできた polygon を表すものとする。これより、 Γ_1 は elementary polygon である。このとき、 Γ_n と Γ_1 が結合し Γ_{n+1} を形成する過程を考える。 Γ_{n+1} を形成する際 Γ_n 、 Γ_1 が共有するボンドは消滅する。ここで、 Γ_n の時計回りの方向の矢印の数を a_n 、 Γ_1 の時計回りの方向の矢印の数を a_1 、 Γ_n 、 Γ_1 が共有しているボンドの数を c とする。つまり、 Γ_n の orientation parity は a_n が偶数な

ら +1、奇数なら -1、 Γ_1 の orientation parity は a_1 が偶数なら +1、奇数なら -1 である。このとき、共有しているボンドは、 Γ_n で時計回りの方向の矢印であれば Γ_1 では反時計回りの方向の矢印であり、 Γ_n で反時計回りの方向の矢印であれば Γ_1 では時計回りの方向の矢印である。これは、 Γ_1 が必ず Γ_n の外側に結合されるためである。これより、 Γ_{n+1} の時計回り方向の矢印の数は $a_{n+1} = a_n + a_1 - c$ となる。つまり、 Γ_{n+1} の orientation parity は a_{n+1} が偶数なら +1、奇数なら -1 である。これは共有している c 本のボンドに対して $\Gamma_n(\Gamma_1)$ で時計回り方向の矢印は $\Gamma_1(\Gamma_n)$ で反時計回りであるからである。

次に、 Γ_n 、 Γ_1 が共有するボンド数と Γ_{n+1} に囲まれた格子点の数の関係について図示したのが図 16 ~ 図 18 である。これらの図より、 Γ_n が Γ_1 を結合し Γ_{n+1} となる際 Γ_n から増えた格子点数は $c - 1$ であることがわかる。したがって、 Γ_n に囲まれた格子点の数を p_n とすると、 Γ_{n+1} に囲まれた格子点の数は $p_{n+1} = p_n + c - 1$ となる。

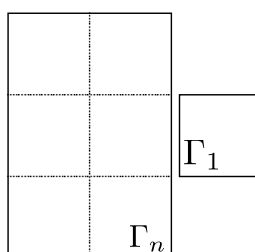


図 16 Γ_n 、 Γ_1 が共有しているボンドが 1 つの場合：結合後 Γ_{n+1} に囲まれた格子点数は $p_n + 0$ 個である。

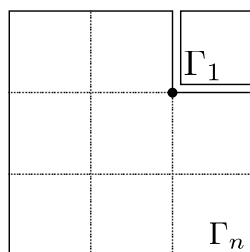


図 17 Γ_n 、 Γ_1 が共有しているボンドが 2 つの場合：結合後 Γ_{n+1} に囲まれた格子点数は $p_n + 1$ 個である。 Γ_n から増えた格子点は黒点 (1 点) で示してある。

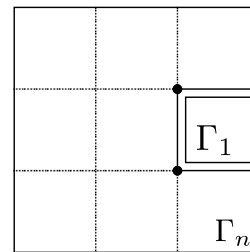


図 18 Γ_n 、 Γ_1 が共有しているボンドが 3 つの場合：結合後 Γ_{n+1} に囲まれた格子点数は $p_n + 2$ 個である。 Γ_n から増えた格子点は黒点 (2 点) で示してある。

ここで、任意の n に対して、

$$\begin{cases} a_n \text{ が偶数のとき、} p_n \text{ は奇数 (} p_n \text{ が偶数のとき、} a_n \text{ は奇数)} \\ a_n \text{ が奇数のとき、} p_n \text{ は偶数 (} p_n \text{ が奇数のとき、} a_n \text{ は偶数)} \end{cases} \quad (4.3.50)$$

を示す。ここでは数学的帰納法を用いる。

[1] a_n が奇数 (a_1)、偶数 (a_4) である最も簡単な polygon に対して orientation parity と polygon に囲まれた格子点数の関係を考えてものが図 19、図 20 であり、(4.3.50) は成立している。

[2] Γ_n において (4.3.50) が成立していると仮定する。

このとき、 Γ_{n+1} において a_{n+1} の偶奇と p_{n+1} の偶奇の関係について考えることとする。ただし、ここで考えている系では Γ_1 の orientation parity は -1 なので a_1 は常に奇数である。

a) a_{n+1} が偶数 (Γ_{n+1} の orientation parity が +1) のとき

この場合、 a_n が偶数で c が奇数、 a_n が奇数で c が偶数の 2 通りの場合が考えられる。前者のときは Γ_n に対する仮定より p_n が奇数であるから、

$$p_{n+1} = p_n + c - 1 = (\text{奇数}) + (\text{奇数}) - 1 = (\text{奇数})$$

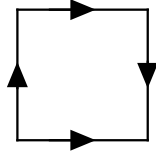


図 19 時計回りの方向の矢印の数が奇数個 (orientation parity が -1) の最も簡単な polygon の例 ($a_1 = 3$): polygon に囲まれた格子点の数は偶数個 (格子点数 0) である。よって、 $a_1 = 3$ (奇数) のとき $p_1 = 0$ (偶数) となる。

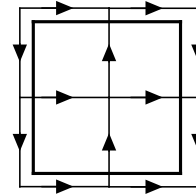


図 20 時計回りの方向の矢印の数が偶数個 (orientation parity が $+1$) の最も簡単な polygon の例 ($a_4 = 4$): polygon に囲まれた格子点の数は奇数個 (格子点数 1) である。よって、 $a_4 = 4$ (偶数) のとき $p_4 = 1$ (奇数) となる。

となる。また、後者のときは Γ_n に対する仮定より p_n が偶数であるから、

$$p_{n+1} = p_n + c - 1 = (\text{偶数}) + (\text{偶数}) - 1 = (\text{奇数})$$

となる。つまり、 a_{n+1} が偶数のとき、 p_{n+1} は奇数 (p_{n+1} が偶数のとき、 a_{n+1} は奇数) となる。

b) a_{n+1} が奇数 (Γ_{n+1} の orientation parity が -1) のとき

この場合、 a_n が偶数で c が偶数、 a_n が奇数で c が奇数の 2 通りの場合が考えられる。前者のときは Γ_n に対する仮定より p_n が奇数であるから、

$$p_{n+1} = p_n + c - 1 = (\text{奇数}) + (\text{偶数}) - 1 = (\text{偶数})$$

となる。また、後者のときは Γ_n に対する仮定より p_n が偶数であるから、

$$p_{n+1} = p_n + c - 1 = (\text{偶数}) + (\text{奇数}) - 1 = (\text{偶数})$$

となる。つまり、 a_{n+1} が奇数のとき、 p_{n+1} は偶数 (p_{n+1} が奇数のとき、 a_{n+1} は偶数) となる。

すなわち、 Γ_{n+1} に対して、(4.3.50) は成立している。

したがって、一般の n に対して (4.3.50) は成立する。この簡単な例を図 21 に示す。(証明終)

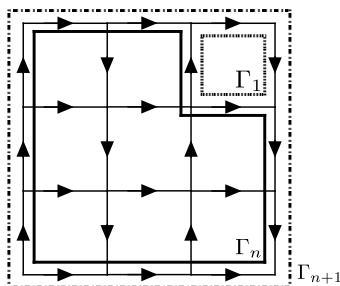


図 21 Γ_n ($n = 8$)、 Γ_1 の 2 つのボンドを消滅させて結合する簡単な例

〈定理 [A]〉より、transition cycle に囲まれた格子点数は偶数である必要があるから、〈定理 [B]〉より、どんな transition cycle においても時計回り方向の矢印の数は奇数 (orientation parity -1) であるといえる。よって、どんな transition cycle においても (4.3.46) を満たす。つまり、任意の transition cycle を形成する 2 つの順列において (4.3.46) が成立する。

したがって、(4.3.49) のように $s(n, m; n', m')$ を定義すれば、Pfaffian のすべての項で $\gamma_{\bar{p}}$ が同符号となる。ここで、基準となる dimer 配置として図 22 で描かれた順列、

$$c_0 = |1, 2|3, 4| \cdots |NM - 1, NM| \quad (4.3.51)$$

をとる。この順列に対しては、

$$\delta_{c_0} s(1, 2)s(3, 4) \cdots s(NM - 1, NM) = 1 \quad (4.3.52)$$

であるから、Pfaffian のすべての項で、

$$\gamma_{\bar{p}} = \delta_{\bar{p}} s(\bar{p}_1, \bar{p}_2)s(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_{NM}) = 1 \quad (4.3.53)$$

となることがわかる。よって、

$$\begin{aligned} \text{Pf}A &= \sum_{\bar{p}} z_1^{n_v} z_2^{n_h} \\ &= \sum_{n_v} \sum_{n_h} N_{vh} z_1^{n_v} z_2^{n_h} \\ &= Z_{\text{DS}}^{\text{Free}} \end{aligned} \quad (4.3.54)$$

となる。ただし、この行列 A の成分は $s(n, m; n', m')$ の定義が (4.3.49) のようになるから、

$$\begin{cases} a(n, m; n+1, m) = -a(n+1, m; n, m) = (-1)^{m-1} z_1 \\ a(n, m; n, m+1) = -a(n, m+1; n, m) = z_2 \\ a(n, m; n', m') = 0 \quad \text{最近接格子でない場合} \end{cases} \quad (4.3.55)$$

となる。また、行列 A は (4.2.2)、(4.2.3) の関係を満たす $NM \times NM$ の非対称行列である。

したがって、dimer 統計の自由端の場合の分配関数は、この行列 A を用いて、

$$Z_{\text{DS}}^{\text{Free}} = \text{Pf}A \quad (4.3.56)$$

となる。

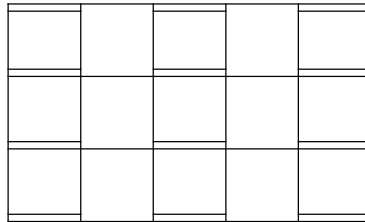


図 22 c_0 の順列

この節をまとめると、次のフローチャートで表される。

1. (4.3.5) の成分を持つ行列 A で $Z_{\text{DS}}^{\text{Free}}$ が、 $Z_{\text{DS}}^{\text{Free}} = \text{Pf}A$ と書けるには、(4.3.12) で定義される γ_p がすべての順列 p で同符号となる必要がある。
2. 順列を形成する制限を (4.2.4)、(4.2.5) による順列 p から、(4.2.4) と、”2a) double bond では左から右の順に格子点を数え上げる、2b) transition cycle では transition cycle を時計回りに回る方向に格子点を数え上げる” による順列 \bar{p} に変える。
3. 制限を変えても (4.3.23) が成立するため、順列 \bar{p} でも (4.3.27) のように順列 p と同様の形で Pfaffian は書ける。
4. (4.3.12) がすべての順列 p で同符号となるには、(4.3.29) で定義される $\gamma_{\bar{p}}$ がすべての順列 \bar{p} で同符号となる必要がある。つまり、すべての transition cycle で (4.3.46) が成立している必要がある。
5. 1つの elementary polygon に対して (4.3.46) が成立するためには、図 15、(4.3.49) のように $s(\bar{p}_k, \bar{p}_{k+1})$ を定義すればよい。
6. 図 15、(4.3.49) のとき、〈定理 [A]〉、〈定理 [B]〉によりすべての transition cycle で (4.3.46) が成立し、 $\gamma_{\bar{p}}$ がすべての順列 \bar{p} で同符号となる。
7. 基準として c_0 の配置をとると (4.3.53) より $\gamma_{\bar{p}}$ はすべての順列 \bar{p} で +1 となる。
8. (4.3.55) を成分とする行列 A で $Z_{\text{DS}}^{\text{Free}} = \text{Pf}A$ が成立する。

4.3.3 環状な境界条件の場合

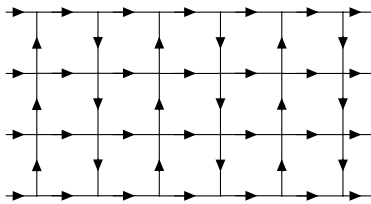
垂直方向または水平方向のどちらかが環状につながっている境界条件をとる場合を考える。ここでは、水平方向が環状となっている境界条件、

$$(n, M+1) = (n, 1) \quad (4.3.58)$$

を考える。また、垂直方向が環状となっている場合も同様に議論できる。ここで、境界条件が環状な場合の分配関数を $Z_{\text{DS}}^{\text{Cyclic}}$ とするとき、自由端の場合と同様に、

$$Z_{\text{DS}}^{\text{Cyclic}} = \text{Pf}A \quad (4.3.59)$$

と書きたい。これが成立するためには、すべての transition cycle に対して、ループする場合も含めて (4.3.46) が成立すればよい。まず、4.3.2 節よりすべての elementary polygon について時計回りの方向の矢印の数が奇数個 (orientation parity -1) である必要があるから、境界での elementary polygon も時計回りの方向の矢



$$a(n, M; n, 1) = -a(n, 1; n, M) = z_2 \quad (4.3.57)$$

図 23 環状の場合の境界条件 1

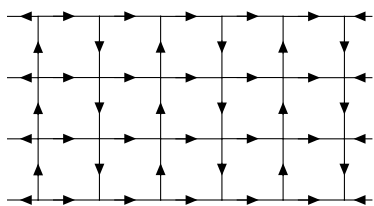


図 24 環状の場合の境界条件 2

$$a(n, M; n, 1) = -a(n, 1; n, M) = -z_2 \quad (4.3.60)$$

印の数が奇数個 (orientation parity -1) である必要がある。境界をまたがない transition cycle については自由端の場合と同じであるから (4.3.55) のようにとればよい。よって、図 23、図 24 の 2 通りの境界条件が考えられる。

つまり、境界をまたぐ transition cycle が (4.3.46) を満たせば分配関数は (4.3.59) と書ける。ここで、境界をまたぐ transition cycle は図 25、図 26 の 2 通りが考えられる。

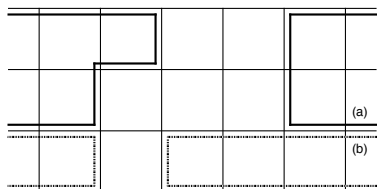


図 25 境界をまたぐ transition cycle 1 (境界をループしない場合)

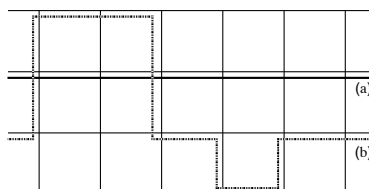


図 26 境界をまたぐ transition cycle 2 (境界をループする場合)

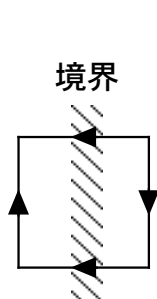


図 27 境界条件 2 の場合、境界を含む polygon に囲まれた格子点の数が偶数の最も簡単な polygon の例 (囲まれた格子点数 0) : 時計回りの方向の矢印の数は 3 つであり奇数個であるため、orientation parity は -1 である。

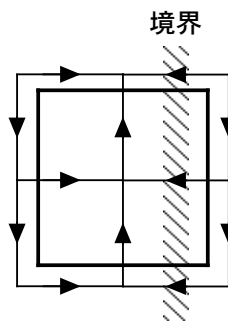


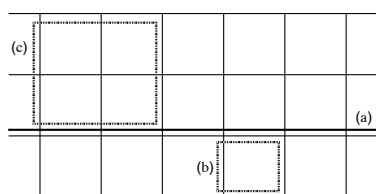
図 28 境界条件 2 の場合、境界を含む polygon に囲まれた格子点の数が奇数の最も簡単な polygon の例 (囲まれた格子点数 1) : 時計回りの方向の矢印の数は 4 つであり偶数個であるため、orientation parity は $+1$ である。

この2つの図の違いは、図 25 の transition cycle は自身で閉じているのに対し、図 26 の transition cycle は格子を二つに分けることにより形成されている。すなわち、図 26 は水平方向に1回ループすることにより transition cycle を形成している。また、どちらの場合も transition cycle に囲まれた格子点数はこれらが dimer を形成しなくてはならないので偶数である必要がある。図 25 のようなループしない polygon(transition cycle でなくてもよい) は、4.3.2 節の自由端の場合と同じように考えることができる。境界をまたぐ polygon に囲まれた格子点数が偶数個および奇数個の場合の orientation parity は境界条件 1 の場合は自由端のときと同じ polygon であり、境界条件 2 の場合は図 27、図 28 に示すように自由端のときと同じ orientation parity をもつため、境界をまたいで形成される polygon においても〈定理 [B]〉が成立している。よって、

〈定理 [C]〉：垂直方向または水平方向のどちらかが環状の場合、境界をまたぐループしない polygon は〈定理 [B]〉を満たす。

が成立する。よって、transition cycle に囲まれた格子点数は偶数個であることを考慮すると、すべてのループしない transition cycle の orientation parity は -1 であることがわかる。したがって、この場合とりうるループしない transition cycle は (4.3.46) を満たしていることがわかる。

次に、図 26 のようにループする transition cycle を考える。ここで、このような transition cycle を class2 の transition cycle と呼び、図 26(a) のような最短でループする transition cycle を class2 の elementary transition cycle と呼ぶ。これに対しループしない任意の polygon を class1 の polygon と呼ぶこととする。class1 の polygon は自由端の場合に形成される polygon および、図 25 のようにループせずに自身で閉じている polygon である。ただし、class1 の polygon は内部に奇数、偶数の格子点を持ってよいため必ずしも transition cycle ではない。このとき、図 29 のように、図 26(b) のような任意の class2 の transition cycle は、1 つの class2 の elementary transition cycle といくつかの class1 の polygon を結合させ、共有するボンドを消滅させることにより得ることができる。



(a) は class2 の elementary transition cycle、(b)、(c) は class1 の polygon であり、共有しているボンドを消滅させることで図 26(b) の class2 の transition cycle となる。

図 29 polygon の結合例

まず、class2 の elementary transition cycle の orientation parity が -1 となるためには、境界条件 2 (図 24) をとる必要がある。境界条件 1 では class2 の elementary transition cycle の orientation parity が $+1$ になってしまう。そのため、これ以降境界条件 2 で考えていく。ここで、任意の class2 の transition cycle を作る場合、class1 の polygon と class2 の elementary transition cycle が奇数個の共有ボンドを消滅させて結合する場合と偶数個の共有ボンドを消滅させて結合する場合で扱いが変わる。

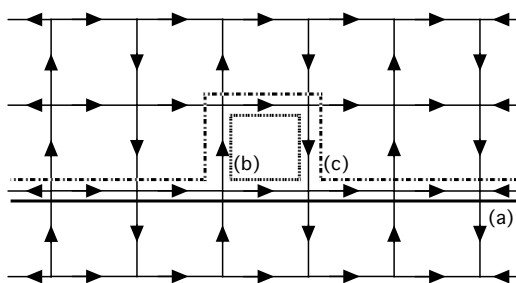
[1] 奇数個の共有ボンドを消滅させる場合

これは図 29 の (a) と (b) の結合に対応する。ここで、class2 の transition cycle は格子を 2 つに分け

て形成されるので、分けられた2つの格子はそれぞれ偶数個の格子点を持っている必要がある。これは分けられたそれぞれの格子に偶数個の格子点が存在しないと dimer が形成されないためである。また、共有ボンド上の格子点数が偶数であるため、結合する class1 の polygon が奇数個の格子点を囲んでいると、分けられた2つの格子は奇数個の格子点を持つてしまう。したがって、この場合結合できる class1 の polygon は内部に偶数個の格子点を持つもののみである。また、class2 の elementary transition cycle の上に class1 の polygon が結合する場合と下に class1 の polygon が結合する場合で扱いが異なる。

1a) class2 の elementary transition cycle の上に class1 の polygon が結合する場合

結合する class1 の polygon で class2 の transition cycle と共有しないボンドの時計回りの方向の矢印がそのまま新しく形成された class2 の transition cycle において時計回りの方向の矢印 (左から右へ向かう方向の矢印を時計回りの方向の矢印と定義する。) となる。また、class1 の polygon と class2 の transition cycle が共有するボンドは class1 の polygon で時計回り (反時計回り) の矢印の場合、class2 の transition cycle では反時計回り (時計回り) の矢印である。これより、共有している1つのボンドに対して、class1 の polygon または class2 の elementary transition cycle のどちらかのみで時計回りの方向の矢印の数を必ず1回多く数えている。そのため、class2 の elementary transition cycle の時計回り方向の矢印の数を a 、class1 の polygon の時計回りの方向の矢印の数を b 、class2 の elementary transition cycle と class1 の polygon が共有しているボンドの数を c とすると、新しく形成される class2 の transition cycle の時計回りの方向の矢印 d は $d = a + b - c$ となる。ここで、内部に偶数個の格子点を持つ class1 の polygon は時計回りの方向の矢印を奇数個持つため、 a 、 b 、 c はすべて奇数個であるから d も奇数個となる。すなわち、この場合新しく形成される class2 の transition cycle の時計回りの方向の矢印の数は奇数 (orientation parity -1) であり、(4.3.46) を満たす。図 30 はこの場合の簡単な1例である。図 30 では、境界をまたがない class1 の polygon を結合する場合を考えたが、境界をまたぐ class1 の polygon を結合する場合も同様の議論により確かめられる。



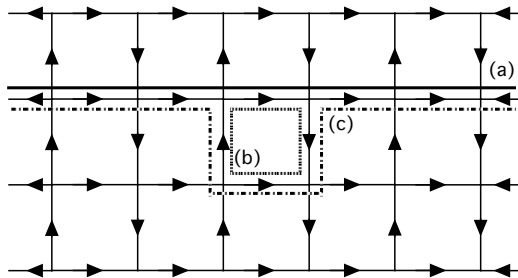
(a) が class2 の elementary transition cycle、(b) が class1 の polygon、(c) が (a)、(b) が結合することにより新しく形成される class2 の transition cycle である。この場合、 $a = 5$ 、 $b = 3$ 、 $c = 1$ であるから、 $d = 7$ であり、(c) の時計回りの方向の矢印の数は奇数となり orientation parity は -1 となる。

図 30 class2 の elementary transition cycle の上に内部に偶数個の格子点を持つ class1 の polygon が結合する場合の例

1b) class2 の elementary transition cycle の下に class1 の polygon が結合する場合

結合する class1 の polygon で class2 の elementary transition cycle と共有しないボンドの反時計回りの方向の矢印がそのまま新しく形成された class2 の transition cycle において時計回りの方向の矢印となる。そのため、(1a) において b を class1 の polygon の反時計回りの方向の矢印の数と

すれば、(1a)と同様の議論により新しく形成される class2 の transition cycle の時計回りの方向の矢印の数は奇数 (orientation parity -1) であり、(4.3.46) を満たす。図 31 はこの場合の簡単な 1 例である。図 31 では、境界をまたがない class1 の polygon を結合する場合を考えたが、境界をまたぐ class1 の polygon を結合する場合も同様の議論により確かめられる。



(a) が class2 の elementary transition cycle、(b) が class1 の polygon、(c) が (a)、(b) が結合することにより新しく形成される class2 の transition cycle である。この場合、 $a = 5$ 、 $b = 1$ 、 $c = 1$ であるから、 $d = 5$ であり、(c) の時計回りの方向の矢印の数は奇数となり orientation parity は -1 となる。

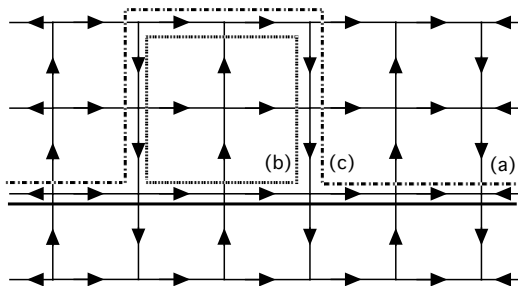
図 31 class2 の elementary transition cycle の下に内部に偶数個の格子点を持つ class1 の polygon が結合する場合の例

[2] 偶数個の共有ボンドを消滅させる場合

これは図 29 の (a) と (c) の結合に対応する。ここで、奇数個の共有ボンドを消滅させる場合と同様に、class2 の transition cycle は格子を 2 つに分けて形成されるので、分けられた 2 つの格子はそれぞれ偶数個の格子点を持っている必要がある。また、共有ボンド上の格子点は奇数であるため、結合する class1 の polygon が偶数個の格子点を囲んでいると、分けられた 2 つの格子は奇数個の格子点を持ってしまう。したがって、この場合結合できる class1 の polygon は内部に奇数個の格子点を持つもののみである。また、class2 の elementary transition cycle の上に class1 の polygon が結合する場合と下に class1 の polygon が結合する場合で扱いが異なる。

2a) class2 の elementary transition cycle の上に class1 の polygon が結合する場合

結合する class1 の polygon で class2 の elementary transition cycle と共有しないボンドの時計回りの方向の矢印がそのまま新しく形成された class2 の transition cycle において時計回りの方向の矢印となる。ここで、 a 、 b 、 c 、 d を (1a) と同じようにとると、内部に奇数個の格子点を持つ class1 の polygon は時計回りの方向の矢印を偶数個持つため、 a が奇数、 b 、 c が偶数個であるから d は



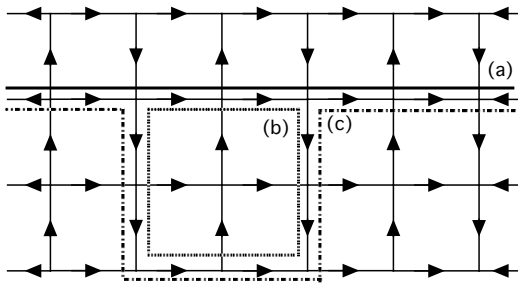
(a) が class2 の elementary transition cycle、(b) が class1 の polygon、(c) が (a)、(b) が結合することにより新しく形成される class2 の transition cycle である。この場合、 $a = 5$ 、 $b = 4$ 、 $c = 2$ であるから、 $d = 7$ であり、(c) の時計回りの方向の矢印の数は奇数となり orientation parity は -1 となる。

図 32 class2 の elementary transition cycle の上に内部に奇数個の格子点を持つ class1 の polygon が結合する場合の例

奇数個となる。すなわち、この場合新しく形成される class2 の transition cycle の時計回りの方向の矢印の数は奇数 (orientation parity -1) であり、(4.3.46) を満たす。図 32 はこの場合の簡単な 1 例である。図 32 では、境界をまたがない class1 の polygon を結合する場合を考えたが、境界をまたぐ class1 の polygon を結合する場合も同様の議論により確かめられる。

2b) class2 の elementary transition cycle の下に class1 の polygon が結合する場合

結合する class1 の polygon で class2 の elementary transition cycle と共有しないボンドの反時計回りの方向の矢印がそのまま新しく形成された class2 の transition cycle において時計回りの方向の矢印となる。ここで、 a 、 b 、 c 、 d を (1b) と同じようにとると、内部に奇数個の格子点を持つ class1 の polygon は時計回りの方向の矢印を偶数個持つため、 a が奇数、 b 、 c が偶数個であるから d は奇数個となる。すなわち、この場合新しく形成される class2 の transition cycle の時計回りの方向の矢印の数は奇数 (orientation parity -1) であり、(4.3.46) を満たす。図 33 はこの場合の簡単な 1 例である。図 33 では、境界をまたがない class1 の polygon を結合する場合を考えたが、境界をまたぐ class1 の polygon を結合する場合も同様の議論により確かめられる。



(a) が class2 の elementary transition cycle、(b) が class1 の polygon、(c) が (a)、(b) が結合することにより新しく形成される class2 の transition cycle である。この場合、 $a = 5$ 、 $b = 4$ 、 $c = 2$ であるから、 $d = 5$ であり、(c) の時計回りの方向の矢印の数は奇数となり orientation parity は -1 となる。

図 33 class2 の elementary transition cycle の下に内部に奇数個の格子点を持つ class1 の polygon が結合する場合の例

以上のことから境界条件を (4.3.60) とおけば、すべての transition cycle は (4.3.46) を満たすことがわかる。つまり、すべての transition graph を形成する順列 $\bar{p}^{(1)}$ 、 $\bar{p}^{(2)}$ において (4.3.30) が成立する。ここで、図 22 の基準となる順列 c_0 を考えると (4.3.53) が成立するため、環状の境界条件においてもすべての順列 \bar{p} で、

$$\gamma_{\bar{p}} = \delta_{\bar{p}} s(\bar{p}_1, \bar{p}_2) s(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_{NM}) = 1 \quad (4.3.61)$$

が成立することがわかる。したがって、境界条件を (4.3.60) とおけば、垂直方向または水平方向のどちらかが環状である場合の分配関数は、

$$Z_{DS}^{\text{Cyclic}} = \text{Pf}A \quad (4.3.62)$$

と書ける。

4.3.4 トーラス状な境界条件の場合

垂直方向および水平方向のどちらも環状につながっているトーラス状の境界条件、

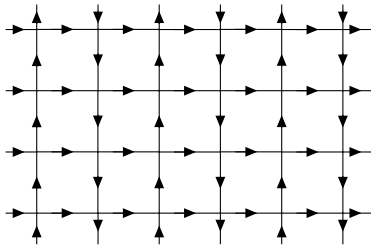
$$(N+1, m) = (1, m) \quad (4.3.63)$$

$$(n, M+1) = (n, 1) \quad (4.3.64)$$

を考える。ここで、すべての elementary polygon の時計回りの方向の矢印の数が奇数であるために、図 34 ~ 図 37 の4つの境界条件が考えられる。このとき、図 34、図 35、図 36、図 37 の境界条件による行列をそれぞれ A_1 、 A_2 、 A_3 、 A_4 とする。本節ではこの分配関数が、

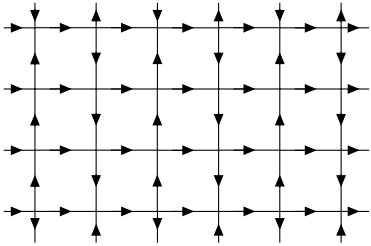
$$Z_{\text{DS}}^{\text{Toroidal}} = \frac{1}{2}(-\text{Pf}A_1 + \text{Pf}A_2 + \text{Pf}A_3 + \text{Pf}A_4) \quad (4.3.65)$$

と書けることを示す。



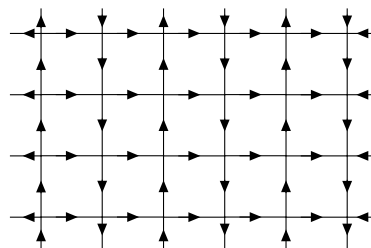
$$\begin{cases} a(N, m; 1, m) = -a(1, m; N, m) = (-1)^{m+1} z_1 \\ a(n, M; n, 1) = -a(n, 1; n, M) = z_2 \end{cases} \quad (4.3.66)$$

図 34 A_1 の境界条件



$$\begin{cases} a(N, m; 1, m) = -a(1, m; N, m) = -(-1)^{m+1} z_1 \\ a(n, M; n, 1) = -a(n, 1; n, M) = z_2 \end{cases} \quad (4.3.67)$$

図 35 A_2 の境界条件



$$\begin{cases} a(N, m; 1, m) = -a(1, m; N, m) = (-1)^{m+1} z_1 \\ a(n, M; n, 1) = -a(n, 1; n, M) = -z_2 \end{cases} \quad (4.3.68)$$

図 36 A_3 の境界条件

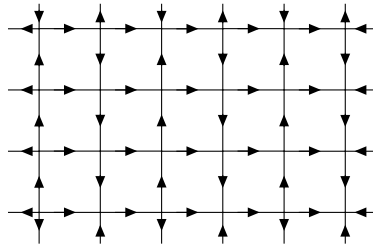


図 37 A_4 の境界条件

$$\begin{cases} a(N, m; 1, m) = -a(1, m; N, m) = -(-1)^{m+1} z_1 \\ a(n, M; n, 1) = -a(n, 1; n, M) = -z_2 \end{cases} \quad (4.3.69)$$

ここで、transition cycle として、ループしない場合 (図 38) とループする場合 (図 39) が考えられる。ただし、 v を垂直方向にループする回数、 h を水平方向にループする回数とする。また、ループする場合、トーラス状の境界条件では格子をわけることにより transition cycle を形成するわけではないので、どんな取り方でも transition cycle となる。

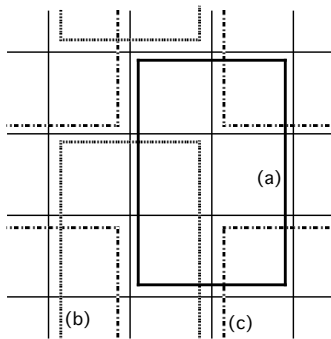


図 38 ループしない transition cycle の例 : $v = h = 0$

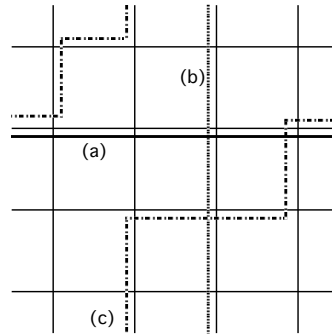


図 39 ループする transition cycle の例 :
(a) $v = 0, h = 1$ (b) $v = 1, h = 0$ (c)
 $v = 1, h = 1$

まず、 $v = h = 0$ の場合を考える。ループしない場合自由端の場合に導いた〈定理 [B]〉を拡張することができる。境界をまたがない polygon においては〈定理 [B]〉が成立している。また、垂直方向または水平方向のどちらかの境界のみ polygon がまたぐ場合は〈定理 [C]〉が成立している。つまり、今までの議論により transition cycle に囲まれた格子点数は偶数個である必要があるから、図 38 の (a)、(b) の transition cycle の orientation parity は -1 となる。よって、垂直方向と水平方向の両方の境界をまたぐ polygon について考えればよい。〈定理 [B]〉を導いた際用いた条件はすべての elementary polygon の orientation parity が -1 であることのみであるから、垂直方向、水平方向両方の境界をまたぐ polygon によって囲まれた格子点数が奇数個、偶数個のそれぞれの場合の最も簡単な polygon で〈定理 [B]〉が成立すれば、垂直方向および水平方向の両方の境界をまたぐ場合においても〈定理 [B]〉が成立する。実際に垂直方向および水平方向の両方の境界をまたぐ polygon によって囲まれた格子点数が奇数個、偶数個の場合の最も簡単な場合について orientation parity は図 40 ~ 図 47 に示すように〈定理 [B]〉を満たす。

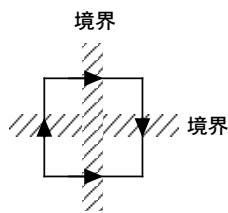


図 42 A_2 の境界条件のとき、垂直方向および水平方向の両方の境界をまたぐ polygon に囲まれた格子点の数が偶数の最も簡単な polygon の例 (囲まれた格子点数 0) : 時計回りの方向の矢印の数は 3 つであり奇数個 (orientation parity-1) である。

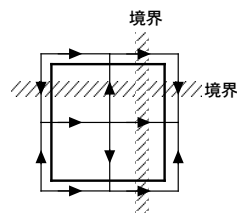


図 43 A_2 の境界条件のとき、垂直方向および水平方向の両方の境界をまたぐ polygon に囲まれた格子点の数が奇数の最も簡単な polygon の例 (囲まれた格子点数 1) : 時計回りの方向の矢印の数は 4 つであり偶数個 (orientation parity+1) である。

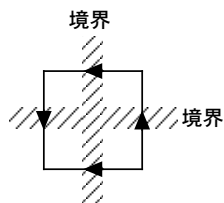


図 44 A_3 の境界条件のとき、垂直方向および水平方向の両方の境界をまたぐ polygon に囲まれた格子点の数が偶数の最も簡単な polygon の例 (囲まれた格子点数 0) : 時計回りの方向の矢印の数は 1 つであり奇数個 (orientation parity-1) である。

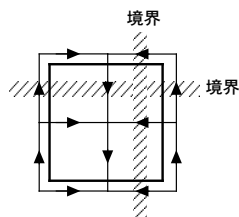


図 45 A_3 の境界条件のとき、垂直方向および水平方向の両方の境界をまたぐ polygon に囲まれた格子点の数が奇数の最も簡単な polygon の例 (囲まれた格子点数 1) : 時計回りの方向の矢印の数は 4 つであり偶数個 (orientation parity+1) である。

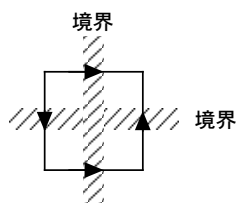


図 40 A_1 の境界条件のとき、垂直方向および水平方向の両方の境界をまたぐ polygon に囲まれた格子点の数が偶数の最も簡単な polygon の例 (囲まれた格子点数 0) : 時計回りの方向の矢印の数は 1 つであり奇数個 (orientation parity-1) である。

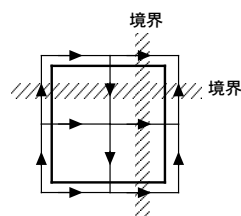


図 41 A_1 の境界条件のとき、垂直方向および水平方向の両方の境界をまたぐ polygon に囲まれた格子点の数が奇数の最も簡単な polygon の例 (囲まれた格子点数 1) : 時計回りの方向の矢印の数は 4 つであり偶数個 (orientation parity+1) である。

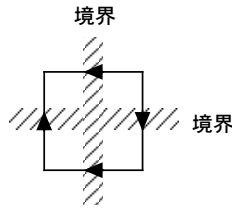


図 46 A_4 の境界条件のとき、垂直方向および水平方向の両方の境界をまたぐ polygon に囲まれた格子点の数が偶数の最も簡単な polygon の例 (囲まれた格子点数 0) : 時計回りの方向の矢印の数は 3 つであり奇数個 (orientation parity -1) である。

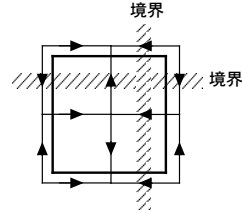


図 47 A_4 の境界条件のとき、垂直方向および水平方向の両方の境界をまたぐ polygon に囲まれた格子点の数が奇数の最も簡単な polygon の例 (囲まれた格子点数 1) : 時計回りの方向の矢印の数は 4 つであり偶数個 (orientation parity $+1$) である。

すなわち、 $v = h = 0$ の場合の transition cycle が囲む格子点数は偶数である必要があるので orientation parity は -1 である。実際、図 38 の 3 つの transition cycle はどの境界条件でも orientation parity は -1 である。ここで、この $v = h = 0$ の場合の transition cycle を class 1 の transition cycle と呼ぶこととする。

次にループする transition cycle を考える。まず、簡単な transition cycle でそれぞれの境界条件に対する orientation parity を求めると図 48 ~ 図 51 のようになる。ただし、(a) は $v = 1, h = 0$ 、(b) は $v = 0, h = 1$ 、(c)、(d) は $v = 1, h = 1$ の transition cycle である。

これより、ループする 4 つの transition cycle で orientation parity がすべて同じものは存在していない。したがって、各々の境界条件を単独で考えることによって、分配関数を 1 つの Pfaffian で書くことはできない。そのため、すべての順列 \bar{p} に対して、各図形に対応する項の線形結合による $\gamma_{\bar{p}}$ が同じ符号になるようにすることを考える。

まず、transition cycle がループできる回数について考えることとする。垂直方向に v 回、水平方向に h 回ループする transition cycle を (v, h) と表す。ここで、ループする transition cycle をわかりやすく表すため、図 52 のような図を導入する。図 52 の 1 つ 1 つの正方形はすべて同一の格子を表している。そのため、それぞれの正方形の同じ位置の点は格子で同一の点となる。図 52 の黒点はすべて正方形の中心の点を表していて、

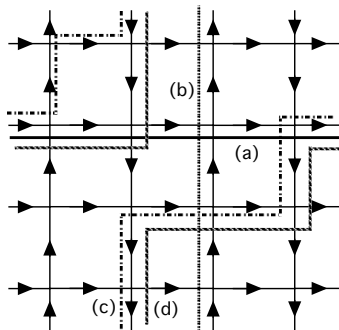


図 48 A_1 の境界条件のときループする transition cycle の例 : それぞれの orientation parity は (a) $+1$ (b) $+1$ (c) -1 (d) $+1$ である。

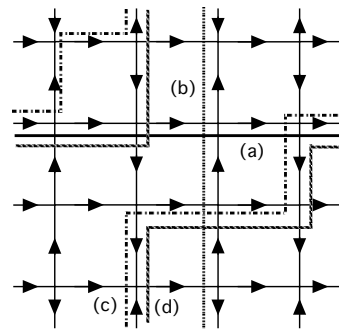


図 49 A_2 の境界条件のときループする transition cycle の例 : それぞれの orientation parity は (a) $+1$ (b) -1 (c) $+1$ (d) -1 である。

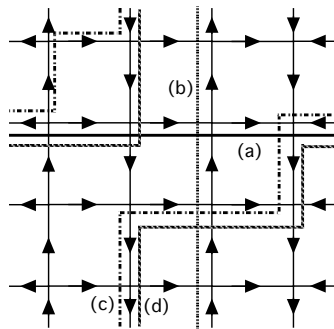


図 50 A_3 の境界条件のときループする transition cycle の例 : それぞれの orientation parity は (a)-1 (b)+1 (c)+1 (d)-1 である。

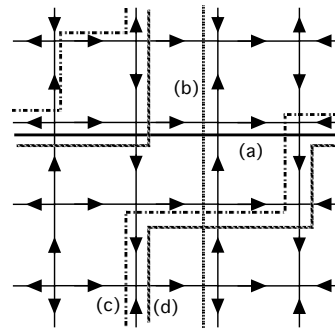


図 51 A_4 の境界条件のときループする transition cycle の例 : それぞれの orientation parity は (a)-1 (b)-1 (c)-1 (d)+1 である。

これらの黒点はすべて格子の中心の点である。このとき、水平方向の隣の正方形に移ると水平方向に境界を 1 回ループしたことになり、垂直方向の隣の正方形に移ると垂直方向に境界を 1 回ループしたこととなる。このため、 $(0, 0)$ を表す正方形のある点から (v, h) を表す正方形の同じ点までを結ぶ曲線は、垂直方向に v 回、水平方向に h 回ループする transition cycle となる。この例は図 52 に表した曲線であり、それぞれの曲線は図 53、図 54 のような transition cycle を表している。ただし、実際 transition cycle は格子をつなぐボンドにより形成されるため滑らかではないが簡単のため滑らかな曲線で描いている。

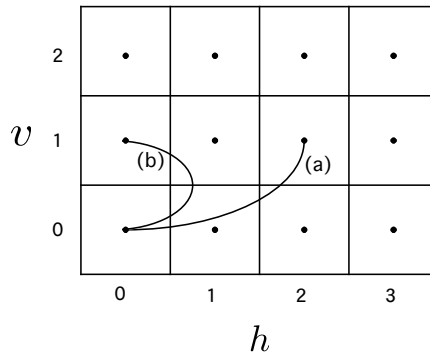


図 52 (a) $v = 1, h = 2$ (b) $v = 1, h = 0$ の曲線

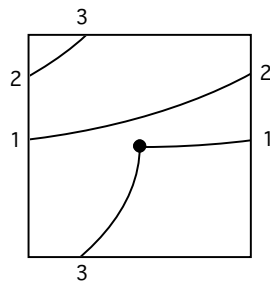
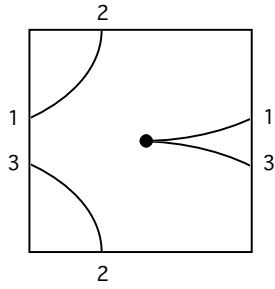


図 53 図 52 の (a) の transition cycle

中心の黒点 (スタート地点) から右向き (番号 1 の方向) にスタートし、自分自身と交わることなく番号順に境界をループして黒点にもどる transition cycle : 番号 1、2 の点で水平方向の境界をまたぎ、番号 3 の点で垂直方向の境界をまたぎ、水平方向に 2 回、垂直方向に 1 回ループしている。すなわちこれは、 $v = 1, h = 2$ の transition cycle になっている。



中心の黒点からスタートし、自分自身と交わることなく番号順に境界をループして黒点にもどる transition cycle : 番号 1 の点で境界をまたぎ、番号 3 の点で戻っているためループしていない。また、番号 2 の点で境界をまたぎ、垂直方向に 1 回ループしている。つまり、 $v = 1$ 、 $h = 0$ の transition cycle になっている。

図 54 図 52 の (b) の transition cycle

ただし、曲線を描く際注意することが 2 つある。それは、

1. それぞれの正方形で同じ点を通らないようにすること。
2. もとの $(0, 0)$ の polygon には戻らない。

である。1 はもし同じ点を通ってしまうと transition cycle は図 56 のように交差してしまうためである。2 はもとの $(0, 0)$ の polygon に戻ると transition cycle は図 57 のようになり、これは図 38(c) と同様のループしない transition cycle となるから、すでに考えているのでここで考える必要はない。

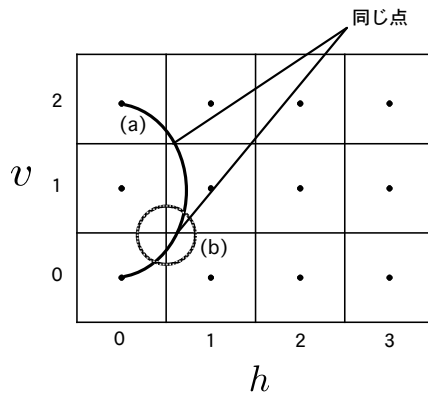
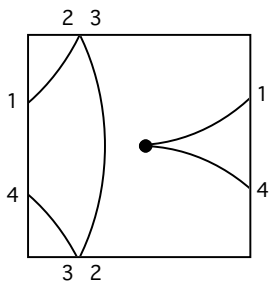
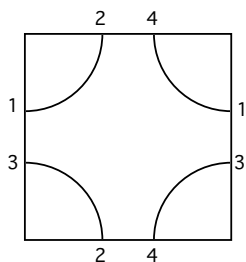


図 55 (a) $v = 2$ 、 $h = 0$ (b) $v = h = 0$ の曲線



中心の黒点からスタートし、番号順に境界をループして黒点にもどる曲線 : ただし、番号 2、3 の点でこの曲線は交差してしまっている。したがって、図 55 の (a) の曲線は transition cycle となっていない。

図 56 図 55 の (a) の transition cycle



番号1からスタートし、番号順に境界をまたぎ番号1にもどる曲線：交わることはないが、水平方向では番号1で境界をまたぎ、番号3で戻っているためループしていない。また、垂直方向でも番号2で境界をまたぎ、番号4で戻っているためループしていない。

図 57 図 55 の (b) の transition cycle

そこで、以下ではまず、簡単のため $(0,0)$ の正方形のある点から (v,h) の正方形の同じ点までを最短で結ぶ曲線、すなわち図 58 のような直線を考える。この図 58 の (c) は明らかに同じ点 (黒点) を途中で通ってしまっているため、図 61 にもあるようにこの元の1つの格子に戻して考えると transition cycle は交わってしまっている。

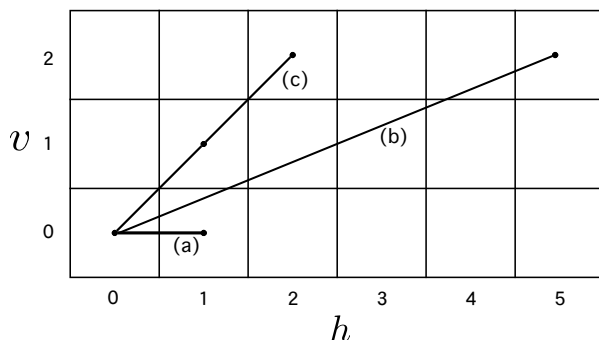
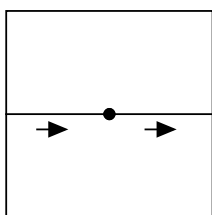
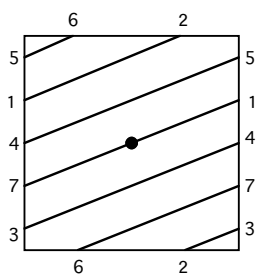


図 58 (a) $v = 0, h = 1$ (b) $v = 2, h = 5$ (c) $v = h = 2$ の直線



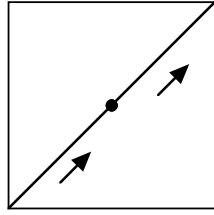
中心の黒点から右向きにスタートし、水平方向の境界をループして黒点に戻る transition cycle：交わることはないため、 $v = 0, h = 1$ の transition cycle になっている。

図 59 図 58 の (a) の transition cycle



中心の黒点からスタートし、番号順に境界をループして黒点に戻る transition cycle：交わることはなく、番号1、3、4、5、7の点で水平方向に境界をループし、番号2、6の点で垂直方向に境界をループする。すなわち、 $v = 2, h = 5$ の transition cycle になっている。

図 60 図 58 の (b) の transition cycle

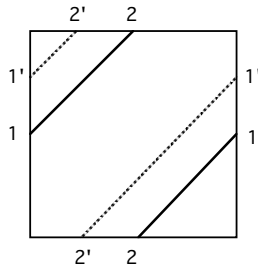


中心の黒点から右上向きにスタートし、水平方向および垂直方向の境界をループして黒点に戻り、もう一度同じ直線を回るもの：同じ transition cycle を2周回ため、 $v = h = 2$ の transition cycle は交わってしまっている。

図 61 図 58 の (c) の transition cycle

このように、 $v = h = 2$ の transition cycle は存在しないことがわかる。一般的に、 v, h が共通の約数 d を持ってしまつと、図 58 のような直線では $(v/d, h/d)$ の正方形において必ずスタート地点に戻ってしまい、 (v, h) の transition cycle は交わってしまう。また、図 55 のような曲線でも (v, h) が共通の約数 d を持つと transition cycle は必ず交わってしまう。したがって、 v, h が共通の約数を持つ transition cycle は存在しない。特に、 v, h がともに偶数である transition cycle は存在しない。

次に、図 58 の (a)、(b)、(c) のように傾きの異なる直線に対応する transition cycle はそれぞれ交わってしまうため1つの transition graph で混在することはできない。すなわち一般的に、 (v, h) の違う transition cycle は必ず交わってしまうため transition graph 中で混在することはできない。ただし、1つの transition graph 中で (v, h) の同じ transition cycle は任意の数存在できる。例として $v = h = 1$ の場合を表したのが図 62 である。したがって、1つの transition graph は (v, h) が同じ transition cycle のいくつかと、 $(0, 0)$ の transition cycle のいくつか、および double bond によって構成される。



実線の transition cycle は水平方向に番号 1 でループし、垂直方向に番号 2 でループする。破線の transition cycle は水平方向に番号 1' でループし、垂直方向に番号 2' でループする。このように (v, h) が同じであれば transition cycle は共存できる。

図 62 $v = h = 1$ の場合

ループの数が (v, h) の transition cycle の orientation parity について考える。ここで、 c_0 transition graph を導入する。今までの transition graph は任意の 2 つの順列により形成されていた。そこで、2 つの順列のうち 1 つの順列を c_0 に固定し形成される transition graph を c_0 transition graph と呼ぶ。ただし、 c_0 は図 22 のような順列である。このとき形成される transition cycle を c_0 transition cycle と呼ぶ。例として $v = h = 0$ の c_0 transition cycle を、図 63 に表しておく。これより、 c_0 transition graph はいくつかの c_0 transition cycle といくつかの double bond によって構成される。ここで、orientation parity が +1 の transition cycle では、

$$\prod_{k=1}^n s(\bar{p}_k^{(1)}, \bar{p}_{k+1}^{(1)}) = +1 \quad (4.3.70)$$

となっている。このとき c_0 は (4.3.53) を満たすため、 c_0 transition graph が t 個の c_0 transition cycle を含

んでいて、そのうち u 個の orientation parity が $+1$ の c_0 transition cycle が存在する場合、任意の順列 \bar{p} に対して、

$$\begin{aligned} \gamma_{\bar{p}} &= \delta_{\bar{p}} s(\bar{p}_1, \bar{p}_2) s(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_N) = (-1)^t \delta_{c_0} (-1)^{t-u} s(1, 2) s(3, 4) \cdots s(NM-1, NM) \\ &= (-1)^u \delta_{c_0} s(1, 2) s(3, 4) \cdots s(NM-1, NM) = (-1)^u \end{aligned} \quad (4.3.71)$$

となる。以下では、 c_0 transition cycle の orientation parity について考えていく。

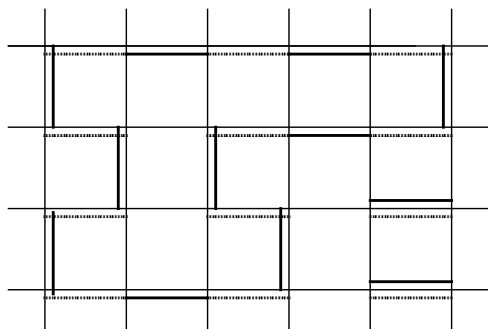
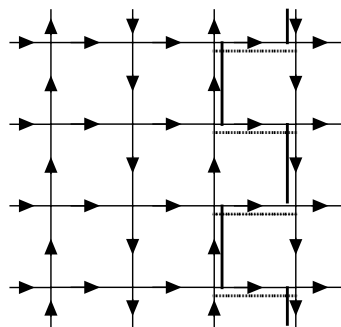


図 63 c_0 transition cycle の例：実線が任意の順列を表し、破線が c_0 を表す。

$v = h = 0$ の c_0 transition cycle が囲む格子点の数は偶数である必要があり、今まで考えてきた transition cycle と同様に orientation parity は -1 となることがわかる。したがって以下では、ループする場合 ($v \neq 0$ または $h \neq 0$ または $v \neq h \neq 0$) を考える。ここで、 c_0 transition cycle の基準となる elementary c_0 transition cycle を導入する。これは、任意の (v, h) における最短の c_0 transition cycle であるとする。つまり、実線の任意の順列として、左右方向には右方向のみ ($m \rightarrow m+1$)、上下方向には上方向のみ ($n \rightarrow n+1$) に dimer が形成されるもの考えることとする。 $(v, h) = (1, 0)$ 、 $(v, h) = (0, 1)$ 、 $(v, h) = (1, 1)$ の elementary c_0 transition cycle の例を図 64~図 66 に示す。ただし、elementary c_0 transition cycle は 1 通りに決まるとは限らない。



$(v, h) = (1, 0)$ の例： A_1 の境界条件の場合の elementary c_0 transition cycle。他の境界条件でも境界の矢印の方向が変わるだけである。この elementary c_0 transition cycle のそれぞれの境界条件における orientation parity は $A_1 : +1$ 、 $A_2 : -1$ 、 $A_3 : +1$ 、 $A_4 : -1$ となる。

図 64 A_1 の境界条件の場合の $(v, h) = (1, 0)$ の elementary c_0 transition cycle

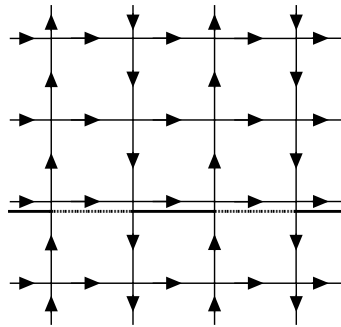


図 65 A_1 の境界条件の場合の $(v, h) = (0, 1)$ の elementary c_0 transition cycle

$(v, h) = (0, 1)$ の例: A_1 の境界条件の場合の elementary c_0 transition cycle。他の境界条件でも境界の矢印の方向が変わるだけである。この elementary c_0 transition cycle のそれぞれの境界条件における orientation parity は $A_1 : +1$ 、 $A_2 : +1$ 、 $A_3 : -1$ 、 $A_4 : -1$ となる。

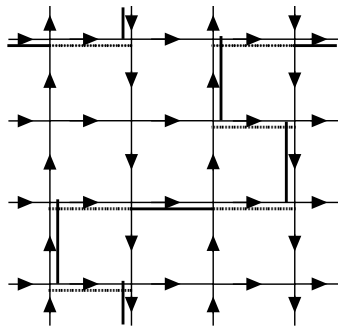


図 66 A_1 の境界条件の場合の $(v, h) = (1, 1)$ の elementary c_0 transition cycle

$(v, h) = (1, 1)$ の例: A_1 の境界条件の場合の elementary c_0 transition cycle。他の境界条件でも境界の矢印の方向が変わるだけである。この elementary c_0 transition cycle のそれぞれの境界条件における orientation parity は $A_1 : +1$ 、 $A_2 : -1$ 、 $A_3 : -1$ 、 $A_4 : +1$ となる。

このようにして $(v, h) = (1, 0), (0, 1), (1, 1)$ の場合それぞれの境界条件による elementary c_0 transition cycle の orientation parity が求まった。次に、一般の (v, h) の elementary c_0 transition cycle に対する orientation parity を求める。ここで、境界を除いた実線のボンドに注目する。境界を除いた実線のボンドには図 67 のように破線のボンドが必ずつながる。これは図 64 ~ 図 66 で実際に成立している。つまり、この (a)、(b)、(c) のボンドの組で境界以外の elementary c_0 transition cycle は書くことができる。

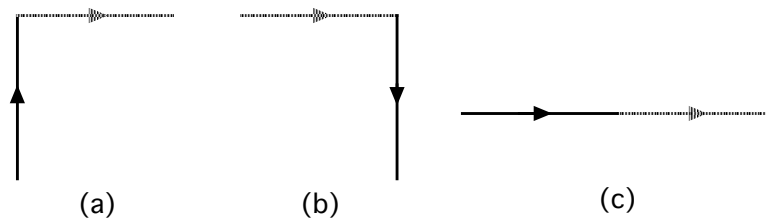


図 67 境界を除いた実線のボンドと破線ボンドのつながり方

この (a)、(b)、(c) のボンドに対して実線のボンドと破線ボンドは同じ向きを向いている。つまり、この対による orientation parity への寄与は $+1$ である。このように、elementary c_0 transition cycle は実線と破線

の対を作っていくと、境界での対以外の対はすべて orientation parity への寄与は +1 となる。この対を作る例として $v = h = 1$ の場合を示したのが図 68 である。

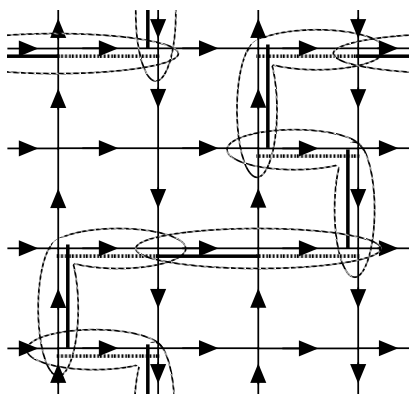


図 68 $v = h = 1$ の elementary c_0 transition cycle の対の形成

つまり、境界での対の性質を調べることで elementary c_0 transition cycle の orientation parity は求まる。このとき、水平方向の境界の実線バンドと破線バンドのつながり方は、境界条件によって図 69、図 70 となる。

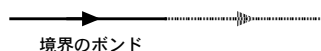


図 69 A_1, A_2 の境界条件における水平方向の境界をまたぐ実線バンドと破線バンドの対

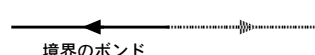


図 70 A_3, A_4 の境界条件における水平方向の境界をまたぐ実線バンドと破線バンドの対

A_1, A_2 の境界条件の場合実線バンドと破線バンドは同じ方向を向いているので、この対による orientation parity への寄与は +1 である。また、 A_3, A_4 の境界条件の場合実線バンドと破線バンドは逆の方向を向いているので、この対による orientation parity への寄与は -1 である。水平方向にループする回数が h 回のときは、水平方向の実線バンドと破線バンドの対が h 個あるため、orientation parity への寄与は A_1, A_2 の境界条件のとき +1、 A_3, A_4 の境界条件のとき $(-1)^h$ となる。

次に、垂直方向の境界の実線バンドと破線バンドのつながり方は、境界条件によって図 71、図 72 となる。



図 71 A_1, A_3 の境界条件における垂直方向の境界をまたぐ実線バンドと破線バンドの対



図 72 A_2, A_4 の境界条件における垂直方向の境界をまたぐ実線バンドと破線バンドの対

A_1 、 A_3 の境界条件の場合実線ボンと破線ボンドは同じ方向を向いているので、この対による orientation parity への寄与は +1 である。また、 A_2 、 A_4 の境界条件の場合実線ボンと破線ボンドは逆の方向を向いているので、この対による orientation parity への寄与は -1 である。垂直方向にループする回数が v 回のときは、垂直方向の実線ボンと破線ボンドの対が v 個あるため、orientation parity への寄与は A_1 、 A_3 の境界条件のとき +1、 A_2 、 A_4 の境界条件のとき $(-1)^v$ となる。

これらにより、それぞれの境界条件において elementary c_0 transition cycle の orientation parity は、

$$\begin{aligned} A_1 &: 1 \times 1 \times 1 = 1 \\ A_2 &: 1 \times 1 \times (-1)^v = (-1)^v \\ A_3 &: 1 \times (-1)^h \times 1 = (-1)^h \\ A_4 &: 1 \times (-1)^h \times (-1)^v = (-1)^{v+h} \end{aligned}$$

となる。これらをまとめると表 1 のようになる。

表 1 elementary c_0 transition cycle の orientation parity

(v, h)	A_1	A_2	A_3	A_4
$(0, 0)$	-1	-1	-1	-1
(奇数, 偶数)	+1	-1	+1	-1
(偶数, 奇数)	+1	+1	-1	-1
(奇数, 奇数)	+1	-1	-1	+1

次に、任意の (v, h) の c_0 transition cycle の orientation parity について考える。任意の (v, h) の c_0 transition cycle は (v, h) の elementary c_0 transition cycle といくつかの $(0, 0)$ の polygon を結合し、共有するボンドを消滅させることにより形成することができる。これより、 (v, h) の elementary c_0 transition cycle に 1 つの $(0, 0)$ の polygon を結合したとき形成される (v, h) の c_0 transition cycle の orientation parity について考える。

まず、結合する $(0, 0)$ の polygon が囲むことのできる格子点数について考える。elementary c_0 transition cycle は c_0 bond (c_0 に属するボンド) と non- c_0 bond (c_0 に属していないボンド) が交互につながるにより形成されている。つまり、 $(0, 0)$ の polygon と (v, h) の elementary c_0 transition cycle が共有して消滅される部分のボンドも同じように c_0 bond と non- c_0 bond が交互につながっているものである。したがって、消滅される部分の格子点はすべて c_0 bond で対を作っている。よって、結合する $(0, 0)$ の polygon が囲んでいる格子点はすべて c_0 bond で対を作っている必要があるので、 $(0, 0)$ の polygon が囲むことのできる格子点数は偶数個である必要がある。これより、結合できる $(0, 0)$ の polygon の orientation parity は〈定理 [B]〉より -1 (時計回り方向の矢印の数は奇数個) であることがわかる。図 73(b) は内部に 1 つの c_0 bond を含んでいる $(0, 0)$ polygon である。

次に、 $(0, 0)$ の polygon と (v, h) の c_0 elementary transition cycle が共有して消滅されるボンドの数について考える。実際、 $(0, 0)$ の polygon と (v, h) の elementary c_0 transition cycle が結合する際図 73、図 74 のように結合された後の elementary c_0 transition cycle の部分は、 c_0 bond で終わり、 c_0 bond で始まっていることがわかる。もし、結合された後の elementary c_0 transition cycle の部分で、non- c_0 bond で終わった

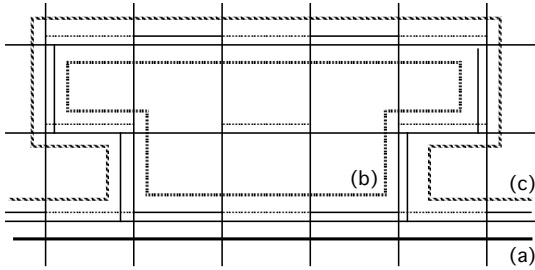


図 73 (0, 1) の elementary c_0 transition cycle と内部に c_0 bond を 1 つ含んでいる (0, 0) polygon の結合

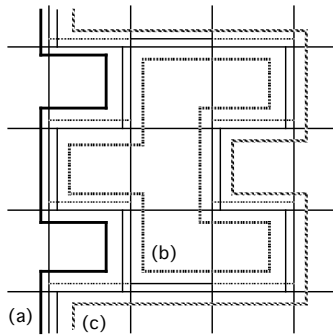


図 74 (1, 0) の elementary c_0 transition cycle と内部に c_0 bond を 1 つも含んでいない (0, 0) polygon の結合

(a) は (0, 1) の elementary c_0 transition cycle を、(b) は内部に c_0 bond を 1 つ含んでいる (0, 0) polygon を、(c) は (a) と (b) が結合された後の (0, 1) の c_0 transition cycle を表す。どの境界条件においても (c) の orientation parity は、(a) の orientation parity と同じである。(c) は c_0 bond と non- c_0 が交互につながるように形成されている。ただし、ボンドが二重になっているところに dimer が形成されているとし、破線が c_0 bond を実線が non- c_0 bond を表している。

(a) は (1, 0) の elementary c_0 transition cycle を、(b) は内部に c_0 bond を 1 つも含んでいない (0, 0) polygon を、(c) は (a) と (b) が結合された後の (1, 0) の c_0 transition cycle を表す。どの境界条件においても (c) の orientation parity は、(a) の orientation parity と同じである。(c) は c_0 bond と non- c_0 が交互につながるように形成されている。ただし、ボンドが二重になっているところに dimer が形成されているとし、破線が c_0 bond を実線が non- c_0 bond を表している。

り始まっていたりすると c_0 bond と non- c_0 bond が交互につながった transition cycle は形成されない。したがって、(0, 0) の polygon と (v, h) の elementary c_0 transition cycle が共有して消滅されるボンドの数は必ず奇数個である必要がある。

以上のことをまとめると、(0, 0) の polygon と (v, h) の elementary c_0 transition cycle の結合により (v, h) の c_0 transition cycle が形成される際、

1. 結合できる (0, 0) の polygon の orientation parity は -1 である。
2. 消滅するボンドの数は奇数個である。

となっている必要がある。ここで、 (v, h) の elementary c_0 transition cycle の時計回り方向の矢印の数を a (a が偶数なら orientation parity が $+1$ 、 a が奇数なら orientation parity が -1) とする。また、(0, 0) の polygon の時計回り方向の矢印の数を b (ここでは常に奇数である)、消滅するボンドの数を c (ここでは常に奇数である) とする。このとき、形成される (v, h) の c_0 transition cycle の時計回り方向の矢印 d は〈定理 [B]〉を導いた際の議論より、

$$d = a + b - c \tag{4.3.72}$$

となる。つまり、 a が奇数であれば、

$$b = a + b - c = (\text{奇数}) + (\text{奇数}) - (\text{奇数}) = (\text{奇数}) \tag{4.3.73}$$

となる。また、 a が偶数であれば、

$$b = a + b - c = (\text{偶数}) + (\text{奇数}) - (\text{奇数}) = (\text{偶数}) \quad (4.3.74)$$

となる。これより、 (v, h) の elementary c_0 transition cycle の orientation parity が $-1(+1)$ のとき $(0, 0)$ の polygon を結合することにより形成される (v, h) の c_0 transition cycle の orientation parity は $-1(+1)$ となり変わらない。一般的に、 (v, h) の c_0 transition cycle と $(0, 0)$ の polygon の結合でも同様のことがいえる。つまり、任意の (v, h) の c_0 transition cycle と $(0, 0)$ の polygon を結合しても新しく形成された (v, h) の c_0 transition cycle の orientation parity は結合前の (v, h) の c_0 transition cycle の orientation parity と変わらない。よって、elementary c_0 transition cycle に何個 $(0, 0)$ の polygon を結合しても orientation parity は変わらない。したがって、

〈定理 [D]〉 : 任意の (v, h) の c_0 transition cycle は (v, h) が同じ elementary c_0 transition cycle と orientation parity は同じである。

が成立する。 c_0 transition graph はいくつかの (v, h) が同じ c_0 transition cycle と、いくつかの $(0, 0)$ の c_0 transition cycle および、double bond により構成される。また、 $(0, 0)$ の c_0 transition cycle の orientation parity は常に -1 であるので、orientation parity が $+1$ となる可能性があるのは (v, h) の c_0 transition cycle である。したがって、 (v, h) が同じ c_0 transition cycle が偶数個ある場合 (4.3.71) の値は常に $+1$ となる。これより、 c_0 transition graph を構成する任意の順列 \bar{p} に対する (4.3.71) の値は表 2 となる。また、 (v, h) が同じ c_0 transition cycle が奇数個ある場合 (4.3.71) の値は c_0 transition cycle の orientation parity が $-1(+1)$ のとき $+1(-1)$ となるから c_0 transition graph を構成する任意の順列 \bar{p} に対する (4.3.71) の値は表 3 となる。

表 2 (v, h) が同じ c_0 transition cycle が偶数個ある場合の c_0 transition graph を構成する任意の順列 \bar{p} による $\gamma_{\bar{p}}$ の値

(v, h)	A_1	A_2	A_3	A_4
$(0, 0)$	+1	+1	+1	+1
(奇数, 偶数)	+1	+1	+1	+1
(偶数, 奇数)	+1	+1	+1	+1
(奇数, 奇数)	+1	+1	+1	+1

表 3 (v, h) が同じ c_0 transition cycle が奇数個ある場合の c_0 transition graph を構成する任意の順列 \bar{p} による $\gamma_{\bar{p}}$ の値

(v, h)	A_1	A_2	A_3	A_4
$(0, 0)$	+1	+1	+1	+1
(奇数, 偶数)	-1	+1	-1	+1
(偶数, 奇数)	-1	-1	+1	+1
(奇数, 奇数)	-1	+1	+1	-1

よって、 $\delta_{\bar{p}}s(\bar{p}_1, \bar{p}_2)s(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_{NM})|_{A_i}$ が A_i の境界条件の場合の $\gamma_{\bar{p}}$ の値を表すこととすると、表 2、表 3 のすべての場合において、

$$\frac{1}{2} \left(-\delta_{\bar{p}}s(\bar{p}_1, \bar{p}_2)s(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_{NM})|_{A_1} + \delta_{\bar{p}}s(\bar{p}_1, \bar{p}_2)s(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_{NM})|_{A_2} + \delta_{\bar{p}}s(\bar{p}_1, \bar{p}_2)s(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_{NM})|_{A_3} + \delta_{\bar{p}}s(\bar{p}_1, \bar{p}_2)s(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_{NM})|_{A_4} \right) = 1 \quad (4.3.75)$$

が成立している。これより、Pfaffian を、

$$\frac{1}{2} (-\text{Pf}A_1 + \text{Pf}A_2 + \text{Pf}A_3 + \text{Pf}A_4) \quad (4.3.76)$$

と線形結合すれば、

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} (-\text{Pf}A_1 + \text{Pf}A_2 + \text{Pf}A_3 + \text{Pf}A_4) &= \sum_{\bar{p}} \frac{1}{2} \left(-\delta_{\bar{p}}s(\bar{p}_1, \bar{p}_2)s(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_{NM})|_{A_1} \right. \\ &\quad + \delta_{\bar{p}}s(\bar{p}_1, \bar{p}_2)s(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_{NM})|_{A_2} \\ &\quad + \delta_{\bar{p}}s(\bar{p}_1, \bar{p}_2)s(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_{NM})|_{A_3} \\ &\quad \left. + \delta_{\bar{p}}s(\bar{p}_1, \bar{p}_2)s(\bar{p}_3, \bar{p}_4) \cdots s(\bar{p}_{NM-1}, \bar{p}_{NM})|_{A_4} \right) z_1^{n_v} z_2^{n_h} \\ &= \sum_{\bar{p}} z_1^{n_v} z_2^{n_h} \\ &= \sum_{n_v} \sum_{n_h} N_{vh} z_1^{n_v} z_2^{n_h} \\ &= Z_{\text{DS}}^{\text{Toroidal}} \end{aligned} \quad (4.3.77)$$

となる。したがって、dimer 統計のトーラス状の境界の場合の分配関数は、

$$Z_{\text{DS}}^{\text{Toroidal}} = \frac{1}{2} (-\text{Pf}A_1 + \text{Pf}A_2 + \text{Pf}A_3 + \text{Pf}A_4) \quad (4.3.78)$$

となることがわかる。

4.4 Ising モデルの dimer 統計

4.4.1 dimer 統計と Ising モデルとの対応

Ising モデルを dimer 統計と対応させるために、Ising モデルの1つの格子点を図 75 のように6つの格子点 (6 サイトクラスターと呼ぶ) に拡張する。トーラス状の境界条件の格子の全体図は図 76 のようになる。ただし、6 サイトクラスターを形成する7本のボンドのボルツマン因子を1とし、垂直方向に6 サイトクラスター間をつなぐボンドのボルツマン因子を z_1 、水平方向に6 サイトクラスター間をつなぐボンドのボルツマン因子を z_2 とする。

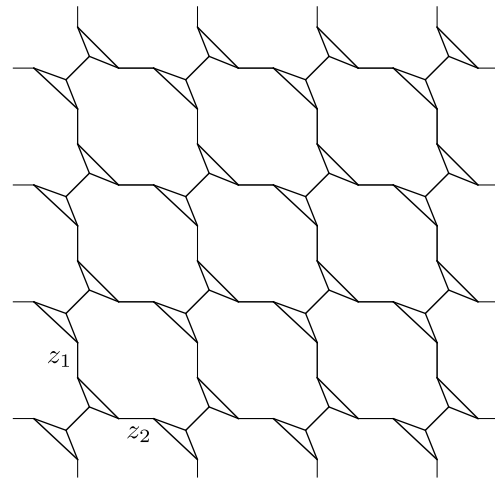
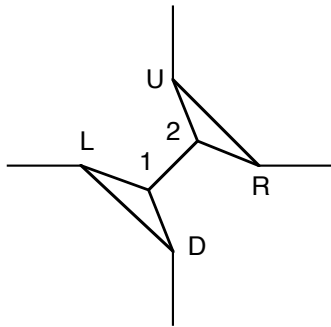


図 75 Ising モデルの1つの格子点に対応する図

図 76 トーラス状の境界条件の格子の全体図

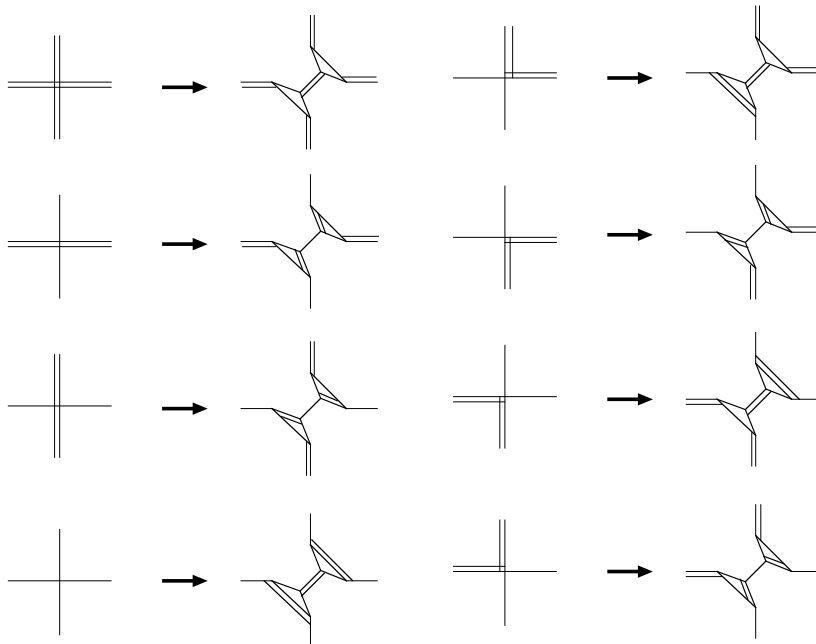


図 77 Ising モデルと dimer 配置の対応表：2重線となっているところにボンドが形成されているとする。

4.1 節で示したように Ising モデルではそれぞれの格子点には偶数本のボンドが結合できる。Ising モデルの 1 つの格子点がとりうるボンド結合と図 75 のように拡張した際とりうる dimer 配置は図 77 のように 1 対 1 対応となる。よって、正方格子の Ising モデルの分配関数を高温展開した 1 つの項に対応する図形に対して図 76 のように拡張された格子の dimer 配置が 1 つ決まる。例として図 8 に対応する dimer 配置は図 78 である。したがって、それぞれの図形が 1 対 1 対応となり、Ising モデルの場合も dimer 統計の場合も分配関数はとりうるすべての図形の和をとるので、

$$\mathcal{Z} = (2 \cosh K_1 \cosh K_2)^{NM} Z_{DS} \quad (4.4.1)$$

となる。ただし、 Z_{DS} は dimer 統計の分配関数である。

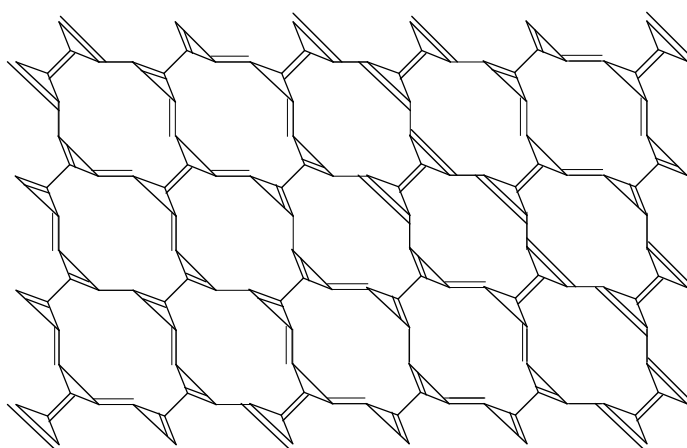


図 78 拡張した格子の図 8 に対応する dimer 配置

4.4.2 自由端の場合

正方格子の場合、dimer 統計の分配関数は 4.3 節のように Pfaffian で書くことができた。図 76 のような格子でも同様に分配関数が Pfaffian で書けることを示す。

まず、ボルツマン因子の正負を決める矢印を図 79、図 80 のようにつける。

この場合正方格子の 1 つの格子点が 6 つの格子点に拡張されているので、 $A(n, m; n', m')$ は 6×6 の行列に拡張される。矢印の方向のボルツマン因子は正であり、逆の方向のボルツマン因子は負であるから、6 サイトクラスターの部分の行列 $A(n, m; n, m)$ は、

$$A(n, m; n, m) = \begin{matrix} & \text{R} & \text{L} & \text{U} & \text{D} & 1 & 2 \\ \text{R} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \text{L} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \text{U} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \text{D} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \\ 1 & \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ 2 & \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (4.4.2)$$

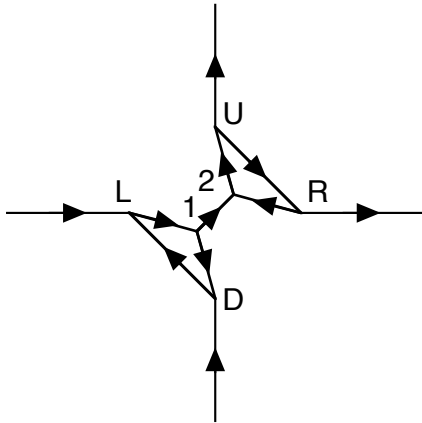


図 79 Ising モデルの 1 つの格子点に対応する図

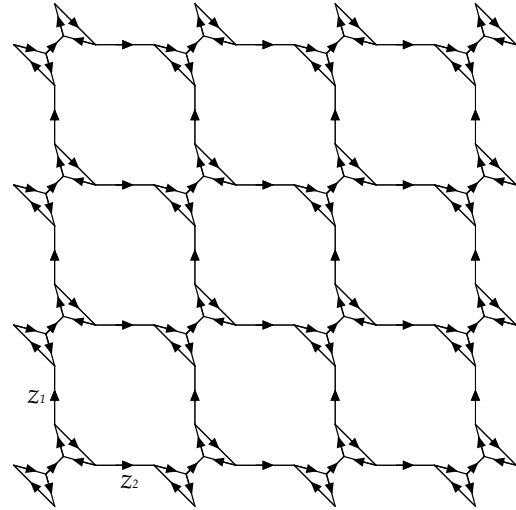


図 80 格子の全体図

となる。これは、正方格子の 1 つの格子点に対応する行列である。また、6 サイトクラスター間では、

$$A(n, m; n, m+1) = \begin{matrix} & \text{R} & \text{L} & \text{U} & \text{D} & 1 & 2 \\ \text{R} & \left(\begin{array}{cccccc} 0 & z_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \\ \text{L} & \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \\ \text{U} & \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \\ \text{D} & \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \\ 1 & \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \\ 2 & \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \end{matrix} \quad (4.4.3)$$

$$A(n, m+1; n, m) = \begin{matrix} & \text{R} & \text{L} & \text{U} & \text{D} & 1 & 2 \\ \text{R} & \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \\ \text{L} & \left(\begin{array}{cccccc} -z_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \\ \text{U} & \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \\ \text{D} & \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \\ 1 & \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \\ 2 & \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \end{matrix} \quad (4.4.4)$$

$$A(n, m; n+1, m) = \begin{matrix} & \text{R} & \text{L} & \text{U} & \text{D} & 1 & 2 \\ \text{R} & \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \\ \text{L} & \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \\ \text{U} & \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & z_1 & 0 & 0 \end{array} \right) \\ \text{D} & \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \\ 1 & \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \\ 2 & \left(\begin{array}{cccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \end{matrix} \quad (4.4.5)$$

$$A(n+1, m; n, m) = \begin{matrix} & \text{R} & \text{L} & \text{U} & \text{D} & 1 & 2 \\ \text{R} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -z_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (4.4.6)$$

であり、それ以外は0行列となる。

よって、構成される格子全体のボルツマン因子を表す行列 A は $6NM \times 6NM$ の行列となる。4.3 節より、この A の Pfaffian が分配関数となるためには任意の transition cycle に対して orientation parity が -1 となっている必要があった。transition cycle は2つの dimer 配置により構成されるので、1つの dimer 配置を基準の配置として固定して考えることができた。よって、図 81、図 82 のように定義される dimer 配置 c_0 を基準とする。1つの6サイトクラスターに対するボルツマン因子を考える。1つの6サイトクラスターに対する dimer 配置 c_0 は、

$$c_0 = |\text{R,U|L,D|1,2}| \quad (4.4.7)$$

である。これより、

$$A(n, m; n, m)_{\text{RU}} A(n, m; n, m)_{\text{LD}} A(n, m; n, m)_{12} = 1 \quad (4.4.8)$$

となる。RULD12 を RLUD12 にするには1回置換を行えばよいので、置換のパリティは -1 となる。すなわち、1つの6サイトクラスターに対して、

$$\delta_{c_0} A(n, m; n, m)_{\text{RU}} A(n, m; n, m)_{\text{LD}} A(n, m; n, m)_{12} = -1 \quad (4.4.9)$$

となる。しかし、ここでは偶数個の格子点からなる系を考えているので、格子全体の dimer 配置 c_0 に対して Pfaffian の項は、

$$\delta_{c_0} a(p_1, p_2) a(p_3, p_4) \cdots a(p_{6NM-1}, p_{6NM}) = +1 \quad (4.4.10)$$

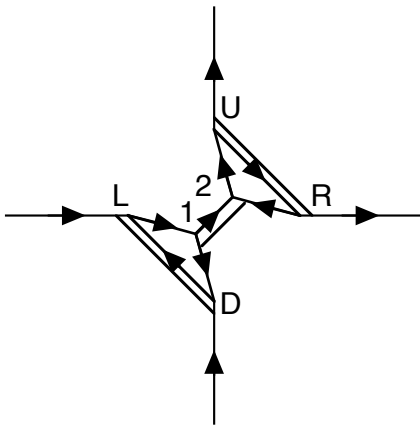


図 81 Ising モデルの1つの格子点に対応する c_0 配置

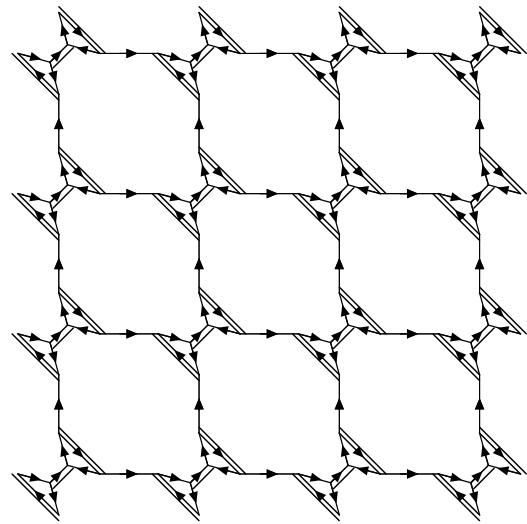


図 82 格子の全体に対する c_0 配置

となる。ただし、 $a(i, j)$ は行列 A の成分とした。よって、 c_0 と任意の dimer 配置からなる c_0 transition cycle の orientation parity が -1 であれば、任意の dimer 配置に対する Pfaffian の項 γ_p は正の符号を持つこととなる。したがって、すべての c_0 transition cycle の orientation parity が -1 であれば、分配関数は行列 A の Pfaffian で書ける。

ここで、以下の定理が成り立つ。

〈定理 [E]〉：1つの6サイトクラスターと、その6サイトクラスターに入る前の1つのボンドの部分の orientation parity は、“左から入り下に出る”、“上から入り右に出る”ものが -1 であり、これ以外はすべて $+1$ である。すなわち、 \downarrow 、 \rightarrow の頂点の orientation parity が -1 、その他の頂点の orientation parity が $+1$ である。

これは、図 83~図 94 により成立していることがわかる。ただし、実線が c_0 配置、破線がもう1つの dimer 配置である。

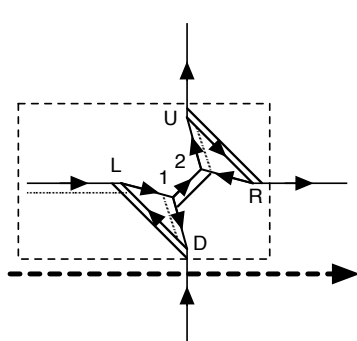


図 83 左から入り右に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は $+1$

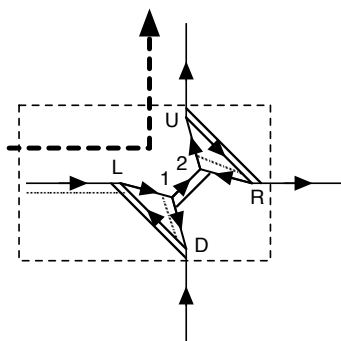


図 84 左から入り上に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は $+1$

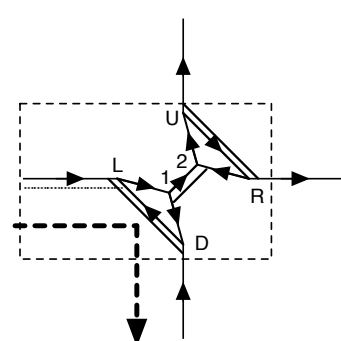


図 85 左から入り下に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は -1

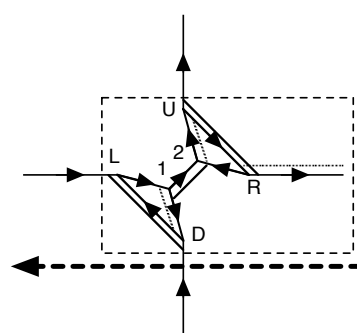


図 86 右から入り左に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は $+1$

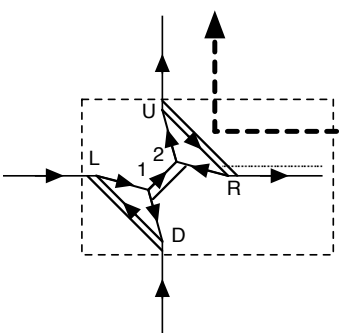


図 87 右から入り上に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は $+1$

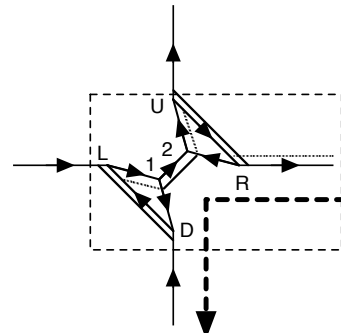


図 88 右から入り下に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は $+1$

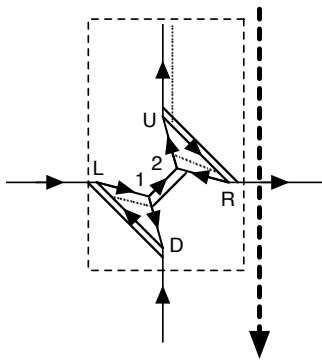


図 89 上から入り下に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は +1

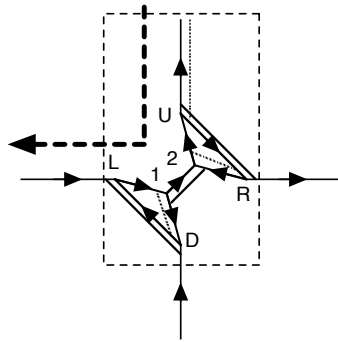


図 90 上から入り左に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は +1

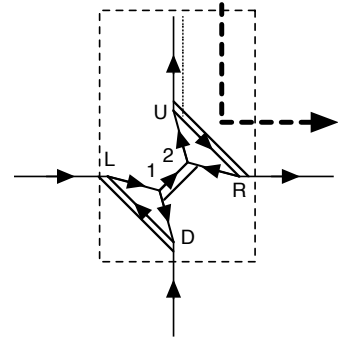


図 91 上から入り右に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は -1

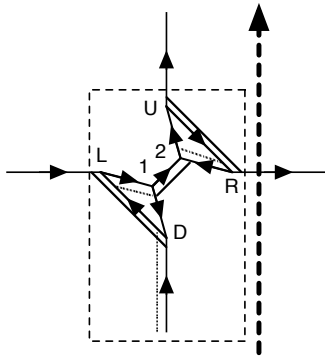


図 92 下から入り上に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は +1

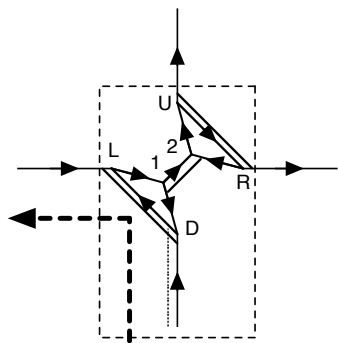


図 93 下から入り左に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は +1

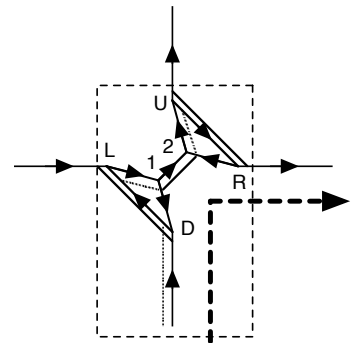


図 94 下から入り右に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は +1

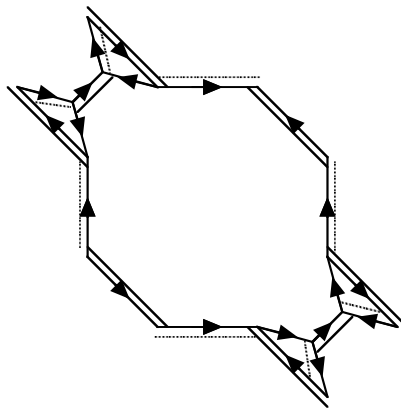


図 95 elementary c_0 polygon : 実線が c_0 、破線がもう 1 方の dimer 配置である。

まず、図 95 の最も簡単な c_0 transition cycle を elementary c_0 polygon と呼ぶこととする。実際に elementary c_0 polygon を回ることにより同じ方向の矢印の数を数えれば、orientation parity は -1 となっていることがわかる。これ以降この elementary c_0 polygon を正方形で書くこととする。

次に偶数のボンドからなる任意の曲線 (閉じていても閉じていなくてもよい) に elementary c_0 transition cycle を結合する場合を考える。ただし、

- 曲線の orientation parity が $+1$: \downarrow 、 \rightarrow の頂点が偶数個存在する曲線
- 曲線の orientation parity が -1 : \downarrow 、 \rightarrow の頂点が奇数個存在する曲線

である。このとき、

〈定理 [F]〉 : 任意の曲線に elementary c_0 polygon を結合しても、結合された後の曲線の orientation parity は元の曲線の orientation parity と同じである。

が成立する。

証明) 実際に任意の曲線に elementary c_0 polygon を結合していく。結合の仕方を大別すると、以下の4つになる。 \downarrow 、 \rightarrow の頂点以外の頂点の orientation parity は $+1$ であるから、 \downarrow 、 \rightarrow の頂点の数の変化について考えればよい。

[1] elementary c_0 polygon の1辺も消滅させることなく結合する場合

実際の結合例は図 96、図 97 である。この場合結合されることにより元の曲線の \downarrow 、 \rightarrow の頂点は消滅されないで、元の曲線の結合される部分の orientation parity は $+1$ (\downarrow 、 \rightarrow の頂点は0個) である。結合した後、曲線を回る方向に elementary c_0 polygon の \downarrow (\rightarrow) の頂点があれば結合することにより、新しく \rightarrow (\downarrow) の頂点が形成される。よって、図 96、図 97 のように \downarrow 、 \rightarrow の2つの頂点が対を形成する。これより、 \downarrow 、 \rightarrow の頂点は1つずつ合わせて2個となり結合した後の結合した部分の orientation parity は $+1$ である。よって、結合した後の曲線の orientation parity は元の曲線の orientation parity と同じである。ただし、図の実線の矢印は elementary c_0 polygon の \downarrow 、 \rightarrow の頂点を表し、破線の矢印は結合することにより新しく形成される \downarrow 、 \rightarrow の頂点を表す。また、図の数字はその方向に回ったときの \downarrow 、 \rightarrow の頂点の数を表している。

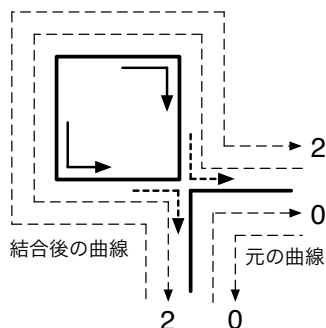


図 96 1 辺も消滅させることなく結合する場合の例 1 : どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数は元の曲線と結合後の曲線でともに偶数であるため、orientation parity は変わらない。

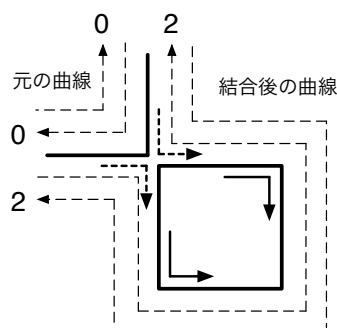


図 97 1 辺も消滅させることなく結合する場合の例 2 : どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数は元の曲線と結合後の曲線でともに偶数であるため、orientation parity は変わらない。

[2] elementary c_0 polygon の 1 辺を消滅させ結合する場合

a) 元の曲線の \downarrow 、 \rightarrow の頂点が消滅されないとき

実際の結合例は図 98 ~ 図 100 である。この場合元の曲線の結合される部分に \downarrow 、 \rightarrow の頂点はないので、元の曲線の結合される部分の orientation parity は $+1$ (\downarrow 、 \rightarrow の頂点は 0 個) である。

a1) 結合した後、曲線を回る方向に elementary c_0 polygon の \downarrow (\rightarrow) の頂点があれば結合することにより、新しく \rightarrow (\downarrow) の頂点が形成される。よって、結合後のこの部分の orientation parity は $+1$ (\downarrow 、 \rightarrow の頂点は 2 個) である。

a2) 結合した後、曲線を回る方向に elementary c_0 polygon の \downarrow 、 \rightarrow の頂点がなければ結合することにより、新しく \rightarrow 、 \downarrow の頂点は形成されない。よって、結合後のこの部分の orientation parity は $+1$ (\downarrow 、 \rightarrow の頂点は 0 個) である。

したがって、どちらの場合も結合した後の曲線の orientation parity は元の曲線の orientation parity と同じである。

b) 元の曲線の \downarrow 、 \rightarrow の頂点が消滅されるとき

実際の結合例は図 101 ~ 図 103 である。この場合、回る方向によって orientation parity が異なる。元の曲線の結合される部分に \downarrow 、 \rightarrow の頂点があれば (この場合はどちらか 1 つのみ) 元の曲線の結合される部分の orientation parity は -1 (\downarrow 、 \rightarrow の頂点は 1 個)、なければ $+1$ (\downarrow 、 \rightarrow の頂点は 0 個) である。

b1) 元の曲線の結合される部分に \downarrow (\rightarrow) の頂点があれば結合により消滅され、elementary c_0 polygon の \downarrow (\rightarrow) の頂点が結合後の \downarrow (\rightarrow) の頂点となる。よって、結合後のこの部分の orientation parity は -1 (\downarrow 、 \rightarrow の頂点は 1 個) である。

b2) 元の曲線の結合される部分に \downarrow (\rightarrow) の頂点がなければ結合により新しく \downarrow 、 \rightarrow の頂点は形成されない。よって、結合後のこの部分の orientation parity は $+1$ (\downarrow 、 \rightarrow の頂点は 0 個) である。

したがって、どちらの場合も結合した後の曲線の orientation parity は元の曲線の orientation parity と同じである。

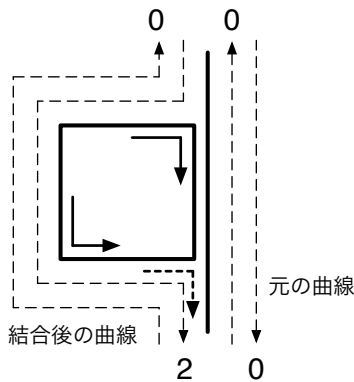


図 98 1 辺を消滅させ結合する場合の例 1 :
どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数の偶奇は元の曲線と結合後の曲線で変わらない。

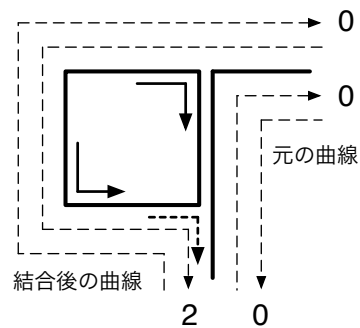


図 99 1 辺を消滅させ結合する場合の例 2 :
どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数の偶奇は元の曲線と結合後の曲線で変わらない。

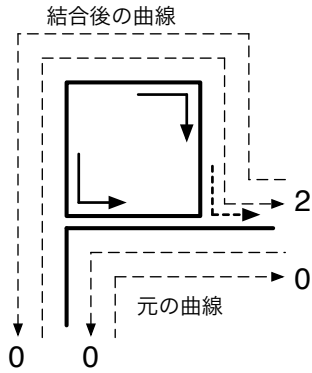


図 100 1 辺を消滅させ結合する場合の例 3 :
 どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数の偶奇は元の曲線と結合後の曲線で変わらない。

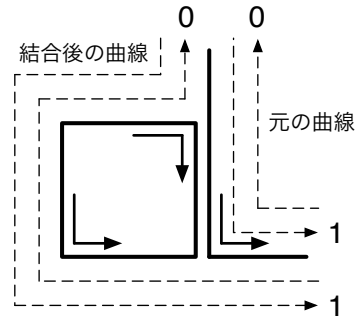


図 101 1 辺を消滅させ結合する場合の例 4 :
 どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数の偶奇は元の曲線と結合後の曲線で変わらない。

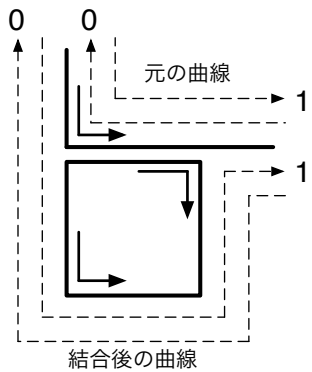


図 102 1 辺を消滅させ結合する場合の例 5 :
 どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数の偶奇は元の曲線と結合後の曲線で変わらない。

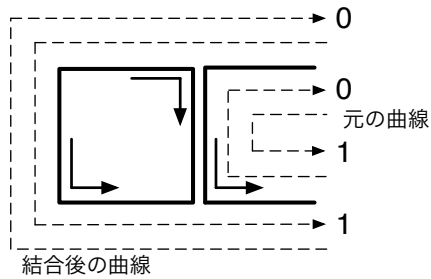


図 103 1 辺を消滅させ結合する場合の例 6 :
 どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数の偶奇は元の曲線と結合後の曲線で変わらない。

[3] elementary c_0 polygon の 2 辺を消滅させ結合する場合

a) 元の曲線の \downarrow 、 \rightarrow の頂点が消滅されるとき

実際の結合例は図 104 ~ 図 106 である。この場合元の曲線の結合される部分に \downarrow 、 \rightarrow の頂点はないので、元の曲線の結合される部分の orientation parity は $+1$ (\downarrow 、 \rightarrow の頂点は 0 個) である。このとき、結合する際に elementary c_0 polygon の \downarrow 、 \rightarrow の頂点は消滅され、新しく \downarrow 、 \rightarrow の頂点も形成されないため、この部分の orientation parity は $+1$ (\downarrow 、 \rightarrow の頂点は 0 個) である。したがって、結合した後の曲線の orientation parity は元の曲線の orientation parity と同じである。

b) 元の曲線の \downarrow 、 \rightarrow の頂点が消滅されるとき

実際の結合例は図 107 ~ 図 109 である。この場合、回る方向および消滅される \downarrow 、 \rightarrow の頂点の数により orientation parity が異なる。元の曲線の結合される部分に \downarrow 、 \rightarrow の頂点がなければ結合される部分の orientation parity は $+1$ (\downarrow 、 \rightarrow の頂点は偶数個) であり、 \downarrow 、 \rightarrow の頂点が奇数個 (偶数個) 存在すれば $-1(+1)$ である。

b1) 元の曲線の結合される部分に \downarrow 、 \rightarrow の頂点が 3 個 (1 個) あれば結合によりすべて消滅され、

elementary c_0 polygon の \downarrow 、 \rightarrow の頂点を含め新しく \downarrow 、 \rightarrow の頂点が 1 個 (3 個) 形成される。よって、結合後のこの部分の orientation parity は -1 (\downarrow 、 \rightarrow の頂点は奇数個) である。(図 107、図 109)

b2) 元の曲線の結合される部分に \downarrow 、 \rightarrow の頂点が 2 個あれば結合によりすべて消滅され、elementary c_0 polygon の \downarrow 、 \rightarrow の頂点を含め新しく \downarrow 、 \rightarrow の頂点が 2 個形成される。よって、結合後のこの部分の orientation parity は $+1$ (\downarrow 、 \rightarrow の頂点は 2 個) である。(図 108)

b3) 元の曲線の結合される部分に \downarrow (\rightarrow) の頂点がなければ結合により新しく \downarrow 、 \rightarrow の頂点は形成されない。よって、結合後のこの部分の orientation parity は $+1$ (\downarrow 、 \rightarrow の頂点は 0 個) である。

したがって、どの場合も結合した後の曲線の orientation parity は元の曲線の orientation parity と同じである。

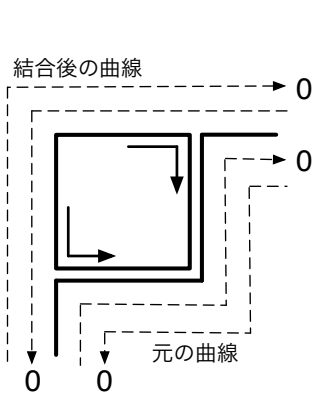


図 104 2 辺を消滅させ結合する場合の例 1 :
どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数は元の曲線と結合後の曲線で変わらない。

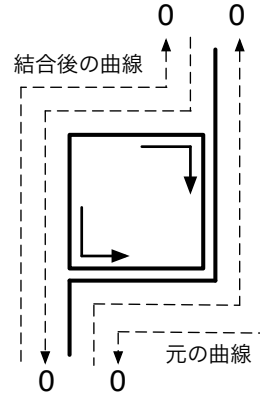


図 105 2 辺を消滅させ結合する場合の例 2 :
どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数は元の曲線と結合後の曲線で変わらない。

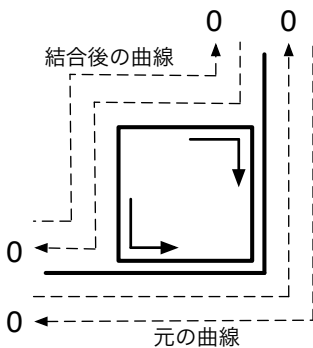


図 106 2 辺を消滅させ結合する場合の例 3 :
どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数は元の曲線と結合後の曲線で変わらない。

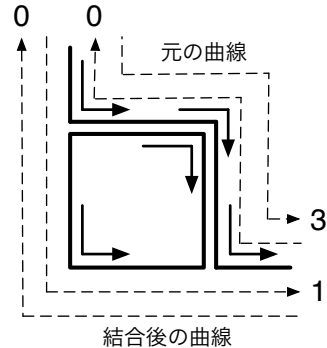


図 107 2 辺を消滅させ結合する場合の例 4 :
どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数の偶奇は元の曲線と結合後の曲線で変わらない。

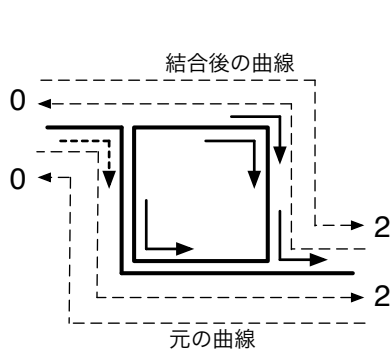


図 108 2辺を消滅させ結合する場合の例 5 :
 どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数の偶奇は元の曲線と結合後の曲線で変わらない。

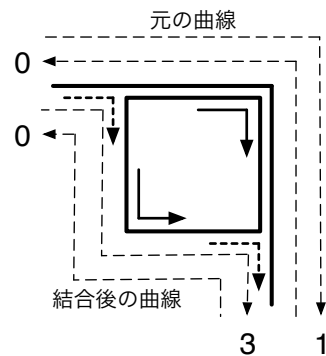


図 109 2辺を消滅させ結合する場合の例 6 :
 どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数の偶奇は元の曲線と結合後の曲線で変わらない。

[4] elementary c_0 polygon の 3 辺を消滅させ結合する場合

この場合、元の曲線の \downarrow 、 \rightarrow の頂点は必ず 1 個または 2 個消滅 (\downarrow 、 \rightarrow の頂点はすべて) する。実際の結合例は図 110 ~ 図 113 である。1 個 (2 個) 消滅する場合の元の曲線の結合される部分の orientation parity は $-1(+1)$ である。

- a) 元の曲線の結合される部分に \downarrow 、 \rightarrow の頂点が 2 個消滅される場合、結合により新しく \downarrow (\rightarrow) の頂点は形成されない。よって、結合後のこの部分の orientation parity は $+1$ (\downarrow 、 \rightarrow の頂点は 0 個) である。(図 110、図 111)
- b) 元の曲線の結合される部分に \downarrow (\rightarrow) の頂点が 1 個消滅される場合、結合により新しく \downarrow (\rightarrow) の頂点が 1 個形成される。よって、結合後のこの部分の orientation parity は -1 (\downarrow 、 \rightarrow の頂点は 1 個) である。(図 112、図 113)
- c) 元の曲線の結合される部分に \downarrow (\rightarrow) の頂点がなければ結合により新しく \downarrow 、 \rightarrow の頂点は形成されない。よって、結合後のこの部分の orientation parity は $+1$ (\downarrow 、 \rightarrow の頂点は 0 個) である。

したがって、どの場合も結合した後の曲線の orientation parity は元の曲線の orientation parity と同じである。

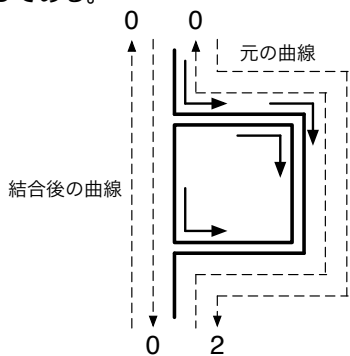


図 110 3 辺を消滅させ結合する場合の例 1 :
 どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数の偶奇は元の曲線と結合後の曲線で変わらない。

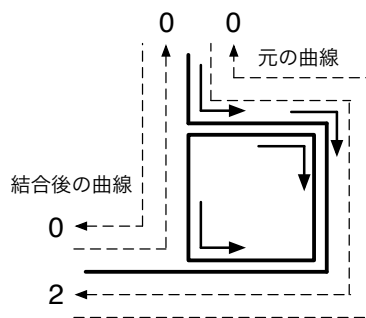


図 111 3 辺を消滅させ結合する場合の例 2 :
 どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数の偶奇は元の曲線と結合後の曲線で変わらない。

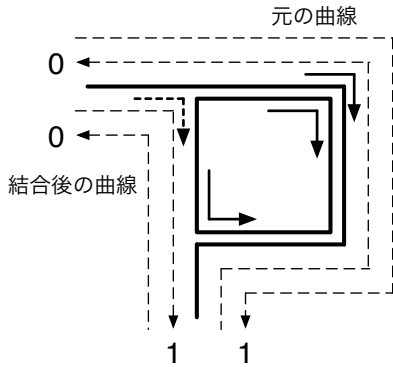


図 112 3 辺を消滅させ結合する場合の例 3 :
 どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数の偶奇は元の曲線と結合後の曲線で変わらない。

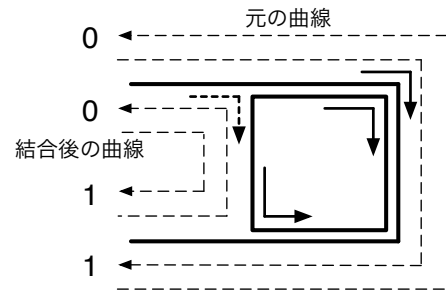


図 113 3 辺を消滅させ結合する場合の例 4 :
 どちらの方向で回っても -1 の orientation parity を持つ頂点の数の偶奇は元の曲線と結合後の曲線で変わらない。

これより、すべての結合の仕方に対して結合された後の曲線の orientation parity は元の曲線の orientation parity と同じであることがわかった。(証明終)

次に、自由端の場合、境界をループする c_0 transition cycle はないので、閉じた c_0 transition cycle を考えればよい。ここで形成されるすべての c_0 transition cycle の orientation parity が -1 なら正方格子の場合と同様に分配関数は Pfaffian で書ける。実際、

〈定理 [G]〉 : ループしない閉じた c_0 transition cycle の orientation parity はすべて -1 である。

が成立する。

証明) 数学的帰納法を用いる。

[1] elementary c_0 polygon の orientation parity は -1 であることは明らかである。

[2] n 個の elementary c_0 polygon により形成される c_0 transition cycle の orientation parity が -1 であると仮定する。このとき、 $n+1$ 個の elementary c_0 polygon により形成される c_0 transition cycle を考える。〈定理 [E]〉により、orientation parity が -1 の c_0 transition cycle に elementary c_0 polygon を結合すると、結合後の c_0 transition cycle の orientation parity は -1 となる。よって、 $n+1$ 個の elementary c_0 polygon により形成される transition cycle は -1 である。

したがって、ループしない閉じた c_0 transition cycle の orientation parity はすべて -1 であることがわかる。(証明終)

よって、図 80 に基づいて構成される $6NM \times 6NM$ 行列 A により、図 80 の格子に対する dimer 統計の分配関数 Z_{DS}^{Free} は、

$$Z_{DS}^{\text{Free}} = \text{Pf}A \quad (4.4.11)$$

と書けることがわかる。

4.4.3 環状の境界条件の場合

境界において形成される elementary c_0 transition cycle の orientation parity が -1 となるには水平方向が環状の場合 (垂直方向が環状の場合)、図 114(図 116)、図 115(図 117) の 2 通りが存在する。

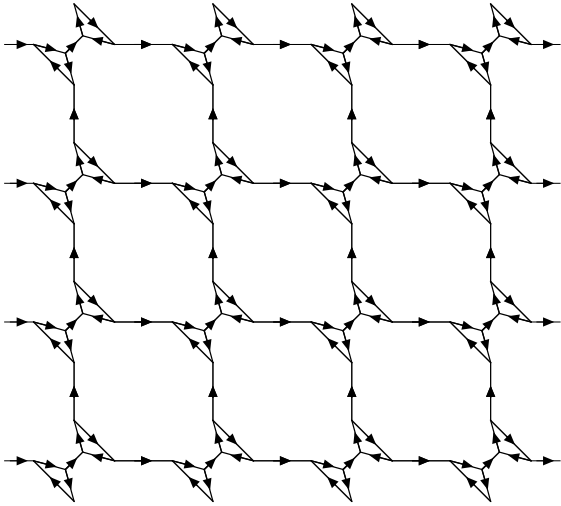


図 114 水平方向が環状な境界条件 1

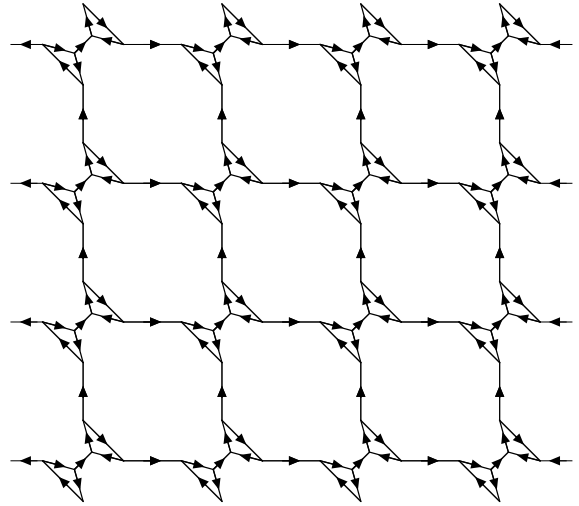


図 115 水平方向が環状な境界条件 2

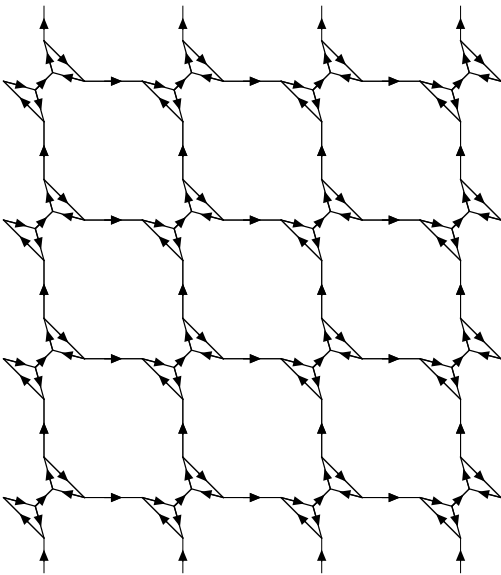


図 116 垂直方向が環状な境界条件 1

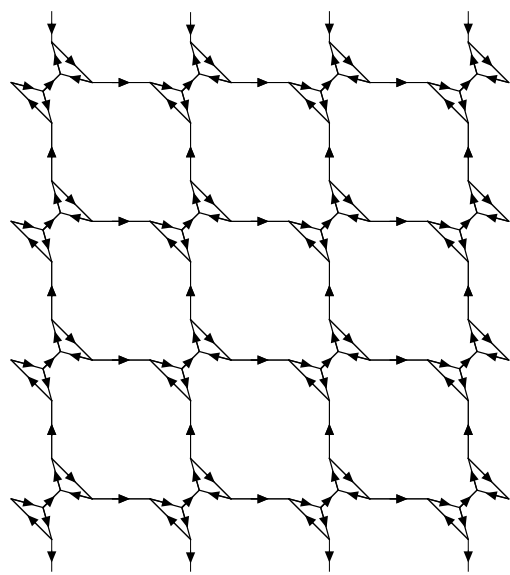


図 117 垂直方向が環状な境界条件 2

まずループしない transition cycle の orientation parity について考える。

(1) 図 114(図 116) の場合の境界条件

境界で形成される elementary c_0 polygon は図 95 と同じである。すなわち、境界をまたいで形成される c_0 transition cycle にも〈定理 [G]〉が成立し、ループしない場合すべての c_0 transition cycle の orientation parity は -1 であることがわかる。

(2) 図 115(図 117) の場合の境界条件

境界で形成される elementary c_0 polygon は、図 118(図 119) のようになる。このとき、境界ボンにおいて 6 サイトクラスターと、その 6 サイトクラスターに入る前の 1 つのボン (境界ボン) の部分

の orientation parity が〈定理 [E]〉で用いられた頂点とは異なる。

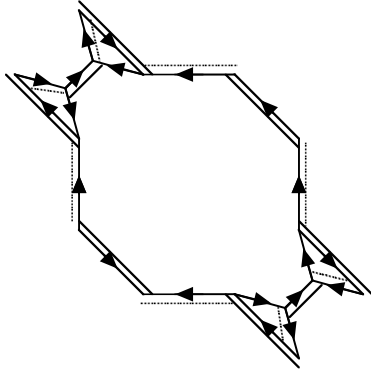


図 118 水平方向が環状な境界条件 2 の場合、境界に形成される elementary c_0 polygon

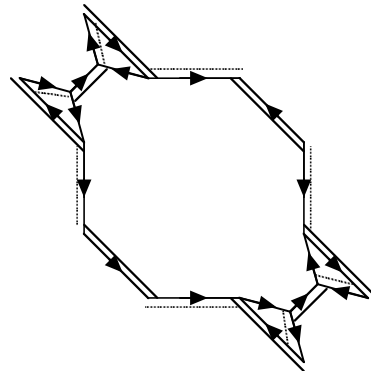


図 119 垂直方向が環状な境界条件 2 の場合、境界に形成される elementary c_0 polygon

- 水平方向が環状な場合 (境界ボンドは水平方向)
 水平方向から 6 サイトクラスターに入る部分の水平方向のボンドが〈定理 [E]〉の場合と逆方向となっている。すなわち、水平方向から入る頂点に関して〈定理 [E]〉の場合に orientation parity が $+1(-1)$ となる頂点が、この場合では $-1(+1)$ の頂点となる。よって、orientation parity は ”左から入り下に出る” ものは $+1$ であり、それ以外の水平方向から 6 サイトクラスターに入るものはすべて -1 である。これは図 120 ~ 図 125 のようになる。
- 垂直方向が環状な場合 (境界ボンドは垂直方向)
 垂直方向から 6 サイトクラスターに入る部分の垂直方向のボンドが〈定理 [E]〉の場合と逆方向となっている。すなわち、垂直方向から入る頂点に関して〈定理 [E]〉の場合に orientation parity が $+1(-1)$ となる頂点が、この場合では $-1(+1)$ の頂点となる。よって、orientation parity は ”上から入り右に出る” ものは $+1$ であり、それ以外の垂直方向から 6 サイトクラスターに入るものはすべて -1 である。これは図 126 ~ 図 131 のようになる。

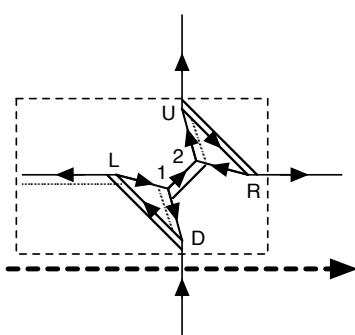


図 120 左から入り右に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は -1

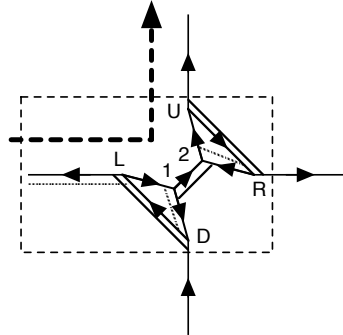


図 121 左から入り上に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は -1

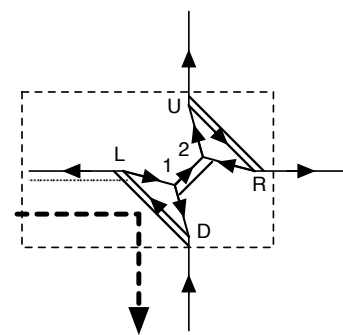


図 122 左から入り下に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は $+1$

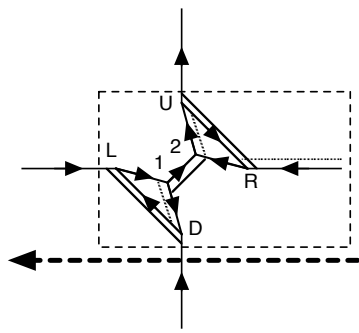


図 123 右から入り左に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は -1

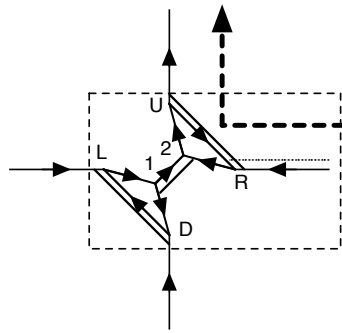


図 124 右から入り上に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は -1

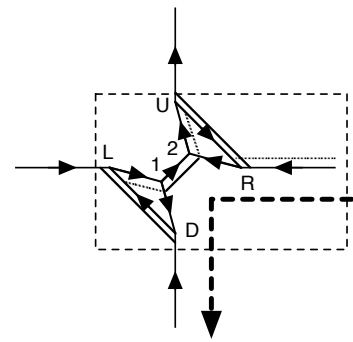


図 125 右から入り下に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は -1

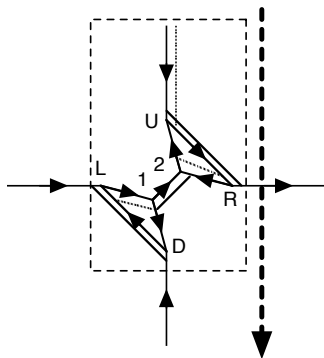


図 126 上から入り下に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は -1

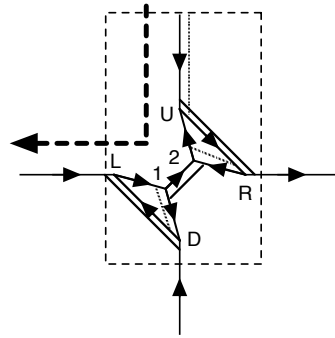


図 127 上から入り左に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は -1

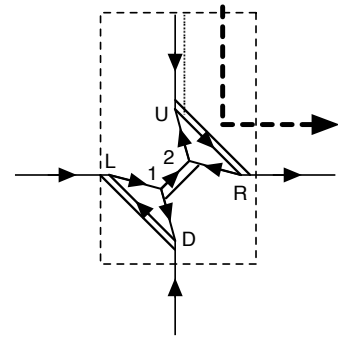


図 128 上から入り右に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は $+1$

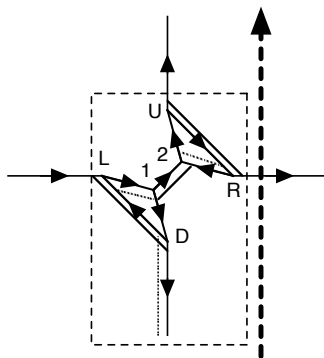


図 129 下から入り上に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は -1

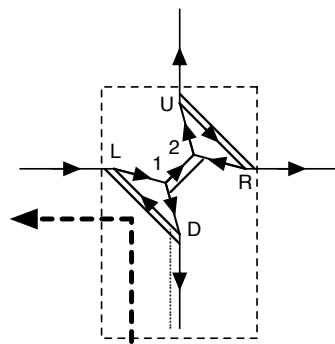


図 130 下から入り左に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は -1

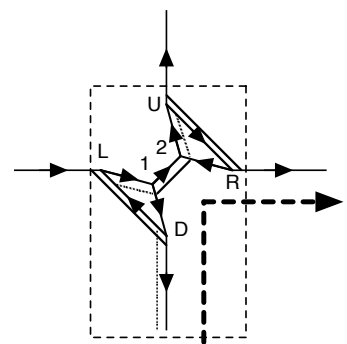


図 131 下から入り右に出る場合：破線で囲まれた部分の orientation parity は -1

これより、境界で形成される elementary c_0 polygon を正方形で表し、orientation parity が -1 となる頂点に矢印を書き入れたものが図 132、図 133(図 134、図 135) となる。すべて、orientation parity が -1 となる頂点が奇数個あるため、境界で形成される elementary c_0 polygon の orientation parity は -1 であることがわかる。

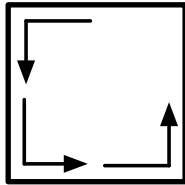


図 132 水平方向が環状な境界条件 2 の場合、境界で形成される elementary c_0 polygon を正方形で表したもの

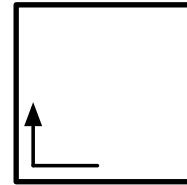


図 133 水平方向が環状な境界条件 2 の場合、境界で形成される elementary c_0 polygon を正方形で表したもの

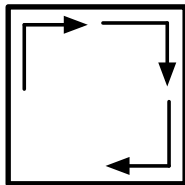


図 134 水平方向が環状な境界条件 2 の場合、境界で形成される elementary c_0 polygon を正方形で表したもの

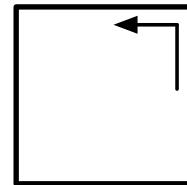


図 135 水平方向が環状な境界条件 2 の場合、境界で形成される elementary c_0 polygon を正方形で表したもの

〈定理 [F]〉を証明した場合と同様に、これらの elementary c_0 polygon を任意の曲線に結合していくとこの場合においても〈定理 [F]〉が成立していることがわかる。したがって、すべての elementary c_0 polygon の orientation parity は -1 であるから〈定理 [G]〉が成立し、ループしない場合すべての c_0 transition cycle の orientation parity は -1 であることがわかる。

これより、ループしない c_0 transition cycle の orientation parity はどちらの境界条件でも -1 となる。

次に、境界をループして形成する c_0 transition cycle について考える。最短でループするような c_0 transition cycle は図 136(図 138)、図 137(図 139) のようになる。この orientation parity が -1 となるのは図 137(図 139) のときのみである。したがって、図 115(図 117) の境界条件をとる必要がある。この最短でループするような c_0 transition cycle に elementary c_0 polygon(境界で形成されるものも含む)を結合しても〈定理 [F]〉により orientation parity は -1 である。よって、図 115(図 117) の境界条件をとれば、ループして形成する c_0 transition cycle の orientation parity は -1 であることがわかる。

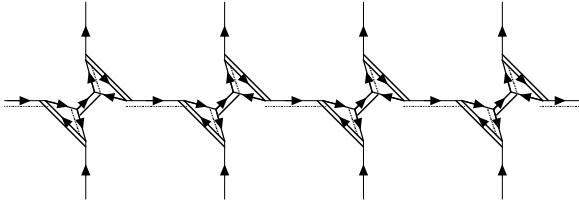


図 136 水平方向が環状な境界条件 1 の場合の最短でループするような c_0 transition cycle : orientation parity は +1

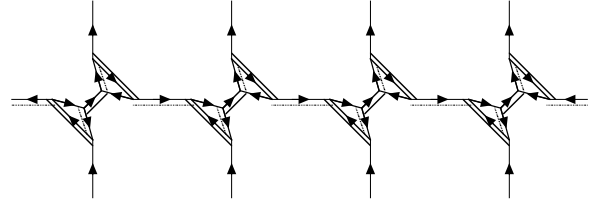


図 137 水平方向が環状な境界条件 2 の場合の最短でループするような c_0 transition cycle : orientation parity は -1

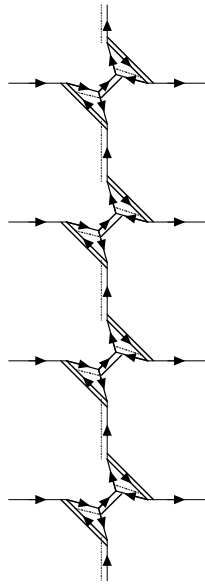


図 138 垂直方向が環状な境界条件 1 の場合の最短でループするような c_0 transition cycle : orientation parity は +1

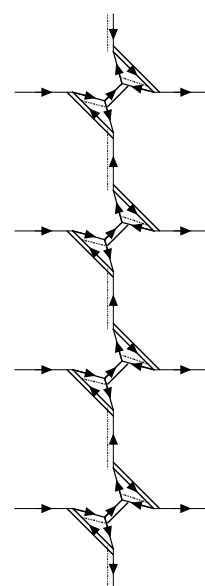


図 139 垂直方向が環状な境界条件 2 の場合の最短でループするような c_0 transition cycle : orientation parity は -1

したがって、図 115(図 117) の境界条件をとれば形成されるすべての c_0 transition cycle の orientation parity は -1 となる。よって、図 115(図 117) に基づいて構成される $6NM \times 6NM$ 行列 A により、dimer 統計の分配関数は、

$$Z_{DS}^{\text{Cyclic}} = \text{Pf}A \quad (4.4.12)$$

と書けることがわかる。

4.4.4 トーラス状の境界条件の場合

境界において形成される elementary c_0 transition cycle の orientation parity が -1 となるには図 140、図 141、図 142、図 143 の 4 つの境界条件が考えられる。このそれぞれの境界条件により構成される行列を A_1 、 A_2 、 A_3 、 A_4 とおく。

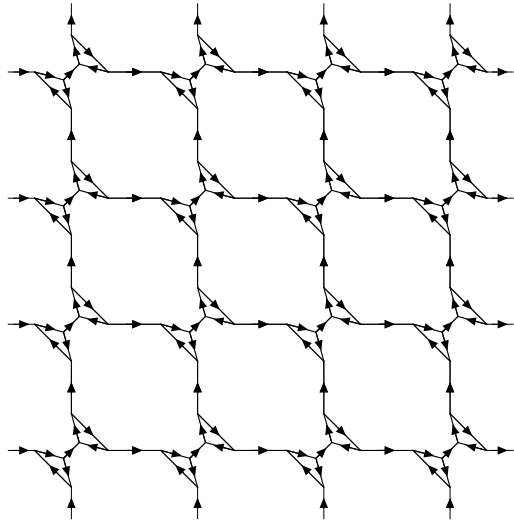


図 140 A_1 の境界条件

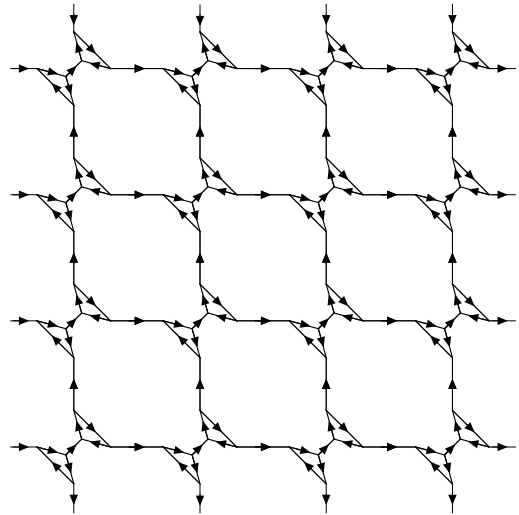


図 141 A_2 の境界条件

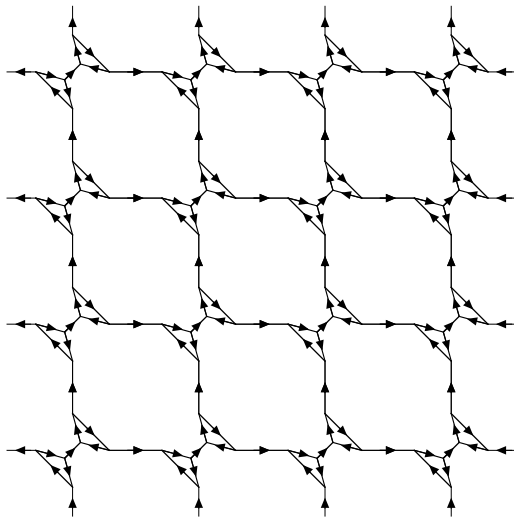


図 142 A_3 の境界条件

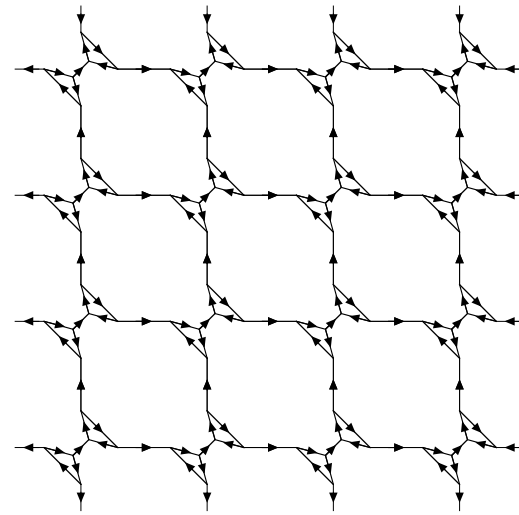


図 143 A_4 の境界条件

図 140、図 141、図 142 の境界条件については、境界において形成される elementary c_0 polygon は図 95、図 118、図 119 のどれかであるので orientation parity は -1 であるから、〈定理 [F]〉が成立し、ループしない場合 c_0 transition cycle の orientation parity は -1 である。図 143 の境界条件では水平方向のみの境界をまたぎ形成される elementary c_0 polygon は図 118 であり、垂直方向のみの境界をまたぎ形成される elementary c_0 polygon は図 119 であり、水平方向、垂直方向のどちらの境界もまたぎ elementary c_0 polygon が今までに考えてきたものと異なる。この elementary c_0 polygon は図 144 である。これを正方形で表し、orientation parity が -1 となる頂点に矢印を書き入れたものが図 145、図 146 であり、矢印の数が奇数であるためこの elementary c_0 polygon の orientation parity は -1 であることがわかる。〈定理 [F]〉を証明した場合と同様に、この elementary c_0 polygon を任意の曲線に結合するとこの場合においても〈定理 [F]〉が成立していることがわかる。したがって、図 143 の境界条件でもループしない場合 c_0 transition cycle の orientation parity は -1 である。よって、ループしない場合どの境界条件でも c_0 transition cycle の orientation parity

は -1 である。

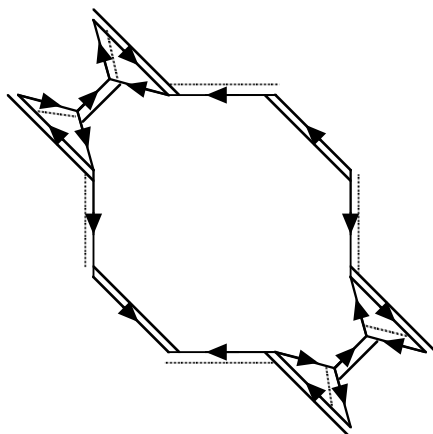


図 144 A_4 の境界条件の場合に水平方向、垂直方向のどちらの境界もまたぐ elementary c_0 polygon

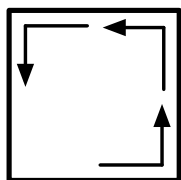


図 145 A_4 の境界条件の場合に水平方向、垂直方向のどちらの境界もまたぐ elementary c_0 polygon を正方形で表したもの

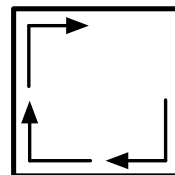


図 146 A_4 の境界条件の場合に水平方向、垂直方向のどちらの境界もまたぐ elementary c_0 polygon を正方形で表したもの

次にループする場合の c_0 transition cycle について考える。

この格子でループする c_0 transition cycle は交わることはできない。そのため、ループできる回数については、4.3.4 節と同様のことがいえる。また、ここでも 4.3.4 節と同様に最短でループする elementary c_0 transition cycle を考える。すなわち、境界以外の頂点は図 83、図 84、図 92、図 94 の頂点により構成される。これらの頂点の orientation parity はすべて $+1$ であるから、4.3.4 節の場合と同様に c_0 transition cycle の orientation parity を決めるのは境界での寄与を考えればよいことがわかる。

1) 水平方向の境界

- A_1 、 A_2 の境界条件の場合境界では図 83、図 84 のどちらかになるので、水平方向の 1 回のループにより orientation parity は $+1$ の寄与をする。
- A_3 、 A_4 の境界条件の場合境界では図 120、図 121 のどちらかになるので、水平方向の 1 回のループにより orientation parity は -1 の寄与をする。

2) 垂直方向の境界

- A_1 、 A_3 の境界条件の場合境界では図 92、図 94 のどちらかになるので、垂直方向の 1 回のループにより orientation parity は $+1$ の寄与をする。

- A_2, A_4 の境界条件の場合境界では図 129、図 131 のどちらかになるので、垂直方向の 1 回のループにより orientation parity は -1 の寄与をする。

したがって、1 つの垂直方向に v 回ループし、水平方向に h 回ループする最短の c_0 transition cycle の orientation parity は 4.3.4 節の場合と同じになり表 1 となる。ここで、〈 定理 [F] 〉により任意の曲線に elementary c_0 polygon を結合しても orientation parity は変わらないので任意のループする c_0 transition cycle に対しても表 1 が成立する。したがって、transition graph を構成する任意の dimer 配置による Pfaffian の項の符号 (ポルツマン因子を除いたもの) は表 4、表 5 のようになる。

表 4 (v, h) が同じ c_0 transition cycle が偶数個ある場合の c_0 transition graph を構成する任意の dimer 配置による Pfaffian の項の符号

(v, h)	A_1	A_2	A_3	A_4
$(0, 0)$	+	+	+	+
(奇数, 偶数)	+	+	+	+
(偶数, 奇数)	+	+	+	+
(奇数, 奇数)	+	+	+	+

表 5 (v, h) が同じ c_0 transition cycle が奇数個ある場合の c_0 transition graph を構成する任意の dimer 配置による Pfaffian の項の符号

(v, h)	A_1	A_2	A_3	A_4
$(0, 0)$	+	+	+	+
(奇数, 偶数)	-	+	-	+
(偶数, 奇数)	-	-	+	+
(奇数, 奇数)	-	+	+	-

したがって、トーラス状の境界の場合の分配関数は、4.3.4 節の場合と同様に、図 140 ~ 図 143 により構成される $6NM \times 6NM$ の行列 A_1, A_2, A_3, A_4 を用いて、

$$Z_{\text{DS}}^{\text{Toroidal}} = \frac{1}{2} (-\text{Pf}A_1 + \text{Pf}A_2 + \text{Pf}A_3 + \text{Pf}A_4) \quad (4.4.13)$$

と書けることがわかる。

4.5 Helmholtz の自由エネルギーの計算

4.5.1 行列 H_n , tH_n , \tilde{H}_n , ${}^t\tilde{H}_n$ の導入

Helmholtz の自由エネルギーの計算をするために便利な行列 H_n , tH_n , \tilde{H}_n , ${}^t\tilde{H}_n$ を導入する。それは、

$$H_n = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \quad (4.5.1)$$

$${}^tH_n = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.5.2)$$

$$\tilde{H}_n = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \quad (4.5.3)$$

$${}^t\tilde{H}_n = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.5.4)$$

である。この行列の関係は、

$$H_n {}^tH_n = 1 \quad (4.5.5)$$

$$\tilde{H}_n {}^t\tilde{H}_n = 1 \quad (4.5.6)$$

となる。それぞれの行列の固有値を求めこの行列を対角化する。

・ H_n の対角化

固有値を λ 、固有関数を、

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} \quad (4.5.7)$$

とすると、

$$\begin{cases} v_2 = \lambda v_1 \\ v_3 = \lambda v_2 \\ v_4 = \lambda v_3 \\ \vdots \\ v_1 = \lambda v_n \end{cases} \quad (4.5.8)$$

となる。これより、

$$\lambda^n = 1 \quad (4.5.9)$$

となる。したがって、この関係を満たす λ は、

$$\lambda = \exp\left[i\frac{2k\pi}{n}\right] \quad (k = 1, 2, \dots, n) \quad (4.5.10)$$

となる。つまり、 H_n を対角化する直交行列 U_n により、

$$U_n^{-1}H_nU_n = \begin{pmatrix} e^{i\frac{2\pi}{n}} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e^{i\frac{4\pi}{n}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\frac{6\pi}{n}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \quad (4.5.11)$$

と対角化される。この U_n を求めるために、 k 番目の固有値である、

$$\lambda_k = \exp\left[i\frac{2k\pi}{n}\right] \quad (4.5.12)$$

の固有関数 v_k を求めることとする。ただし、固有関数 v_k の成分を、

$$\mathbf{v}_k = \begin{pmatrix} v_1^{(k)} \\ v_2^{(k)} \\ v_3^{(k)} \\ \vdots \\ v_n^{(k)} \end{pmatrix} \quad (4.5.13)$$

と書くこととする。このとき、

$$(H_n - \lambda_k)\mathbf{v}_k = 0 \quad (4.5.14)$$

となっている必要があるため、固有関数は、

$$\begin{pmatrix} -e^{i\frac{2k\pi}{n}} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -e^{i\frac{2k\pi}{n}} & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -e^{i\frac{2k\pi}{n}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & -e^{i\frac{2k\pi}{n}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1^{(k)} \\ v_2^{(k)} \\ v_3^{(k)} \\ \vdots \\ v_n^{(k)} \end{pmatrix} = 0 \quad (4.5.15)$$

を満たす必要がある。ここで、

$$v_n^{(k)} = c \text{ (定数)} \quad (4.5.16)$$

とおくと、

$$v_l^{(k)} = ce^{i\frac{2k\pi}{n} \times l} \quad (l = 1 \sim n) \quad (4.5.17)$$

となる。これより、 v_k が規格化されることを要請し、

$$\mathbf{v}_k^* \mathbf{v}_k = 1 \quad (4.5.18)$$

となるように c を決めると、

$$c = \frac{1}{\sqrt{n}} \quad (4.5.19)$$

となる。したがって、固有値 λ_k に対する固有関数 v_k の成分は、

$$v_l^{(k)} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{i \frac{2kl\pi}{n}} \quad (l = 1 \sim n) \quad (4.5.20)$$

となることがわかる。ここで、行列 H_n を対角化する直交行列 U_n は v_k の線形結合で書けるため、正規直交化されたものを考えると直交行列 U_n の成分 u_{lk} は、

$$u_{lk} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{i \frac{2kl\pi}{n}} \quad (k, l = 1 \sim n) \quad (4.5.21)$$

となる。次に、直交行列 U_n の逆行列 U_n^{-1} であるが、

$$U_n^{-1} U_n = 1 \quad (4.5.22)$$

となっているために、 U_n^{-1} の成分を $u'_{k'l'}$ とすると、

$$\sum_{l'} u'_{k'l'} u_{lk} \delta_{l,l'} = \delta_{k',k} \quad (4.5.23)$$

となる必要がある。ここで、 u_{lk} を代入すると、

$$\sum_l u'_{k'l} \frac{1}{\sqrt{n}} e^{i \frac{2kl\pi}{n}} = \delta_{k',k} \quad (4.5.24)$$

となる。これを満たす $u'_{k'l'}$ は、

$$u'_{k'l'} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{-i \frac{2l'k'\pi}{n}} \quad (l', k' = 1 \sim n) \quad (4.5.25)$$

であることがわかる。したがって、 u_{lk} を成分とする U_n 、 $u'_{k'l'}$ を成分とする U_n^{-1} により、 H_n は (4.5.11) のように対角化される。実際、行列 U_n 、 U_n^{-1} を行列で書くと、

$$U_n = \frac{1}{\sqrt{n}} \begin{pmatrix} e^{i \frac{2\pi}{n}} & e^{i \frac{4\pi}{n}} & \cdots & e^{i \frac{2n\pi}{n}} \\ e^{i \frac{4\pi}{n}} & e^{i \frac{8\pi}{n}} & \cdots & e^{i \frac{4n\pi}{n}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e^{i \frac{2n\pi}{n}} & e^{i \frac{4n\pi}{n}} & \cdots & e^{i \frac{2n^2\pi}{n}} \end{pmatrix} \quad (4.5.26)$$

$$U_n^{-1} = \frac{1}{\sqrt{n}} \begin{pmatrix} e^{-i \frac{2\pi}{n}} & e^{-i \frac{4\pi}{n}} & \cdots & e^{-i \frac{2n\pi}{n}} \\ e^{-i \frac{4\pi}{n}} & e^{-i \frac{8\pi}{n}} & \cdots & e^{-i \frac{4n\pi}{n}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e^{-i \frac{2n\pi}{n}} & e^{-i \frac{4n\pi}{n}} & \cdots & e^{-i \frac{2n^2\pi}{n}} \end{pmatrix} \quad (4.5.27)$$

となる。

・ tH_n の対角化

H_n の場合と同様に考えると、

$$\begin{cases} v_n = \lambda v_1 \\ v_1 = \lambda v_2 \\ v_2 = \lambda v_3 \\ \vdots \\ v_{n-1} = \lambda v_n \end{cases} \quad (4.5.28)$$

となる。これより、

$$\lambda^n = 1 \quad (4.5.29)$$

となることがわかり、この関係を満たし、かつ (4.5.5) を満たす λ は、

$$\lambda = \exp\left[-i\frac{2k\pi}{n}\right] \quad (k = 1, 2, \dots, n) \quad (4.5.30)$$

となる。つまり、 tH_n を対角化する直交行列 U_n により、

$$U_n^{-1} {}^tH_n U_n = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{2\pi}{n}} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{4\pi}{n}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\frac{6\pi}{n}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \quad (4.5.31)$$

と対角化される。この U_n を H_n の場合と同様に考えると、固有値 λ_k に対する固有関数 v_k は、

$$\begin{pmatrix} -e^{-i\frac{2k\pi}{n}} & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 1 & -e^{-i\frac{2k\pi}{n}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -e^{-i\frac{2k\pi}{n}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -e^{-i\frac{2k\pi}{n}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1^{(k)} \\ v_2^{(k)} \\ v_3^{(k)} \\ \vdots \\ v_n^{(k)} \end{pmatrix} = 0 \quad (4.5.32)$$

を満たす必要がある。ここで、

$$v_n^{(k)} = c \text{ (定数)} \quad (4.5.33)$$

とおくと、

$$v_l^{(k)} = ce^{i\frac{2kl\pi}{n}} \quad (l = 1 \sim n) \quad (4.5.34)$$

となる。これは、 H_n のときと同じ結果であるから、 tH_n を対角化する直交行列 U_n の成分を u_{lk} 、逆行列 U_n^{-1} の成分を $u'_{k'l'}$ とすると、

$$u_{lk} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{i\frac{2kl\pi}{n}} \quad (k, l = 1 \sim n) \quad (4.5.35)$$

$$u'_{k'l'} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{-i\frac{2l'k'\pi}{n}} \quad (l', k' = 1 \sim n) \quad (4.5.36)$$

となる。これらを用いて、 tH_n は (4.5.31) のように対角化される。

したがって、 H_n 、 ${}^t H_n$ を対角化する直交行列 U_n は同じであり、 H_n と ${}^t H_n$ は同時に対角化できることがわかる。

・ \tilde{H}_n の対角化

H_n の場合と同様に考えると、

$$\begin{cases} v_2 = \lambda v_1 \\ v_3 = \lambda v_2 \\ v_4 = \lambda v_3 \\ \vdots \\ -v_1 = \lambda v_n \end{cases} \quad (4.5.37)$$

となる。これより、

$$\lambda^n = -1 \quad (4.5.38)$$

となることがわかる。したがって、この関係を満たす λ は、

$$\lambda = \exp\left[i\frac{(2k-1)\pi}{n}\right] \quad (k = 1, 2, \dots, n) \quad (4.5.39)$$

となる。つまり、 \tilde{H}_n を対角化する直交行列 \tilde{U}_n により、

$$\tilde{U}_n^{-1} \tilde{H}_n \tilde{U}_n = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\pi}{n}} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e^{i\frac{3\pi}{n}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\frac{5\pi}{n}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 \end{pmatrix} \quad (4.5.40)$$

と対角化される。この \tilde{U}_n を H_n の場合と同様に考えると、固有値 λ_k に対する固有関数 v_k は、

$$\begin{pmatrix} -e^{i\frac{(2k-1)\pi}{n}} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -e^{i\frac{(2k-1)\pi}{n}} & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -e^{i\frac{(2k-1)\pi}{n}} & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1 & 0 & 0 & \cdots & -e^{i\frac{(2k-1)\pi}{n}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1^{(k)} \\ v_2^{(k)} \\ v_3^{(k)} \\ \vdots \\ v_n^{(k)} \end{pmatrix} = 0 \quad (4.5.41)$$

を満たす必要がある。ここで、

$$v_n^{(k)} = c \quad (\text{定数}) \quad (4.5.42)$$

とおくと、

$$v_l^{(k)} = -ce^{i\frac{(2k-1)\pi}{n} \times l} \quad (l = 1 \sim n) \quad (4.5.43)$$

となる。これより、 v_k が規格化されることを要請すると c は、

$$c = -\frac{1}{\sqrt{n}} \quad (4.5.44)$$

となる。ただし、(4.5.43) の負符号を消去するため c を負符号とした。したがって、固有値 λ_k に対する固有関数 v_k の成分は、

$$v_l^{(k)} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{i \frac{(2k-1)\pi}{n} \times l} \quad (l = 1 \sim n) \quad (4.5.45)$$

となる。ここで、行列 \tilde{H}_n を対角化する直交行列 \tilde{U}_n は v_k の線形結合で書けるため、正規直交化されたものを考えると直交行列 \tilde{U}_n の成分 \tilde{u}_{lk} は、

$$\tilde{u}_{lk} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{i \frac{(2k-1)l\pi}{n}} \quad (k, l = 1 \sim n) \quad (4.5.46)$$

となる。次に直交行列 \tilde{U}_n の逆行列 \tilde{U}_n^{-1} は、 \tilde{U}_n^{-1} の成分を $\tilde{u}'_{k'l'}$ とすると、

$$\sum_{l,l'} \tilde{u}'_{k'l'} \tilde{u}_{lk} \delta_{l,l'} = \delta_{k',k} \quad (4.5.47)$$

となる必要がある。ここで、 \tilde{u}_{lk} を代入すると、

$$\sum_l \tilde{u}'_{k'l} \frac{1}{\sqrt{n}} e^{i \frac{(2k-1)l\pi}{n}} = \delta_{k',k} \quad (4.5.48)$$

となる。これを満たす $\tilde{u}'_{k'l'}$ は、

$$\tilde{u}'_{k'l'} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{-i \frac{(2k'-1)l'\pi}{n}} \quad (l', k' = 1 \sim n) \quad (4.5.49)$$

であることがわかる。したがって、 \tilde{u}_{lk} を成分とする \tilde{U}_n 、 $\tilde{u}'_{k'l'}$ を成分とする \tilde{U}_n^{-1} により、 \tilde{H}_n は (4.5.40) のように対角化される。実際、行列 \tilde{U}_n 、 \tilde{U}_n^{-1} を行列で書くと、

$$\tilde{U}_n = \frac{1}{\sqrt{n}} \begin{pmatrix} e^{i \frac{\pi}{n}} & e^{i \frac{3\pi}{n}} & \cdots & e^{i \frac{(2n-1)\pi}{n}} \\ e^{i \frac{2\pi}{n}} & e^{i \frac{6\pi}{n}} & \cdots & e^{i \frac{(2n-1)2\pi}{n}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e^{i \frac{n\pi}{n}} & e^{i \frac{3n\pi}{n}} & \cdots & e^{i \frac{(2n-1)n\pi}{n}} \end{pmatrix} \quad (4.5.50)$$

$$\tilde{U}_n^{-1} = \frac{1}{\sqrt{n}} \begin{pmatrix} e^{-i \frac{\pi}{n}} & e^{-i \frac{2\pi}{n}} & \cdots & e^{-i \frac{n\pi}{n}} \\ e^{-i \frac{3\pi}{n}} & e^{-i \frac{6\pi}{n}} & \cdots & e^{-i \frac{3n\pi}{n}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e^{-i \frac{(2n-1)\pi}{n}} & e^{-i \frac{(2n-1)2\pi}{n}} & \cdots & e^{-i \frac{(2n-1)n\pi}{n}} \end{pmatrix} \quad (4.5.51)$$

となる。

・ ${}^t \tilde{H}_n$ の対角化

H_n の場合と同様に考えると、

$$\begin{cases} -v_n = \lambda v_1 \\ v_1 = \lambda v_2 \\ v_2 = \lambda v_3 \\ \vdots \\ v_{n-1} = \lambda v_n \end{cases} \quad (4.5.52)$$

となる。これより、

$$\lambda^n = -1 \quad (4.5.53)$$

となることがわかり、この関係を満たし、かつ (4.5.6) を満たす λ は、

$$\lambda = \exp\left[-i\frac{(2k-1)\pi}{n}\right] \quad (l = k, 2, \dots, n) \quad (4.5.54)$$

となる。つまり、 ${}^t\tilde{H}_n$ を対角化する直交行列 \tilde{U} により、

$$\tilde{U}^{-1}{}^t\tilde{H}_n\tilde{U} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\pi}{n}} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{3\pi}{n}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\frac{5\pi}{n}} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 \end{pmatrix} \quad (4.5.55)$$

と対角化される。この \tilde{U}_n を H_n の場合と同様に考えると、固有値 λ_k に対する固有関数 v_k は、

$$\begin{pmatrix} -e^{-i\frac{(2k-1)\pi}{n}} & 0 & 0 & \dots & -1 \\ 1 & -e^{-i\frac{(2k-1)\pi}{n}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -e^{-i\frac{(2k-1)\pi}{n}} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -e^{-i\frac{(2k-1)\pi}{n}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1^{(k)} \\ v_2^{(k)} \\ v_3^{(k)} \\ \vdots \\ v_n^{(k)} \end{pmatrix} = 0 \quad (4.5.56)$$

を満たす必要がある。ここで、

$$v_n^{(k)} = c \text{ (定数)} \quad (4.5.57)$$

とおくと、

$$v_l^{(k)} = ce^{i\frac{(2k-1)\pi}{n} \times l} \quad (l = 1 \sim n) \quad (4.5.58)$$

となる。これは、 \tilde{H}_n のときと同じ結果であるから、 ${}^t\tilde{H}_n$ を対角化する直交行列 \tilde{U}_n の成分を \tilde{u}_{lk} 、逆行列 \tilde{U}_n^{-1} の成分を $\tilde{u}'_{k'l'}$ とすると、

$$\tilde{u}_{lk} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{i\frac{(2k-1)l\pi}{n}} \quad (k, l = 1 \sim n) \quad (4.5.59)$$

$$\tilde{u}'_{k'l'} = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{-i\frac{(2k'-1)l'\pi}{n}} \quad (l', k' = 1 \sim n) \quad (4.5.60)$$

となる。これらを用いて、 ${}^t\tilde{H}_n$ は (4.5.55) のように対角化される。

したがって、 \tilde{H}_n 、 ${}^t\tilde{H}_n$ を対角化する直交行列 \tilde{U}_n は同じであり、 \tilde{H}_n と ${}^t\tilde{H}_n$ は同時に対角化できることがわかる。

4.5.2 トーラス状の境界条件の Ising モデルの Helmholtz の自由エネルギー

行列 H_n 、 tH_n 、 \tilde{H}_n 、 ${}^t\tilde{H}_n$ を用いて Ising モデルのトーラス状の境界条件を持つ場合を考える。このとき境界条件によって、4つの行列 A_i が存在する。これをそれぞれ評価する。

・ A_1 (図 140) に対応する境界条件

A_1 は、

$$\begin{aligned}
A_1 = & \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \otimes I_M \otimes I_N \\
& + \begin{pmatrix} 0 & z_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes H_M \otimes I_N + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -z_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes {}^t H_M \otimes I_N \\
& + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes I_M \otimes H_N + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -z_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes I_M \otimes {}^t H_N \quad (4.5.61)
\end{aligned}$$

となる。ただし、 I_n は $n \times n$ の単位行列である。また、右辺第 2 項は右側の格子点との相互作用、右辺第 3 項は左側の格子点との相互作用、右辺第 4 項は上側の格子点との相互作用、右辺第 5 項は下側の格子点との相互作用をそれぞれ表している。書き方を変えると、

$$\begin{aligned}
A_1 = & A(n, m; n, m) \otimes I_M \otimes I_N + A(n, m; n, m+1) \otimes H_M \otimes I_N \\
& + A(n, m+1; n, m) \otimes {}^t H_M \otimes I_N + A(n, m; n+1, m) \otimes I_M \otimes H_N + A(n+1, m; n, m) \otimes I_M \otimes {}^t H_N \quad (4.5.62)
\end{aligned}$$

となる。ここで、 H_n 、 ${}^t H_n$ は直交行列 U_n で同時対角化可能なので、

$$U_{6NM} = I_6 \otimes U_M \otimes U_N \quad (4.5.63)$$

$$U_{6NM}^{-1} = I_6 \otimes U_M^{-1} \otimes U_N^{-1} \quad (4.5.64)$$

により、左右方向の相互作用を表す $M \times M$ 行列および上下方向の相互作用を表す $N \times N$ 行列は対角化され、

$$U_{6NM}^{-1} A_1 U_{6NM} = B(n, m; n, m) \otimes I_M \otimes I_N \quad (4.5.65)$$

となる。ただし、 $B(n, m; n, m)$ は 6×6 の行列で、

$$B(n, m; n, m) = \begin{pmatrix} 0 & z_2 e^{i \frac{2m\pi}{M}} & -1 & 0 & 0 & 1 \\ -z_2 e^{-i \frac{2m\pi}{M}} & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & z_1 e^{i \frac{2m\pi}{N}} & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -z_1 e^{-i \frac{2m\pi}{N}} & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.5.66)$$

である。よって、 A_1 は 6×6 行列が対角に並んだ $6NM \times 6NM$ 行列となる。

・ A_2 (図 141) に対応する境界条件

A_2 は、 A_1 の場合と同様に、

$$A_2 = A(n, m; n, m) \otimes I_M \otimes I_N + A(n, m; n, m+1) \otimes H_M \otimes I_N \\ + A(n, m+1; n, m) \otimes {}^t H_M \otimes I_N + A(n, m; n+1, m) \otimes I_M \otimes \tilde{H}_N + A(n+1, m; n, m) \otimes I_M \otimes {}^t \tilde{H}_N \quad (4.5.67)$$

となる。ここで、 H_n 、 ${}^t H_n$ は直交行列 U_n で、 \tilde{H}_n 、 ${}^t \tilde{H}_n$ は直交行列 \tilde{U}_n でそれぞれ同時対角化可能なので、

$$U_{6NM} = I_6 \otimes U_M \otimes \tilde{U}_N \quad (4.5.68)$$

$$U_{6NM}^{-1} = I_6 \otimes U_M^{-1} \otimes \tilde{U}_N^{-1} \quad (4.5.69)$$

により、左右方向の相互作用を表す $M \times M$ 行列および上下方向の相互作用を表す $N \times N$ 行列は対角化され、

$$U_{6NM}^{-1} A_2 U_{6NM} = B(n, m; n, m) \otimes I_M \otimes I_N \quad (4.5.70)$$

となる。ただし、 $B(n, m; n, m)$ は 6×6 の行列で、

$$B(n, m; n, m) = \begin{pmatrix} 0 & z_2 e^{i \frac{2m\pi}{M}} & -1 & 0 & 0 & 1 \\ -z_2 e^{-i \frac{2m\pi}{M}} & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & z_1 e^{i \frac{(2n-1)\pi}{N}} & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -z_1 e^{-i \frac{(2n-1)\pi}{N}} & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.5.71)$$

である。よって、 A_2 は 6×6 行列が対角に並んだ $6NM \times 6NM$ 行列となる。

・ A_3 (図 142) に対応する境界条件

A_3 は、 A_1 の場合と同様に、

$$A_3 = A(n, m; n, m) \otimes I_M \otimes I_N + A(n, m; n, m+1) \otimes \tilde{H}_M \otimes I_N \\ + A(n, m+1; n, m) \otimes {}^t \tilde{H}_M \otimes I_N + A(n, m; n+1, m) \otimes I_M \otimes H_N + A(n+1, m; n, m) \otimes I_M \otimes {}^t H_N \quad (4.5.72)$$

となる。ここで、 \tilde{H}_n 、 ${}^t \tilde{H}_n$ は直交行列 \tilde{U}_n で、 H_n 、 ${}^t H_n$ は直交行列 U_n でそれぞれ同時対角化可能なので、

$$U_{6NM} = I_6 \otimes \tilde{U}_M \otimes U_N \quad (4.5.73)$$

$$U_{6NM}^{-1} = I_6 \otimes \tilde{U}_M^{-1} \otimes U_N^{-1} \quad (4.5.74)$$

により、左右方向の相互作用を表す $M \times M$ 行列および上下方向の相互作用を表す $N \times N$ 行列は対角化され、

$$U_{6NM}^{-1} A_3 U_{6NM} = B(n, m; n, m) \otimes I_M \otimes I_N \quad (4.5.75)$$

となる。ただし、 $B(n, m; n, m)$ は 6×6 の行列で、

$$B(n, m; n, m) = \begin{pmatrix} 0 & z_2 e^{i \frac{(2m-1)\pi}{M}} & -1 & 0 & 0 & 1 \\ -z_2 e^{-i \frac{(2m-1)\pi}{M}} & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & z_1 e^{i \frac{2n\pi}{N}} & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -z_1 e^{-i \frac{2n\pi}{N}} & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.5.76)$$

である。よって、 A_3 は 6×6 行列が対角に並んだ $6NM \times 6NM$ 行列となる。

・ A_4 (図 143) に対応する境界条件

A_4 は、 A_1 の場合と同様に、

$$A_4 = A(n, m; n, m) \otimes I_M \otimes I_N + A(n, m; n, m+1) \otimes \tilde{H}_M \otimes I_N \\ + A(n, m+1; n, m) \otimes {}^t \tilde{H}_M \otimes I_N + A(n, m; n+1, m) \otimes I_M \otimes \tilde{H}_N + A(n+1, m; n, m) \otimes I_M \otimes {}^t \tilde{H}_N \quad (4.5.77)$$

となる。ここで、 \tilde{H}_n 、 ${}^t \tilde{H}_n$ は直交行列 \tilde{U}_n で同時対角化可能なので、

$$U_{6NM} = I_6 \otimes \tilde{U}_M \otimes \tilde{U}_N \quad (4.5.78)$$

$$U_{6NM}^{-1} = I_6 \otimes \tilde{U}_M^{-1} \otimes \tilde{U}_N^{-1} \quad (4.5.79)$$

により、左右方向の相互作用を表す $M \times M$ 行列および上下方向の相互作用を表す $N \times N$ 行列は対角化され、

$$U_{6NM}^{-1} A_4 U_{6NM} = B(n, m; n, m) \otimes I_M \otimes I_N \quad (4.5.80)$$

となる。ただし、 $B(n, m; n, m)$ は 6×6 の行列で、

$$B(n, m; n, m) = \begin{pmatrix} 0 & z_2 e^{i \frac{(2m-1)\pi}{M}} & -1 & 0 & 0 & 1 \\ -z_2 e^{-i \frac{(2m-1)\pi}{M}} & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & z_1 e^{i \frac{(2n-1)\pi}{N}} & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -z_1 e^{-i \frac{(2n-1)\pi}{N}} & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.5.81)$$

である。よって、 A_4 は 6×6 行列が対角に並んだ $6NM \times 6NM$ 行列となる。

これより、以上の A_1 、 A_2 、 A_3 、 A_4 の行列式は、

$$\det A_i = \prod_{\theta_1} \prod_{\theta_2} \det \begin{bmatrix} 0 & z_2 e^{i\theta_2} & -1 & 0 & 0 & 1 \\ -z_2 e^{-i\theta_2} & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & z_1 e^{i\theta_1} & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -z_1 e^{-i\theta_1} & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.5.82)$$

となる。ただし、

$$A_1 : \begin{cases} \theta_1 = \frac{2n\pi}{N} & (n = 1, 2, \dots, N) \\ \theta_2 = \frac{2m\pi}{M} & (m = 1, 2, \dots, M) \end{cases} \quad (4.5.83)$$

$$A_2 : \begin{cases} \theta_1 = \frac{(2n-1)\pi}{N} & (n = 1, 2, \dots, N) \\ \theta_2 = \frac{2m\pi}{M} & (m = 1, 2, \dots, M) \end{cases} \quad (4.5.84)$$

$$A_3 : \begin{cases} \theta_1 = \frac{2n\pi}{N} & (n = 1, 2, \dots, N) \\ \theta_2 = \frac{(2m-1)\pi}{M} & (m = 1, 2, \dots, M) \end{cases} \quad (4.5.85)$$

$$A_4 : \begin{cases} \theta_1 = \frac{(2n-1)\pi}{N} & (n = 1, 2, \dots, N) \\ \theta_2 = \frac{(2m-1)\pi}{M} & (m = 1, 2, \dots, M) \end{cases} \quad (4.5.86)$$

とした。

しかし、 $N, M \rightarrow \infty$ の極限では、 θ_1, θ_2 は離散的ではなく $[0, 2\pi]$ の範囲で連続的になるため、 $\det A_i (i = 1, 2, 3, 4)$ は同じ値となり、

$$\det A_1 = \det A_2 = \det A_3 = \det A_4 = \det A_i \quad (4.5.87)$$

となる。

これより、分配関数 \mathcal{Z} は、

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= (2 \cosh K_1 \cosh K_2)^{NM} \sum_{v,h} N_{vh} z_1^v z_2^h \\ &= (2 \cosh K_1 \cosh K_2)^{NM} \frac{1}{2} (-\text{Pf} A_1 + \text{Pf} A_2 + \text{Pf} A_3 + \text{Pf} A_4) \end{aligned} \quad (4.5.88)$$

$$= (2 \cosh K_1 \cosh K_2)^{NM} \frac{1}{2} [-(\det A_1)^{\frac{1}{2}} + (\det A_2)^{\frac{1}{2}} + (\det A_3)^{\frac{1}{2}} + (\det A_4)^{\frac{1}{2}}] \quad (4.5.89)$$

$$= (2 \cosh K_1 \cosh K_2)^{NM} (\det A_i)^{\frac{1}{2}} \quad (4.5.90)$$

となる。

ここで、 $\det A_i$ の値を求める。ここで、R 列 - 1 列、L 列 + 2 列、U 列 + 1 列、D 列 - 2 列 を実行すると、

$$\begin{aligned} \det & \begin{pmatrix} & \text{R} & \text{L} & \text{U} & \text{D} & 1 & 2 \\ \text{R} & 0 & z_2 e^{i\theta_2} & -1 & 0 & 0 & 1 \\ \text{L} & -z_2 e^{-i\theta_2} & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ \text{U} & 1 & 0 & 0 & z_1 e^{i\theta_1} & 0 & -1 \\ \text{D} & 0 & 1 & -z_1 e^{-i\theta_1} & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 2 & -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \det \begin{pmatrix} & \text{R} & \text{L} & \text{U} & \text{D} & 1 & 2 \\ \text{R} & 0 & 1 + z_2 e^{i\theta_2} & -1 & -1 & 0 & 1 \\ \text{L} & -1 - z_2 e^{-i\theta_2} & 0 & 1 & -1 & 1 & 0 \\ \text{U} & 1 & -1 & 0 & 1 + z_1 e^{i\theta_1} & 0 & -1 \\ \text{D} & 1 & 1 & -1 - z_1 e^{-i\theta_1} & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \det \begin{pmatrix} & \text{R} & \text{L} & \text{U} & \text{D} \\ \text{R} & 0 & 1 + z_2 e^{i\theta_2} & -1 & -1 \\ \text{L} & -1 - z_2 e^{-i\theta_2} & 0 & 1 & -1 \\ \text{U} & 1 & -1 & 0 & 1 + z_1 e^{i\theta_1} \\ \text{D} & 1 & 1 & -1 - z_1 e^{-i\theta_1} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.5.91)$$

となり 6×6 の行列式を 4×4 の行列式に縮小できた。これを計算すると、

$$\begin{aligned}
& \det \begin{bmatrix} 0 & 1 + z_2 e^{i\theta_2} & -1 & -1 \\ -1 - z_2 e^{-i\theta_2} & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 + z_1 e^{i\theta_1} \\ 1 & 1 & -1 - z_1 e^{-i\theta_1} & 0 \end{bmatrix} \\
&= -(-1 - z_2 e^{-i\theta_2}) \begin{vmatrix} 1 + z_2 e^{i\theta_2} & -1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 + z_1 e^{i\theta_1} \\ 1 & -1 - z_1 e^{-i\theta_1} & 0 \end{vmatrix} \\
&\quad + \begin{vmatrix} 1 + z_2 e^{i\theta_2} & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 - z_1 e^{-i\theta_1} & 0 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} 1 + z_2 e^{i\theta_2} & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 + z_1 e^{i\theta_1} \end{vmatrix} \\
&= 1 - (e^{i\theta_1} + e^{-i\theta_1})z_1 - (e^{i\theta_2} + e^{-i\theta_2})z_2 + (e^{i\theta_2} + e^{-i\theta_2})z_1^2 z_2 + (e^{i\theta_1} + e^{-i\theta_1})z_1 z_2^2 + z_1^2 + z_2^2 + z_1^2 z_2^2 \\
&= (1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_1(1 - z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1 - z_1^2) \cos \theta_2 \tag{4.5.92}
\end{aligned}$$

となる。よって、

$$\det A_i = \prod_{\theta_1} \prod_{\theta_2} [(1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_1(1 - z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1 - z_1^2) \cos \theta_2] \tag{4.5.93}$$

となる。つまり、分配関数 \mathcal{Z} は、

$$\mathcal{Z} = (2 \cosh K_1 \cosh K_2)^{NM} \prod_{\theta_1} \prod_{\theta_2} [(1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_1(1 - z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1 - z_1^2) \cos \theta_2]^{\frac{1}{2}} \tag{4.5.94}$$

となる。

ここで、1 スピンあたりの Helmholtz の自由エネルギー F は、

$$F = -\frac{1}{NM} k_B T \ln \mathcal{Z} \tag{4.5.95}$$

となるので、

$$\begin{aligned}
F &= -\frac{1}{NM} k_B T \ln \left\{ (2 \cosh K_1 \cosh K_2)^{NM} \prod_{\theta_1} \prod_{\theta_2} [(1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_1(1 - z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1 - z_1^2) \cos \theta_2]^{\frac{1}{2}} \right\} \\
&= -k_B T \left\{ \ln(2 \cosh K_1 \cosh K_2) + \frac{1}{2} \frac{1}{NM} \sum_{\theta_1} \sum_{\theta_2} \ln[(1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_1(1 - z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1 - z_1^2) \cos \theta_2] \right\} \tag{4.5.96}
\end{aligned}$$

と変形できる。ここで、 $N, M \rightarrow \infty$ の極限をとり和を積分に置き換えると、

$$\sum_{\theta_1} \rightarrow \frac{N}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_1 \tag{4.5.97}$$

$$\sum_{\theta_2} \rightarrow \frac{M}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_2 \tag{4.5.98}$$

となるので、

$$\begin{aligned}
F &= -k_B T \left\{ \ln(2 \cosh K_1 \cosh K_2) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\theta_2 \ln[(1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_1(1 - z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1 - z_1^2) \cos \theta_2] \right\} \tag{4.5.99}
\end{aligned}$$

となる。また、

$$\ln(2 \cosh K_1 \cosh K_2) = \ln 2 + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\theta_2 \ln(\cosh K_1 \cosh K_2)^2 \quad (4.5.100)$$

となるので、

$$F = -k_B T \left\{ \ln 2 + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\theta_2 \ln(\cosh^2 K_1 \cosh^2 K_2) [(1 + \tanh^2 K_1)(1 + \tanh^2 K_2) - 2 \tanh K_1 (1 - \tanh^2 K_2) \cos \theta_1 - 2 \tanh K_2 (1 - \tanh^2 K_1) \cos \theta_2] \right\} \quad (4.5.101)$$

となる。また、

$$\cosh^2 K_1 (1 + \tanh^2 K_1) = \cosh^2 K_1 + \sinh^2 K_1 = \cosh 2K_1 \quad (4.5.102)$$

$$\cosh^2 K_2 (1 + \tanh^2 K_2) = \cosh^2 K_2 + \sinh^2 K_2 = \cosh 2K_2 \quad (4.5.103)$$

$$\cosh^2 K_1 (1 - \tanh^2 K_1) = \cosh^2 K_1 \frac{1}{\cosh^2 K_1} = 1 \quad (4.5.104)$$

$$\cosh^2 K_2 (1 - \tanh^2 K_2) = \cosh^2 K_2 \frac{1}{\cosh^2 K_2} = 1 \quad (4.5.105)$$

であるので、

$$F = -k_B T \left\{ \ln 2 + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \ln[\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_1 \cos \theta_1 - \sinh 2K_2 \cos \theta_2] \right\} \quad (4.5.106)$$

となる。ただし、 θ_1 、 θ_2 がともに周期 2π の周期関数であるから、積分範囲を変更した。

4.6 dimer 統計と Ising モデルとの対応 2

Ising モデルを dimer 統計と対応させるために、1つの格子点を6つの格子点に拡張して考えることを4.4節で行った。ここでは、1つの格子点を4つの格子点に拡張することを考える。これより、構成される行列が $6NM \times 6NM$ から、 $4NM \times 4NM$ へと減らすことができる。6つの格子点に拡張した場合、 $A(n, m; n', m')$ は 6×6 の行列であった。対角化し行列式を計算する際 (4.5.91) のように6サイトクラスターの1、2番の格子点をなくし最終的に計算する行列式は 4×4 に縮小できた。これより、初めから6サイトクラスターの1、2番の格子点をなくしたのものからも同様の行列式が形成され则认为られる。すなわち、 $A(n, m; n', m')$ を左右方向の相互作用を表す $M \times M$ の行列の (m, m') 成分、上下方向の相互作用を表す $N \times N$ 行列の (n, n') 成分に対する 4×4 の行列とすると、

$$A(n, m; n, m) = \begin{matrix} & \text{R} & \text{L} & \text{U} & \text{D} \\ \text{R} & \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \\ \text{L} & \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \\ \text{U} & \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \text{D} & \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (4.6.1)$$

$$A(n, m; n, m+1) = \begin{matrix} & \text{R} & \text{L} & \text{U} & \text{D} \\ \text{R} & \begin{pmatrix} 0 & z_2 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \text{L} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \text{U} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \text{D} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (4.6.2)$$

$$A(n, m+1; n, m) = \begin{matrix} & \text{R} & \text{L} & \text{U} & \text{D} \\ \text{R} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \text{L} & \begin{pmatrix} -z_2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \text{U} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \text{D} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (4.6.3)$$

$$A(n, m; n+1, m) = \begin{matrix} & \text{R} & \text{L} & \text{U} & \text{D} \\ \text{R} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \text{L} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \text{U} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & z_1 \end{pmatrix} \\ \text{D} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (4.6.4)$$

$$A(n+1, m; n, m) = \begin{matrix} & \text{R} & \text{L} & \text{U} & \text{D} \\ \text{R} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \text{L} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \text{U} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \text{D} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & -z_1 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (4.6.5)$$

とできる。よって、1つの格子点は図 147 のように4つの格子点に拡張される。また、自由端の場合の格子全体は図 148 のようになる。

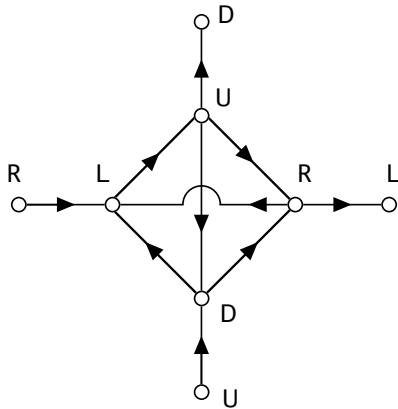


図 147 Ising モデルの 1 格子点に対応する図

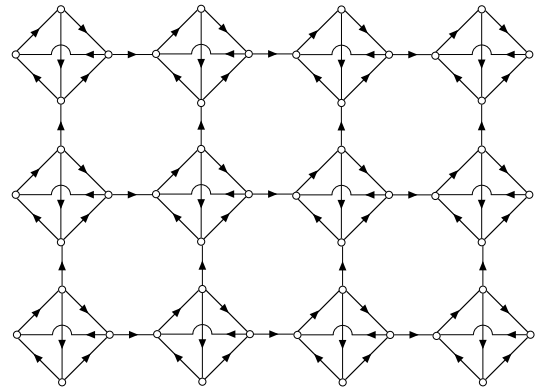


図 148 自由端の正方格子

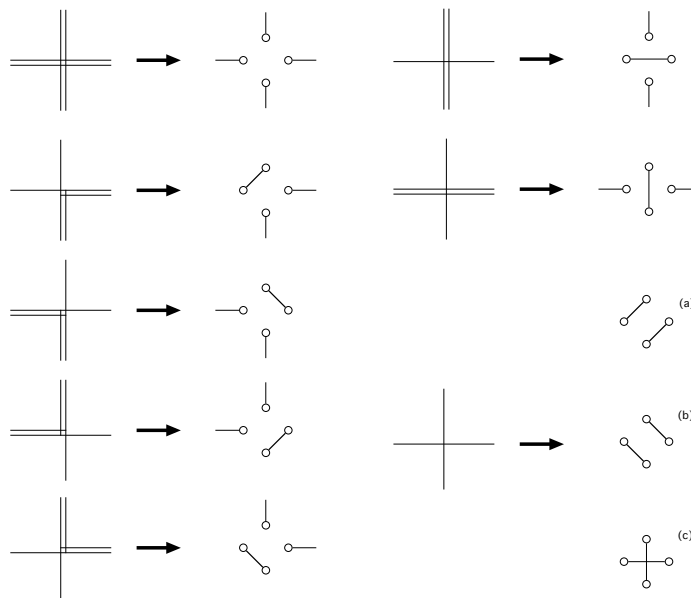


図 149 Ising モデルと dimer 配置の対応表

このようにすると図 149 のように Ising モデルの 1 つの格子点がとりうるボンド結合と図 147 のように拡張した際とりうる dimer 配置は対応付けできる。

においてボンド数が偶数個のすべての配列を表すことができる。ここで、1 つの格子点に対して Ising モデルと dimer 統計の対応は他の場合は 1 対 1 対応なのに対し、ボンド数が 0 の場合に対応する dimer 配置のみ 3 通り存在する。ここで、図 149 のボンド数が 0 の場合に対応する dimer 配置 (a) の配置を p_1 、(b) の配置を p_2 、(c) の配置を p_3 とする。ここで、 p_1 に対するボルツマン因子を考える。 p_1 は、

$$p_1 = |R,D|L,U|1,2| \quad (4.6.6)$$

となる。これより、

$$A(n, m; n, m)_{\text{RD}} A(n, m; n, m)_{\text{LU}} = -1 \quad (4.6.7)$$

となる。RDLU を RLUD にするには 2 回置換を行えばよいので、置換のパリティは +1 となる。すなわち、

$$\delta_{p_1} A(n, m; n, m)_{\text{RD}} A(n, m; n, m)_{\text{LU}} = -1 \quad (4.6.8)$$

となる。そのため、 p_1 と p_2 、 p_1 と p_3 からなる transition cycle を考えると図 150、図 151 のようになる。

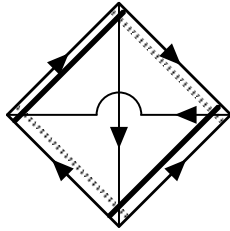


図 150 実線は p_1 、点線は p_2 である。 p_1 と p_2 からなる transition cycle の時計回りの矢印の数は奇数であるため、 p_1 と p_2 の寄与は同符号である。 p_1 からの寄与は -1 であるから、 p_2 の寄与も -1 である。

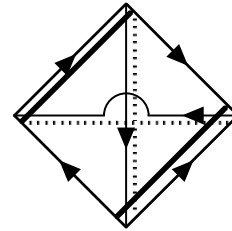


図 151 実線は p_1 、点線は p_3 である。 p_1 と p_3 からなる transition cycle の時計回りの矢印の数は偶数であるため、 p_1 と p_3 の寄与は異符号である。 p_1 からの寄与は -1 であるから、 p_3 の寄与は $+1$ である。

したがって、1 つの格子点に対してこの 3 通りの dimer 配置からの寄与は $-1 + (-1) + 1 = -1$ となる。よって、この場合も 1 対 1 対応となる。

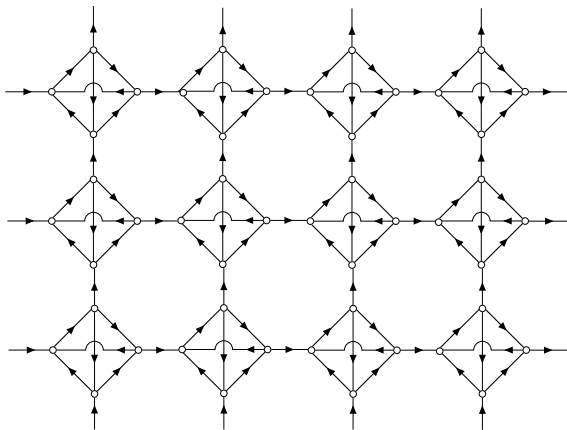


図 152 A_1 の境界条件

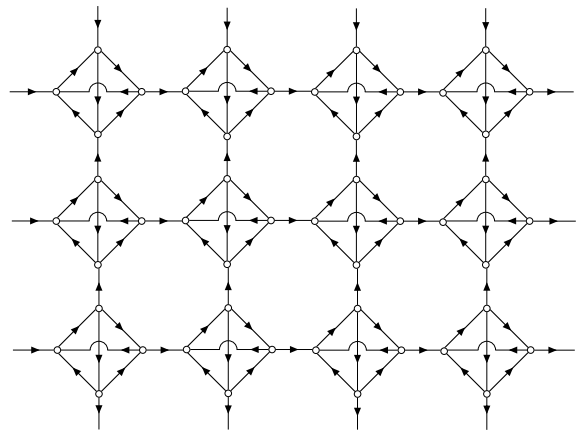


図 153 A_2 の境界条件

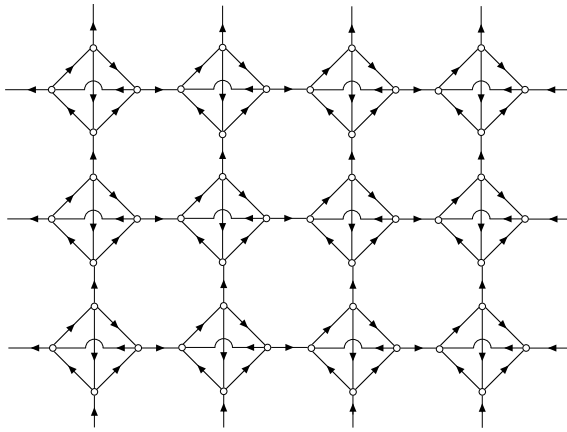


図 154 A_3 の境界条件

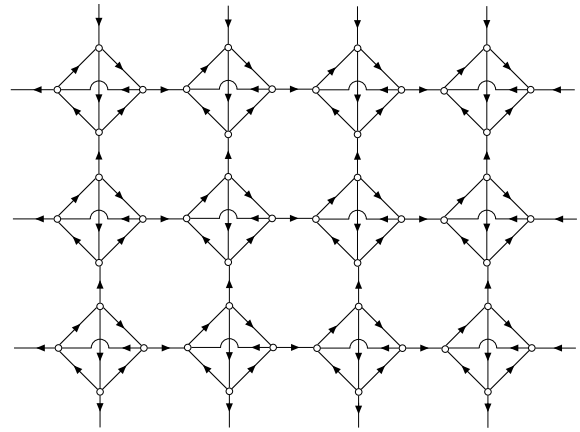


図 155 A_4 の境界条件

トーラス状の境界条件の考えると図 152 ~ 図 155 の 4 つの境界条件が存在し、この格子について今までと同様の議論により、4.5 節と同様の分配関数および Helmholtz の自由エネルギーが導出される。第 6 章で相関関数を求めるが、そこでは 1 つの格子点を 4 つの格子点に拡張した場合の $4NM \times 4NM$ の行列 A を用いて議論を行う。

5 物理量の表記および温度依存性

第3章、第4章で求めた Helmholtz の自由エネルギーを用いて内部エネルギーおよび比熱を求める。また、それぞれの温度依存性を評価する。まず、5.1 節では簡単のため $J_1 = J_2$ の等方的な場合 [12] を議論する。また、5.2 節では異方的な場合の Helmholtz の自由エネルギーの温度依存性を求める。また、転移温度の評価も行う。5.3 節では、 $J_1 \neq J_2$ の異方的な場合の内部エネルギー [8, pp.96–102] を完全楕円積分を用いた形で求め温度依存性を評価する。最後に、5.4 節では $J_1 \neq J_2$ の異方的な場合の比熱 [8, pp.102–106] を完全楕円積分を用いた形で求め温度依存性を評価する。この比熱に発散があり、2次元 Ising モデルは2次相転移を持つことを示すことができる。

5.1 $J_1 = J_2$ の場合

5.1.1 Helmholtz の自由エネルギー

第3章、第4章で求めた Helmholtz の自由エネルギー F を $J_1 = J_2$ と相互作用が縦横の両方向で同じ場合を考える。この場合、

$$K_1 = K_2 \equiv K \quad (5.1.1)$$

となる。したがって、

$$F = -k_B T \left\{ \ln(2 \cosh^2 K) + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \ln [(1+z^2)^2 - 2z(1-z^2)(\cos \theta_1 + \cos \theta_2)] \right\} \quad (5.1.2)$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} \ln [(1+z^2)^2 - 2z(1-z^2)(\cos \theta_1 + \cos \theta_2)] &= \ln \left[\frac{\cosh^2 2K}{\cosh^4 K} - 2 \frac{\sinh K}{\cosh^3 K} (\cos \theta_1 + \cos \theta_2) \right] \\ &= \ln \left[\frac{\cosh^2 2K}{\cosh^4 K} \right] + \ln \left[1 - 2 \frac{\sinh K \cosh K}{\cosh^2 2K} (\cos \theta_1 + \cos \theta_2) \right] \\ &= \ln \left[\frac{\cosh^2 2K}{\cosh^4 K} \right] + \ln \left[1 - \frac{1}{\cosh 2K \coth 2K} (\cos \theta_1 + \cos \theta_2) \right] \end{aligned} \quad (5.1.3)$$

となるから、

$$\begin{aligned} F &= -k_B T \left\{ \ln(2 \cosh^2 K) + \frac{1}{2} \ln \left[\frac{\cosh^2 2K}{\cosh^4 K} \right] + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \ln \left[1 - \frac{1}{\cosh 2K \coth 2K} (\cos \theta_1 + \cos \theta_2) \right] \right\} \\ &= -k_B T \left\{ \ln(2 \cosh 2K) + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \ln \left[1 - \frac{1}{\cosh 2K \coth 2K} (\cos \theta_1 + \cos \theta_2) \right] \right\} \\ &= -k_B T \left\{ \ln(2 \cosh 2K) + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \ln \left[1 - \frac{2}{\cosh 2K \coth 2K} \cos \frac{\theta_1 + \theta_2}{2} \cos \frac{\theta_1 - \theta_2}{2} \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.1.4)$$

となる。ただし、

$$\cos \theta_1 + \cos \theta_2 = 2 \cos \frac{\theta_1 + \theta_2}{2} \cos \frac{\theta_1 - \theta_2}{2} \quad (5.1.5)$$

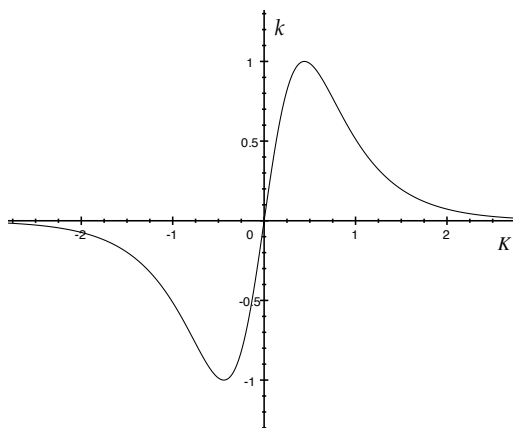


図 156 k の K 依存性

となることを用いた。ここで、

$$k \equiv \frac{2}{\cosh 2K \coth 2K} = \frac{2 \sinh 2K}{\cosh^2 2K} \quad (5.1.6)$$

とおく。ただし、 k は K 依存性が図 156 のようになるため、任意の K において $-1 \leq k \leq 1$ であることがわかる。

また、

$$\omega_1 \equiv \frac{\theta_1 + \theta_2}{2} \quad (5.1.7)$$

$$\omega_2 \equiv \frac{\theta_1 - \theta_2}{2} \quad (5.1.8)$$

と変数変換すると、

$$F = -k_B T \left\{ \ln(2 \cosh 2K) + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\omega_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\omega_2 \ln [1 - k \cos \omega_1 \cos \omega_2] \right\} \quad (5.1.9)$$

となる。ここで、右辺第 2 項の積分は $c = -k \cos \omega_1$ とおくことにより付録 E の (付録 E.21) を用いて計算することができるので、

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\omega_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\omega_2 \ln [1 - k \cos \omega_1 \cos \omega_2] &= \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\pi} d\omega_1 \int_0^{\pi} d\omega_2 \ln [1 - k \cos \omega_1 \cos \omega_2] \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\pi} \left[\int_0^{\pi} \ln(1 + c \cos \omega_2) d\omega_2 \right] d\omega_1 \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\pi} \pi \ln \left[\frac{1}{2} (1 + \sqrt{1 - c^2}) \right] d\omega_1 \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \ln \left[\frac{1}{2} (1 + \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \omega_1}) \right] d\omega_1 \quad (5.1.10) \end{aligned}$$

となり Helmholtz の自由エネルギー F は、

$$F = -k_B T \left\{ \ln(2 \cosh 2K) + \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \ln \left[\frac{1}{2} (1 + \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \omega}) \right] d\omega \right\} \quad (5.1.11)$$

となる。ただし、積分変数は 1 つであるから $\omega_1 \rightarrow \omega$ とした。

5.1.2 内部エネルギー

内部エネルギー U は Helmholtz の自由エネルギーにより、

$$U = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T} \right) = -T^2 \frac{\partial K}{\partial T} \frac{\partial}{\partial K} \left(\frac{F}{T} \right) \quad (5.1.12)$$

となるから、 F/T を K で微分したものを求める必要がある。そのため、

$$\ln \lambda \equiv -\frac{F}{k_B T} = \ln(2 \cosh 2K) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \ln \left[\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \omega} \right) \right] d\omega \quad (5.1.13)$$

を K で微分する。これは、

$$\frac{\partial \ln \lambda}{\partial K} = -\frac{1}{k_B} \frac{\partial}{\partial K} \left(\frac{F}{T} \right) = 2 \tanh 2K + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \frac{\partial}{\partial K} \ln \left[\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \omega} \right) \right] d\omega \quad (5.1.14)$$

となる。この右辺第二項の積分中の微分を実行すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial K} \ln \left[\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \omega} \right) \right] &= \frac{\partial}{\partial K} \ln \left(1 + \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \omega} \right) \\ &= -\frac{1}{2} \frac{(1 - k^2 \cos^2 \omega)^{-\frac{1}{2}} \cos^2 \omega \left(\frac{\partial k^2}{\partial K} \right)}{1 + \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \omega}} \\ &= -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial k^2}{\partial K} \right) \frac{\cos^2 \omega (1 - k^2 \cos^2 \omega)^{-\frac{1}{2}}}{1 + \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \omega}} \times \frac{1 - \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \omega}}{1 - \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \omega}} \\ &= -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial k^2}{\partial K} \right) \frac{1}{k^2} \left(\frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \cos^2 \omega}} - 1 \right) \end{aligned} \quad (5.1.15)$$

となる。したがって、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln \lambda}{\partial K} &= 2 \tanh 2K - \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\partial k^2}{\partial K} \right) \frac{1}{k^2} \int_0^\pi \left(\frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \cos^2 \omega}} - 1 \right) d\omega \\ &= 2 \tanh 2K - \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\partial k^2}{\partial K} \right) \frac{1}{k^2} \left(\int_0^\pi \frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \cos^2 \omega}} d\omega - \pi \right) \end{aligned} \quad (5.1.16)$$

となる。ここで、右辺の積分を、

$$I_2 \equiv \int_0^\pi \frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \cos^2 \omega}} d\omega \quad (5.1.17)$$

とおく。このとき、

$$\cos \omega = \sin t, \quad d\omega = -dt \quad (5.1.18)$$

と変数変換する。積分区間は、

$$\begin{array}{c|c} \omega & 0 \rightarrow \pi \\ \hline t & \frac{\pi}{2} \rightarrow -\frac{\pi}{2} \end{array}$$

であるから、

$$\begin{aligned} I_2 &= - \int_{\frac{\pi}{2}}^{-\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 t}} dt \\ &= 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 t}} dt \end{aligned} \quad (5.1.19)$$

$$\equiv 2K(k) \quad (5.1.20)$$

となる。ここで、 $0 \leq k^2 \leq 1$ であるから $K(k)$ は第一種完全楕円積分である。したがって、

$$\frac{\partial \ln \lambda}{\partial K} = 2 \tanh 2K - \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\partial k^2}{\partial K} \right) \frac{1}{k^2} \left\{ K(k) - \frac{\pi}{2} \right\} \quad (5.1.21)$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} \frac{\partial k}{\partial K} &= \frac{\partial}{\partial K} \left(\frac{2 \sinh 2K}{\cosh^2 2K} \right) \\ &= \frac{4 \cosh 2K (\cosh^2 2K - 2 \sinh^2 2K)}{\cosh^4 2K} \\ &= \frac{4(1 - \sinh^2 2K)}{\cosh^3 2K} \end{aligned} \quad (5.1.22)$$

となるので、

$$\begin{aligned} 2 \tanh 2K + \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\partial k^2}{\partial K} \right) \frac{1}{k^2} \frac{\pi}{2} &= 2 \tanh 2K + \frac{1}{2k} \frac{\partial k}{\partial K} \\ &= 2 \tanh 2K + \frac{1 - \sinh^2 2K}{\sinh 2K \cosh 2K} \\ &= \frac{1 + \sinh^2 2K}{\sinh 2K \cosh 2K} \\ &= \coth 2K \end{aligned} \quad (5.1.23)$$

となる。また、

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2\pi} \left(\frac{\partial k^2}{\partial K} \right) \frac{1}{k^2} &= -\frac{1}{\pi k} \frac{\partial k}{\partial K} = -\frac{1}{\pi} \frac{2(1 - \sinh^2 2K)}{\sinh 2K \cosh 2K} \\ &= -\frac{2}{\pi} \left(\frac{1}{\sinh 2K \cosh 2K} - \tanh 2K \right) \\ &= -\frac{2}{\pi} \coth 2K \tanh 2K \left(\frac{1}{\sinh 2K \cosh 2K} - \tanh 2K \right) \\ &= \frac{2}{\pi} \coth 2K \left(\tanh^2 2K - \frac{1}{\cosh^2 2K} \right) \end{aligned} \quad (5.1.24)$$

となり、

$$1 - \tanh^2 2K = \frac{1}{\cosh^2 2K} \quad (5.1.25)$$

となることを用いると、

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\pi k} \frac{\partial k}{\partial K} &= \frac{2}{\pi} \coth 2K (2 \tanh^2 2K - 1) \\ &= \frac{2}{\pi} \coth 2K k'' \end{aligned} \quad (5.1.26)$$

となる。ただし、

$$k'' \equiv 2 \tanh^2 2K - 1 \quad (5.1.27)$$

とおいた。したがって、

$$\frac{\partial \ln \lambda}{\partial K} = \coth 2K \left[1 + \frac{2}{\pi} k'' K(k) \right] \quad (5.1.28)$$

となる。

ここで、

$$\frac{\partial K}{\partial T} = -\frac{J}{2k_B} T^{-2} \quad (5.1.29)$$

となるから、

$$\begin{aligned} U &= -\frac{J}{2} \frac{\partial \ln \lambda}{\partial K} \\ &= -\frac{J}{2} \coth 2K \left[1 + \frac{2}{\pi} k'' K(k) \right] \end{aligned} \quad (5.1.30)$$

となる。

5.1.3 比熱

比熱 C は、

$$\begin{aligned} C &= \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial K}{\partial T} \frac{\partial U}{\partial K} \\ &= -\frac{J}{2k_B} T^{-2} \left(-\frac{J}{2} \frac{\partial^2}{\partial K^2} \ln \lambda \right) \\ &= \frac{J^2}{4k_B T^2} \frac{\partial^2 \ln \lambda}{\partial K^2} \end{aligned} \quad (5.1.31)$$

となるので、 $\ln \lambda$ を K で 2 階微分する必要がある。これは、

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \ln \lambda}{\partial K^2} &= \frac{\partial \coth 2K}{\partial K} \left[1 + \frac{2}{\pi} k'' K(k) \right] + \coth 2K \frac{\partial}{\partial K} \left[1 + \frac{2}{\pi} k'' K(k) \right] \\ &= \frac{\partial \coth 2K}{\partial K} \left[1 + \frac{2}{\pi} k'' K(k) \right] + \frac{2}{\pi} \coth 2K \left[\frac{\partial k''}{\partial K} K(k) + k'' \frac{\partial K(k)}{\partial K} \right] \end{aligned} \quad (5.1.32)$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \coth 2K}{\partial K} &= -\frac{2}{\sinh^2 2K} \\ &= -2 \coth^2 2K \frac{1}{\cosh^2 2K} \\ &= -2 \coth^2 2K (1 - \tanh^2 2K) \\ &= -\coth^2 2K \{1 - (2 \tanh^2 2K - 1)\} \\ &= -\coth^2 2K (1 - k'') \end{aligned} \quad (5.1.33)$$

である。これより、(5.1.32) の右辺第 1 項は、

$$\frac{\partial \coth 2K}{\partial K} \left[1 + \frac{2}{\pi} k'' K(k) \right] = -\frac{2}{\pi} \coth^2 2K (1 - k'') \left[\frac{\pi}{2} + k'' K(k) \right] \quad (5.1.34)$$

となる。

また、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial k''}{\partial K} &= \frac{\partial}{\partial K}(2 \tanh^2 2K - 1) \\
&= 4 \tanh 2K \frac{\partial \tanh 2K}{\partial K} \\
&= 4 \tanh 2K \frac{2}{\cosh^2 2K} \\
&= \frac{8 \sinh 2K}{\cosh^3 2K}
\end{aligned} \tag{5.1.35}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial K(k)}{\partial K} &= \frac{\partial k}{\partial K} \frac{\partial K(k)}{\partial k} \\
&= \frac{\partial k}{\partial K} \frac{1}{k} \left\{ \frac{E(k)}{1-k^2} - K(k) \right\} \\
&= -2 \coth 2K (2 \tanh^2 2K - 1) \left\{ \frac{E(k)}{1-k^2} - K(k) \right\}
\end{aligned} \tag{5.1.36}$$

となる。ただし、 $E(k)$ は、

$$E(k) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{1 - k^2 \sin^2 t} dt \tag{5.1.37}$$

であり、式変形においては付録 F で導出される (付録 F.1) を用いた。

これより、(5.1.32) の右辺第 2 項は、

$$\begin{aligned}
\frac{2}{\pi} \coth 2K \left[\frac{\partial k''}{\partial K} K(k) + k'' \frac{\partial K(k)}{\partial K} \right] &= \frac{2}{\pi} \coth 2K \left[\frac{8 \sinh 2K}{\cosh^3 2K} K(k) \right. \\
&\quad \left. - 2 \coth 2K (2 \tanh^2 2K - 1)^2 \left\{ \frac{E(k)}{1-k^2} - K(k) \right\} \right]
\end{aligned} \tag{5.1.38}$$

となる。このうち $K(k)$ にかかる係数は、

$$\begin{aligned}
\frac{2}{\pi} \coth 2K \left\{ \frac{8 \sinh 2K}{\cosh^3 2K} + 2 \coth 2K (2 \tanh^2 2K - 1)^2 \right\} &= \frac{2}{\pi} \coth^2 2K \left\{ \frac{8 \sinh^2 2K}{\cosh^4 2K} + 2(2 \tanh^2 2K - 1)^2 \right\} \\
&= \frac{2}{\pi} \coth^2 2K \left\{ \frac{8 \sinh^2 2K}{\cosh^4 2K} + 8 \tanh^4 2K - 8 \tanh^2 2K + 2 \right\}
\end{aligned} \tag{5.1.39}$$

となるが、ここで、

$$\begin{aligned}
\frac{\sinh^2 2K}{\cosh^4 2K} - \tanh^2 2K &= \frac{\sinh^2 2K - \sinh^2 2K \cosh^2 2K}{\cosh^4 2K} \\
&= \frac{\sinh^2 2K}{\cosh^4 2K} (1 - \cosh^2 2K) \\
&= -\tanh^4 2K
\end{aligned} \tag{5.1.40}$$

を用いると、

$$\frac{2}{\pi} \coth 2K \left\{ \frac{8 \sinh 2K}{\cosh^3 2K} + 2 \coth 2K (2 \tanh^2 2K - 1)^2 \right\} = \frac{2}{\pi} \coth^2 2K \times 2 \tag{5.1.41}$$

となる。また、 $E(k)$ にかかる係数は、

$$\begin{aligned}
(2 \tanh^2 2K - 1)^2 &= 4 \tanh^4 2K - 4 \tanh^2 2K + 1 \\
&= 4 \frac{\sinh^2 2K (\sinh^2 2K - \cosh^2 2K)}{\cosh^4 2K} + 1 \\
&= 1 - \frac{4 \sinh^2 2K}{\cosh^4 2K} \\
&= 1 - k^2
\end{aligned} \tag{5.1.42}$$

となることより、

$$\frac{2}{\pi} \coth 2K \left\{ -2 \coth 2K (2 \tanh^2 2K - 1)^2 \frac{1}{1 - k^2} \right\} = -\frac{2}{\pi} \coth^2 2K \times 2 \tag{5.1.43}$$

となる。

したがって、これらをまとめると、

$$\frac{\partial^2 \ln \lambda}{\partial K^2} = \frac{2}{\pi} \coth^2 2K \left\{ 2K(k) - 2E(k) - (1 - k'') \left[\frac{\pi}{2} + k'' K(k) \right] \right\} \tag{5.1.44}$$

が得られる。

よって比熱 C は、

$$C = \frac{J^2}{4k_B T^2} \frac{2}{\pi} \coth^2 2K \left\{ 2K(k) - 2E(k) - (1 - k'') \left[\frac{\pi}{2} + k'' K(k) \right] \right\} \tag{5.1.45}$$

となる。

5.1.4 自由エネルギー、内部エネルギー、比熱の温度依存性

以上の結果をまとめると、 $J_1 = J_2 \equiv J$ と相互作用が等方的な場合、自由エネルギー F 、内部エネルギー U 、比熱 C はそれぞれ、

$$F = -k_B T \left\{ \ln(2 \cosh 2K) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \ln \left[\frac{1}{2} (1 + \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \omega}) \right] d\omega \right\} \tag{5.1.46}$$

$$U = -\frac{J}{2} \coth 2K \left[1 + \frac{2}{\pi} k'' K(k) \right] \tag{5.1.47}$$

$$C = \frac{J^2}{4k_B T^2} \frac{2}{\pi} \coth^2 2K \left\{ 2K(k) - 2E(k) - (1 - k'') \left[\frac{\pi}{2} + k'' K(k) \right] \right\} \tag{5.1.48}$$

で与えられる。

次に、これらの温度依存性を数値的に評価する。まず、自由エネルギー F の温度依存性は図 158 に示すようになる。このように F は温度により単調に減少することがわかる。このとき、(3.3.26) において定義される T_c (このときの K を K_c とする) は、

$$\sinh 2K_c = \sinh \frac{J}{k_B T_c} = 1 \tag{5.1.49}$$

を満たす温度であるが、この値を実際に計算すると、

$$\frac{J}{k_B T_c} = \sinh^{-1} 1 \cong 0.881374 \tag{5.1.50}$$

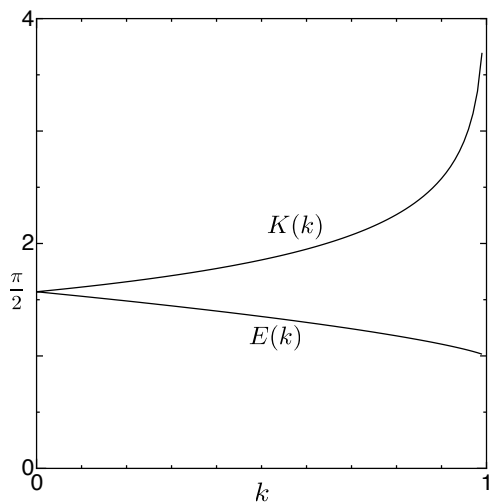


図 157 第一種完全楕円積分 $K(k)$ 、第二種完全楕円積分 $E(k)$ の k 依存性

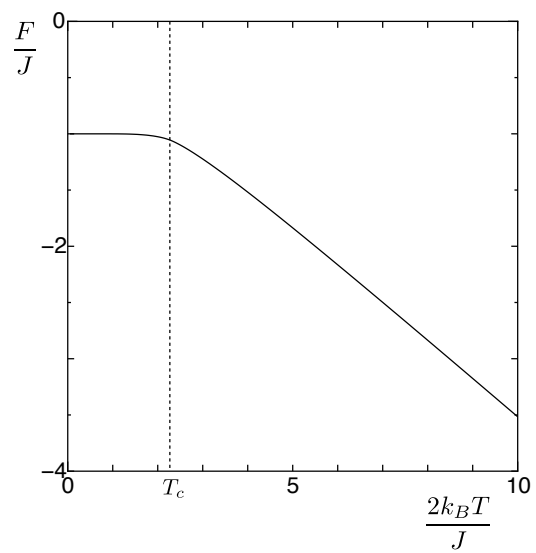


図 158 自由エネルギー F の温度依存性

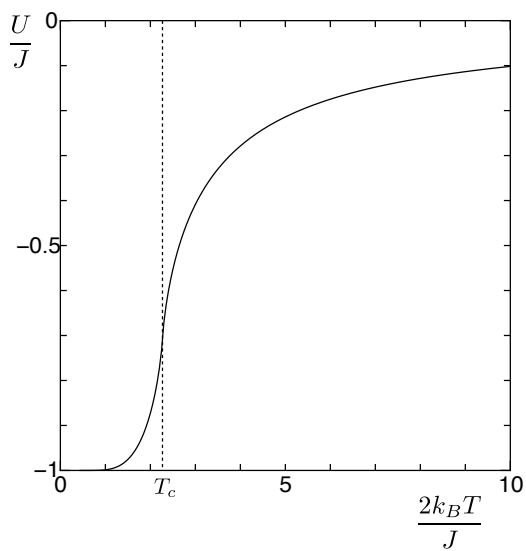


図 159 内部エネルギー U の温度依存性

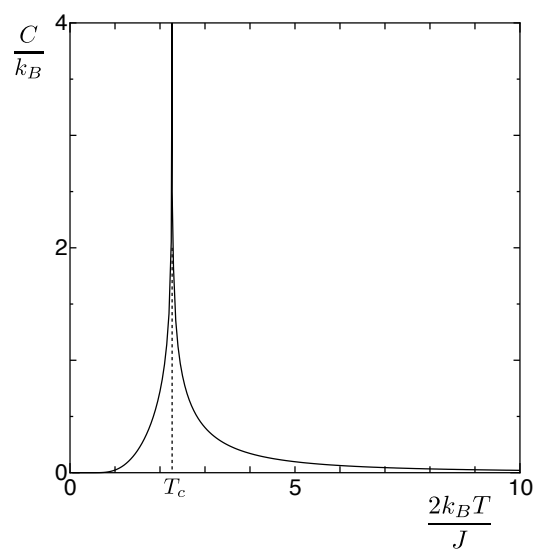


図 160 比熱 C の温度依存性

より、

$$\frac{2k_B T_c}{J} \cong 2.26918 \quad (5.1.51)$$

と評価される。

次に U 、 C の温度依存性について考えることとする。このため、第一種完全楕円積分 $K(k)$ 、第二種完全楕円積分 $E(k)$ の性質を調べる。それぞれの k 依存性は図 157 のようになる。このように、 $k = 1$ において

$K(k)$ は発散する。ここで、 $T = T_c$ のとき k の値は、

$$k = \frac{2 \sinh 2K_c}{\cosh^2 2K_c} = \frac{2 \sinh 2K_c}{1 + \sinh^2 2K_c} = 1 \quad (5.1.52)$$

となるので、 $T = T_c$ において第一種完全楕円積分 $K(k)$ は発散する。このため T_c の近傍では内部エネルギー U 、比熱 C に特異性が生じる。

ただし、内部エネルギー U では $K(k)$ は k'' がかった状態で存在しており、この k'' は $T = T_c$ において、

$$k'' = 2 \tanh^2 2K_c - 1 = 2 \frac{\sinh^2 2K_c}{1 + \sinh^2 2K_c} - 1 = 0 \quad (5.1.53)$$

となる。これより、内部エネルギーは $T \cong T_c$ で微分は発散するが連続である。よって、内部エネルギーの温度依存性は図 159 に示すようになる。

最後に比熱 C であるが、 T_c 近傍では、

$$\begin{aligned} C &\cong \frac{J^2}{4k_B T_c^2} \frac{4}{\pi} \coth^2 2K_c \left\{ K(k) - 1 - \frac{\pi}{4} \right\} \\ &= \frac{2k_B \beta_c^2 J^2}{\pi} \left\{ K(k) - 1 - \frac{\pi}{4} \right\} \end{aligned} \quad (5.1.54)$$

と近似できる。ただし、 β_c は T_c での β である。温度依存性を明らかにするために、 T_c 近傍での $K(k)$ の振る舞いを考える。まず、 k を T_c 近傍で展開する。2 次までの導関数は、

$$\frac{\partial k}{\partial T} = -\frac{J}{k_B T^2} \left(\frac{2}{\cosh 2K} - \frac{4 \sinh^2 2K}{\cosh^3 2K} \right) \quad (5.1.55)$$

$$\frac{\partial^2 k}{\partial T^2} = 2 \frac{J}{k_B T^3} \left(\frac{2}{\cosh 2K} - \frac{4 \sinh^2 2K}{\cosh^3 2K} \right) + \left(\frac{J}{k_B T^2} \right)^2 \left(-\frac{2 \sinh 2K}{\cosh^2 2K} - \frac{8 \sinh 2K}{\cosh^2 2K} + \frac{12 \sinh^3 2K}{\cosh^4 2K} \right) \quad (5.1.56)$$

となるので、

$$\left. \frac{\partial k}{\partial T} \right|_{T=T_c} = -\frac{J}{k_B T_c^2} \left(\frac{2}{\cosh 2K_c} - \frac{4 \sinh^2 2K_c}{\cosh^3 2K_c} \right) = 0 \quad (5.1.57)$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 k}{\partial T^2} \right|_{T=T_c} &= 2 \frac{J}{k_B T_c^3} \left(\frac{2}{\cosh 2K_c} - \frac{4 \sinh^2 2K_c}{\cosh^3 2K_c} \right) + \left(\frac{J}{k_B T_c^2} \right)^2 \left(-\frac{2 \sinh 2K_c}{\cosh^2 2K_c} - \frac{8 \sinh 2K_c}{\cosh^2 2K_c} + \frac{12 \sinh^3 2K_c}{\cosh^4 2K_c} \right) \\ &= -2 \left(\frac{J}{k_B T_c^2} \right)^2 \end{aligned} \quad (5.1.58)$$

となる。よって、

$$\begin{aligned} k &\cong 1 - \left(\frac{J}{k_B T_c^2} \right)^2 (T - T_c)^2 \\ &= 1 - \beta_c^2 J^2 \left(\frac{T}{T_c} - 1 \right)^2 \end{aligned} \quad (5.1.59)$$

となる。これより、(付録 G.1) で定義される k' は、

$$\begin{aligned} k'^2 &= 1 - k^2 \\ &\cong 1 - \left\{ 1 - \beta_c^2 J^2 \left(\frac{T}{T_c} - 1 \right)^2 \right\}^2 \\ &\cong 2\beta_c^2 J^2 \left(\frac{T}{T_c} - 1 \right)^2 \end{aligned} \quad (5.1.60)$$

と近似される。したがって、(付録 G.16) より、 $K(k)$ は $k \rightarrow 1$ の極限で、

$$\begin{aligned} K(k) &\cong \ln \frac{4}{|k'|} \\ &= -\ln \frac{\sqrt{2}}{4} \beta_c J \left| \frac{T}{T_c} - 1 \right| \\ &= -\ln \left| \frac{T}{T_c} - 1 \right| - \ln \frac{\sqrt{2}}{4} \beta_c J \end{aligned} \quad (5.1.61)$$

と近似される。よって、比熱 C は T_c 近傍で、

$$\frac{C}{k_B} \cong \frac{2\beta_c^2 J^2}{\pi} \left\{ -\ln \left| \frac{T}{T_c} - 1 \right| - \ln \frac{\sqrt{2}}{4} \beta_c J - 1 - \frac{\pi}{4} \right\} \quad (5.1.62)$$

$$\propto -\ln \left| \frac{T}{T_c} - 1 \right| \quad (5.1.63)$$

という振る舞いとなる。すなわち、 $T = T_c$ で比熱は \log 発散をする。よって、比熱の温度依存性は図 160 となる。

このように、自由エネルギー F の 2 階微分である比熱 C に特異性が生じるため 2 次元イジングモデルの相転移は 2 次相転移であることがわかる。また、(3.3.26) において定義される T_c は 2 次相転移の臨界温度であることがわかった。

5.2 異方的な場合の Helmholtz の自由エネルギーの温度依存性と転移温度

Helmholtz の自由エネルギーは、

$$\begin{aligned} F = -k_B T &\left\{ \ln(2 \cosh K_1 \cosh K_2) \right. \\ &\left. + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \ln [(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2] \right\} \end{aligned} \quad (5.2.1)$$

であった。この温度依存性を数値的に評価したものが図 161 となる。このように自由エネルギーは温度により単調に減少する。ただし、

$$r \equiv \frac{J_1}{J_2} = \frac{K_1}{K_2} \quad (5.2.2)$$

とおき、異方性の強さを表すパラメーターとした。つまり、 $r = 1$ のときが等方的な場合で r が小さくなるにつれて縦方向の相互作用が弱くなっていき、 $r = 0$ で 1 次元の Ising モデルとなる。それぞれの r に対する転移温度 T_c を (3.3.26) において小数点以下 3 桁の精度で求めると表 6 となる。

表 6 $r = J_1/J_2$ と転移温度 T_c の関係

$r = J_1/J_2$	1	0.1	0.01
$\frac{4k_B T_c}{J_1 + J_2}$	2.269	1.647	1.008

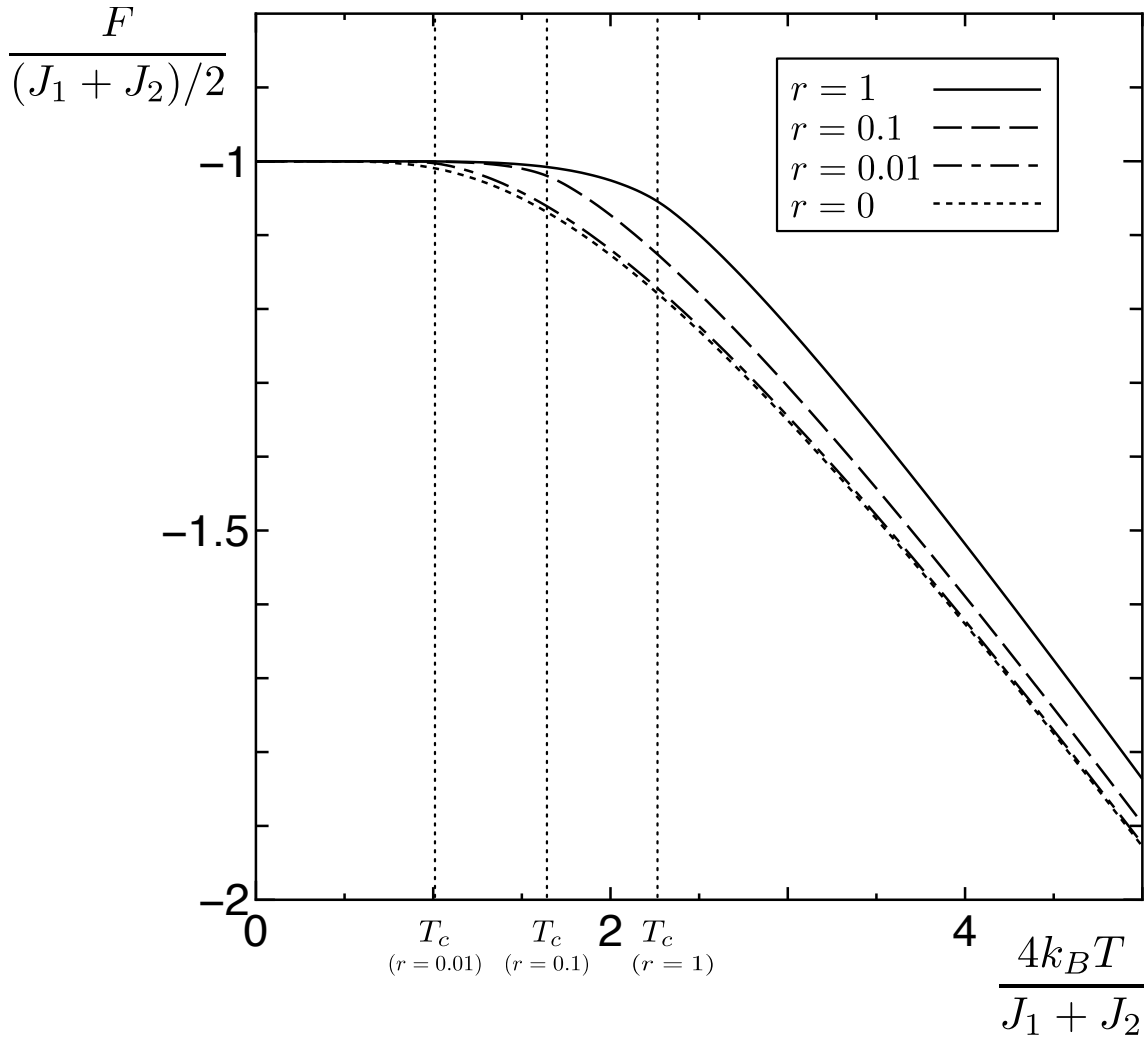


図 161 Helmholtz の自由エネルギーの温度依存性

これより、 r を 10^{-2} 程度まで小さくしても転移点が有限の値をとることが分かる。実際、

$$x_c = \frac{4k_B T_c}{J_1 + J_2} \cong \frac{4k_B T_c}{J_2} \quad (5.2.3)$$

$$(5.2.4)$$

とおき、 $r \ll 1$ のとき (3.3.26) を展開すると、

$$\begin{aligned} \sinh\left(\frac{4r}{1+r} \frac{1}{x_c}\right) \sinh\left(\frac{4}{1+r} \frac{1}{x_c}\right) &= 1 \\ \sinh\frac{4r}{x_c} \sinh\frac{4}{x_c} &= 1 \\ \frac{2r}{x_c} e^{\frac{4}{x_c}} &\cong 1 \\ r &\cong \frac{1}{2} x_c e^{-\frac{4}{x_c}} \end{aligned} \quad (5.2.5)$$

となる。この関係を図示すると図 162 となる。このように $r = 10^{-2}$ 程度の場合転移温度は有限であり、限りなく $r = 0$ に近づくと転移温度は急激に 0 に近づくことが分かる。

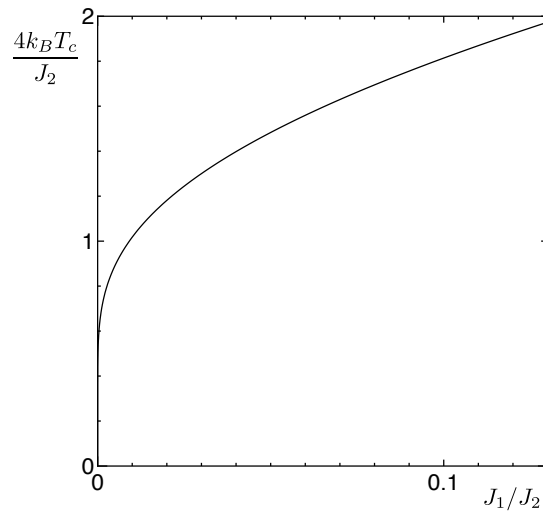


図 162 転移点の r 依存性

これより、片方の相互作用を小さくしていく際、転移温度が下がりにくいことが分かる。この物理的意味について考える。ここでは、 J_1 (縦方向の相互作用) を小さくしていく場合について考える。縦方向の相互作用が弱いと、横方向に 1 次元 Ising モデルの性質が現れてくると考えられる。1 次元 Ising モデルでは、第 2 章で扱ったように温度を下げるにより相関距離 ξ が大きくなる。つまり、図 163 のように ξ 程度の距離でスピンの向きがそろっていると考えられる。このため、 $S = \frac{1}{2}\xi$ という大きなスピンによる 2 次元 Ising モデルに近似できると考えられる。ただし、スピン間の相互作用は図 163 のように横方向は変わらず J_2 、縦方向は $J_1 \xi^2$ 程度になると考えられる。ここで、 $J_1 \ll J_2$ であっても低温では ξ が大きくなると考えられるので、 J_2 、 $J_1 \xi^2$ の差は大きくなりにくい。そのため、 J_1 を小さくしても転移温度が下がりにくくなると考えられる。

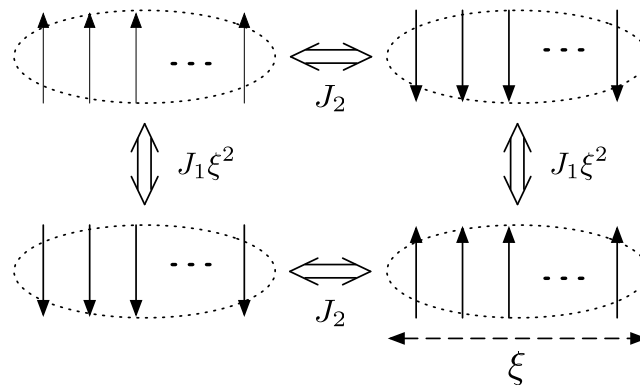


図 163 $J_1 \ll 1$ の低温での振る舞いの模式図

5.3 内部エネルギー

5.3.1 内部エネルギーの表記

内部エネルギー U は、Helmholtz の自由エネルギー F により、

$$U = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T} \right) = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F) \quad (5.3.1)$$

で与えられる。ここで、Helmholtz の自由エネルギー F は、

$$F = -k_B T \left\{ \ln(2 \cosh K_1 \cosh K_2) + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \ln [(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2] \right\} \quad (5.3.2)$$

である。これより、

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left\{ \ln(2 \cosh K_1 \cosh K_2) + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \ln [(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2] \right\} \quad (5.3.3)$$

となる。まず、第1項の微分は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln(2 \cosh K_1 \cosh K_2) &= \frac{1}{2 \cosh K_1 \cosh K_2} \frac{\partial}{\partial \beta} 2 \cosh K_1 \cosh K_2 \\ &= \frac{2}{2 \cosh K_1 \cosh K_2} \left(\frac{\partial \cosh K_1}{\partial \beta} \cosh K_2 + \cosh K_1 \frac{\partial \cosh K_2}{\partial \beta} \right) \\ &= \frac{2}{2 \cosh K_1 \cosh K_2} \left(\frac{\partial K_1}{\partial \beta} \sinh K_1 \cosh K_2 + \frac{\partial K_2}{\partial \beta} \cosh K_1 \sinh K_2 \right) \\ &= \frac{J_1}{2} \tanh K_1 + \frac{J_2}{2} \tanh K_2 \end{aligned} \quad (5.3.4)$$

$$= \frac{J_1}{2} z_1 + \frac{J_2}{2} z_2 \quad (5.3.5)$$

となる。ただし、 $i = 1, 2$ に対して、

$$\frac{\partial K_i}{\partial \beta} = \frac{\partial J_i \beta}{\partial \beta} \frac{1}{2} = \frac{J_i}{2} \quad (5.3.6)$$

である。

次に、 $i = 1, 2$ に対して、

$$\frac{\partial}{\partial \beta} = \frac{\partial z_i}{\partial \beta} \frac{\partial}{\partial z_i} = \frac{J_i}{2} \frac{1}{\cosh^2 K_i} \frac{\partial}{\partial z_i} = \frac{J_i}{2} (1-z_i^2) \frac{\partial}{\partial z_i} \quad (5.3.7)$$

となるので、第2項の微分は、

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \ln[(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta_1 - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta_2] \\
&= \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{\partial}{\partial \beta} \ln[(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta_1 - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta_2] \\
&= \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{J_1}{2} (1-z_1^2) \frac{\partial}{\partial z_1} \ln[(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta_1 - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta_2] \\
&\quad + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{J_2}{2} (1-z_2^2) \frac{\partial}{\partial z_2} \ln[(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta_1 - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta_2] \\
&= \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{J_1}{2} (1-z_1^2) \frac{2z_1(1+z_2^2) - 2(1-z_2^2)\cos\theta_1 + 4z_1z_2\cos\theta_2}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta_1 - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta_2} \\
&\quad + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{J_2}{2} (1-z_2^2) \frac{2z_2(1+z_1^2) - 2(1-z_1^2)\cos\theta_2 + 4z_1z_2\cos\theta_1}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta_1 - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta_2} \\
&= \frac{J_1}{2} (1-z_1^2) \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{z_1(1+z_2^2) - (1-z_2^2)\cos\theta_1 + 2z_1z_2\cos\theta_2}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta_1 - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta_2} \\
&\quad + \frac{J_2}{2} (1-z_2^2) \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{z_2(1+z_1^2) - (1-z_1^2)\cos\theta_2 + 2z_1z_2\cos\theta_1}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta_1 - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta_2} \tag{5.3.8}
\end{aligned}$$

となる。よって、内部エネルギー U は、

$$\begin{aligned}
U &= -\frac{J_1}{2} \left[z_1 + (1-z_1^2) \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{z_1(1+z_2^2) - (1-z_2^2)\cos\theta_1 + 2z_1z_2\cos\theta_2}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta_1 - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta_2} \right] \\
&\quad - \frac{J_2}{2} \left[z_2 + (1-z_2^2) \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{z_2(1+z_1^2) - (1-z_1^2)\cos\theta_2 + 2z_1z_2\cos\theta_1}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta_1 - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta_2} \right] \tag{5.3.9}
\end{aligned}$$

となる。ここで、 J_1 にかかる積分の部分は、

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{z_1(1+z_2^2) - (1-z_2^2)\cos\theta_1 + 2z_1z_2\cos\theta_2}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta_1 - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta_2} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{z_1(1+z_2^2) - (1-z_2^2)\frac{1}{2}(e^{i\theta_1} + e^{-i\theta_1}) + 2z_1z_2\cos\theta_2}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta_1 - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta_2} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{1}{2} \frac{\{z_1(1+z_2^2) - (1-z_2^2)e^{i\theta_1} + 2z_1z_2\cos\theta_2\} + \{z_1(1+z_2^2) - (1-z_2^2)e^{-i\theta_1} + 2z_1z_2\cos\theta_2\}}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta_1 - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta_2} \\
&= \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{z_1(1+z_2^2) - (1-z_2^2)e^{-i\theta_1} + 2z_1z_2\cos\theta_2}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta_1 - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta_2} \\
&\quad + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{z_1(1+z_2^2) - (1-z_2^2)e^{i\theta_1} + 2z_1z_2\cos\theta_2}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta_1 - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta_2} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{z_1(1+z_2^2) - (1-z_2^2)e^{-i\theta_1} + 2z_1z_2\cos\theta_2}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta_1 - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta_2} \\
&= -\frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 e^{-i\theta_1} \frac{1-z_2^2 - z_1e^{i\theta_1}(1+z_2^2+2z_2\cos\theta_2)}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta_1 - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta_2} \tag{5.3.10}
\end{aligned}$$

となる。ただし、4行目から5行目の式変形では $\theta_1 \rightarrow -\theta_1$ という変数変換により、

$$\begin{aligned} & \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{z_1(1+z_2^2) - (1-z_2^2)e^{i\theta_1} + 2z_1z_2 \cos \theta_2}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2} \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{z_1(1+z_2^2) - (1-z_2^2)e^{-i\theta_1} + 2z_1z_2 \cos \theta_2}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2} \end{aligned} \quad (5.3.11)$$

となることを用いた。同様に J_2 にかかる積分も変形でき、

$$\begin{aligned} U &= -\frac{J_1}{2} \left[z_1 - (1-z_1^2) \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 e^{-i\theta_1} \frac{1 - z_2^2 - z_1 e^{i\theta_1} (1 + z_2^2 + 2z_2 \cos \theta_2)}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2} \right] \\ &\quad - \frac{J_2}{2} \left[z_2 - (1-z_2^2) \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 e^{-i\theta_2} \frac{1 - z_1^2 - z_2 e^{i\theta_2} (1 + z_1^2 + 2z_1 \cos \theta_1)}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2} \right] \end{aligned} \quad (5.3.12)$$

となる。ここで、

$$U \equiv -\frac{J_1}{2} u_1 - \frac{J_2}{2} u_2 \quad (5.3.13)$$

とおく。これより、 u_2 を計算する。 u_1 は u_2 に対して添字を $1 \leftrightarrow 2$ としたものである。 u_2 は、

$$u_2 = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \left[z_2 - (1-z_2^2) e^{-i\theta_2} \frac{1 - z_1^2 - z_2 e^{i\theta_2} (1 + z_1^2 + 2z_1 \cos \theta_1)}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2} \right] \quad (5.3.14)$$

である。この被積分関数は、

$$\begin{aligned} & z_2 - e^{-i\theta_2} (1-z_2^2) \frac{1 - z_1^2 - z_2 e^{i\theta_2} (1 + z_1^2 + 2z_1 \cos \theta_1)}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2} \\ &= \frac{z_2 \{ (1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2 \} - e^{-i\theta_2} (1-z_2^2) \{ 1 - z_1^2 - z_2 e^{i\theta_2} (1 + z_1^2 + 2z_1 \cos \theta_1) \}}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2} \\ &= \frac{z_2(1+z_1^2)(1+z_2^2) + z_2(1-z_2^2)(1+z_1^2) - 2z_2^2(1-z_1^2) \cos \theta_2 - (1-z_2^2)(1-z_1^2) e^{-i\theta_2}}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2} \\ &= \frac{2z_2(1+z_1^2) - z_2^2(1-z_1^2) e^{i\theta_2} - (1-z_1^2) e^{-i\theta_2}}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2} \end{aligned} \quad (5.3.15)$$

と変形できるので、

$$u_2 = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{2z_2(1+z_1^2) - z_2^2(1-z_1^2) e^{i\theta_2} - (1-z_1^2) e^{-i\theta_2}}{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2} d\theta_1 d\theta_2 \quad (5.3.16)$$

となる。ここで、 θ_1 の積分を実行する。まず、

$$u \equiv -2z_1(1-z_2^2) \quad (5.3.17)$$

$$v \equiv (1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta_2 \quad (5.3.18)$$

とおくと、計算すべき積分は、

$$I \equiv \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{u \cos \theta_1 + v} d\theta_1 \quad (5.3.19)$$

となる。この積分を解くために、

$$\tan \frac{\theta_1}{2} = t \quad (5.3.20)$$

と変数変換すると、

$$d\theta_1 = \frac{2}{1+t^2} dt \quad (5.3.21)$$

となる。また積分区間は、

$$\begin{array}{c|cc} \theta_1 & -\pi & \rightarrow & \pi \\ \hline t & -\infty & \rightarrow & \infty \end{array}$$

となり、

$$\cos \theta_1 = \frac{1-t^2}{1+t^2} \quad (5.3.22)$$

となる。よって、

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{u \frac{1-t^2}{1+t^2} + v} \frac{2}{1+t^2} dt \\ &= 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{(v-u)t^2 + (v+u)} dt \end{aligned} \quad (5.3.23)$$

となる。ここで、 $0 \leq z_1 \leq 1$ 、 $0 \leq z_2 \leq 1$ の範囲では $v+u$ 、 $v-u$ はすべての θ_1 の値に対して正の値となる。これより、

$$\begin{aligned} I &= \frac{2}{v-u} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{t^2 + \frac{v+u}{v-u}} dt \\ &= \frac{2}{v-u} \left(\frac{v-u}{v+u} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\tan^{-1} \left(\frac{v-u}{v+u} \right)^{\frac{1}{2}} t \right]_{-\infty}^{\infty} \\ &= \frac{2}{\sqrt{(v+u)(v-u)}} \left(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2} \right) \\ &= \frac{2\pi}{\sqrt{(v+u)(v-u)}} \end{aligned} \quad (5.3.24)$$

となる。

したがって、

$$\begin{aligned} u_2 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \\ &\times \frac{2z_2(1+z_1^2) - z_2^2(1-z_1^2)e^{i\theta} - (1-z_1^2)e^{-i\theta}}{\sqrt{\{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta - 2z_1(1-z_2^2)\}\{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta + 2z_1(1-z_2^2)\}}} \end{aligned} \quad (5.3.25)$$

となる。ただし、積分変数は θ_2 のみであるので、 θ_2 を θ とした。ここで、

$$\alpha_1 \equiv \frac{z_2(1-z_1)}{1+z_1} \quad (5.3.26)$$

$$\alpha_2 \equiv \frac{1-z_1}{z_2(1+z_1)} \quad (5.3.27)$$

とおき表記を簡略化する。このとき、被積分関数の分子の部分は、

$$\begin{aligned}
& 2z_2(1+z_1^2) - z_2^2(1-z_1^2)e^{i\theta} - (1-z_1^2)e^{-i\theta} \\
&= z_2(1+z_1)^2 \left\{ 2 \frac{1+z_1^2}{(1+z_1)^2} - z_2 \frac{1-z_1^2}{(1+z_1)^2} e^{i\theta} - \frac{1-z_1^2}{z_2(1+z_1)^2} e^{-i\theta} \right\} \\
&= z_2(1+z_1)^2 \left\{ \frac{1+2z_1+z_1^2+1-2z_1+z_1^2}{(1+z_1)^2} - z_2 \frac{1-z_1}{1+z_1} e^{i\theta} - \frac{1-z_1}{z_2(1+z_1)} e^{-i\theta} \right\} \\
&= z_2(1+z_1)^2 \left\{ 1 + \frac{(1-z_1)^2}{(1+z_1)^2} - \alpha_1 e^{i\theta} - \alpha_2 e^{-i\theta} \right\} \\
&= z_2(1+z_1)^2 (1 + \alpha_1 \alpha_2 - \alpha_1 e^{i\theta} - \alpha_2 e^{-i\theta}) \\
&= z_2(1+z_1)^2 (1 - \alpha_1 e^{i\theta}) (1 - \alpha_2 e^{-i\theta}) \tag{5.3.28}
\end{aligned}$$

となる。また、

$$\begin{aligned}
& (1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta - 2z_1(1-z_2^2) \\
&= z_2^2(1+z_1)^2 \left\{ \frac{(1+z_1^2)(1+z_2^2)}{z_2^2(1+z_1)^2} - \frac{2z_1(1-z_2^2)}{z_2^2(1+z_1)^2} - 2 \frac{z_2(1-z_1^2)}{z_2^2(1+z_1)^2} \frac{1}{2} (e^{i\theta} + e^{-i\theta}) \right\} \\
&= z_2^2(1+z_1)^2 \left\{ \frac{z_2^2(1+2z_1+z_1^2) + (1-2z_1+z_1^2)}{z_2^2(1+z_1)^2} - \frac{1-z_1}{z_2(1+z_1)} (e^{i\theta} + e^{-i\theta}) \right\} \\
&= z_2^2(1+z_1)^2 \left\{ 1 + \frac{(1-z_1)^2}{z_2^2(1+z_1)^2} - \alpha_2 (e^{i\theta} + e^{-i\theta}) \right\} \\
&= z_2^2(1+z_1)^2 (1 + \alpha_2^2 - \alpha_2 e^{i\theta} - \alpha_2 e^{-i\theta}) \\
&= z_2^2(1+z_1)^2 (1 - \alpha_2 e^{i\theta}) (1 - \alpha_2 e^{-i\theta}) \tag{5.3.29}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& (1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta + 2z_1(1-z_2^2) \\
&= (1+z_1)^2 \left\{ \frac{(1+z_1^2)(1+z_2^2)}{(1+z_1)^2} + \frac{2z_1(1-z_2^2)}{(1+z_1)^2} - 2 \frac{z_2(1-z_1^2)}{(1+z_1)^2} \frac{1}{2} (e^{i\theta} + e^{-i\theta}) \right\} \\
&= (1+z_1)^2 \left\{ \frac{(1+2z_1+z_1^2) + z_2^2(1-2z_1+z_1^2)}{(1+z_1)^2} - \frac{z_2(1-z_1)}{1+z_1} (e^{i\theta} + e^{-i\theta}) \right\} \\
&= (1+z_1)^2 \left\{ 1 + \frac{z_2^2(1-z_1)^2}{(1+z_1)^2} - \alpha_1 (e^{i\theta} + e^{-i\theta}) \right\} \\
&= (1+z_1)^2 (1 + \alpha_1^2 - \alpha_1 e^{i\theta} - \alpha_1 e^{-i\theta}) \\
&= (1+z_1)^2 (1 - \alpha_1 e^{i\theta}) (1 - \alpha_1 e^{-i\theta}) \tag{5.3.30}
\end{aligned}$$

となるので、 u_2 は、

$$\begin{aligned}
u_2 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{z_2(1+z_1)^2(1-\alpha_1 e^{i\theta})(1-\alpha_2 e^{-i\theta})}{z_2(1+z_1)^2 \sqrt{(1-\alpha_2 e^{i\theta})(1-\alpha_2 e^{-i\theta})(1-\alpha_1 e^{i\theta})(1-\alpha_1 e^{-i\theta})}} d\theta \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(1-\alpha_1 e^{i\theta})(1-\alpha_2 e^{-i\theta})}{\sqrt{(1-\alpha_1 e^{i\theta})(1-\alpha_1 e^{-i\theta})(1-\alpha_2 e^{i\theta})(1-\alpha_2 e^{-i\theta})}} d\theta \tag{5.3.31}
\end{aligned}$$

となる。ここで、この被積分関数を、

$$C(e^{i\theta}) \equiv \frac{(1-\alpha_1 e^{i\theta})(1-\alpha_2 e^{-i\theta})}{\sqrt{(1-\alpha_1 e^{i\theta})(1-\alpha_1 e^{-i\theta})(1-\alpha_2 e^{i\theta})(1-\alpha_2 e^{-i\theta})}} \tag{5.3.32}$$

$$= \frac{2z_2(1+z_1^2) - z_2^2(1-z_1^2)e^{i\theta} - (1-z_1^2)e^{-i\theta}}{\sqrt{\{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta - 2z_1(1-z_2^2)\} \{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta + 2z_1(1-z_2^2)\}}} \tag{5.3.33}$$

とおくと、

$$\begin{aligned}
 u_2 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} C(e^{i\theta}) d\theta \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} C(e^{i\theta}) d\theta + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^0 C(e^{i\theta}) d\theta \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} C(e^{i\theta}) d\theta + \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} C(e^{-i\theta}) d\theta \\
 &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{1}{2} \{C(e^{i\theta}) + C(e^{-i\theta})\} d\theta
 \end{aligned} \tag{5.3.34}$$

となる。ここで、

$$C(e^{i\theta})^* = \frac{(1 - \alpha_1 e^{-i\theta})(1 - \alpha_2 e^{i\theta})}{\sqrt{(1 - \alpha_1 e^{-i\theta})(1 - \alpha_1 e^{i\theta})(1 - \alpha_2 e^{-i\theta})(1 - \alpha_2 e^{i\theta})}} = C(e^{-i\theta}) \tag{5.3.35}$$

となるので、

$$\operatorname{Re} [C(e^{i\theta})] = \frac{1}{2} \{C(e^{i\theta}) + C(e^{-i\theta})\} \tag{5.3.36}$$

である。

5.3.2 $T > T_c$ の場合の u_2 の計算

温度が臨界温度 T_c よりも高い場合を考える。このとき、

$$\sinh 2K_1 \sinh 2K_2 < 1 \tag{5.3.37}$$

であり、この条件のとき α_1 、 α_2 は、

$$0 \leq \alpha_1 \leq 1 \quad , \quad 1 < \alpha_2 \tag{5.3.38}$$

となる。

まず、 $C(e^{i\theta})$ の実部を、

$$\cos \psi(\theta) \equiv \frac{1}{2} \{C(e^{i\theta}) + C(e^{-i\theta})\} \tag{5.3.39}$$

とおくと、 $\theta = 0$ のとき、

$$\cos \psi(0) = \frac{1}{2} \{C(0) + C(0)\} = -1 \tag{5.3.40}$$

$$\psi(0) = \pi \tag{5.3.41}$$

となり、 $\theta = \pi$ のとき、

$$\cos \psi(\pi) = \frac{1}{2} \{C(e^{i\pi}) + C(e^{-i\pi})\} = 1 \tag{5.3.42}$$

$$\psi(\pi) = 0 \tag{5.3.43}$$

となる。したがって、 u_2 を ψ の積分へと変数変換すると、

$$\begin{aligned}
u_2 &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos \psi(\theta) d\theta \\
&= \frac{1}{\pi} \int_\pi^0 \cos \psi(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial \psi} d\psi \\
&= -\frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos \psi(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial \psi} d\psi
\end{aligned} \tag{5.3.44}$$

となる。

まず、 $\cos \psi$ の表式を得るために、 $C(e^{i\theta})$ の表式を変更する。まず、(5.3.33) の分子は、

$$\begin{aligned}
&2z_2(1+z_1^2) - z_2^2(1-z_1^2)e^{i\theta} - (1-z_1^2)e^{-i\theta} \\
&= 2 \tanh K_2(1 + \tanh^2 K_1) - \tanh^2 K_2(1 - \tanh^2 K_1)e^{i\theta} - (1 - \tanh^2 K_1)e^{-i\theta} \\
&= 2 \tanh K_2 \frac{\cosh 2K_1}{\cosh^2 K_1} - \tanh^2 K_2 \frac{1}{\cosh^2 K_1} e^{i\theta} - \frac{1}{\cosh^2 K_1} e^{-i\theta} \\
&= \frac{1}{\cosh^2 K_1 \cosh^2 K_2} (2 \sinh K_2 \cosh K_2 \cosh 2K_1 - \sinh^2 K_2 e^{i\theta} - \cosh^2 K_2 e^{-i\theta}) \\
&= \frac{1}{\cosh^2 K_1 \cosh^2 K_2} (\sinh 2K_2 \cosh 2K_1 - \sinh^2 K_2 e^{i\theta} - \cosh^2 K_2 e^{-i\theta})
\end{aligned} \tag{5.3.45}$$

となる。ただし、2行目から3行目の式変形において、

$$1 + \tanh^2 K_1 = \frac{\cosh^2 K_1 + \sinh^2 K_1}{\cosh^2 K_1} = \frac{\cosh 2K_1}{\cosh^2 K_1} \tag{5.3.46}$$

$$1 - \tanh^2 K_1 = \frac{1}{\cosh^2 K_1} \tag{5.3.47}$$

となることを用いた。また、

$$\begin{aligned}
&(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta - 2z_1(1-z_2^2) \\
&= (1 + \tanh^2 K_1)(1 + \tanh^2 K_2) - 2 \tanh K_2(1 - \tanh^2 K_1) \cos \theta - 2 \tanh K_1(1 - \tanh^2 K_2) \\
&= \frac{\cosh 2K_1 \cosh 2K_2}{\cosh^2 K_1 \cosh^2 K_2} - 2 \frac{\sinh K_2}{\cosh K_2 \cosh^2 K_1} \cos \theta - 2 \frac{\sinh K_1}{\cosh K_1 \cosh^2 K_2} \\
&= \frac{1}{\cosh^2 K_1 \cosh^2 K_2} (\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - 2 \sinh K_2 \cosh K_2 \cos \theta - 2 \sinh K_1 \cosh K_1) \\
&= \frac{1}{\cosh^2 K_1 \cosh^2 K_2} (\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta - \sinh 2K_1)
\end{aligned} \tag{5.3.48}$$

$$\begin{aligned}
&(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2) \cos \theta + 2z_1(1-z_2^2) \\
&= \frac{1}{\cosh^2 K_1 \cosh^2 K_2} (\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta + \sinh 2K_1)
\end{aligned} \tag{5.3.49}$$

となるので、

$$C(e^{i\theta}) = \frac{\sinh 2K_2 \cosh 2K_1 - \sinh^2 K_2 e^{i\theta} - \cosh^2 K_2 e^{-i\theta}}{\sqrt{(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta - \sinh 2K_1)(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta + \sinh 2K_1)}} \tag{5.3.50}$$

となる。また、 $\theta \rightarrow -\theta$ とすると、

$$C(e^{-i\theta}) = \frac{\sinh 2K_2 \cosh 2K_1 - \sinh^2 K_2 e^{-i\theta} - \cosh^2 K_2 e^{i\theta}}{\sqrt{(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta - \sinh 2K_1)(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta + \sinh 2K_1)}} \quad (5.3.51)$$

となる。これより、

$$\begin{aligned} \cos \psi &= \frac{\sinh 2K_2 \cosh 2K_1 - (\sinh^2 K_2 + \cosh^2 K_2) \frac{1}{2}(e^{i\theta} + e^{-i\theta})}{\sqrt{(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta - \sinh 2K_1)(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta + \sinh 2K_1)}} \\ &= \frac{\sinh 2K_2 \cosh 2K_1 - \cosh 2K_2 \cos \theta}{\sqrt{(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta - \sinh 2K_1)(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta + \sinh 2K_1)}} \end{aligned} \quad (5.3.52)$$

となる。ここで、 k を、

$$k \equiv \sinh 2K_1 \sinh 2K_2 \quad (5.3.53)$$

とおき、 $\cos \psi$ の変形をする。まず、(5.3.52) の分子は、

$$\begin{aligned} \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 - \cosh 2K_2 \cos \theta &= \coth 2K_1 \sinh 2K_1 \sinh 2K_2 - \cosh 2K_2 \cos \theta \\ &= k \coth 2K_1 - \cosh 2K_2 \cos \theta \end{aligned} \quad (5.3.54)$$

となる。ここで (5.3.52) の分母の根号の中身を X とおくと、

$$\begin{aligned} X &\equiv (\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta - \sinh 2K_1)(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta + \sinh 2K_1) \\ &= (\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta)^2 - \sinh^2 2K_1 \\ &= \sinh^2 2K_2 \cos^2 \theta - 2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \cos \theta + \cosh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 - \sinh^2 2K_1 \\ &\equiv X_1 \cos^2 \theta - X_2 \cos \theta + X_3 \end{aligned} \quad (5.3.56)$$

となる。ただし、 $\cos^2 \theta$ の係数を X_1 、 $\cos \theta$ の係数を X_2 、 θ に依存しない係数を X_3 とおいた。この X に $(1 - k^2)$ をかけたものについて考えることとする。ただし、 $1 - k^2$ は、

$$\begin{aligned} 1 - k^2 &= 1 - \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 \\ &= 1 - \sinh^2 2K_1 (\cosh^2 2K_2 - 1) \\ &= 1 + \sinh^2 2K_1 - \sinh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 \\ &= \cosh^2 2K_1 - \sinh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 \end{aligned} \quad (5.3.57)$$

である。まず、 $X_1 \times (1 - k^2)$ は、

$$\begin{aligned} X_1 \times (1 - k^2) &= \sinh^2 2K_2 (\cosh^2 2K_1 - \sinh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2) \\ &= \sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2 \end{aligned} \quad (5.3.58)$$

となる。また、 $X_2 \times (1 - k^2)$ は、

$$X_2 \times (1 - k^2) = 2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - k^2 2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \quad (5.3.59)$$

となる。最後に、 $X_3 \times (1 - k^2)$ は、

$$\begin{aligned}
X_3 \times (1 - k^2) &= (\cosh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 - \sinh^2 2K_1)(1 - \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2) \\
&= \cosh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 - \cosh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 - \sinh^2 2K_1 + \sinh^4 2K_1 \sinh^2 2K_2 \\
&= (1 + \sinh^2 2K_1) \cosh^2 2K_2 - \cosh^2 2K_1 (1 + \sinh^2 2K_2) \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 \\
&\quad - \sinh^2 2K_1 + \sinh^4 2K_1 \sinh^2 2K_2 \\
&= \cosh^2 2K_2 - \cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_1 \sinh^4 2K_2 + \sinh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 \\
&\quad - (1 + \sinh^2 2K_1) \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 - \sinh^2 2K_1 + \sinh^4 2K_1 \sinh^2 2K_2 \\
&= \cosh^2 2K_2 - \cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_1 \sinh^4 2K_2 + \sinh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 - \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 - \sinh^2 2K_1 \\
&= \cosh^2 2K_2 - \cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_1 \sinh^4 2K_2 + \sinh^2 2K_1 (\cosh^2 2K_2 - \sinh^2 2K_2) - \sinh^2 2K_1 \\
&= \cosh^2 2K_2 - k^2 \sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1 \tag{5.3.60}
\end{aligned}$$

となる。したがって、 $X \times (1 - k^2)$ は、

$$\begin{aligned}
X \times (1 - k^2) &= (\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2) \cos^2 \theta \\
&\quad - (2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - k^2 2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2) \cos \theta \\
&\quad + \cosh^2 2K_2 - k^2 \sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1 \\
&= (\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1 \cos^2 \theta - 2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \cos \theta + \cosh^2 2K_2) \\
&\quad - k^2 (\cosh^2 2K_2 \cos^2 \theta - 2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \cos \theta + \sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1) \\
&= (\cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cos \theta)^2 - k^2 (\sinh 2K_2 \cosh 2K_1 - \cosh 2K_2 \cos \theta)^2 \tag{5.3.61}
\end{aligned}$$

となる。ここで、

$$\sinh 2K_2 \cosh 2K_1 = \sinh 2K_1 \sinh 2K_2 \coth 2K_1 = k \coth 2K_1 \tag{5.3.62}$$

となるので、

$$X \times (1 - k^2) = (\cosh 2K_2 - k \coth 2K_1 \cos \theta)^2 - k^2 (k \coth 2K_1 - \cosh 2K_2 \cos \theta)^2 \tag{5.3.63}$$

となる。したがって、 $\cos \psi$ は、

$$\begin{aligned}
\cos \psi &= \frac{k \coth 2K_1 - \cosh 2K_2 \cos \theta}{\sqrt{X}} \times \frac{(1 - k^2)^{\frac{1}{2}}}{(1 - k^2)^{\frac{1}{2}}} \\
&= \frac{(k \coth 2K_1 - \cosh 2K_2 \cos \theta)(1 - k^2)^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{X(1 - k^2)}} \\
&= \frac{(k \coth 2K_1 - \cosh 2K_2 \cos \theta)(1 - k^2)^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{(\cosh 2K_2 - k \coth 2K_1 \cos \theta)^2 - k^2 (k \coth 2K_1 - \cosh 2K_2 \cos \theta)^2}} \tag{5.3.64}
\end{aligned}$$

となる。これを $\cos \theta$ について解くと、

$$\begin{aligned}
\{(\cosh 2K_2 - k \coth 2K_1 \cos \theta)^2 - k^2 (k \coth 2K_1 - \cosh 2K_2 \cos \theta)^2\} \cos^2 \psi &= (k \coth 2K_1 - \cosh 2K_2 \cos \theta)^2 (1 - k^2) \\
(\cosh 2K_2 - k \coth 2K_1 \cos \theta)^2 \cos^2 \psi &= (k \coth 2K_1 - \cosh 2K_2 \cos \theta)^2 \{1 - k^2(1 - \cos^2 \psi)\} \\
(\cosh 2K_2 - k \coth 2K_1 \cos \theta) \cos \psi &= (k \coth 2K_1 - \cosh 2K_2 \cos \theta)(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} \\
-\cos \theta \{\cosh 2K_2(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \coth 2K_1 \cos \psi\} &= \cosh 2K_2 \cos \psi - k \cot 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} \\
-\cos \theta &= \frac{\cosh 2K_2 \cos \psi - k \cot 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}}{\cosh 2K_2 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \coth 2K_1 \cos \psi} \tag{5.3.65}
\end{aligned}$$

となる。ただし、2行目から3行目の式変形の際、正負号をとった。

次に、 $\cos \theta$ を用いて $\sin \theta$ を求める。 $\sin^2 \theta$ は、

$$\begin{aligned} \sin^2 \theta &= 1 - \cos^2 \theta \\ &= \frac{\{\cosh 2K_2(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \coth 2K_1 \cos \psi\}^2 - \{\cosh 2K_2 \cos \psi - k \cot 2K_1(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}\}^2}{\{\cosh 2K_2(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \coth 2K_1 \cos \psi\}^2} \end{aligned} \quad (5.3.66)$$

となる。この分子を変形すると、

$$\begin{aligned} &\{\cosh 2K_2(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \coth 2K_1 \cos \psi\}^2 - \{\cosh 2K_2 \cos \psi - k \cot 2K_1(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}\}^2 \\ &= \cosh^2 2K_2(1 - k^2 \sin^2 \psi) - 2k \coth 2K_1 \cosh 2K_2 \cos \psi(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k^2 \coth^2 2K_1 \cos^2 \psi \\ &\quad - \cosh^2 2K_2 \cos^2 \psi + 2k \coth 2K_1 \cosh 2K_2 \cos \psi(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k^2 \cot^2 2K_1(1 - k^2 \sin^2 \psi) \\ &= \cosh^2 2K_2(1 - k^2 \sin^2 \psi) + k^2 \coth^2 2K_1(1 - \sin^2 \psi) - \cosh^2 2K_2(1 - \sin^2 \psi) - k^2 \cot^2 2K_1(1 - k^2 \sin^2 \psi) \\ &= \cosh^2 2K_2 + k^2 \coth^2 2K_1 - \cosh^2 2K_2 - k^2 \cot^2 2K_1 \\ &\quad + (\coth^2 2K_1 k^4 - \cosh^2 2K_2 k^2 - \coth^2 2K_1 k^2 + \cosh^2 2K_2) \sin^2 \psi \\ &= \left\{ \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1} + 1 \right) k^4 - (1 + \sinh^2 2K_2) k^2 - \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1} + 1 \right) k^2 + (1 + \sinh^2 2K_2) \right\} \sin^2 \psi \\ &= (k^4 - 2k^2 + 1) \sin^2 \psi + (\sinh^2 2K_2 k^2 - \sinh^2 2K_2 k^2 - \sinh^2 2K_2 + \sinh^2 2K_2) \sin^2 \psi \\ &= (1 - k^2)^2 \sin^2 \psi \end{aligned} \quad (5.3.67)$$

となる。式変形において、 $k^2 = \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2$ を用いた。したがって、

$$\sin^2 \theta = \frac{(1 - k^2)^2 \sin^2 \psi}{\{\cosh 2K_2(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \coth 2K_1 \cos \psi\}^2} \quad (5.3.68)$$

$$\sin \theta = \pm \frac{(1 - k^2) \sin \psi}{\cosh 2K_2(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \coth 2K_1 \cos \psi} \quad (5.3.69)$$

となる。

(5.3.69) の両辺を微分すると、

$$\begin{aligned} \cos \theta d\theta &= \pm [(1 - k^2) \cos \psi \{\cosh 2K_2(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \coth 2K_1 \cos \psi\} \\ &\quad - (1 - k^2) \sin \psi \{-k^2 \cosh 2K_2 \sin \psi \cos \psi(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}} + k \coth 2K_1 \sin \psi\}] \\ &\quad \times [\cosh 2K_2(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \coth 2K_1 \cos \psi]^{-2} d\psi \end{aligned} \quad (5.3.70)$$

となる。この分子を変形すると、

$$\begin{aligned} &(1 - k^2) \cos \psi \{\cosh 2K_2(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \coth 2K_1 \cos \psi\} \\ &\quad - (1 - k^2) \sin \psi \{-k^2 \cosh 2K_2 \sin \psi \cos \psi(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}} + k \coth 2K_1 \sin \psi\} \\ &= (1 - k^2)(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}} [\cosh 2K_2(1 - k^2 \sin^2 \psi) \cos \psi - k \coth 2K_1 \cos^2 \psi(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} \\ &\quad + k^2 \cosh 2K_2 \sin^2 \psi \cos \psi - k \coth 2K_1 \sin^2 \psi(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}] \\ &= (1 - k^2)(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}} [\cosh 2K_2 \cos \psi - k \coth 2K_1(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}] \end{aligned} \quad (5.3.71)$$

となる。これより、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \theta}{\partial \psi} &= \pm \frac{1}{\cos \theta} \times \frac{(1-k^2)(1-k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}} \{ \cosh 2K_2 \cos \psi - k \coth 2K_1 (1-k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} \}}{\{ \cosh 2K_2 (1-k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \coth 2K_1 \cos \psi \}^2} \\
&= \mp \frac{\cosh 2K_2 (1-k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \coth 2K_1 \cos \psi}{\cosh 2K_2 \cos \psi - k \coth 2K_1 (1-k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} \\
&\quad \times \frac{(1-k^2)(1-k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}} \{ \cosh 2K_2 \cos \psi - k \coth 2K_1 (1-k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} \}}{\{ \cosh 2K_2 (1-k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \coth 2K_1 \cos \psi \}^2} \\
&= \mp \frac{(1-k^2)(1-k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}}}{\cosh 2K_2 (1-k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \coth 2K_1 \cos \psi} \tag{5.3.72}
\end{aligned}$$

となり、分母分子に $\cosh 2K_2 (1-k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k \coth 2K_1 \cos \psi$ をかけると、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \theta}{\partial \psi} &= \mp \frac{(1-k^2)(1-k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}}}{\cosh 2K_2 (1-k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \coth 2K_1 \cos \psi} \\
&\quad \times \frac{\cosh 2K_2 (1-k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k \coth 2K_1 \cos \psi}{\cosh 2K_2 (1-k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k \coth 2K_1 \cos \psi} \\
&= \mp \frac{(1-k^2)(1-k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}} \{ \cosh 2K_2 (1-k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k \coth 2K_1 \cos \psi \}}{\cosh^2 2K_2 (1-k^2 \sin^2 \psi) - k^2 \coth^2 2K_1 \cos^2 \psi} \tag{5.3.73}
\end{aligned}$$

となる。この分母は、

$$\begin{aligned}
&\cosh^2 2K_2 (1-k^2 \sin^2 \psi) - k^2 \coth^2 2K_1 \cos^2 \psi \\
&= \cosh^2 2K_2 (1-k^2 \sin^2 \psi) - k^2 \coth^2 2K_1 + k^2 \coth^2 2K_1 \sin^2 \psi \\
&= 1 + \sinh^2 2K_2 - k^2 (1 + \sinh^2 2K_2) \sin^2 \psi - k^2 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1} + 1 \right) + k^2 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1} + 1 \right) \sin^2 \psi \\
&= \left(1 + \sinh^2 2K_2 - \frac{k^2}{\sinh^2 2K_1} - k^2 \right) + \left(-k^2 - k^2 \sinh^2 2K_2 + \frac{k^2}{\sinh^2 2K_1} + k^2 \right) \sin^2 \psi \\
&= (1-k^2) + (1-k^2) \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi \\
&= (1-k^2)(1 + \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi) \tag{5.3.74}
\end{aligned}$$

となるから、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \theta}{\partial \psi} &= \mp \frac{(1-k^2)(1-k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}} \{ \cosh 2K_2 (1-k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k \coth 2K_1 \cos \psi \}}{(1-k^2)(1 + \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi)} \\
&= \mp \frac{\cosh 2K_2 (1-k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k \coth 2K_1 \cos \psi}{(1 + \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi)(1-k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} \tag{5.3.75}
\end{aligned}$$

となる。ここで、 θ が $0 \rightarrow \pi$ により、 ψ は $\pi \rightarrow 0$ と変化するので、 $\frac{\partial \theta}{\partial \psi} < 0$ となっている必要があり、

$$\frac{\partial \theta}{\partial \psi} = - \frac{\cosh 2K_2 (1-k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k \coth 2K_1 \cos \psi}{(1 + \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi)(1-k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} \tag{5.3.76}$$

となる。

したがって、

$$\begin{aligned}
u_2 &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{\cosh 2K_2(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k \coth 2K_1 \cos \psi}{(1 + \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi)(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} \cos \psi d\psi \\
&= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{\cosh 2K_2 \cos \psi}{1 + \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi} d\psi \\
&\quad + \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{k \coth 2K_1 \cos^2 \psi}{(1 + \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi)(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} d\psi
\end{aligned} \tag{5.3.77}$$

となる。

・右辺第 1 項の積分

$\psi \rightarrow \psi - \frac{\pi}{2}$ と変数変換すると、

$$\int_0^\pi \frac{\cosh 2K_2 \cos \psi}{1 + \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi} d\psi = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{\cosh 2K_2 \sin \psi}{1 + \sinh^2 2K_2 \cos^2 \psi} d\psi = 0 \tag{5.3.78}$$

となる。ただし、右辺が奇関数であることを用いた。

・右辺第 2 項の積分

$\psi \rightarrow \psi - \frac{\pi}{2}$ と変数変換すると、

$$\begin{aligned}
\int_0^\pi \frac{k \coth 2K_1 \cos^2 \psi}{(1 + \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi)(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} d\psi &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{k \coth 2K_1 \sin^2 \psi}{(1 + \sinh^2 2K_2 \cos^2 \psi)(1 - k^2 \cos^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} d\psi \\
&= 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{k \coth 2K_1 \sin^2 \psi}{(1 + \sinh^2 2K_2 \cos^2 \psi)(1 - k^2 \cos^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} d\psi
\end{aligned} \tag{5.3.79}$$

となる。ただし、1 行目の右辺が偶関数であることを用いた。ここで、再び $\psi \rightarrow -\psi + \frac{\pi}{2}$ と変数変換すると、

$$\int_0^\pi \frac{k \coth 2K_1 \cos^2 \psi}{(1 + \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi)(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} d\psi = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{k \coth 2K_1 \cos^2 \psi}{(1 + \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi)(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} d\psi \tag{5.3.80}$$

となる。

よって、

$$u_2 = 2\pi^{-1} k \coth 2K_1 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\cos^2 \psi}{(1 + \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi)(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} d\psi \tag{5.3.81}$$

となる。また、

$$\begin{aligned}
\cos^2 \psi &= 1 - \sin^2 \psi \\
&= \frac{1}{\sinh^2 2K_2} (\sinh^2 2K_2 - \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi) \\
&= \frac{1}{\sinh^2 2K_2} \{1 + \sinh^2 2K_2 - (1 + \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi)\} \\
&= \frac{\cosh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_2} - \frac{1 + \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi}{\sinh^2 2K_2}
\end{aligned} \tag{5.3.82}$$

となるから、

$$u_2 = 2\pi^{-1}k \coth 2K_1 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{\cosh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_2} - \frac{1 + \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi}{\sinh^2 2K_2} \right) \frac{1}{(1 + \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi)(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} d\psi$$

$$= 2\pi^{-1}k \coth 2K_1 \frac{\cosh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{(1 + \sinh^2 2K_2 \sin^2 \psi)(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} d\psi$$

$$- 2\pi^{-1}k \coth 2K_1 \frac{1}{\sinh^2 2K_2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} d\psi$$

$$= 2\pi^{-1} \coth 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - 2\pi^{-1} \frac{\cosh 2K_1}{\sinh 2K_2} K(k) \quad (5.3.83)$$

$$= 2\pi^{-1} \coth 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[\Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \quad (5.3.84)$$

となる。ただし、

$$K(k) \equiv \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{(1 - k^2 \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}}} d\theta \quad : \text{第 1 種完全楕円積分} \quad (5.3.85)$$

$$\Pi_1(\nu, k) \equiv \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{(1 + \nu \sin^2 \theta)(1 - k^2 \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}}} d\theta \quad : \text{第 3 種完全楕円積分} \quad (5.3.86)$$

である。

また、 u_1 は u_2 において $1 \leftrightarrow 2$ としたものであるから、

$$u_1 = 2\pi^{-1} \coth 2K_1 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[\Pi_1(\sinh^2 2K_1, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_1} K(k) \right] \quad (5.3.87)$$

となる。したがって、

$$U = -\frac{J_1}{\pi} \coth 2K_1 \cosh 2K_2 \cosh 2K_1 \left[\Pi_1(\sinh^2 2K_1, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_1} K(k) \right]$$

$$- \frac{J_2}{\pi} \coth 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[\Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \quad (5.3.88)$$

となる。

5.3.3 $T < T_c$ の場合の u_2 の計算

温度が臨界温度 T_c よりも低い場合を考える。このとき、

$$\sinh 2K_1 \sinh 2K_2 > 1 \quad (5.3.89)$$

であり、この条件のとき α_1 、 α_2 は、

$$0 \leq \alpha_1 \leq 1 \quad \alpha_2 < 1 \quad (5.3.90)$$

となる。

まず、 $C(e^{i\theta})$ の虚部である、

$$Y(\theta) \equiv \frac{1}{2i} \{C(e^{i\theta}) - C(e^{-i\theta})\} \quad (5.3.91)$$

という関数について考える。これは、(5.3.50)、(5.3.51) を使うと、

$$Y(\theta) = \frac{1}{2i} \frac{-\sinh^2 K_2(e^{i\theta} - e^{-i\theta}) + \cosh^2 K_2(e^{i\theta} - e^{-i\theta})}{\sqrt{(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta - \sinh 2K_1)(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta + \sinh 2K_1)}} \sin \theta$$

$$= \frac{\sin \theta}{\sqrt{(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta - \sinh 2K_1)(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta + \sinh 2K_1)}} \quad (5.3.92)$$

$$= \frac{\sin \theta}{\sqrt{(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta)^2 - \sinh^2 2K_1}} \quad (5.3.93)$$

となる。 $\theta = 0, \pi$ に対しては、

$$Y(0) = 0 \quad (5.3.94)$$

$$Y(\pi) = 0 \quad (5.3.95)$$

となる。これより、 $Y(\theta)$ の最大値を k とし、

$$k \sin \psi(\theta) \equiv \frac{1}{2i} \{C(e^{i\theta}) - C(e^{-i\theta})\} = Y(\theta) \quad (5.3.96)$$

とおくこととする。このようにおくと、 ψ の積分範囲は $[0, \pi]$ となり、 $k \sin \psi(\theta)$ は $\psi = \frac{\pi}{2}$ で $Y(\theta)$ の最大値 k をとることとなる。まず、 $Y(\theta)$ の最大値を求めることとする。ここで、

$$\frac{\partial Y(\theta)}{\partial \theta} = 0 \quad (5.3.97)$$

となる θ で最大値は与えられるから計算すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial Y(\theta)}{\partial \theta} &= \left\{ \cos \theta [(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta)^2 - \sinh^2 2K_1]^{\frac{1}{2}} \right. \\ &\quad \left. - \sin^2 \theta \sinh 2K_2 (\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta) [(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta)^2 - \sinh^2 2K_1]^{-\frac{1}{2}} \right\} \\ &\quad \times \left\{ (\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta)^2 - \sinh^2 2K_1 \right\}^{-1} = 0 \end{aligned} \quad (5.3.98)$$

となる。これより、

$$\cos \theta [(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta)^2 - \sinh^2 2K_1] - \sin^2 \theta \sinh 2K_2 (\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta) = 0 \quad (5.3.99)$$

を満たす θ を求めればよいことがわかる。これを变形すると、

$$\begin{aligned} &\cos \theta [(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta)^2 - \sinh^2 2K_1] - \sin^2 \theta \sinh 2K_2 (\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta) \\ &= \sinh^2 2K_2 \cos^3 \theta - 2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \cos^2 \theta + (\cosh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 - \sinh^2 2K_1) \cos \theta \\ &\quad - \sinh^2 2K_2 \cos^3 \theta + \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \cos^2 \theta + \sinh^2 2K_2 \cos \theta - \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \\ &= -\sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \cos^2 \theta \\ &\quad + (\cosh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 - \sinh^2 2K_1 + \sinh^2 2K_2) \cos \theta - \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \\ &= -\sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \cos^2 \theta \\ &\quad + (\cosh^2 2K_2 + \cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2) \cos \theta - \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 = 0 \end{aligned} \quad (5.3.100)$$

となる。ただし、最後の式変形において、

$$\begin{aligned}
\cosh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 - \sinh^2 2K_1 + \sinh^2 2K_2 &= (1 + \sinh^2 2K_1)(1 + \sinh^2 2K_2) - \sinh^2 2K_1 + \sinh^2 2K_2 \\
&= \cosh^2 2K_2 + \sinh^2 2K_2(1 + \sinh^2 2K_1) \\
&= \cosh^2 2K_2 + \cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2
\end{aligned} \tag{5.3.101}$$

となることを使った。よって、最大値をとる θ は、

$$\begin{aligned}
\cos \theta &= \frac{(\cosh^2 2K_2 + \cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2) \pm \sqrt{(\cosh^2 2K_2 + \cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2)^2 - 4 \sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2}}{2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2} \\
&= \frac{(\cosh^2 2K_2 + \cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2) \pm \sqrt{(\cosh^2 2K_2 - \cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2)^2}}{2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2} \\
&= \frac{(\cosh^2 2K_2 + \cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2) \pm (\cosh^2 2K_2 - \cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2)}{2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2} \\
&= \frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_2 \cosh 2K_1} \cdot \frac{\sinh 2K_2 \cosh 2K_1}{\cosh 2K_2}
\end{aligned} \tag{5.3.102}$$

となる。ここで、特に $K_1 = K_2 = K$ と等方的な場合を考えると最大値をとる θ は、

$$\cos \theta = \frac{1}{\sinh 2K} \cdot \sinh 2K \tag{5.3.103}$$

となる。ここで、 $T < T_c$ の場合、

$$\sinh^2 2K > 1 \tag{5.3.104}$$

となるから、 $\sinh 2K$ は 1 より大きくなる。よって、後者を満たす θ は存在しない。

これより、極値としてとれるのは前者のみであるから、最大値をとる θ_{\max} は、

$$\cos \theta_{\max} = \frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_2 \cosh 2K_1} \tag{5.3.105}$$

であることがわかる。これより、 $Y(\theta)$ 最大値 k は、

$$\begin{aligned}
k &= \frac{\sin \theta_{\max}}{\sqrt{(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta_{\max})^2 - \sinh^2 2K_1}} \\
&= \frac{\left(1 - \frac{\cosh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1}\right)^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{\left(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_2 \cosh 2K_1}\right)^2 - \sinh^2 2K_1}} \\
&= \left(\frac{1 - \frac{\cosh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1}}{\cosh^2 2K_2 \left(\cosh 2K_1 - \frac{1}{\cosh 2K_1}\right)^2 - \sinh^2 2K_1}\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\frac{1 - \frac{\cosh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1}}{\cosh^2 2K_2 (\cosh^2 2K_1 - 2 + 1 - \tanh^2 2K_1) - \sinh^2 2K_1}\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \left(\frac{1 - \frac{\cosh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1}}{\cosh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1 - \cosh^2 2K_2 - \cosh^2 2K_2 \tanh^2 2K_1 - \sinh^2 2K_1}\right)^{\frac{1}{2}}
\end{aligned} \tag{5.3.106}$$

となる。この分子は、

$$\begin{aligned}
& \cosh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1 - \cosh^2 2K_2 - \cosh^2 2K_2 \tanh^2 2K_1 - \sinh^2 2K_1 \\
&= (1 + \sinh^2 2K_1)(1 + \sinh^2 2K_2) - (1 + \sinh^2 2K_2) - \cosh^2 2K_2 \tanh^2 2K_1 - \sinh^2 2K_1 \\
&= \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 - \cosh^2 2K_2 \tanh^2 2K_1 \\
&= \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 \left(1 - \frac{\cosh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1} \right) \tag{5.3.107}
\end{aligned}$$

と変形できるので、

$$\begin{aligned}
k &= \left(\frac{1 - \frac{\cosh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1}}{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 \left(1 - \frac{\cosh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1} \right)} \right)^{\frac{1}{2}} \\
&= \frac{1}{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2} \tag{5.3.108}
\end{aligned}$$

となる。

次に、 $1 - k^2 \sin^2 \psi$ は、

$$1 - k^2 \sin^2 \psi = \frac{[(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta)^2 - \sinh^2 2K_1] - \sin^2 \theta}{(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta)^2 - \sinh^2 2K_1} \tag{5.3.109}$$

となるがこの分子は、

$$\begin{aligned}
& (\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta)^2 - \sinh^2 2K_1 - \sin^2 \theta \\
&= \cosh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 - 2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \cos \theta + \sinh^2 2K_2 \cos^2 \theta - \sinh^2 2K_1 - (1 - \cos^2 \theta) \\
&= (1 + \sinh^2 2K_2) \cos^2 \theta - 2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \cos \theta + \cosh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 - \sinh^2 2K_1 - 1 \\
&= \cosh^2 2K_2 \cos^2 \theta - 2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \cos \theta + \cosh^2 2K_1 (1 + \sinh^2 2K_2) - \sinh^2 2K_1 - 1 \\
&= \cosh^2 2K_2 \cos^2 \theta - 2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \cos \theta + \cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 + \cosh^2 2K_1 - \sinh^2 2K_1 - 1 \\
&= \cosh^2 2K_2 \cos^2 \theta - 2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \cos \theta + \cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 \\
&= (\cosh 2K_1 \sinh 2K_2 - \cosh 2K_2 \cos \theta)^2 \tag{5.3.110}
\end{aligned}$$

となるので、

$$1 - k^2 \sin^2 \psi = \frac{(\cosh 2K_1 \sinh 2K_2 - \cosh 2K_2 \cos \theta)^2}{(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta)^2 - \sinh^2 2K_1} \tag{5.3.111}$$

となる。よって、

$$\pm (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} = \frac{\cosh 2K_1 \sinh 2K_2 - \cosh 2K_2 \cos \theta}{\sqrt{(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta)^2 - \sinh^2 2K_1}} \tag{5.3.112}$$

$$= \frac{1}{2} \{C(e^{i\theta}) + C(e^{-i\theta})\} \tag{5.3.113}$$

となる。ただし、ここでは正符号をとることとする。

したがって、 u_2 は、

$$\begin{aligned}
u_2 &= \frac{1}{\pi} \int_{\pi}^0 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} \frac{\partial \theta}{\partial \psi} d\psi \\
&= -\frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} \frac{\partial \theta}{\partial \psi} d\psi \tag{5.3.114}
\end{aligned}$$

と書くことができる。ただし、 θ が $0 \rightarrow \pi$ により、 ψ が $\pi \rightarrow 0$ となるように積分を定義した。つまり、 $\frac{\partial \theta}{\partial \psi} < 0$ である。

次に、 $\cos \theta$ の表式を求める。 $k \sin \psi$ の分母分子にそれぞれ $(\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2)^{\frac{1}{2}}$ をかけると、

$$k \sin \psi = \frac{\sin \theta}{\sqrt{(\cosh 2K_1 \cosh 2K_2 - \sinh 2K_2 \cos \theta)^2 - \sinh^2 2K_1}} \times \frac{(\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2)^{\frac{1}{2}}}{(\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2)^{\frac{1}{2}}} \quad (5.3.115)$$

となる。まず分子を2乗したものは、

$$\begin{aligned} & \sin^2 \theta (\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2) \\ &= (1 - \cos^2 \theta) (\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2) \\ &= \coth^2 2K_1 + k^2 \cosh^2 2K_2 \cos^2 \theta - k^2 \cosh^2 2K_2 - \coth^2 2K_1 \cos^2 \theta \\ &\quad + (2k \coth 2K_1 \cosh 2K_2 \cos \theta - 2k \coth 2K_1 \cosh 2K_2 \cos \theta) \\ &= (\coth 2K_1 - k \cosh 2K_2 \cos \theta)^2 - (k \cosh 2K_2 - \coth 2K_1 \cos \theta)^2 \end{aligned} \quad (5.3.116)$$

となる。よって、分子は、

$$\sin^2 \theta (\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2)^{\frac{1}{2}} = \pm \sqrt{(\coth 2K_1 - k \cosh 2K_2 \cos \theta)^2 - (k \cosh 2K_2 - \coth 2K_1 \cos \theta)^2} \quad (5.3.117)$$

となる。分母の根号の中身は $T > T_c$ の場合と同じであり (5.3.56) となる。まず、 $X_1 \times (\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2)$ は、

$$\begin{aligned} X_1 \times (\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2) &= \sinh^2 2K_2 \left(\coth^2 2K_1 - \frac{\coth^2 2K_1}{\sinh^2 2K_2} \right) \\ &= \cosh^2 2K_2 - \coth^2 2K_1 \end{aligned} \quad (5.3.118)$$

となる。ただし式変形で、

$$\begin{aligned} \coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2 &= \coth^2 2K_1 - \frac{\cosh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} \\ &= \coth^2 2K_1 - \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \coth^2 2K_2 \\ &= \coth^2 2K_1 - (\coth^2 2K_1 - 1) \coth^2 2K_2 \\ &= \coth^2 2K_2 - \coth^2 2K_1 (\coth^2 2K_2 - 1) \\ &= \coth^2 2K_2 - \frac{\coth^2 2K_1}{\sinh^2 2K_2} \end{aligned} \quad (5.3.119)$$

となることを使った。また、 $X_2 \times (\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2)$ は、

$$\begin{aligned} X_2 \times (\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2) &= 2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 (\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2) \\ &= 2 \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 (1 - k^2) \\ &= 2 \left(\frac{1}{k} - k \right) k \sinh 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \\ &= 2 \frac{1}{k} \coth 2K_1 \cosh 2K_2 - 2k \coth 2K_1 \cosh 2K_2 \end{aligned} \quad (5.3.120)$$

となる。ただし式変形で、

$$\begin{aligned}
\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2 &= \frac{1}{\sinh^2 2K_1} + 1 - k^2(1 + \sinh^2 2K_2) \\
&= 1 - k^2 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} - \frac{\sinh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} \\
&= 1 - k^2
\end{aligned} \tag{5.3.121}$$

となることを使った。最後に、

$$\begin{aligned}
X_3 \times (\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2) &= (\cosh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 - \sinh^2 2K_1)(\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2) \\
&= \frac{\cosh^4 2K_1 \cosh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_1} - \cosh^2 2K_1 - \frac{\cosh^2 2K_1 \cosh^4 2K_2}{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} + \coth^2 2K_2 \\
&= \frac{(1 + \sinh^2 2K_1) \cosh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_1} - \cosh^2 2K_1 \\
&\quad - \frac{\cosh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 (1 + \sinh^2 2K_2)}{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} + \coth^2 2K_2 \\
&= \cosh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 - \cosh^2 2K_1 - \frac{\cosh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} + \coth^2 2K_2 \\
&= \cosh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 - \cosh^2 2K_1 - \frac{(1 + \sinh^2 2K_1) \cosh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} + \coth^2 2K_2 \\
&= \cosh^2 2K_1 (\cosh^2 2K_2 - 1) - k^2 \cosh^2 2K_2 \\
&= \cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 - k^2 \cosh^2 2K_2 \\
&= \frac{1}{k^2} \coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2
\end{aligned} \tag{5.3.122}$$

となる。したがって、 $X \times (\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2)$ は、

$$\begin{aligned}
X \times (\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2) &= (\cosh^2 2K_2 - \coth^2 2K_1) \cos^2 \theta \\
&\quad - \left(2\frac{1}{k} \coth 2K_1 \cosh 2K_2 - 2k \coth 2K_1 \cosh 2K_2 \right) \cos \theta \\
&\quad + \frac{1}{k^2} \coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2 \\
&= \left(\frac{1}{k} \coth 2K_1 - \cosh 2K_2 \cos \theta \right)^2 - (k \cosh 2K_2 - \coth 2K_1 \cos \theta)^2
\end{aligned} \tag{5.3.123}$$

となる。したがって、 $k \sin \psi$ は、

$$\begin{aligned}
k \sin \psi &= \frac{\sin \theta}{\sqrt{X}} \times \frac{(\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2)^{\frac{1}{2}}}{(\coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2)^{\frac{1}{2}}} \\
&= \pm \frac{\sqrt{(\coth 2K_1 - k \cosh 2K_2 \cos \theta)^2 - (k \cosh 2K_2 + \coth 2K_1 \cos \theta)^2}}{\sqrt{(\frac{1}{k} \coth 2K_1 - \cosh 2K_2 \cos \theta)^2 - (k \cosh 2K_2 - \coth 2K_1 \cos \theta)^2}}
\end{aligned} \tag{5.3.124}$$

となる。これを $\cos \theta$ について解くと、

$$\begin{aligned}
& \left\{ \left(\frac{1}{k} \coth 2K_1 - \cosh 2K_2 \cos \theta \right)^2 - (k \cosh 2K_2 - \coth 2K_1 \cos \theta)^2 \right\} k^2 \sin^2 \psi \\
& = (\coth 2K_1 - k \cosh 2K_2 \cos \theta)^2 - (k \cosh 2K_2 - \coth 2K_1 \cos \theta)^2 \\
& (k \cosh 2K_2 - \coth 2K_1 \cos \theta)^2 (1 - k^2 \sin^2 \psi) = (\coth 2K_1 - k \cosh 2K_2 \cos \theta)^2 (1 - \sin^2 \psi) \\
& (k \cosh 2K_2 - \coth 2K_1 \cos \theta) (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} = (\coth 2K_1 - k \cosh 2K_2 \cos \theta) \cos \psi \\
& - \cos \theta \{ \coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \cosh 2K_2 \cos \psi \} = \coth 2K_1 \cos \psi - k \cosh 2K_2 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} \\
& - \cos \theta = \frac{\coth 2K_1 \cos \psi - k \cosh 2K_2 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}}{\coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \cosh 2K_2 \cos \psi} \tag{5.3.125}
\end{aligned}$$

となる。ただし、2行目から3行目の式変形の際、正符号をとった。

次に、 $\cos \theta$ を用いて $\sin \theta$ を求める。 $\sin^2 \theta$ は、

$$\begin{aligned}
\sin^2 \theta & = 1 - \cos^2 \theta \\
& = \frac{\{ \coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \cosh 2K_2 \cos \psi \}^2 - \{ \coth 2K_1 \cos \psi - k \cosh 2K_2 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} \}^2}{\{ \coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \cosh 2K_2 \cos \psi \}^2} \tag{5.3.126}
\end{aligned}$$

となる。この分子を変形すると、

$$\begin{aligned}
& \{ \coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \cosh 2K_2 \cos \psi \}^2 - \{ \coth 2K_1 \cos \psi - k \cosh 2K_2 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} \}^2 \\
& = \coth^2 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi) - 2k \coth 2K_1 \cosh 2K_2 \cos \psi (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k^2 \cosh^2 2K_2 \cos^2 \psi \\
& \quad - \coth^2 2K_1 \cos^2 \psi + 2k \coth 2K_1 \cosh 2K_2 \cos \psi (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k^2 \cosh^2 2K_2 (1 - k^2 \sin^2 \psi) \\
& = \coth^2 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi) + k^2 \cosh^2 2K_2 (1 - \sin^2 \psi) - \coth^2 2K_1 (1 - \sin^2 \psi) - k^2 \cosh^2 2K_2 (1 - k^2 \sin^2 \psi) \\
& = \coth^2 2K_1 + k^2 \cosh^2 2K_2 - \coth^2 2K_1 - k^2 \cosh^2 2K_2 \\
& \quad + (\cosh^2 2K_2 k^4 - \coth^2 2K_1 k^2 - \cosh^2 2K_2 k^2 + \coth^2 2K_1) \sin^2 \psi \\
& = \left\{ (1 + \sinh^2 2K_2) k^4 - \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1} + 1 \right) k^2 - (1 + \sinh^2 2K_2) k^2 + \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1} + 1 \right) \right\} \sin^2 \psi \\
& = (k^4 - 2k + 1) \sin^2 \psi + \left(\sinh^2 2K_2 k^4 - \frac{k^2}{\sinh^2 2K_1} - \sinh^2 2K_2 k^2 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \right) \sin^2 \psi \\
& = (1 - k^2)^2 \sin^2 \psi \tag{5.3.127}
\end{aligned}$$

となる。したがって、

$$\sin^2 \theta = \frac{(1 - k^2)^2 \sin^2 \psi}{\{ \coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \cosh 2K_2 \cos \psi \}^2} \tag{5.3.128}$$

$$\sin \theta = \pm \frac{(1 - k^2) \sin \psi}{\coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \cosh 2K_2 \cos \psi} \tag{5.3.129}$$

となる。

(5.3.129) の両辺を微分すると、

$$\begin{aligned}
\cos \theta d\theta & = \pm \left[(1 - k^2) \cos \psi \{ \coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \cosh 2K_2 \cos \psi \} \right. \\
& \quad \left. - (1 - k^2) \sin \psi \{ -k^2 \coth 2K_1 \sin \psi \cos \psi (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}} + k \cosh 2K_2 \sin \psi \} \right] \\
& \quad \times \left[\coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \cosh 2K_2 \cos \psi \right]^{-2} d\psi \tag{5.3.130}
\end{aligned}$$

となる。この分子を変形すると、

$$\begin{aligned}
& (1 - k^2) \cos \psi \{ \coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \cosh 2K_2 \cos \psi \} \\
& \quad - (1 - k^2) \sin \psi \{ -k^2 \coth 2K_1 \sin \psi \cos \psi (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}} + k \cosh 2K_2 \sin \psi \} \\
& = (1 - k^2) (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}} \{ \coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi) \cos \psi - k \cosh 2K_2 \cos^2 \psi (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} \\
& \quad + k^2 \coth 2K_1 \sin^2 \psi \cos \psi - k \cosh 2K_2 \sin^2 \psi (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} \} \\
& = (1 - k^2) (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}} [\coth 2K_1 \cos \psi - k \cosh 2K_2 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}] \tag{5.3.131}
\end{aligned}$$

となる。これより、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \theta}{\partial \psi} & = \pm \frac{1}{\cos \theta} \times \frac{(1 - k^2) (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}} [\coth 2K_1 \cos \psi - k \cosh 2K_2 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}]}{[\coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \cosh 2K_2 \cos \psi]^2} \\
& = \mp \frac{\coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \cosh 2K_2 \cos \psi}{\coth 2K_1 \cos \psi - k \cosh 2K_2 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} \\
& \quad \times \frac{(1 - k^2) (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}} [\coth 2K_1 \cos \psi - k \cosh 2K_2 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}]}{[\coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \cosh 2K_2 \cos \psi]^2} \\
& = \mp \frac{(1 - k^2) (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}}}{\coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \cosh 2K_2 \cos \psi} \tag{5.3.132}
\end{aligned}$$

となり、分母分子に $\coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k \cosh 2K_2 \cos \psi$ をかけると、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \theta}{\partial \psi} & = \mp \frac{(1 - k^2) (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}}}{\coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} - k \cosh 2K_2 \cos \psi} \\
& \quad \times \frac{\coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k \cosh 2K_2 \cos \psi}{\coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k \cosh 2K_2 \cos \psi} \\
& = \mp \frac{(1 - k^2) (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}} \{ \coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k \cosh 2K_2 \cos \psi \}}{\coth^2 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi) - k^2 \cosh^2 2K_2 \cos^2 \psi} \tag{5.3.133}
\end{aligned}$$

となる。この分母は、

$$\begin{aligned}
& \coth^2 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi) - k^2 \cosh^2 2K_2 \cos^2 \psi \\
& = \coth^2 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi) - k^2 \cosh^2 2K_2 + k^2 \cosh^2 2K_2 \sin^2 \psi \\
& = \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1} + 1 \right) - k^2 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1} + 1 \right) \sin^2 \psi - k^2 (1 + \sinh^2 2K_2) + k^2 (1 + \sinh^2 2K_2) \sin^2 \psi \\
& = \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1} + 1 - k^2 - k^2 \sinh^2 2K_2 \right) + \left(-\frac{k^2}{\sinh^2 2K_1} - k^2 + k^2 + k^2 \sinh^2 2K_2 \right) \sin^2 \psi \\
& = (1 - k^2) + (1 - k^2) \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi \\
& = (1 - k^2) \left(1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi \right) \tag{5.3.134}
\end{aligned}$$

となるから、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \theta}{\partial \psi} & = \mp \frac{(1 - k^2) (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{-\frac{1}{2}} \{ \coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k \cosh 2K_2 \cos \psi \}}{(1 - k^2) \left(1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi \right)} \\
& = \mp \frac{\coth 2K_1 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k \cosh 2K_2 \cos \psi}{\left(1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi \right) (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} \tag{5.3.135}
\end{aligned}$$

となる。ここで、 $\frac{\partial \theta}{\partial \psi} < 0$ である必要があり、

$$\frac{\partial \theta}{\partial \psi} = -\frac{\coth 2K_1(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k \cosh 2K_2 \cos \psi}{\left(1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi\right) (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} \quad (5.3.136)$$

となる。

したがって、

$$\begin{aligned} u_2 &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{\coth 2K_1(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k \cosh 2K_2 \cos \psi}{\left(1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi\right) (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} d\psi \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{\coth 2K_1(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}} + k \cosh 2K_2 \cos \psi}{1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi} d\psi \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{\coth 2K_1(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}}{1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi} d\psi \\ &\quad + \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{k \cosh 2K_2 \cos \psi}{1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi} d\psi \end{aligned} \quad (5.3.137)$$

となる。

・右辺第 1 項の積分

$\psi \rightarrow \psi - \frac{\pi}{2}$ と変数変換すると、

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \frac{\coth 2K_1(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}}{1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi} d\psi &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{\coth 2K_1(1 - k^2 \cos^2 \psi)^{\frac{1}{2}}}{1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \cos^2 \psi} d\psi \\ &= 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\coth 2K_1(1 - k^2 \cos^2 \psi)^{\frac{1}{2}}}{1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \cos^2 \psi} d\psi \end{aligned} \quad (5.3.138)$$

となる。ただし、1 行目の右辺が偶関数であることを用いた。ここで、再び $\psi \rightarrow -\psi + \frac{\pi}{2}$ と変数変換すると、

$$\int_0^\pi \frac{\coth 2K_1(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}}{1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi} d\psi = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\coth 2K_1(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}}{1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi} d\psi \quad (5.3.139)$$

となる。

・右辺第 2 項の積分

$\psi \rightarrow \psi - \frac{\pi}{2}$ と変数変換すると、

$$\int_0^\pi \frac{k \cosh 2K_2 \cos \psi}{1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi} d\psi = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{k \cosh 2K_2 \sin \psi}{1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \cos^2 \psi} d\psi = 0 \quad (5.3.140)$$

となる。ただし、右辺が奇関数であることを用いた。

よって、

$$u_2 = 2\pi^{-1} \coth 2K_1 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}}{1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi} d\psi \quad (5.3.141)$$

となる。また、この被積分関数は、

$$\begin{aligned}
\frac{(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}}{1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi} &= \frac{1 - k^2 \sin^2 \psi}{\left(1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi\right) (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} \\
&= \frac{\coth^2 2K_2 \left\{1 - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \left(1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi\right)\right\}}{\left(1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi\right) (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} \\
&= \coth^2 2K_2 \left\{ \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi\right) (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{\cosh^2 2K_2 (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} \right\}
\end{aligned} \tag{5.3.142}$$

となる。ただし、式変形で、

$$\begin{aligned}
1 - k^2 \sin^2 \psi &= 1 - \frac{\sin^2 \psi}{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} \\
&= \frac{1}{\sinh^2 2K_2} \left(\sinh^2 2K_2 - \frac{\sin^2 \psi}{\sinh^2 2K_1} \right) \\
&= \frac{1}{\sinh^2 2K_2} \left\{ 1 + \sinh^2 2K_2 - \left(1 + \frac{\sin^2 \psi}{\sinh^2 2K_1}\right) \right\} \\
&= \coth^2 2K_2 - \frac{1}{\sinh^2 2K_2} \left(1 + \frac{\sin^2 \psi}{\sinh^2 2K_1}\right) \\
&= \coth^2 2K_2 \left\{ 1 - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \left(1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi\right) \right\}
\end{aligned} \tag{5.3.143}$$

となることを使った。よって、

$$\begin{aligned}
u_2 &= 2\pi^{-1} \coth 2K_1 \coth^2 2K_2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \sin^2 \psi\right) (1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} d\psi \\
&\quad - 2\pi^{-1} \coth 2K_1 \coth^2 2K_2 \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{(1 - k^2 \sin^2 \psi)^{\frac{1}{2}}} d\psi \\
&= 2\pi^{-1} \coth 2K_1 \coth^2 2K_2 \left[\Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right]
\end{aligned} \tag{5.3.144}$$

となる。

また、 u_1 は u_2 において $1 \leftrightarrow 2$ としたものであるから、

$$u_1 = 2\pi^{-1} \coth 2K_2 \coth^2 2K_1 \left[\Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_2}, k \right) - \frac{1}{\cosh^2 2K_1} K(k) \right] \tag{5.3.145}$$

となる。したがって、

$$\begin{aligned}
U &= -\frac{J_1}{\pi} \coth 2K_2 \coth^2 2K_1 \left[\Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_2}, k \right) - \frac{1}{\cosh^2 2K_1} K(k) \right] \\
&\quad - \frac{J_2}{\pi} \coth 2K_1 \coth^2 2K_2 \left[\Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right]
\end{aligned} \tag{5.3.146}$$

となる。

5.3.4 温度依存性

以上の考察より内部エネルギーは以下ようになる。

・ $T > T_c$ のとき ($k = \sinh 2K_1 \sinh 2K_2$)

$$U = -\frac{J_1}{\pi} \coth 2K_1 \cosh 2K_2 \cosh 2K_1 \left[\Pi_1(\sinh^2 2K_1, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_1} K(k) \right] \\ - \frac{J_2}{\pi} \coth 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[\Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \quad (5.3.147)$$

・ $T < T_c$ のとき ($k = \frac{1}{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2}$)

$$U = -\frac{J_1}{\pi} \coth 2K_2 \coth^2 2K_1 \left[\Pi_1\left(\frac{1}{\sinh^2 2K_2}, k\right) - \frac{1}{\cosh^2 2K_1} K(k) \right] \\ - \frac{J_2}{\pi} \coth 2K_1 \coth^2 2K_2 \left[\Pi_1\left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k\right) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \quad (5.3.148)$$

$T = T_c$ での振る舞いについて考える。(付録 G.16)、(付録 G.24) より、 $T > T_c$ のとき T_c 近傍では、

$$\Pi_1(\sinh^2 2K_1, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_1} K(k) \cong \frac{1}{1 + \sinh^2 \beta_c J_1} \ln \frac{4}{|k'|} \\ + \frac{\sinh \beta_c J_1}{1 + \sinh^2 \beta_c J_1} \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_1) - \frac{1}{\cosh^2 \beta_c J_1} \ln \frac{4}{|k'|} \\ = \frac{\sinh \beta_c J_1}{\cosh^2 \beta_c J_1} \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_1) \quad (5.3.149)$$

$$\Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \cong \frac{\sinh \beta_c J_2}{\cosh^2 \beta_c J_2} \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_2) \quad (5.3.150)$$

となり、どちらも発散することはない。よって、 $T = T_c$ で内部エネルギーは連続であり、

$$U = -\frac{J_1}{\pi} \coth \beta_c J_1 \cosh \beta_c J_2 \cosh \beta_c J_1 \frac{\sinh \beta_c J_1}{\cosh^2 \beta_c J_1} \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_1) \\ - \frac{J_2}{\pi} \coth \beta_c J_2 \cosh \beta_c J_1 \cosh \beta_c J_2 \frac{\sinh \beta_c J_2}{\cosh^2 \beta_c J_2} \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_2) \\ = -\frac{J_1}{\pi} \coth \beta_c J_1 \frac{\cosh \beta_c J_2 \sinh \beta_c J_1}{\cosh \beta_c J_1} \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_1) \\ - \frac{J_2}{\pi} \coth \beta_c J_2 \frac{\cosh \beta_c J_1 \sinh \beta_c J_2}{\cosh \beta_c J_2} \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_2) \\ = -\frac{1}{\pi} \{ J_1 \coth \beta_c J_1 \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_1) + J_2 \coth \beta_c J_2 \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_2) \} \quad (5.3.151)$$

という値をとる。ただし、

$$\sinh^2 \beta_c J_1 \sinh^2 \beta_c J_2 = 1 \\ (\cosh^2 \beta_c J_1 - 1)(\cosh^2 \beta_c J_2 - 1) = 1 \\ \cosh^2 \beta_c J_1 \cosh^2 \beta_c J_2 = \cosh^2 \beta_c J_1 + \cosh^2 \beta_c J_2 \\ \frac{\cosh^2 \beta_c J_2}{\cosh^2 \beta_c J_1} = \cosh^2 \beta_c J_2 - 1 = \sinh^2 \beta_c J_2 \quad (5.3.152)$$

となることを使った。

実際に内部エネルギーを数値的に評価したものが図 164 となる。このように内部エネルギーは任意の温度に対して有限で連続であり、温度とともに単調増加することが分かる。

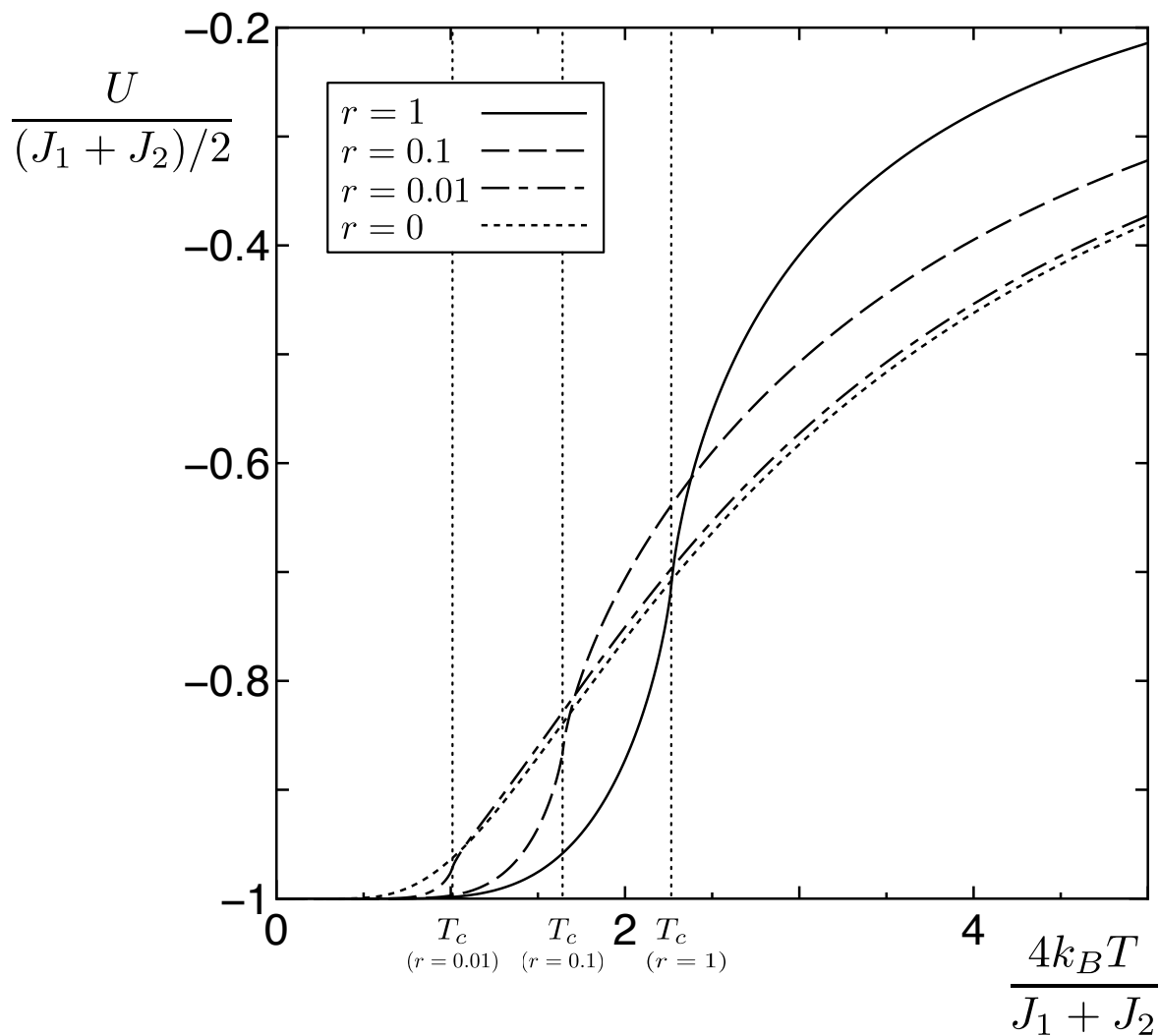


図 164 内部エネルギーの温度依存性

5.4 比熱

5.4.1 $T > T_c$ の場合の比熱

比熱 C は、

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} \quad (5.4.1)$$

で与えられる。これより、

$$C = -\frac{J_1}{\pi} \frac{\partial}{\partial T} \coth 2K_1 \cosh 2K_2 \cosh 2K_1 \left[\Pi_1(\sinh^2 2K_1, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_1} K(k) \right] \\ - \frac{J_2}{\pi} \frac{\partial}{\partial T} \coth 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[\Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \quad (5.4.2)$$

となる。ここで、

$$C \equiv -\frac{J_1}{\pi} c_1 - \frac{J_2}{\pi} c_2 \quad (5.4.3)$$

とおき、 c_2 を求める。 c_1 は c_2 において $1 \leftrightarrow 2$ としたものである。ここで、 $i = 1, 2$ に対して、

$$\frac{\partial}{\partial T} = \frac{\partial K_i}{\partial T} \frac{\partial}{\partial K_i} = -\frac{J_i}{2k_B T^2} \frac{\partial}{\partial K_i} \quad (5.4.4)$$

が成立する。よって、

$$c_2 = -\frac{J_1}{2k_B T^2} \frac{\partial}{\partial K_1} \coth 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[\Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \\ - \frac{J_2}{2k_B T^2} \frac{\partial}{\partial K_2} \coth 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[\Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \quad (5.4.5)$$

$$\equiv -\frac{J_1}{2k_B T^2} a - \frac{J_2}{2k_B T^2} b \quad (5.4.6)$$

となる。

まず、 a について考えると、

$$a = 2 \coth 2K_2 \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[\Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \\ + \coth 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[\frac{\partial}{\partial K_1} \Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \frac{\partial}{\partial K_1} K(k) \right] \quad (5.4.7)$$

となり、

$$\nu \equiv \sinh^2 2K_2 \quad (5.4.8)$$

とおくと付録 F、付録 H より、

$$\frac{\partial}{\partial K_1} \Pi_1(\nu, k) = \frac{\partial k}{\partial K_1} \frac{\partial}{\partial k} \Pi_1(\nu, k) \\ = 2 \cosh 2K_1 \sinh 2K_2 \frac{k}{k^2 + \nu} [k'^{-2} E(k) - \Pi_1(\nu, k)] \quad (5.4.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial K_1} K(k) = \frac{\partial k}{\partial K_1} \frac{\partial}{\partial k} K(k) \\ = 2 \cosh 2K_1 \sinh 2K_2 k^{-1} k'^{-2} [E(k) - k'^2 K(k)] \quad (5.4.10)$$

となる。ただし、

$$k'^2 = 1 - k^2 = 1 - \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 \quad (5.4.11)$$

であり、以降の計算に必要なものとして、

$$1 + k^2 \nu^{-1} = 1 + \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 \frac{1}{\sinh^2 2K_2} = 1 + \sinh^2 2K_1 = \cosh^2 2K_1 \quad (5.4.12)$$

$$1 + \nu = 1 + \sinh^2 2K_2 = \cosh^2 2K_2 \quad (5.4.13)$$

$$\frac{k^2}{\nu^2} - 1 = \frac{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2}{\sinh^4 2K_2} - 1 = \frac{\sinh^2 2K_1}{\sinh^2 2K_2} - 1 \quad (5.4.14)$$

$$\nu + k^2 = \sinh^2 2K_2 + \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 = \cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 \quad (5.4.15)$$

が成立する。

よって、

$$\begin{aligned} a &= 2 \coth 2K_2 \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[\Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \\ &\quad + \coth 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[2 \cosh 2K_1 \sinh 2K_2 \frac{k}{\nu + k^2} \{k'^{-2} E(k) - \Pi_1(\sinh^2 2K_2, k)\} \right. \\ &\quad \quad \quad \left. - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} 2 \cosh 2K_1 \sinh 2K_2 k^{-1} k'^{-2} \{E(k) - k'^2 K(k)\} \right] \\ &= 2 \coth 2K_2 \cosh 2K_2 \left[\sinh 2K_1 - \cosh^2 2K_1 \sinh 2K_2 \frac{k}{\nu + k^2} \right] \Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) \\ &\quad + 2 \coth 2K_2 \cosh^2 2K_1 \cosh 2K_2 \sinh 2K_2 \left[\frac{k}{\nu + k^2} k'^{-2} - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} k^{-1} k'^{-2} \right] E(k) \\ &\quad + 2 \coth 2K_2 \cosh 2K_2 \left[-\sinh 2K_1 \frac{1}{\cosh^2 2K_2} + \cosh 2K_1 \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \cosh 2K_1 \sinh 2K_2 k^{-1} \right] K(k) \end{aligned} \quad (5.4.16)$$

となる。まず、 $\Pi_1(\sinh^2 2K_2, k)$ にかかっている括弧の中を計算すると、

$$\begin{aligned} \sinh 2K_1 - \cosh^2 2K_1 \sinh 2K_2 \frac{k}{\nu + k^2} &= \sinh 2K_1 - \cosh^2 2K_1 \sinh 2K_2 \frac{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2}{\cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} \\ &= \sinh 2K_1 - \sinh 2K_1 = 0 \end{aligned} \quad (5.4.17)$$

となる。次に、 $E(k)$ にかかっている括弧の中を計算すると、

$$\begin{aligned} \frac{k}{\nu + k^2} k'^{-2} - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} k^{-1} k'^{-2} &= k'^{-2} \left[\frac{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2}{\cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} - \frac{1}{\cosh^2 2K_2 \sinh 2K_1 \sinh 2K_2} \right] \\ &= k'^{-2} \frac{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2 \cosh^2 2K_2 - \sinh 2K_2 \cosh^2 2K_1}{\cosh^2 2K_1 \sinh 2K_1 \cosh^2 2K_2 \sinh^2 2K_2} \\ &= k'^{-2} \frac{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2 (1 + \sinh^2 2K_2) - \sinh 2K_2 (1 + \sinh^2 2K_1)}{\cosh^2 2K_1 \sinh 2K_1 \cosh^2 2K_2 \sinh^2 2K_2} \\ &= -(1 - \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2)^{-1} \frac{\sinh 2K_2 (1 - \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2)}{\cosh^2 2K_1 \sinh 2K_1 \cosh^2 2K_2 \sinh^2 2K_2} \\ &= -\frac{\sinh 2K_2}{\cosh^2 2K_1 \sinh 2K_1 \cosh^2 2K_2 \sinh^2 2K_2} \end{aligned} \quad (5.4.18)$$

となる。最後に、 $K(k)$ にかかっている括弧の中を計算すると、

$$\begin{aligned}
-\sinh 2K_1 \frac{1}{\cosh^2 2K_2} + \cosh 2K_1 \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \cosh 2K_1 \sinh 2K_2 k^{-1} &= -\frac{\sinh 2K_1}{\cosh^2 2K_2} + \frac{\cosh^2 2K_1 \sinh 2K_2}{\cosh^2 2K_2 \sinh 2K_1 \sinh 2K_2} \\
&= \frac{-\sinh^2 2K_1 + \cosh^2 2K_1}{\cosh^2 2K_2 \sinh 2K_1} \\
&= \frac{1}{\cosh^2 2K_2 \sinh 2K_1} \quad (5.4.19)
\end{aligned}$$

となる。したがって、 a は、

$$\begin{aligned}
a &= -2 \coth 2K_2 \cosh^2 2K_1 \cosh 2K_2 \sinh 2K_2 \frac{\sinh 2K_2}{\cosh^2 2K_1 \sinh 2K_1 \cosh^2 2K_2 \sinh^2 2K_2} E(k) \\
&\quad + 2 \coth 2K_2 \cosh 2K_2 \frac{1}{\cosh^2 2K_2 \sinh 2K_1} K(k) \\
&= \frac{2}{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2} [K(k) - E(k)] \quad (5.4.20)
\end{aligned}$$

となる。

次に b について考えると、

$$\begin{aligned}
b &= -\frac{2}{\sinh^2 2K_2} \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[\Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \\
&\quad + 2 \coth 2K_2 \cosh 2K_1 \sinh 2K_2 \left[\Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \\
&\quad + \coth 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[\frac{\partial}{\partial K_2} \Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - \frac{\partial}{\partial K_2} \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \quad (5.4.21)
\end{aligned}$$

となり、付録 F、付録 H、付録 I より、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial K_2} \Pi_1(\nu, k) &= \frac{\partial \nu}{\partial K_2} \frac{\partial}{\partial \nu} \Pi_1(\nu, k) + \frac{\partial k}{\partial K_2} \frac{\partial}{\partial k} \Pi_1(\nu, k) \\
&= 4 \sinh 2K_2 \cosh 2K_2 \frac{1}{2(1+\nu)(1+k^2\nu^{-1})} \left[\left(\frac{k^2}{\nu^2} - 1 \right) \Pi_1(\nu, k) - \frac{1}{\nu^2} (k^2 + \nu) K(k) + \frac{1}{\nu} E(k) \right] \\
&\quad + 2 \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 \frac{k}{\nu + k^2} [k'^{-2} E(k) - \Pi_1(\nu, k)] \quad (5.4.22) \\
\frac{\partial}{\partial K_2} \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) &= -4 \frac{\sinh 2K_2}{\cosh^3 2K_2} K(k) + \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \frac{\partial k}{\partial K_2} \frac{\partial}{\partial k} K(k) \\
&= -4 \frac{\sinh 2K_2}{\cosh^3 2K_2} K(k) + 2 \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 k^{-1} k'^{-2} [E(k) - k'^2 K(k)] \quad (5.4.23)
\end{aligned}$$

となる。

よって、

$$\begin{aligned}
b &= -\frac{2}{\sinh^2 2K_2} \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[\Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \\
&\quad + 2 \coth 2K_2 \cosh 2K_1 \sinh 2K_2 \left[\Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \\
&\quad + \coth 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \\
&\quad \times \left\{ 4 \sinh 2K_2 \cosh 2K_2 \frac{1}{2(1+\nu)(1+k^2\nu^{-1})} \left[\left(\frac{k^2}{\nu^2} - 1 \right) \Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - \frac{1}{\nu^2} (k^2 + \nu) K(k) + \frac{1}{\nu} E(k) \right] \right. \\
&\quad \quad + 2 \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 \frac{k}{\nu + k^2} [k'^{-2} E(k) - \Pi_1(\sinh^2 2K_2, k)] \\
&\quad \quad \left. + 4 \frac{\sinh 2K_2}{\cosh^3 2K_2} K(k) - 2 \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 k^{-1} k'^{-2} [E(k) - k'^2 K(k)] \right\} \\
&= 2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[-\frac{1}{\sinh^2 2K_2} + 1 + \coth 2K_2 \left\{ \sinh 2K_2 \cosh 2K_2 \frac{1}{(1+\nu)(1+k^2\nu^{-1})} \left(\frac{k^2}{\nu^2} - 1 \right) \right. \right. \\
&\quad \quad \left. \left. - \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 \frac{k}{\nu + k^2} \right\} \right] \Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) \\
&\quad + 2 \coth 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[\sinh 2K_2 \cosh 2K_2 \frac{1}{(1+\nu)(1+k^2\nu^{-1})} \frac{1}{\nu} \right. \\
&\quad \quad \left. + \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 \frac{k}{\nu + k^2} k'^{-2} - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 k^{-1} k'^{-2} \right] E(k) \\
&\quad + 2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[\frac{1}{\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_2} - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \right. \\
&\quad \quad \left. + \coth 2K_2 \left\{ -\sinh 2K_2 \cosh 2K_2 \frac{1}{(1+\nu)(1+k^2\nu^{-1})} \frac{1}{\nu^2} (k^2 + \nu) \right. \right. \\
&\quad \quad \left. \left. + 2 \frac{\sinh 2K_2}{\cosh^3 2K_2} + \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 k^{-1} \right\} \right] K(k)
\end{aligned} \tag{5.4.24}$$

となる。まず、 $\Pi_1(\sinh^2 2K_2, k)$ にかかっている括弧の中を計算すると、

$$\begin{aligned}
&-\frac{1}{\sinh^2 2K_2} + 1 + \coth 2K_2 \left\{ \sinh 2K_2 \cosh 2K_2 \frac{1}{(1+\nu)(1+k^2\nu^{-1})} \left(\frac{k^2}{\nu^2} - 1 \right) - \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 \frac{k}{\nu + k^2} \right\} \\
&= -\frac{1}{\sinh^2 2K_2} + 1 + \coth 2K_2 \left\{ \sinh 2K_2 \cosh 2K_2 \frac{1}{\cosh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1} \left(\frac{\sinh^2 2K_1}{\sinh^2 2K_2} - 1 \right) \right. \\
&\quad \quad \left. - \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 \frac{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2}{\cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} \right\} \\
&= -\frac{1}{\sinh^2 2K_2} + \frac{\cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2}{\cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} + \frac{\sinh^2 2K_1 - \sinh^2 2K_2}{\cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} - \frac{\sinh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2}{\cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} \\
&= -\frac{1}{\sinh^2 2K_2} + \frac{(1 + \sinh^2 2K_1)(-1 + \cosh^2 2K_2) + \sinh^2 2K_1 - \sinh^2 2K_2 - \sinh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2}{\cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} \\
&= -\frac{1}{\sinh^2 2K_2} + \frac{-1 + \cosh^2 2K_2 - \sinh^2 2K_2}{\cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} \\
&= -\frac{1}{\sinh^2 2K_2}
\end{aligned} \tag{5.4.25}$$

となる。次に、 $E(k)$ にかかっている括弧の中を計算すると、

$$\begin{aligned}
& \sinh 2K_2 \cosh 2K_2 \frac{1}{(1+\nu)(1+k^2\nu^{-1})} \frac{1}{\nu} + \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 \frac{k}{\nu+k^2} k'^{-2} - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 k^{-1} k'^{-2} \\
&= \sinh 2K_2 \cosh 2K_2 \frac{1}{\cosh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \\
&\quad + \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 \frac{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2}{\cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} k'^{-2} - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 \frac{1}{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2} k'^{-2} \\
&= k'^{-2} \left\{ \frac{1 - \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2}{\cosh^2 2K_1 \sinh 2K_2 \cosh 2K_2} + \frac{\sinh^2 2K_1 \cosh 2K_2}{\cosh^2 2K_1 \sinh 2K_2} - \frac{1}{\sinh 2K_2 \cosh 2K_2} \right\} \\
&= k'^{-2} \frac{1 - \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 + \sinh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2 - \cosh^2 2K_1}{\cosh^2 2K_1 \sinh 2K_2 \cosh 2K_2} \\
&= k'^{-2} \frac{1 - \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 + \sinh^2 2K_1 (1 + \sinh^2 2K_2) - \cosh^2 2K_1}{\cosh^2 2K_1 \sinh 2K_2 \cosh 2K_2} \\
&= 0
\end{aligned} \tag{5.4.26}$$

となる。最後に、 $K(k)$ にかかっている括弧の中を計算すると、

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_2} - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} + \coth 2K_2 \left\{ -\sinh 2K_2 \cosh 2K_2 \frac{1}{(1+\nu)(1+k^2\nu^{-1})} \frac{1}{\nu^2} (k^2 + \nu) \right. \\
&\quad \left. + 2 \frac{\sinh 2K_2}{\cosh^3 2K_2} + \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 k^{-1} \right\} \\
&= \frac{1}{\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_2} - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \\
&\quad + \coth 2K_2 \left\{ -\sinh 2K_2 \cosh 2K_2 \frac{1}{\cosh^2 2K_2 \cosh^2 2K_1 \sinh^4 2K_2} \frac{1}{\cosh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} \right. \\
&\quad \left. + 2 \frac{\sinh 2K_2}{\cosh^3 2K_2} + \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \sinh 2K_1 \cosh 2K_2 \frac{1}{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2} \right\} \\
&= \frac{1}{\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_2} - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} + \coth 2K_2 \left\{ -\frac{1}{\sinh 2K_2 \cosh 2K_2} + 2 \frac{\sinh 2K_2}{\cosh^3 2K_2} + \frac{1}{\sinh 2K_2 \cosh 2K_2} \right\} \\
&= \frac{1}{\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_2} - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} + 2 \coth 2K_2 \frac{\sinh 2K_2}{\cosh^3 2K_2} \\
&= \frac{1 + \sinh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_2} \\
&= \frac{1}{\sinh^2 2K_2}
\end{aligned} \tag{5.4.27}$$

となる。したがって、 b は、

$$\begin{aligned}
b &= -2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \frac{1}{\sinh^2 2K_2} \Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) + 2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \frac{1}{\sinh^2 2K_2} K(k) \\
&= 2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \frac{1}{\sinh^2 2K_2} [K(k) - \Pi_1(\sinh^2 2K_2, k)]
\end{aligned} \tag{5.4.28}$$

となる。

よって、 c_2 は、

$$c_2 = -\frac{J_1}{k_B T^2} \frac{1}{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2} [K(k) - E(k)] - \frac{J_2}{k_B T^2} \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \frac{1}{\sinh^2 2K_2} [K(k) - \Pi_1(\sinh^2 2K_2, k)] \tag{5.4.29}$$

となる。また、 c_1 は c_2 において $1 \leftrightarrow 2$ としたものであるから、

$$c_1 = -\frac{J_2}{k_B T^2} \frac{1}{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2} [K(k) - E(k)] - \frac{J_1}{k_B T^2} \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \frac{1}{\sinh^2 2K_1} [K(k) - \Pi_1(\sinh^2 2K_1, k)] \quad (5.4.30)$$

となる。したがって、比熱 C は、

$$C = \frac{1}{\pi k_B T^2} \left\{ \left(\frac{J_1}{\sinh 2K_1} \right)^2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 [K(k) - \Pi_1(\sinh^2 2K_1, k)] \right. \\ \left. + \left(\frac{J_2}{\sinh 2K_2} \right)^2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 [K(k) - \Pi_1(\sinh^2 2K_2, k)] \right. \\ \left. + 2 \frac{J_1 J_2}{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2} [K(k) - E(k)] \right\} \quad (5.4.31)$$

となる。

5.4.2 $T < T_c$ の場合の比熱

比熱 C は、

$$C = -\frac{J_1}{\pi} \frac{\partial}{\partial T} \coth 2K_2 \coth^2 2K_1 \left[\Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_2}, k \right) - \frac{1}{\cosh^2 2K_1} K(k) \right] \\ - \frac{J_2}{\pi} \frac{\partial}{\partial T} \coth 2K_1 \coth^2 2K_2 \left[\Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \quad (5.4.32)$$

となる。ここで、 $T > T_c$ の場合と同様に、

$$C \equiv -\frac{J_1}{\pi} c_1 - \frac{J_2}{\pi} c_2 \quad (5.4.33)$$

とおき、 c_2 を求める。 c_1 は c_2 において $1 \leftrightarrow 2$ としたものである。 c_2 は、

$$c_2 = -\frac{J_1}{2k_B T^2} \frac{\partial}{\partial K_1} \coth 2K_1 \coth^2 2K_2 \left[\Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \\ - \frac{J_2}{2k_B T^2} \frac{\partial}{\partial K_2} \coth 2K_1 \coth^2 2K_2 \left[\Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \quad (5.4.34)$$

$$\equiv -\frac{J_1}{2k_B T^2} a - \frac{J_2}{2k_B T^2} b \quad (5.4.35)$$

となる。

まず、 a について考えると、

$$a = -\frac{2}{\sinh^2 2K_1} \coth^2 2K_2 \left[\Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \\ + \coth 2K_1 \coth^2 2K_2 \left[\frac{\partial}{\partial K_1} \Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \frac{\partial}{\partial K_1} K(k) \right] \quad (5.4.36)$$

となり、

$$\nu \equiv \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \quad (5.4.37)$$

とおくと、付録 F、付録 H、付録 I より、

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial K_1} \Pi_1(\nu, k) &= \frac{\partial \nu}{\partial K_1} \frac{\partial}{\partial \nu} \Pi_1(\nu, k) + \frac{\partial k}{\partial K_1} \frac{\partial}{\partial k} \Pi_1(\nu, k) \\ &= -4 \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^3 2K_1} \frac{1}{2(1+\nu)(1+k^2\nu^{-1})} \left[\left(\frac{k^2}{\nu^2} - 1 \right) \Pi_1(\nu, k) - \frac{1}{\nu^2} (k^2 + \nu) K(k) + \frac{1}{\nu} E(k) \right] \\ &\quad - 2 \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2} \frac{k}{\nu + k^2} [k'^{-2} E(k) - \Pi_1(\nu, k)]\end{aligned}\quad (5.4.38)$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial K_1} K(k) &= \frac{\partial k}{\partial K_1} \frac{\partial}{\partial k} K(k) \\ &= -2 \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2} k^{-1} k'^{-2} [E(k) - k'^2 K(k)]\end{aligned}\quad (5.4.39)$$

となる。ただし、

$$k'^2 = 1 - k^2 = 1 - \frac{1}{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2}\quad (5.4.40)$$

であり、以降の計算において必要なものとして、

$$1 + k^2 \nu^{-1} = 1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} \sinh^2 2K_1 = \coth^2 2K_2\quad (5.4.41)$$

$$1 + \nu = 1 + \frac{1}{\sinh^2 2K_1} = \coth^2 2K_1\quad (5.4.42)$$

$$\frac{k^2}{\nu^2} - 1 = \frac{1}{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} \sinh^4 2K_1 - 1 = \frac{\sinh^2 2K_1}{\sinh^2 2K_2} - 1\quad (5.4.43)$$

$$\nu + k^2 = \frac{1}{\sinh^2 2K_1} + \frac{1}{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} = \frac{\cosh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2}\quad (5.4.44)$$

が成立する。

よって、

$$\begin{aligned}a &= -\frac{2}{\sinh^2 2K_1} \coth^2 2K_2 \left[\Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \\ &\quad + \coth 2K_1 \coth^2 2K_2 \left\{ -4 \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^3 2K_1} \frac{1}{2(1+\nu)(1+k^2\nu^{-1})} \left[\left(\frac{k^2}{\nu^2} - 1 \right) \Pi_1(\nu, k) - \frac{1}{\nu^2} (k^2 + \nu) K(k) + \frac{1}{\nu} E(k) \right] \right. \\ &\quad \left. - 2 \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2} \frac{k}{\nu + k^2} [k'^{-2} E(k) - \Pi_1(\nu, k)] + 2 \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2} k^{-1} k'^{-2} [E(k) - k'^2 K(k)] \right\} \\ &= 2 \coth^2 2K_2 \left[-\frac{1}{\sinh^2 2K_1} \right. \\ &\quad \left. - \coth 2K_1 \left\{ \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^3 2K_1} \frac{1}{(1+\nu)(1+k^2\nu^{-1})} \left(\frac{k^2}{\nu^2} - 1 \right) - \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2} \frac{k}{\nu + k^2} \right\} \right] \Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) \\ &\quad + 2 \coth 2K_1 \coth^2 2K_2 \left[-\frac{\cosh 2K_1}{\sinh^3 2K_1} \frac{1}{(1+\nu)(1+k^2\nu^{-1})} \frac{1}{\nu} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2} \frac{k}{\nu + k^2} k'^{-2} + \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2} k^{-1} k'^{-2} \right] E(k) \\ &\quad + 2 \coth^2 2K_2 \left[\frac{1}{\sinh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2} \right. \\ &\quad \left. + \coth 2K_1 \left\{ \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^3 2K_1} \frac{1}{(1+\nu)(1+k^2\nu^{-1})} \frac{1}{\nu^2} (k^2 + \nu) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2} k^{-1} \right\} \right] K(k)\end{aligned}\quad (5.4.45)$$

となる。まず、 $\Pi_1(1/\sinh^2 2K_1, k)$ にかかっている括弧の中を計算すると、

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{\sinh^2 2K_1} - \coth 2K_1 \left\{ \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^3 2K_1} \frac{1}{(1+\nu)(1+k^2\nu^{-1})} \left(\frac{k^2}{\nu^2} - 1 \right) - \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2} \frac{k}{\nu + k^2} \right\} \\
&= -\frac{1}{\sinh^2 2K_1} - \coth 2K_1 \left\{ \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^3 2K_1} \frac{1}{\coth^2 2K_1 \coth^2 2K_2} \left(\frac{\sinh^2 2K_1}{\sinh^2 2K_2} - 1 \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2} \frac{1}{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2} \frac{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2}{\cosh^2 2K_2} \right\} \\
&= -\frac{1}{\sinh^2 2K_1} - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} + \frac{1}{\sinh^2 2K_1 \coth^2 2K_2} + \frac{\coth^2 2K_1}{\cosh^2 2K_2} \\
&= -\frac{\cosh^2 2K_2 - \sinh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2} + \frac{-\sinh^2 2K_1 + \cosh^2 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2} \\
&= 0
\end{aligned} \tag{5.4.46}$$

となる。次に、 $E(k)$ にかかっている括弧の中を計算すると、

$$\begin{aligned}
& -\frac{\cosh 2K_1}{\sinh^3 2K_1} \frac{1}{(1+\nu)(1+k^2\nu^{-1})} \frac{1}{\nu} - \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2} \frac{k}{\nu + k^2} k'^{-2} + \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2} k^{-1} k'^{-2} \\
&= -\frac{\cosh 2K_1}{\sinh^3 2K_1} \frac{1}{\coth^2 2K_1 \coth^2 2K_2} \sinh^2 2K_1 - \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2} \frac{1}{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2} \frac{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2}{\cosh^2 2K_2} k'^{-2} \\
&\quad + \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2} \sinh 2K_1 \sinh 2K_2 k'^{-2} \\
&= -\frac{1}{\coth 2K_1 \coth^2 2K_2} - \frac{\cosh 2K_1}{\sinh 2K_1 \cosh^2 2K_2} k'^{-2} + \frac{\cosh 2K_1}{\sinh 2K_1 \cosh^2 2K_2} k'^{-2} \\
&= -\frac{1}{\coth 2K_1 \coth^2 2K_2}
\end{aligned} \tag{5.4.47}$$

となる。最後に、 $K(k)$ にかかっている括弧の中を計算すると、

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\sinh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2} + \coth 2K_1 \left\{ \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^3 2K_1} \frac{1}{(1+\nu)(1+k^2\nu^{-1})} \frac{1}{\nu^2} (k^2 + \nu) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2} k^{-1} \right\} \\
&= \frac{1}{\sinh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2} + \coth 2K_1 \left\{ \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^3 2K_1} \frac{1}{\coth^2 2K_1 \coth^2 2K_2} \sinh^4 2K_1 \frac{\cosh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \frac{\cosh 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \sinh 2K_2} \sinh 2K_1 \sinh 2K_2 \right\} \\
&= \frac{1}{\sinh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2} + 1 - \frac{\cosh^2 2K_1}{\sinh^2 2K_1 \cosh^2 2K_2} \\
&= 1 - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \\
&= \tanh^2 2K_2
\end{aligned} \tag{5.4.48}$$

となる。したがって、 a は、

$$\begin{aligned}
a &= -2 \coth 2K_1 \coth^2 2K_2 \frac{1}{\coth 2K_1 \coth^2 2K_2} E(k) + 2 \coth^2 2K_2 \tanh^2 2K_2 K(k) \\
&= 2 [K(k) - E(k)]
\end{aligned} \tag{5.4.49}$$

となる。

次に b について考えると、

$$\begin{aligned}
b &= -4 \coth 2K_1 \frac{\cosh 2K_2}{\sinh^3 2K_2} \left[\Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \\
&\quad + \coth 2K_1 \coth^2 2K_2 \left[\frac{\partial}{\partial K_2} \Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) - \frac{\partial}{\partial K_2} \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right]
\end{aligned} \tag{5.4.50}$$

となり、ここで付録 F、付録 H より、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial K_2} \Pi_1(\nu, k) &= \frac{\partial k}{\partial K_2} \frac{\partial}{\partial k} \Pi_1(\nu, k) \\
&= -2 \frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_1 \sinh^2 2K_2} \frac{k}{k^2 + \nu} [k'^{-2} E(k) - \Pi_1(\nu, k)] \\
\frac{\partial}{\partial K_2} \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) &= -4 \frac{\sinh 2K_2}{\cosh^3 2K_2} K(k) + \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \frac{\partial k}{\partial K_2} \frac{\partial}{\partial k} K(k) \\
&= -4 \frac{\sinh 2K_2}{\cosh^3 2K_2} K(k) - \frac{2}{\cosh^2 2K_2} \frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_1 \sinh^2 2K_2} k^{-1} k'^{-2} [E(k) - k'^2 K(k)]
\end{aligned} \tag{5.4.51}$$

となる。よって、

$$\begin{aligned}
b &= -4 \coth 2K_1 \frac{\cosh 2K_2}{\sinh^3 2K_2} \left[\Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \\
&\quad + \coth 2K_1 \coth^2 2K_2 \left\{ -2 \frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_1 \sinh^2 2K_2} \frac{k}{k^2 + \nu} [k'^{-2} E(k) - \Pi_1(\nu, k)] \right. \\
&\quad \left. + 4 \frac{\sinh 2K_2}{\cosh^3 2K_2} K(k) + \frac{2}{\cosh^2 2K_2} \frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_1 \sinh^2 2K_2} k^{-1} k'^{-2} [E(k) - k'^2 K(k)] \right\} \\
&= 2 \coth 2K_1 \coth 2K_2 \left[-\frac{2}{\sinh^2 2K_2} + \coth 2K_2 \frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_1 \sinh^2 2K_2} \frac{k}{k^2 + \nu} \right] \Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) \\
&\quad + 2 \coth 2K_1 \coth^2 2K_2 k'^{-2} \left[-\frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_1 \sinh^2 2K_2} \frac{k}{k^2 + \nu} + \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_1 \sinh^2 2K_2} k^{-1} \right] E(k) \\
&\quad + 2 \coth 2K_1 \coth 2K_2 \left[\frac{2}{\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_2} \right. \\
&\quad \left. + \coth 2K_2 \left\{ 2 \frac{\sinh 2K_2}{\cosh^3 2K_2} - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_1 \sinh^2 2K_2} k^{-1} \right\} \right] K(k)
\end{aligned} \tag{5.4.53}$$

となる。まず、 $\Pi_1(1/\sinh^2 2K_1, k)$ にかかっている括弧の中を計算すると、

$$\begin{aligned}
&-\frac{2}{\sinh^2 2K_2} + \coth 2K_2 \frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_1 \sinh^2 2K_2} \frac{k}{k^2 + \nu} \\
&= -\frac{2}{\sinh^2 2K_2} + \coth 2K_2 \frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_1 \sinh^2 2K_2} \frac{1}{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2} \frac{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2}{\cosh^2 2K_2} \\
&= -\frac{2}{\sinh^2 2K_2} + \frac{1}{\sinh^2 2K_2} \\
&= -\frac{1}{\sinh^2 2K_2}
\end{aligned} \tag{5.4.54}$$

となる。次に、 $E(k)$ にかかっている括弧の中を計算すると、

$$\begin{aligned}
& -\frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_1 \sinh^2 2K_2} \frac{k}{k^2 + \nu} + \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_1 \sinh^2 2K_2} k^{-1} \\
& = -\frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_1 \sinh^2 2K_2} \frac{1}{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2} \frac{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2}{\cosh^2 2K_2} + \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_1 \sinh^2 2K_2} \sinh 2K_1 \sinh 2K_2 \\
& = -\frac{1}{\sinh 2K_2 \cosh 2K_2} + \frac{1}{\sinh 2K_2 \cosh 2K_2} \\
& = 0
\end{aligned} \tag{5.4.55}$$

となる。最後に、 $K(k)$ にかかっている括弧の中を計算すると、

$$\begin{aligned}
& \frac{2}{\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_2} + \coth 2K_2 \left\{ 2 \frac{\sinh 2K_2}{\cosh^3 2K_2} - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} \frac{\cosh 2K_2}{\sinh 2K_1 \sinh^2 2K_2} k^{-1} \right\} \\
& = \frac{2}{\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_2} + \frac{2}{\cosh^2 2K_2} - \frac{1}{\sinh^2 2K_2} \\
& = 2 \frac{1 + \sinh^2 2K_2}{\sinh^2 2K_2 \cosh^2 2K_2} - \frac{1}{\sinh^2 2K_2} \\
& = \frac{1}{\sinh^2 2K_2}
\end{aligned} \tag{5.4.56}$$

となる。したがって、 b は、

$$\begin{aligned}
b & = -2 \coth 2K_1 \coth 2K_2 \frac{1}{\sinh^2 2K_2} \Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) + 2 \coth 2K_1 \coth 2K_2 \frac{1}{\sinh^2 2K_2} K(k) \\
& = 2 \coth 2K_1 \coth 2K_2 \frac{1}{\sinh^2 2K_2} \left[K(k) - \Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) \right]
\end{aligned} \tag{5.4.57}$$

となる。

よって、 c_2 は、

$$c_2 = -\frac{J_1}{k_B T^2} [K(k) - E(k)] - \frac{J_2}{k_B T^2} \coth 2K_1 \coth 2K_2 \frac{1}{\sinh^2 2K_2} \left[K(k) - \Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) \right] \tag{5.4.58}$$

となり、 c_1 は c_2 において $1 \leftrightarrow 2$ としたものであるから、

$$c_1 = -\frac{J_2}{k_B T^2} [K(k) - E(k)] - \frac{J_1}{k_B T^2} \coth 2K_1 \coth 2K_2 \frac{1}{\sinh^2 2K_1} \left[K(k) - \Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_2}, k \right) \right] \tag{5.4.59}$$

となる。したがって、比熱 C は、

$$\begin{aligned}
C & = \frac{1}{\pi k_B T^2} \left\{ \left(\frac{J_1}{\sinh 2K_1} \right)^2 \coth 2K_1 \coth 2K_2 \left[K(k) - \Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_2}, k \right) \right] \right. \\
& \quad + \left(\frac{J_2}{\sinh 2K_2} \right)^2 \coth 2K_1 \coth 2K_2 \left[K(k) - \Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) \right] \\
& \quad \left. + 2J_1 J_2 [K(k) - E(k)] \right\}
\end{aligned} \tag{5.4.60}$$

となる。

5.4.3 温度依存性

以上の考察より内部エネルギーは以下ようになる。

・ $T > T_c$ のとき ($k = \sinh 2K_1 \sinh 2K_2$)

$$C = \frac{1}{\pi k_B T^2} \left\{ \left(\frac{J_1}{\sinh 2K_1} \right)^2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 [K(k) - \Pi_1(\sinh^2 2K_1, k)] \right. \\ \left. + \left(\frac{J_2}{\sinh 2K_2} \right)^2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 [K(k) - \Pi_1(\sinh^2 2K_2, k)] \right. \\ \left. + 2 \frac{J_1 J_2}{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2} [K(k) - E(k)] \right\} \quad (5.4.61)$$

・ $T < T_c$ のとき ($k = \frac{1}{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2}$)

$$C = \frac{1}{\pi k_B T^2} \left\{ \left(\frac{J_1}{\sinh 2K_1} \right)^2 \coth 2K_1 \coth 2K_2 \left[K(k) - \Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_2}, k \right) \right] \right. \\ \left. + \left(\frac{J_2}{\sinh 2K_2} \right)^2 \coth 2K_1 \coth 2K_2 \left[K(k) - \Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) \right] \right. \\ \left. + 2J_1 J_2 [K(k) - E(k)] \right\} \quad (5.4.62)$$

これより、 T_c 近傍の振る舞いについて考える。

・ $T > T_c$ のとき ($k = \sinh 2K_1 \sinh 2K_2$)

まず、 k^2 を T_c 近傍で展開する。1次の導関数は、

$$\frac{\partial k^2}{\partial T} = -2 \frac{J_1}{k_B T^2} \sinh 2K_1 \cosh 2K_1 \sinh^2 2K_2 - 2 \frac{J_2}{k_B T^2} \sinh 2K_2 \cosh 2K_2 \sinh^2 2K_1 \quad (5.4.63)$$

となるので、

$$\left. \frac{\partial k^2}{\partial T} \right|_{T=T_c} = -2 \frac{J_1}{k_B T_c^2} \sinh \beta_c J_1 \cosh \beta_c J_1 \sinh^2 \beta_c J_2 - 2 \frac{J_2}{k_B T_c^2} \sinh \beta_c J_2 \cosh \beta_c J_2 \sinh^2 \beta_c J_1 \\ = -2 \frac{1}{k_B T_c^2} (J_1 \cosh \beta_c J_1 \sinh \beta_c J_2 + J_2 \cosh \beta_c J_2 \sinh \beta_c J_1) \\ = -2 \frac{1}{k_B T_c^2} (J_1 \coth \beta_c J_1 + J_2 \coth \beta_c J_2) \quad (5.4.64)$$

となる。ただし、

$$\sinh \beta_c J_1 \sinh \beta_c J_2 = 1 \quad (5.4.65)$$

となることを使った。よって、

$$k^2 \cong 1 - 2 \frac{1}{k_B T_c^2} (J_1 \coth \beta_c J_1 + J_2 \coth \beta_c J_2) (T - T_c) \\ = 1 - 2\beta_c \left(\frac{T}{T_c} - 1 \right) (J_1 \coth \beta_c J_1 + J_2 \coth \beta_c J_2) \quad (5.4.66)$$

となる。これより、

$$\begin{aligned} k'^2 &= 1 - k^2 \\ &\cong 2\beta_c \left(\frac{T}{T_c} - 1 \right) (J_1 \coth \beta_c J_1 + J_2 \coth \beta_c J_2) \end{aligned} \quad (5.4.67)$$

となる。よって、 $K(k)$ の T_c 近傍での振る舞いは、(付録 G.16) により、

$$\begin{aligned} K(k) &\cong \ln \frac{4}{|k'|} \\ &= -\ln \frac{1}{4} \left[2\beta_c \left(\frac{T}{T_c} - 1 \right) (J_1 \coth \beta_c J_1 + J_2 \coth \beta_c J_2) \right]^{\frac{1}{2}} \\ &= -\frac{1}{2} \ln \left(\frac{T}{T_c} - 1 \right) - \frac{1}{2} \ln \frac{1}{8} \beta_c (J_1 \coth \beta_c J_1 + J_2 \coth \beta_c J_2) \end{aligned} \quad (5.4.68)$$

となる。また、

$$\begin{aligned} K(k) - \Pi_1(\sinh^2 2K_1, k) &\cong \ln \frac{4}{|k'|} - \frac{1}{1 + \nu_c} \ln \frac{4}{|k'|} - \frac{\nu_c^{\frac{1}{2}}}{1 + \nu_c} \tan^{-1} \nu_c^{\frac{1}{2}} \\ &= \left(1 - \frac{1}{1 + \nu_c} \right) \ln \frac{4}{|k'|} - \frac{\nu_c^{\frac{1}{2}}}{1 + \nu_c} \tan^{-1} \nu_c^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{\sinh^2 \beta_c J_1}{\cosh^2 \beta_c J_1} \ln \frac{4}{|k'|} - \frac{\sinh \beta_c J_1}{\cosh^2 \beta_c J_1} \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_1) \end{aligned} \quad (5.4.69)$$

となる。ただし、 ν_c は T_c での ν であり、

$$\nu_c = \sinh^2 \beta_c J_1 \quad (5.4.70)$$

$$1 - \frac{1}{1 + \nu_c} = 1 - \frac{1}{1 + \sinh^2 \beta_c J_1} = \frac{\sinh^2 \beta_c J_1}{\cosh^2 \beta_c J_1} \quad (5.4.71)$$

$$\frac{\nu_c^{\frac{1}{2}}}{1 + \nu_c} = \frac{\sinh \beta_c J_1}{1 + \sinh^2 \beta_c J_1} = \frac{\sinh \beta_c J_1}{\cosh^2 \beta_c J_1} \quad (5.4.72)$$

となることを使った。同様に、

$$K(k) - \Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) \cong \frac{\sinh^2 \beta_c J_2}{\cosh^2 \beta_c J_2} \ln \frac{4}{|k'|} - \frac{\sinh \beta_c J_2}{\cosh^2 \beta_c J_2} \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_2) \quad (5.4.73)$$

となる。

これより、 C の第 1 項目は、

$$\begin{aligned} &\left(\frac{J_1}{\sinh 2K_1} \right)^2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 [K(k) - \Pi_1(\sinh^2 2K_1, k)] \\ &\cong \left(\frac{J_1}{\sinh \beta_c J_1} \right)^2 \cosh \beta_c J_1 \cosh \beta_c J_2 \frac{\sinh^2 \beta_c J_1}{\cosh^2 \beta_c J_1} \ln \frac{4}{|k'|} \\ &\quad - \left(\frac{J_1}{\sinh \beta_c J_1} \right)^2 \cosh \beta_c J_1 \cosh \beta_c J_2 \frac{\sinh \beta_c J_1}{\cosh^2 \beta_c J_1} \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_1) \\ &= J_1^2 \sinh \beta_c J_2 \ln \frac{4}{|k'|} - J_1^2 \sinh^2 \beta_c J_2 \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_1) \end{aligned} \quad (5.4.74)$$

となる。ただし、(5.3.152)を使った。また、同様に第2項目は、

$$\begin{aligned} \left(\frac{J_2}{\sinh 2K_2}\right)^2 \cosh 2K_2 \cosh 2K_1 [K(k) - \Pi_1(\sinh^2 2K_2, k)] \\ \cong J_2^2 \sinh \beta_c J_1 \ln \frac{4}{|k'|} - J_2^2 \sinh^2 \beta_c J_1 \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_2) \end{aligned} \quad (5.4.75)$$

となる。最後に、第3項目は、(付録 G.17)により、

$$2 \frac{J_1 J_2}{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2} [K(k) - E(k)] \cong 2J_1 J_2 \left(\ln \frac{4}{|k'|} - 1 \right) \quad (5.4.76)$$

となる。

したがって、

$$\begin{aligned} \frac{C}{k_B} \cong \frac{\beta_c^2}{2\pi} \left\{ (J_1^2 \sinh \beta_c J_2 + 2J_1 J_2 + J_2^2 \sinh \beta_c J_1) \left[-\ln \left(\frac{T}{T_c} - 1 \right) - \ln \frac{1}{8} \beta_c (J_1 \coth \beta_c J_1 + J_2 \coth \beta_c J_2) \right] \right. \\ \left. - [J_1^2 \sinh \beta_c J_2 \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_1) + 2J_1 J_2 + J_2^2 \sinh \beta_c J_1 \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_2)] \right\} \end{aligned} \quad (5.4.77)$$

$$\propto -\ln \left(\frac{T}{T_c} - 1 \right) \quad (5.4.78)$$

という振る舞いをする。

・ $T < T_c$ のとき ($k = \frac{1}{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2}$)

まず、 k^2 を T_c 近傍で展開する。1次の導関数は、

$$\frac{\partial k^2}{\partial T} = -(\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2)^{-2} \frac{\partial}{\partial T} \sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2 \quad (5.4.79)$$

となるので、

$$\left. \frac{\partial k^2}{\partial T} \right|_{T=T_c} = 2 \frac{1}{k_B T_c^2} (J_1 \coth \beta_c J_1 + J_2 \coth \beta_c J_2) \quad (5.4.80)$$

となる。ただし、

$$\frac{1}{\sinh \beta_c J_1 \sinh \beta_c J_2} = 1 \quad (5.4.81)$$

なることを使った。よって、

$$\begin{aligned} k^2 &\cong 1 + 2 \frac{1}{k_B T_c^2} (J_1 \coth \beta_c J_1 + J_2 \coth \beta_c J_2) (T - T_c) \\ &= 1 - 2\beta_c \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) (J_1 \coth \beta_c J_1 + J_2 \coth \beta_c J_2) \end{aligned} \quad (5.4.82)$$

となる。これより、

$$k'^2 \cong 2\beta_c \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) (J_1 \coth \beta_c J_1 + J_2 \coth \beta_c J_2) \quad (5.4.83)$$

となる。よって、

$$\begin{aligned} K(k) &\cong -\ln \frac{1}{4} \left[2\beta_c \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) (J_1 \coth \beta_c J_1 + J_2 \coth \beta_c J_2) \right]^{\frac{1}{2}} \\ &= -\frac{1}{2} \ln \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) - \frac{1}{2} \ln \frac{1}{8} \beta_c (J_1 \coth \beta_c J_1 + J_2 \coth \beta_c J_2) \end{aligned} \quad (5.4.84)$$

となる。また、

$$\begin{aligned} K(k) - \Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_2}, k \right) &\cong \left(1 - \frac{1}{1 + \nu_c} \right) \ln \frac{4}{|k'|} - \frac{\nu_c^{\frac{1}{2}}}{1 + \nu_c} \tan^{-1} \nu_c^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{1}{\cosh^2 \beta_c J_2} \ln \frac{4}{|k'|} - \frac{\sinh \beta_c J_2}{\cosh^2 \beta_c J_2} \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_1) \end{aligned} \quad (5.4.85)$$

となる。ただし、

$$\nu_c = \frac{1}{\sinh^2 \beta_c J_2} = \sinh^2 \beta_c J_1 \quad (5.4.86)$$

$$1 - \frac{1}{1 + \nu_c} = 1 - \frac{\sinh^2 \beta_c J_2}{1 + \sinh^2 \beta_c J_2} = \frac{1}{\cosh^2 \beta_c J_2} \quad (5.4.87)$$

$$\frac{\nu_c^{\frac{1}{2}}}{1 + \nu_c} = \frac{\sinh \beta_c J_2}{1 + \sinh^2 \beta_c J_2} = \frac{\sinh \beta_c J_2}{\cosh^2 \beta_c J_2} \quad (5.4.88)$$

となることを使った。同様に、

$$K(k) - \Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) \cong \frac{1}{\cosh^2 \beta_c J_1} \ln \frac{4}{|k'|} - \frac{\sinh \beta_c J_1}{\cosh^2 \beta_c J_1} \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_2) \quad (5.4.89)$$

となる。

これより、 C の第 1 項は、

$$\begin{aligned} &\left(\frac{J_1}{\sinh 2K_1} \right)^2 \coth 2K_1 \coth 2K_2 \left[K(k) - \Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_2}, k \right) \right] \\ &\cong \left(\frac{J_1}{\sinh \beta_c J_1} \right)^2 \coth \beta_c J_1 \coth \beta_c J_2 \frac{1}{\cosh^2 \beta_c J_2} \ln \frac{4}{|k'|} \\ &\quad - \left(\frac{J_1}{\sinh \beta_c J_1} \right)^2 \coth \beta_c J_1 \coth \beta_c J_2 \frac{\sinh \beta_c J_2}{\cosh^2 \beta_c J_2} \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_1) \\ &= J_1^2 \sinh \beta_c J_2 \ln \frac{4}{|k'|} - J_1^2 \sinh \beta_c J_2 \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_2) \end{aligned} \quad (5.4.90)$$

となる。ただし、(5.3.152) より、

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sinh^2 \beta_c J_1} \coth \beta_c J_1 \coth \beta_c J_2 \frac{1}{\cosh^2 \beta_c J_2} &= \frac{\cosh \beta_c J_1}{\sinh^2 \beta_c J_1 \cosh \beta_c J_2} \\ &= \frac{1}{\sinh^2 \beta_c J_1 \sinh \beta_c J_2} \\ &= \frac{1}{\sinh \beta_c J_1} \\ &= \sinh \beta_c J_2 \end{aligned} \quad (5.4.91)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sinh^2 \beta_c J_1} \coth \beta_c J_1 \coth \beta_c J_2 \frac{\sinh \beta_c J_2}{\cosh^2 \beta_c J_2} &= \frac{\cosh \beta_c J_1 \sinh \beta_c J_2}{\sinh^2 \beta_c J_1 \cosh \beta_c J_2} \\ &= \frac{1}{\sinh^2 \beta_c J_1} \\ &= \sinh^2 \beta_c J_2 \end{aligned} \quad (5.4.92)$$

となることを使った。また、同様に第2項は、

$$\begin{aligned} \left(\frac{J_2}{\sinh 2K_2}\right)^2 \coth 2K_2 \coth 2K_1 \left[K(k) - \Pi_1 \left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k \right) \right] \\ \cong J_2^2 \sinh \beta_c J_1 \ln \frac{4}{|k'|} - J_2^2 \sinh \beta_c J_1 \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_1) \end{aligned} \quad (5.4.93)$$

となる。最後に、第3項は、

$$2J_1 J_2 [K(k) - E(k)] \cong 2J_1 J_2 \left(\ln \frac{4}{|k'|} - 1 \right) \quad (5.4.94)$$

となる。

したがって、

$$\begin{aligned} \frac{C}{k_B} \cong \frac{\beta_c^2}{2\pi} \left\{ (J_1^2 \sinh \beta_c J_2 + 2J_1 J_2 + J_2^2 \sinh \beta_c J_1) \left[-\ln \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) - \ln \frac{1}{8} \beta_c (J_1 \coth \beta_c J_1 + J_2 \coth \beta_c J_2) \right] \right. \\ \left. - [J_1^2 \sinh \beta_c J_2 \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_1) + 2J_1 J_2 + J_2^2 \sinh \beta_c J_1 \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_2)] \right\} \end{aligned} \quad (5.4.95)$$

$$\propto -\ln \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \quad (5.4.96)$$

という振る舞いをする。

よって、 T_c の上限でも下限でも、 T_c 近傍の温度依存性は、

$$\begin{aligned} \frac{C}{k_B} \cong \frac{\beta_c^2}{2\pi} \left\{ (J_1^2 \sinh \beta_c J_2 + 2J_1 J_2 + J_2^2 \sinh \beta_c J_1) \left[-\ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right| - \ln \frac{1}{8} \beta_c (J_1 \coth \beta_c J_1 + J_2 \coth \beta_c J_2) \right] \right. \\ \left. - [J_1^2 \sinh \beta_c J_2 \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_1) + 2J_1 J_2 + J_2^2 \sinh \beta_c J_1 \tan^{-1}(\sinh \beta_c J_2)] \right\} \end{aligned} \quad (5.4.97)$$

$$\propto -\ln \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right| \quad (5.4.98)$$

となる。ここで、臨界指数 α は比熱 C に対して、

$$C \propto \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|^{-\alpha} \quad (5.4.99)$$

で定義される。これより、2次元 Ising モデルの臨界指数 α は、

$$\alpha = 0 \quad (\log) \quad (5.4.100)$$

となる。

実際に比熱を数値的に評価したものが図 165 となる。このように比熱は転移温度 T_c において発散する。これより、2次元 Ising モデルは転移温度 T_c において2次相転移が起こることが分かる。

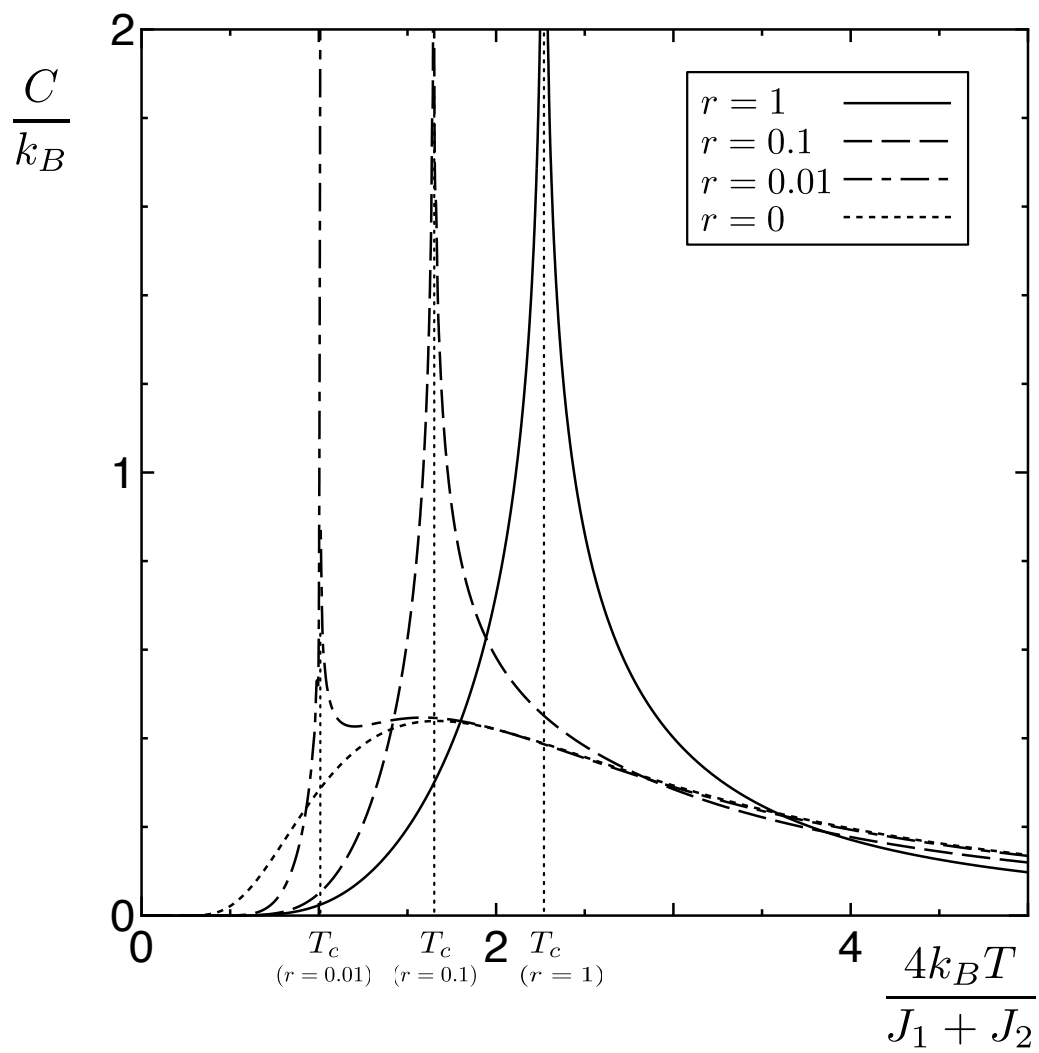


図 165 比熱の温度依存性

6 相関関数

第3章、第4章の2つの方法を用いて隣同士の相関関数および横方向の相関関数を求める。また、隣同士の相関関数では温度依存性も議論する。6.1節では、dimer 統計の方法を用いて相関関数を求める。これは、E.W.Montroll and P.B.Potts , J.C.Ward [13] により行われた。また、6.2節では第2量子化の方法により相関関数を求める。これは、T.D.Schlutz and D.C.Mattis , E.D.Lieb [3] により行われた。ここで得られる横方向の相関関数は、第7章で自発磁化を求める際に用いることができる。

6.1 dimer 統計の方法による相関関数

6.1.1 相関関数の導入

分配関数 \mathcal{Z} は高温展開後の、

$$\mathcal{Z} = (2 \cosh K_1 \cosh K_2)^{NM} \sum_{\sigma=\pm 1} \prod_{\text{n.n.}} (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m} z_1) (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1} z_2) \quad (6.1.1)$$

を用いる。これより、格子点 $(1, 1)$ と $(1+k, 1+l)$ の間の相関関数 $\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1+k,1+l} \rangle$ は、

$$\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1+k,1+l} \rangle \equiv \mathcal{Z}^{-1} (2 \cosh K_1 \cosh K_2)^{NM} \sum_{\sigma=\pm 1} \sigma_{1,1} \sigma_{1+k,1+l} \prod_{\text{n.n.}} (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m} z_1) (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1} z_2) \quad (6.1.2)$$

と定義される。ここで、 $\sigma_i^2 = 1$ であるから、

$$\begin{aligned} \sigma_{1,1} \sigma_{1+k,1+l} &= (\sigma_{1,1} \sigma_{1,2}) (\sigma_{1,2} \sigma_{1,3}) \cdots (\sigma_{1,l} \sigma_{1,1+l}) (\sigma_{1,1+l} \sigma_{2,1+l}) (\sigma_{2,1+l} \sigma_{3,1+l}) \cdots (\sigma_{k,1+l} \sigma_{1+k,1+l}) \\ &= \prod_{l'=1}^l (\sigma_{1,l'} \sigma_{1,1+l'}) \prod_{k'=1}^k (\sigma_{k',1+l} \sigma_{1+k',1+l}) \end{aligned} \quad (6.1.3)$$

と変形できる。また、

$$\sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1} (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1} z_2) = \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1} + z_2 = z_2 (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1} z_2^{-1}) \quad (6.1.4)$$

$$\sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m} (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m} z_1) = \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m} + z_1 = z_1 (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m} z_1^{-1}) \quad (6.1.5)$$

となるから、(6.1.2) は、

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{1,1} \sigma_{1+k,1+l} \rangle &= \mathcal{Z}^{-1} (\cosh K_1 \cosh K_2)^{NM} \sum_{\sigma=\pm 1} \prod_{l'=1}^l z_2 (1 + \sigma_{1,l'} \sigma_{1,1+l'} z_2^{-1}) \\ &\quad \times \prod_{k'=1}^k z_1 (1 + \sigma_{k',1+l} \sigma_{1+k',1+l} z_1^{-1}) \\ &\quad \times \prod'_{\text{n.n.}} (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m} z_1) (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1} z_2) \end{aligned} \quad (6.1.6)$$

となる。

ただし、 $\prod_{n,n.}$ は、 $\prod_{l'=1}^l$ 、 $\prod_{k'=1}^k$ の積に含まれるもの以外の最近接格子点間の積を表す。この式を、

$$\begin{aligned} z_1^{-k} z_2^{-l} \mathcal{Z}(\sigma_{1,1} \sigma_{1+k,1+l}) &= (2 \cosh K_1 \cosh K_2)^{NM} \sum_{\sigma=\pm 1} \prod_{l'=1}^l (1 + \sigma_{1,l'} \sigma_{1,1+l'} z_2^{-1}) \\ &\quad \times \prod_{k'=1}^k (1 + \sigma_{k',1+l} \sigma_{1+k',1+l} z_1^{-1}) \\ &\quad \times \prod_{n,n.} (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n+1,m} z_1) (1 + \sigma_{n,m} \sigma_{n,m+1} z_2) \end{aligned} \quad (6.1.7)$$

と変形すると、右辺は $\prod_{l'=1}^l$ 、 $\prod_{k'=1}^k$ の積に含まれる成分において $z_1^{-1} \rightarrow z_1$ 、 $z_2^{-1} \rightarrow z_2$ と置き換えれば分配関数に等しい。これより、分配関数を Pfaffian で書き表すために 4.6 節で導入される格子で考えることとする。このとき、分配関数は、

$$\mathcal{Z} = (2 \cosh K_1 \cosh K_2)^{NM} \text{Pf} A = (2 \cosh K_1 \cosh K_2)^{NM} (\det A)^{\frac{1}{2}} \quad (6.1.8)$$

のようになる。この行列 A は成分が (4.6.2) ~ (4.6.5) で与えられる $4NM \times 4NM$ の行列である。この関係を用いれば、

$$z_1^{-2k} z_2^{-2l} (2 \cosh K_1 \cosh K_2)^{2NM} \det A(\sigma_{1,1} \sigma_{1+k,1+l})^2 = (2 \cosh K_1 \cosh K_2)^{2NM} \det A' \quad (6.1.9)$$

と書ける。ただし、行列 A' は行列 A の $\prod_{l'=1}^l$ 、 $\prod_{k'=1}^k$ の積に含まれる成分を $z_1^{-1} \rightarrow z_1$ 、 $z_2^{-1} \rightarrow z_2$ と置き換えたものと定義する。

これより、行列 A' について考える。行列 A' の成分では、 $\prod_{l'=1}^l$ 、 $\prod_{k'=1}^k$ の積に含まれる成分において、

$$A'(n, m; n+1, m)_{\text{UD}} = -A'(n+1, m; n, m)_{\text{DU}} = z_1^{-1} \quad (6.1.10)$$

$$A'(n, m; n, m+1)_{\text{RL}} = -A'(n, m+1; n, m)_{\text{LR}} = z_2^{-1} \quad (6.1.11)$$

となっていればよい。これより、

$$A'(n, m; n+1, m)_{\text{UD}} = -A'(n+1, m; n, m)_{\text{DU}} = A(n, m; n+1, m)_{\text{UD}} + (-1)^{m-1} (z_1^{-1} - z_1) \quad (6.1.12)$$

$$A'(n, m; n, m+1)_{\text{RL}} = -A'(n, m+1; n, m)_{\text{LR}} = A(n, m; n, m+1)_{\text{RL}} + (z_2^{-1} - z_2) \quad (6.1.13)$$

と書ける。ただし、 $A'(n, m; n', m')$ は 4×4 の行列を表す。つまり、右辺第 2 項を成分とする反対称行列を δ とすると、

$$A' = A + \delta \quad (6.1.14)$$

と書けることがわかる。ここで、 δ は、

$$\delta(n, m; n+1, m)_{\text{UD}} = -\delta(n+1, m; n, m)_{\text{DU}} = (z_1^{-1} - z_1) \quad (6.1.15)$$

$$\delta(n, m; n, m+1)_{\text{RL}} = -\delta(n, m+1; n, m)_{\text{LR}} = (z_2^{-1} - z_2) \quad (6.1.16)$$

$$\delta(n, m; n', m') = 0 \quad \prod_{l'=1}^l, \prod_{k'=1}^k \text{ の積に含まれない成分} \quad (6.1.17)$$

となる。ただし、 $\delta(n, m; n', m')$ は 4×4 の行列を表す。これより、行列 A' 、 δ はともに $4NM \times 4NM$ の正方向行列である。つまり、

$$z_1^{-2k} z_2^{-2l} \det A(\sigma_{1,1} \sigma_{1+k,1+l})^2 = \det(A + \delta) \quad (6.1.18)$$

となり、相関関数 $\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1+k,1+l} \rangle$ は、

$$\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1+k,1+l} \rangle^2 = z_1^{2k} z_2^{2l} \det(I + A^{-1} \delta) \quad (6.1.19)$$

と書ける。ただし、 I は $4NM \times 4NM$ の単位行列である。

ここで、 δ が δ_{12} 、 δ_{21} 以外の成分はすべて 0 である場合を考えることとする。このとき、

$$I + A^{-1} \delta = I + \begin{pmatrix} a_{11}^{-1} & a_{12}^{-1} & a_{13}^{-1} & \cdots \\ a_{21}^{-1} & a_{22}^{-1} & a_{23}^{-1} & \cdots \\ a_{31}^{-1} & a_{32}^{-1} & a_{33}^{-1} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \delta_{12} & 0 & \cdots \\ \delta_{21} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + a_{12}^{-1} \delta_{21} & a_{11}^{-1} \delta_{12} & 0 & \cdots \\ a_{22}^{-1} \delta_{21} & 1 + a_{21}^{-1} \delta_{12} & 0 & \cdots \\ a_{32}^{-1} \delta_{21} & a_{31}^{-1} \delta_{12} & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (6.1.20)$$

となるから、この行列式は、

$$\begin{aligned} \det(I + A^{-1} \delta) &= \begin{vmatrix} 1 + a_{12}^{-1} \delta_{21} & a_{11}^{-1} \delta_{12} \\ a_{22}^{-1} \delta_{21} & 1 + a_{21}^{-1} \delta_{12} \end{vmatrix} \\ &= \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} + \begin{pmatrix} a_{11}^{-1} & a_{12}^{-1} \\ a_{21}^{-1} & a_{22}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \delta_{12} \\ \delta_{21} & 0 \end{pmatrix} \end{vmatrix} \quad (6.1.21) \\ &\equiv \det(I + Qy) \quad (6.1.22) \end{aligned}$$

となる。ただし、行列 y は行列 δ のうち 0 でない成分をもつ行および列の部分行列である。そのため、行列 y は反対称行列である。また、行列 Q は行列 A^{-1} の行列 y に対応する行および列の部分行列である。したがって、

$$\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1+k,1+l} \rangle^2 = z_1^{2k} z_2^{2l} \det(I + Qy) \quad (6.1.23)$$

となる。ここで、

$$\det(I + Qy) = \det(y^{-1} + Q) \det y = [\text{Pf}(y^{-1} + Q) \text{Pf}(y)]^2 \quad (6.1.24)$$

となり、

$$\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1+k,1+l} \rangle = \pm z_1^k z_2^l [\text{Pf}(y^{-1} + Q) \text{Pf}(y)] \quad (6.1.25)$$

となる。ただし、右辺 \pm は相関関数が正になるように選ぶこととする。

6.1.2 逆行列 A^{-1}

6.1.1 節より相関関数の計算には行列 A の逆行列 A^{-1} が必要である。以前、トーラス状の境界条件の場合 4 つの境界条件を考える必要があった。しかし、無限系を考えれば 4 つの境界条件はすべて同じ結果を与えるので、ここでは境界条件として A_1 の場合を考えることとする。つまり、

$$\sum_{\alpha, \alpha', \beta, \beta'} u_{m\beta}^{(M)-1} u_{n\alpha}^{(N)-1} A(\alpha, \beta; \alpha', \beta') u_{\beta'm}^{(M)} u_{\alpha'n}^{(N)} = B(n, m; n, m) \quad (6.1.26)$$

という関係が成立する。ただし、括弧内の添字は次元を表している。ここで、一般に行列 A を対角化する直行列を U としたとき、対角化された行列を \tilde{A} とすると、

$$U^{-1} A U = \tilde{A} \quad (6.1.27)$$

となる。ここで、 \tilde{A} の逆行列は、

$$\tilde{A}^{-1} = (U^{-1}AU)^{-1} = U^{-1}A^{-1}U \quad (6.1.28)$$

となる。したがって、

$$A^{-1} = U\tilde{A}^{-1}U^{-1} \quad (6.1.29)$$

となる。これより、 $A(\alpha, \beta; \alpha', \beta')$ の逆行列は、

$$A^{-1}(\alpha, \beta; \alpha', \beta') = \sum_{m,n} u_{\beta m}^{(M)} u_{\alpha n}^{(N)} B^{-1}(n, m; n, m) u_{m\beta'}^{(M)-1} u_{n\alpha'}^{(N)-1} \quad (6.1.30)$$

となる。 $A^{-1}(\alpha, \beta; \alpha', \beta')$ 、 $B^{-1}(n, m; n, m)$ はともに 4×4 の行列である。これを計算すると、

$$\begin{aligned} A^{-1}(\alpha, \beta; \alpha', \beta') &= \sum_{m,n} u_{\beta m}^{(M)} u_{\alpha n}^{(N)} u_{m\beta'}^{(M)-1} u_{n\alpha'}^{(N)-1} B^{-1}(n, m; n, m) \\ &= \sum_{m,n} \frac{1}{\sqrt{M}} e^{i\frac{2m\beta\pi}{M}} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\frac{2n\alpha\pi}{N}} \frac{1}{\sqrt{M}} e^{-i\frac{2\beta'm\pi}{M}} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i\frac{2\alpha'n\pi}{N}} B^{-1}\left(\frac{2\pi n}{N}, \frac{2\pi m}{M}\right) \\ &= \sum_{m,n} \frac{1}{N} e^{i\frac{2n(\alpha-\alpha')\pi}{N}} \frac{1}{M} e^{i\frac{2m(\beta-\beta')\pi}{M}} B^{-1}\left(\frac{2\pi n}{N}, \frac{2\pi m}{M}\right) \\ &= \sum_{\theta_1, \theta_2} \frac{1}{N} e^{i\theta_1(\alpha-\alpha')} \frac{1}{M} e^{i\theta_2(\beta-\beta')} B^{-1}(\theta_1, \theta_2) \end{aligned} \quad (6.1.31)$$

となる。ただし、 $B^{-1}(n, m; n, m)$ は $\frac{2\pi n}{N}$ 、 $\frac{2\pi m}{M}$ にのみ依存する行列であるから、

$$B(n, m; n, m) \equiv B\left(\frac{2\pi n}{N}, \frac{2\pi m}{M}\right) \quad (6.1.32)$$

とおいた。また、

$$\theta_1 \equiv \frac{2\pi n}{N} \quad (6.1.33)$$

$$\theta_2 \equiv \frac{2\pi m}{M} \quad (6.1.34)$$

とおいた。 $N, M \rightarrow \infty$ の極限では、

$$\sum_{\theta_1} \rightarrow \frac{N}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_1 \quad (6.1.35)$$

$$\sum_{\theta_2} \rightarrow \frac{M}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_2 \quad (6.1.36)$$

となるから、 A の逆行列の成分 $A^{-1}(\alpha, \beta; \alpha', \beta')$ は、

$$A^{-1}(\alpha, \beta; \alpha', \beta') = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i[(\alpha-\alpha')\theta_1 + (\beta-\beta')\theta_2]} B^{-1}(\theta_1, \theta_2) d\theta_1 d\theta_2 \quad (6.1.37)$$

と書ける。

これより、 $A^{-1}(\alpha, \beta; \alpha', \beta')$ を求めるためには、 $B^{-1}(\theta_1, \theta_2)$ を求める必要がある。 $B(\theta_1, \theta_2)$ は、

$$B(\theta_1, \theta_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 + z_2 e^{i\theta_2} & -1 & -1 \\ -1 - z_2 e^{-i\theta_2} & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 + z_1 e^{i\theta_1} \\ 1 & 1 & -1 - z_1 e^{-i\theta_1} & 0 \end{pmatrix} \quad (6.1.38)$$

$$\equiv \begin{pmatrix} 0 & b & -1 & -1 \\ -b^* & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & a \\ 1 & 1 & -a^* & 0 \end{pmatrix} \quad (6.1.39)$$

である。ただし、

$$a \equiv 1 + z_1 e^{i\theta_1} \quad a^* \equiv 1 + z_1 e^{-i\theta_1} \quad (6.1.40)$$

$$b \equiv 1 + z_2 e^{i\theta_2} \quad b^* \equiv 1 + z_2 e^{-i\theta_2} \quad (6.1.41)$$

とおいた。 $B(\theta_1, \theta_2)$ の (i, j) の余因子を Δ_{ij} とすると、 $B^{-1}(\theta_1, \theta_2)$ [14, pp.55–61] は、

$$B^{-1}(\theta_1, \theta_2) = \frac{1}{\det B} \begin{pmatrix} \Delta_{11} & \Delta_{21} & \Delta_{31} & \Delta_{41} \\ \Delta_{12} & \Delta_{22} & \Delta_{32} & \Delta_{42} \\ \Delta_{13} & \Delta_{23} & \Delta_{33} & \Delta_{43} \\ \Delta_{14} & \Delta_{24} & \Delta_{34} & \Delta_{44} \end{pmatrix} \quad (6.1.42)$$

となる。

余因子をそれぞれ求めると、

$$\begin{aligned} \Delta_{11} &= (-1)^{1+1} \det \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & a \\ 1 & -a^* & 0 \end{pmatrix} \\ &= a - a^* = 2iz_1 \sin \theta_1 \end{aligned} \quad (6.1.43)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{12} &= (-1)^{1+2} \det \begin{pmatrix} -b^* & 1 & -1 \\ 1 & 0 & a \\ 1 & -a^* & 0 \end{pmatrix} \\ &= -a - a^* + aa^*b^* = -1 + z_1^2 + z_2 e^{-i\theta_2} (1 + z_1^2 + 2z_1 \cos \theta_1) \end{aligned} \quad (6.1.44)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{13} &= (-1)^{1+3} \det \begin{pmatrix} -b^* & 0 & -1 \\ 1 & -1 & a \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= -2 + ab^* = -1 + z_1 e^{i\theta_1} + z_2 e^{-i\theta_2} + z_1 z_2 e^{i(\theta_1 - \theta_2)} \end{aligned} \quad (6.1.45)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{14} &= (-1)^{1+4} \det \begin{pmatrix} -b^* & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & -a^* \end{pmatrix} \\ &= -2 + a^*b^* = -1 + z_1 e^{-i\theta_1} + z_2 e^{-i\theta_2} + z_1 z_2 e^{-i(\theta_1 + \theta_2)} \end{aligned} \quad (6.1.46)$$

$$\begin{aligned} \Delta_{21} &= (-1)^{2+1} \det \begin{pmatrix} b & -1 & -1 \\ -1 & 0 & a \\ 1 & -a^* & 0 \end{pmatrix} \\ &= a + a^* - aa^*b = 1 - z_1^2 - z_2 e^{i\theta_2} (1 + z_1^2 + 2z_1 \cos \theta_1) \end{aligned} \quad (6.1.47)$$

$$\begin{aligned}\Delta_{22} &= (-1)^{2+2} \det \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 \\ 1 & 0 & a \\ 1 & -a^* & 0 \end{pmatrix} \\ &= -a + a^* = -2iz_1 \sin \theta_1\end{aligned}\tag{6.1.48}$$

$$\begin{aligned}\Delta_{23} &= (-1)^{2+3} \det \begin{pmatrix} 0 & b & -1 \\ 1 & -1 & a \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= 2 - ab = 1 - z_1 e^{i\theta_1} - z_2 e^{i\theta_2} - z_1 z_2 e^{i(\theta_1 + \theta_2)}\end{aligned}\tag{6.1.49}$$

$$\begin{aligned}\Delta_{24} &= (-1)^{2+4} \det \begin{pmatrix} 0 & b & -1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & -a^* \end{pmatrix} \\ &= -2 + a^* b = -1 + z_1 e^{-i\theta_1} + z_2 e^{i\theta_2} + z_1 z_2 e^{-i(\theta_1 - \theta_2)}\end{aligned}\tag{6.1.50}$$

$$\begin{aligned}\Delta_{31} &= (-1)^{3+1} \det \begin{pmatrix} b & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & -a^* & 0 \end{pmatrix} \\ &= 2 - a^* b = 1 - z_1 e^{-i\theta_1} - z_2 e^{i\theta_2} - z_1 z_2 e^{-i(\theta_1 - \theta_2)}\end{aligned}\tag{6.1.51}$$

$$\begin{aligned}\Delta_{32} &= (-1)^{3+2} \det \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 \\ -b^* & 1 & -1 \\ 1 & -a^* & 0 \end{pmatrix} \\ &= -2 + a^* b^* = -1 + z_1 e^{-i\theta_1} + z_2 e^{-i\theta_2} + z_1 z_2 e^{-i(\theta_1 + \theta_2)}\end{aligned}\tag{6.1.52}$$

$$\begin{aligned}\Delta_{33} &= (-1)^{3+3} \det \begin{pmatrix} 0 & b & -1 \\ -b^* & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= -b + b^* = -2iz_2 \sin \theta_2\end{aligned}\tag{6.1.53}$$

$$\begin{aligned}\Delta_{34} &= (-1)^{3+4} \det \begin{pmatrix} 0 & b & -1 \\ -b^* & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -a^* \end{pmatrix} \\ &= -b - b^* + a^* b b^* = -1 + z_2^2 + z_1 e^{-i\theta_1} (1 + z_2^2 + 2z_2 \cos \theta_2)\end{aligned}\tag{6.1.54}$$

$$\begin{aligned}\Delta_{41} &= (-1)^{4+1} \det \begin{pmatrix} b & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & a \end{pmatrix} \\ &= 2 - ab = 1 - z_1 e^{i\theta_1} - z_2 e^{i\theta_2} - z_1 z_2 e^{i(\theta_1 + \theta_2)}\end{aligned}\tag{6.1.55}$$

$$\begin{aligned}\Delta_{42} &= (-1)^{4+2} \det \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 \\ -b^* & 1 & -1 \\ 1 & 0 & a \end{pmatrix} \\ &= 2 - ab^* = 1 - z_1 e^{i\theta_1} - z_2 e^{-i\theta_2} - z_1 z_2 e^{i(\theta_1 - \theta_2)}\end{aligned}\tag{6.1.56}$$

$$\begin{aligned}\Delta_{43} &= (-1)^{4+3} \det \begin{pmatrix} 0 & b & -1 \\ -b^* & 0 & -1 \\ 1 & -1 & a \end{pmatrix} \\ &= b + b^* - ab b^* = 1 - z_2^2 - z_1 e^{i\theta_1} (1 + z_2^2 + 2z_2 \cos \theta_2)\end{aligned}\tag{6.1.57}$$

$$\begin{aligned}\Delta_{44} &= (-1)^{4+4} \det \begin{pmatrix} 0 & b & -1 \\ -b^* & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= b - b^* = 2iz_2 \sin \theta_2\end{aligned}\tag{6.1.58}$$

となるから、

$$B^{-1}(\theta_1, \theta_2) = \frac{1}{\det B} \begin{pmatrix} & \text{R} & & & \\ & & \text{L} & & \\ & & & \text{U} & \\ & & & & \text{D} \\ & & & & \\ \text{R} & & & & \\ \text{L} & & & & \\ \text{U} & & & & \\ \text{D} & & & & \end{pmatrix} \quad (6.1.59)$$

となる。また、

$$\det B = (1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_1(1 - z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1 - z_1^2) \cos \theta_2 \quad (6.1.60)$$

である。ここで、 a 、 a^* 、 b 、 b^* および $\det B$ は周期 2π の周期関数であるから、 $B^{-1}(\theta_1, \theta_2)$ の成分はすべて周期 2π の周期関数となる。したがって、 $A^{-1}(\alpha, \beta; \alpha', \beta')$ の被積分関数は周期 2π の周期関数となるため、 $A^{-1}(\alpha, \beta; \alpha', \beta')$ の積分区間を、

$$A^{-1}(\alpha, \beta; \alpha', \beta') = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i[(\alpha - \alpha')\theta_1 + (\beta - \beta')\theta_2]} B^{-1}(\theta_1, \theta_2) d\theta_1 d\theta_2 \quad (6.1.61)$$

と変えることができる。また、この式より $A^{-1}(\alpha, \beta; \alpha', \beta')$ は $(\alpha' - \alpha, \beta' - \beta)$ の関数であることがわかる。よって、表記の簡略化のため、

$$A^{-1}(\alpha, \beta; \alpha', \beta')_{ij} \equiv [\alpha' - \alpha, \beta' - \beta]_{ij} \quad (6.1.62)$$

とおくこととする。ただし、 (i, j) は $A^{-1}(\alpha, \beta; \alpha', \beta')$ の成分を表す。ここで、 $B^{-1}(\theta_1, \theta_2)$ の複素共役は、

$$B^{-1}(\theta_1, \theta_2)^* = B^{-1}(-\theta_1, -\theta_2) \quad (6.1.63)$$

となる。これより、 $A^{-1}(\alpha, \beta; \alpha', \beta')$ の複素共役は、

$$\begin{aligned} A^{-1}(\alpha, \beta; \alpha', \beta')^* &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-i[(\alpha - \alpha')\theta_1 + (\beta - \beta')\theta_2]} B^{-1}(\theta_1, \theta_2)^* d\theta_1 d\theta_2 \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i[(\alpha - \alpha')(-\theta_1) + (\beta - \beta')(-\theta_2)]} B^{-1}(-\theta_1, -\theta_2) d(-\theta_1) d(-\theta_2) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i[(\alpha - \alpha')\theta_1 + (\beta - \beta')\theta_2]} B^{-1}(\theta_1, \theta_2) d\theta_1 d\theta_2 \\ &= A^{-1}(\alpha, \beta; \alpha', \beta') \end{aligned} \quad (6.1.64)$$

であり、 $A^{-1}(\alpha, \beta; \alpha', \beta')$ は実行列である。ただし、2行目から3行目の式変形では $\theta_1 \rightarrow -\theta_1$ 、 $\theta_2 \rightarrow -\theta_2$ とした。これより、

$$[\alpha' - \alpha, \beta' - \beta]_{ij}^* = [\alpha' - \alpha, \beta' - \beta]_{ij} \quad (6.1.65)$$

となる。

$[\alpha' - \alpha, \beta' - \beta]_{ij}$ の対角要素に対しては、

$$[0, \beta' - \beta]_{\text{RR}} = [0, \beta' - \beta]_{\text{LL}} = [\alpha' - \alpha, 0]_{\text{UU}} = [\alpha' - \alpha, 0]_{\text{DD}} = 0 \quad (6.1.66)$$

となる。これは、

$$[0, \beta' - \beta]_{\text{RR}} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 e^{i(\beta - \beta')\theta_2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \frac{2iz_1 \sin \theta_1}{\det B} = 0 \quad (6.1.67)$$

$$[0, \beta' - \beta]_{\text{LL}} = -\frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 e^{i(\beta - \beta')\theta_2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \frac{2iz_1 \sin \theta_1}{\det B} = 0 \quad (6.1.68)$$

$$[\alpha' - \alpha, 0]_{\text{UU}} = -\frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 e^{i(\alpha - \alpha')\theta_1} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{2iz_2 \sin \theta_2}{\det B} = 0 \quad (6.1.69)$$

$$[\alpha' - \alpha, 0]_{\text{DD}} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 e^{i(\alpha - \alpha')\theta_1} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \frac{2iz_2 \sin \theta_2}{\det B} = 0 \quad (6.1.70)$$

となるためである。また、

$$[\alpha' - \alpha, \beta' - \beta]_{\text{RL}} = -[-(\alpha' - \alpha), -(\beta' - \beta)]_{\text{LR}} \quad (6.1.71)$$

$$[\alpha' - \alpha, \beta' - \beta]_{\text{UD}} = -[-(\alpha' - \alpha), -(\beta' - \beta)]_{\text{DU}} \quad (6.1.72)$$

という関係が成立する。これは、

$$(a + a^* - aa^*b)^* = a^* + a - a^*ab^* = -(-a - a^* + aa^*b^*) \quad (6.1.73)$$

$$(b + b^* - abb^*)^* = b^* + b - a^*b^*b = -(-b - b^* + a^*bb^*) \quad (6.1.74)$$

となるから、

$$\begin{aligned} [\alpha' - \alpha, \beta' - \beta]_{\text{RL}} &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i[(\alpha - \alpha')\theta_1 + (\beta - \beta')\theta_2]} \frac{a + a^* - aa^*b}{\det B} d\theta_1 d\theta_2 \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i[(\alpha - \alpha')\theta_1 + (\beta - \beta')\theta_2]} \frac{(-a - a^* + aa^*b^*)^*}{\det B} d\theta_1 d\theta_2 \\ &= -\left\{ \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i[-(\alpha - \alpha')\theta_1 - (\beta - \beta')\theta_2]} \frac{-a - a^* + aa^*b^*}{\det B} d\theta_1 d\theta_2 \right\}^* \\ &= -[-(\alpha' - \alpha), -(\beta' - \beta)]_{\text{LR}}^* \\ &= -[-(\alpha' - \alpha), -(\beta' - \beta)]_{\text{LR}} \end{aligned} \quad (6.1.75)$$

$$\begin{aligned} [\alpha' - \alpha, \beta' - \beta]_{\text{UD}} &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i[(\alpha - \alpha')\theta_1 + (\beta - \beta')\theta_2]} \frac{b + b^* - abb^*}{\det B} d\theta_1 d\theta_2 \\ &= -\frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i[(\alpha - \alpha')\theta_1 + (\beta - \beta')\theta_2]} \frac{(-b - b^* + a^*bb^*)^*}{\det B} d\theta_1 d\theta_2 \\ &= -\left\{ \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i[-(\alpha - \alpha')\theta_1 - (\beta - \beta')\theta_2]} \frac{-b - b^* + a^*bb^*}{\det B} d\theta_1 d\theta_2 \right\}^* \\ &= -[-(\alpha' - \alpha), -(\beta' - \beta)]_{\text{DU}}^* \\ &= -[-(\alpha' - \alpha), -(\beta' - \beta)]_{\text{DU}} \end{aligned} \quad (6.1.76)$$

となるためである。

6.1.3 相関関数 $\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1,2} \rangle$

ここでは $(n, m) = (1, 1)$ と $(1, 2)$ の間の相関関数を求める。

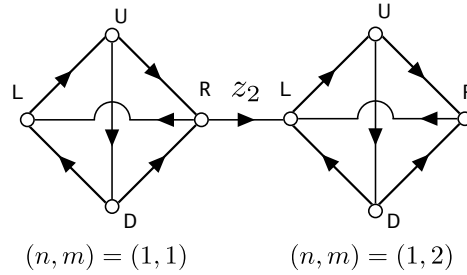


図 166 $(1, 1)$ と $(1, 2)$ の間の相関関数

この計算をする際に必要な格子は図 166 に表された部分のみである。この場合、行列 δ の成分で 0 でないのは、

$$\delta(1, 1; 1, 2)_{\text{RL}} = z_2^{-1} - z_2 = -\delta(1, 2; 1, 1)_{\text{LR}} \quad (6.1.77)$$

だけである。つまり行列 y は、

$$y = \begin{matrix} (1, 1)\text{R} & (1, 2)\text{L} \\ (1, 1)\text{R} & (1, 2)\text{L} \end{matrix} \begin{pmatrix} 0 & z_2^{-1} - z_2 \\ -(z_2^{-1} - z_2) & 0 \end{pmatrix} = (z_2^{-1} - z_2) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.1.78)$$

と 2×2 の行列となる。この行列 y に対応する行列 Q は、

$$Q = \begin{pmatrix} [0, 0]_{\text{RR}} & [0, 1]_{\text{RL}} \\ [0, -1]_{\text{LR}} & [0, 0]_{\text{LL}} \end{pmatrix} \quad (6.1.79)$$

となる。ここで (6.1.66)、(6.1.71) を用いると、

$$[0, 0]_{\text{RR}} = [0, 0]_{\text{LL}} = 0 \quad (6.1.80)$$

$$[0, -1]_{\text{LR}} = -[0, 1]_{\text{RL}} \quad (6.1.81)$$

となるから、

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & [0, 1]_{\text{RL}} \\ -[0, 1]_{\text{RL}} & 0 \end{pmatrix} = [0, 1]_{\text{RL}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.1.82)$$

となる。また、行列 y の逆行列 y^{-1} は、

$$y^{-1} = (z_2^{-1} - z_2)^{-1} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (6.1.83)$$

となる。よって、

$$y^{-1} + Q = \begin{pmatrix} 0 & -(z_2^{-1} - z_2)^{-1} + [0, 1]_{\text{RL}} \\ (z_2^{-1} - z_2)^{-1} - [0, 1]_{\text{RL}} & 0 \end{pmatrix} \quad (6.1.84)$$

となるから、

$$\begin{aligned}\text{Pf}(y^{-1} + Q) &= \{\det(y^{-1} + Q)\}^{\frac{1}{2}} \\ &= \{[-(z_2^{-1} - z_2)^{-1} + [0, 1]_{\text{RL}}]^2\}^{\frac{1}{2}} \\ &= -(z_2^{-1} - z_2)^{-1} + [0, 1]_{\text{RL}}\end{aligned}\quad (6.1.85)$$

$$\text{Pf}(y) = (\det y)^{\frac{1}{2}} = z_2^{-1} - z_2 \quad (6.1.86)$$

となる。よって $\langle \sigma_{1,1}\sigma_{1,2} \rangle$ は、

$$\begin{aligned}\langle \sigma_{1,1}\sigma_{1,2} \rangle &= \pm z_2 [-(z_2^{-1} - z_2)^{-1} + [0, 1]_{\text{RL}}] (z_2^{-1} - z_2) \\ &= \pm [z_2 - (1 - z_2^2)[0, 1]_{\text{RL}}]\end{aligned}\quad (6.1.87)$$

となる。これに $[0, 1]_{\text{RL}}$ を代入すると、

$$\begin{aligned}\langle \sigma_{1,1}\sigma_{1,2} \rangle &= \pm \left[z_2 - (1 - z_2^2) \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 e^{-i\theta_2} \frac{1 - z_1^2 - z_2 e^{i\theta_2} (1 + z_1^2 + 2z_1 \cos \theta_1)}{(1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_1(1 - z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1 - z_1^2) \cos \theta_2} \right] \\ &= \pm \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_2 \left[z_2 - e^{-i\theta_2} (1 - z_2^2) \frac{1 - z_1^2 - z_2 e^{i\theta_2} (1 + z_1^2 + 2z_1 \cos \theta_1)}{(1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_1(1 - z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1 - z_1^2) \cos \theta_2} \right]\end{aligned}\quad (6.1.88)$$

となる。この積分部分はまさに (5.3.14) であるから、

$$\langle \sigma_{1,1}\sigma_{1,2} \rangle = \pm u_2 \quad (6.1.90)$$

となる。これより、(5.3.31) の表式を用いいると、

$$\langle \sigma_{1,1}\sigma_{1,2} \rangle = \pm \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(1 - \alpha_1 e^{i\theta})(1 - \alpha_2 e^{-i\theta})}{\sqrt{(1 - \alpha_1 e^{i\theta})(1 - \alpha_1 e^{-i\theta})(1 - \alpha_2 e^{i\theta})(1 - \alpha_2 e^{-i\theta})}} d\theta \quad (6.1.91)$$

となる。ここで、 $T = 0$ のとき、

$$K_1 = \frac{J_1}{2k_B T} \rightarrow \infty, \quad z_1 = \tanh K_1 \rightarrow 1 \quad (6.1.92)$$

$$K_2 = \frac{J_2}{2k_B T} \rightarrow \infty, \quad z_2 = \tanh K_2 \rightarrow 1 \quad (6.1.93)$$

となるため、

$$\alpha_1 \rightarrow 0 \quad \alpha_2 \rightarrow 0 \quad (6.1.94)$$

となる。したがって、 $T = 0$ のとき

$$\langle \sigma_{1,1}\sigma_{1,2} \rangle = \pm \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta = \pm 1 \quad (6.1.95)$$

となる。ここで、相関関数は正である必要があるため、右辺は正の符号をとる必要があることがわかる。よって、

$$\langle \sigma_{1,1}\sigma_{1,2} \rangle = u_2 \quad (6.1.96)$$

となる。

これより、以前の結果を用いると相関関数 $\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1,2} \rangle$ は以下ようになる。

・ $T > T_c$ のとき ($k = \sinh 2K_1 \sinh 2K_2$)

$$\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1,2} \rangle = 2\pi^{-1} \coth 2K_2 \cosh 2K_1 \cosh 2K_2 \left[\Pi_1(\sinh^2 2K_2, k) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \quad (6.1.97)$$

・ $T < T_c$ のとき ($k = \frac{1}{\sinh 2K_1 \sinh 2K_2}$)

$$\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1,2} \rangle = 2\pi^{-1} \coth 2K_1 \coth^2 2K_2 \left[\Pi_1\left(\frac{1}{\sinh^2 2K_1}, k\right) - \frac{1}{\cosh^2 2K_2} K(k) \right] \quad (6.1.98)$$

実際に隣同士の相関関数 $\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1,2} \rangle$ を数値的に評価したものが図 167 となる。 $T = 0$ で 1 の値 (相関距離 ∞) をとり、温度に対して単調減少し、高温で 0 (相関距離 0) に漸近する。

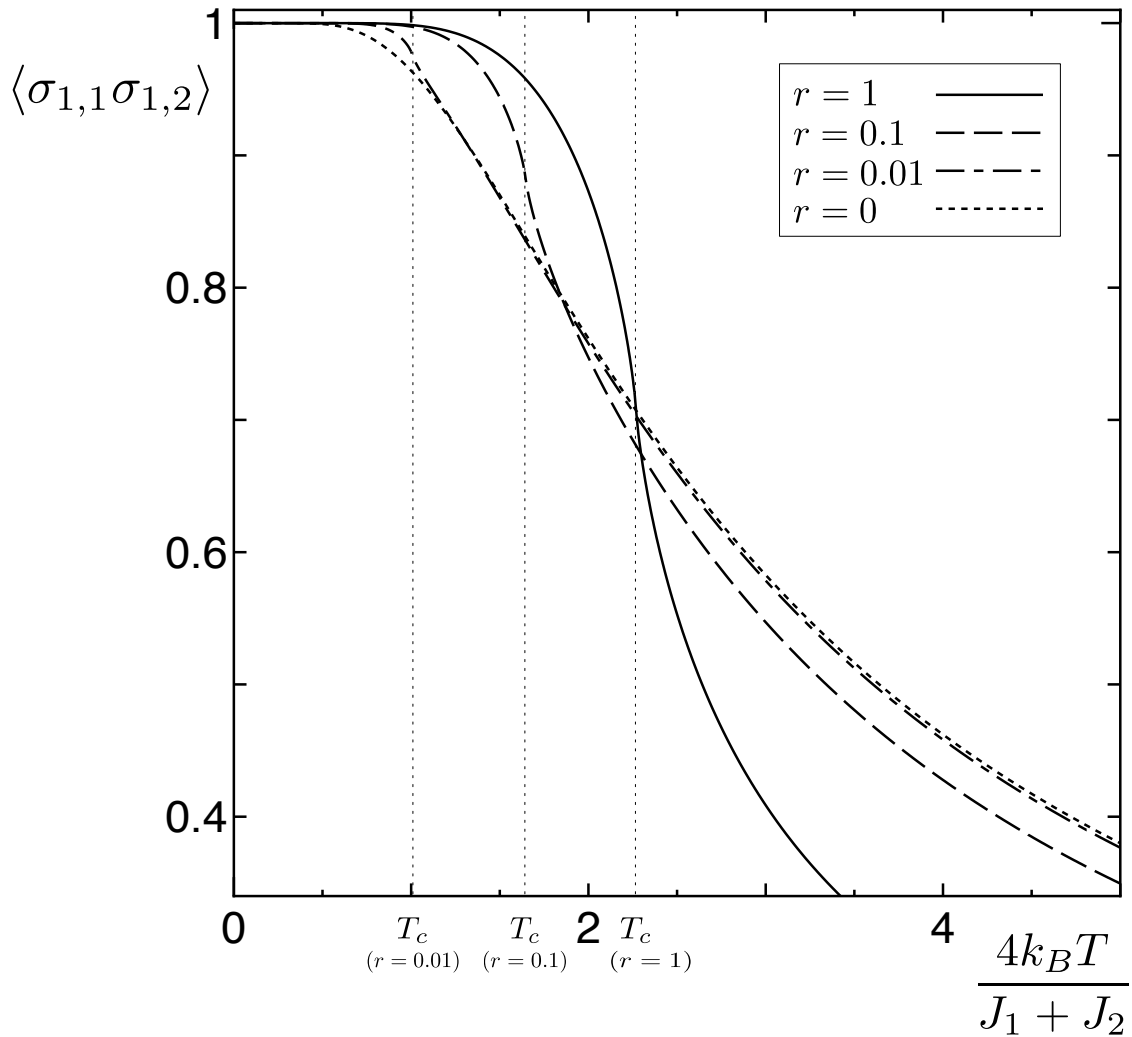


図 167 相関関数 $\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1,2} \rangle$ の温度依存性

6.1.4 相関関数 $\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1,1+m} \rangle$

(1, 1)、(1, 1 + m) の間の相関関数を求める。

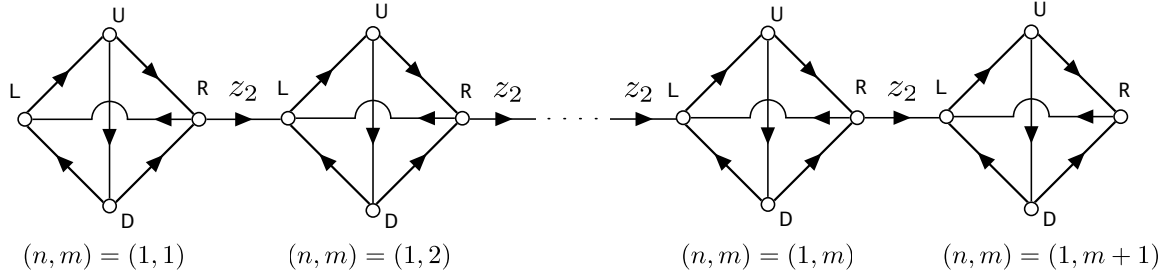


図 168 (1, 1) と (1, 1 + m) の間の相関関数

この計算をする際に必要な格子は図 168 に表された部分のみである。この場合の行列 δ の成分のうち 0 でないものは、

$$\delta(1, 1; 1, 2)_{\text{RL}} = \delta(1, 2; 1, 3)_{\text{RL}} = \cdots = \delta(1, m; 1, m+1)_{\text{RL}} = (z_2^{-1} - z_2) \quad (6.1.99)$$

$$\delta(1, 2; 1, 1)_{\text{LR}} = \delta(1, 3; 1, 2)_{\text{LR}} = \cdots = \delta(1, m+1; 1, m)_{\text{LR}} = -(z_2^{-1} - z_2) \quad (6.1.100)$$

である。これより、行列 y は、

$$y = (z_2^{-1} - z_2) \times \begin{array}{c} \text{R} \\ \text{L} \end{array} \begin{array}{cccccccc} & & & \text{R} & & & & \text{L} \\ & & & (1, 1) & (1, 2) & \cdots & (1, m) & (1, 2) & (1, 3) & \cdots & (1, m+1) \\ \text{R} & (1, 1) & (1, 2) & \vdots & (1, m) & & & & & & \\ \text{L} & (1, 2) & (1, 3) & \vdots & & & & & & & \\ & (1, m) & & & & & & & & & \\ & (1, 2) & (1, 3) & & & & & & & & \\ & (1, m+1) & & & & & & & & & \end{array} \quad (6.1.101)$$

となる。これより、

$$y = (z_2^{-1} - z_2) \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \quad (6.1.102)$$

という $2m \times 2m$ の行列となる。ただし、 I は $m \times m$ の単位行列である。

また、これに対応する行列 Q は、

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & S \\ S' & 0 \end{pmatrix} \quad (6.1.103)$$

となる。ただし、

$$S = \begin{pmatrix} [0, 1]_{\text{RL}} & [0, 2]_{\text{RL}} & [0, 3]_{\text{RL}} & \cdots & [0, m]_{\text{RL}} \\ [0, 0]_{\text{RL}} & [0, 1]_{\text{RL}} & [0, 2]_{\text{RL}} & \cdots & [0, m-1]_{\text{RL}} \\ [0, -1]_{\text{RL}} & [0, 0]_{\text{RL}} & [0, 1]_{\text{RL}} & \cdots & [0, m-2]_{\text{RL}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ [0, 2-m]_{\text{RL}} & [0, 3-m]_{\text{RL}} & [0, 4-m]_{\text{RL}} & \cdots & [0, 1]_{\text{RL}} \end{pmatrix} \quad (6.1.104)$$

$$S' = \begin{pmatrix} [0, -1]_{\text{LR}} & [0, 0]_{\text{LR}} & [0, 1]_{\text{LR}} & \cdots & [0, m-2]_{\text{LR}} \\ [0, -2]_{\text{LR}} & [0, -1]_{\text{LR}} & [0, 0]_{\text{LR}} & \cdots & [0, m-3]_{\text{LR}} \\ [0, -3]_{\text{LR}} & [0, -2]_{\text{LR}} & [0, -1]_{\text{LR}} & \cdots & [0, m-4]_{\text{LR}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ [0, -m]_{\text{LR}} & [0, 1-m]_{\text{LR}} & [0, 2-m]_{\text{LR}} & \cdots & [0, -1]_{\text{LR}} \end{pmatrix} \quad (6.1.105)$$

$$= - \begin{pmatrix} [0, 1]_{\text{RL}} & [0, 0]_{\text{RL}} & [0, -1]_{\text{RL}} & \cdots & [0, 2-m]_{\text{RL}} \\ [0, 2]_{\text{RL}} & [0, 1]_{\text{RL}} & [0, 0]_{\text{RL}} & \cdots & [0, 3-m]_{\text{RL}} \\ [0, 3]_{\text{RL}} & [0, 2]_{\text{RL}} & [0, 1]_{\text{RL}} & \cdots & [0, 4-m]_{\text{RL}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ [0, m]_{\text{RL}} & [0, m-1]_{\text{RL}} & [0, m-2]_{\text{RL}} & \cdots & [0, 1]_{\text{RL}} \end{pmatrix} = -{}^t S \quad (6.1.106)$$

である。これより、

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & S \\ -{}^t S & 0 \end{pmatrix} \quad (6.1.107)$$

となる。また、行列 y の逆行列 y^{-1} は、

$$y^{-1} = (z_2^{-1} - z_2)^{-1} \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix} \quad (6.1.108)$$

となる。よって、

$$y^{-1} + Q = \begin{pmatrix} 0 & -(z_2^{-1} - z_2)^{-1}I + S \\ (z_2^{-1} - z_2)^{-1}I - {}^t S & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -(z_2^{-1} - z_2)^{-1}I + S \\ -{}^t\{-(z_2^{-1} - z_2)^{-1}I + S\} & 0 \end{pmatrix} \quad (6.1.109)$$

となる。これより、

$$\begin{aligned} \det(y^{-1} + Q) &= \det \begin{pmatrix} 0 & -(z_2^{-1} - z_2)^{-1}I + S \\ -{}^t\{-(z_2^{-1} - z_2)^{-1}I + S\} & 0 \end{pmatrix} \\ &= (-1)^{2m} \det \begin{pmatrix} {}^t\{-(z_2^{-1} - z_2)^{-1}I + S\} & 0 \\ 0 & -(z_2^{-1} - z_2)^{-1}I + S \end{pmatrix} \\ &= \det[{}^t\{-(z_2^{-1} - z_2)^{-1}I + S\}] \det[-(z_2^{-1} - z_2)^{-1}I + S] \\ &= (\det[-(z_2^{-1} - z_2)^{-1}I + S])^2 \end{aligned} \quad (6.1.110)$$

となる。したがって、

$$\text{Pf}(y^{-1} + Q) = \{\det(y^{-1} + Q)\}^{\frac{1}{2}} = \det[-(z_2^{-1} - z_2)^{-1}I + S] \quad (6.1.111)$$

$$\text{Pf}(y) = (\det y)^{\frac{1}{2}} = (z_2^{-1} - z_2)^m \quad (6.1.112)$$

となる。よって、

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1,1+m} \rangle &= \pm z_2^m \det[-(z_2^{-1} - z_2)I + S](z_2^{-1} - z_2)^m \\
&= \pm \det[z_2(z_2^{-1} - z_2)\{-(z_2^{-1} - z_2)^{-1}I + S\}] \\
&= \pm \det[-z_2I + (1 - z_2^2)S] \\
&= \pm \det[z_2I - (1 - z_2^2)S]
\end{aligned} \tag{6.1.113}$$

となる。ここで、

$$c_0 \equiv z_2 - (1 - z_2^2)[0, 1]_{\text{RL}} \tag{6.1.114}$$

$$c_r \equiv -(1 - z_2^2)[0, 1 + r]_{\text{RL}} \tag{6.1.115}$$

$$c_{-r} \equiv -(1 - z_2^2)[0, 1 - r]_{\text{RL}} \tag{6.1.116}$$

とおくと、

$$\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1,1+m} \rangle = \pm \begin{vmatrix} c_0 & c_1 & c_2 & \cdots & c_{m-1} \\ c_{-1} & c_0 & c_1 & \cdots & c_{m-2} \\ c_{-2} & c_{-1} & c_0 & \cdots & c_{m-3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{-m+1} & c_{-m+2} & c_{-m+3} & \cdots & c_0 \end{vmatrix} \tag{6.1.117}$$

という行列式で書ける。ここで、 $m = 1$ の場合を考えると、

$$\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1,2} \rangle = \pm c_0 \tag{6.1.118}$$

となるが、これはまさに (6.1.88) であり、 c_0 は正の値であることがわかっている。つまり、相関関数が正となるためには正符号をとればよいことがわかり、相関関数 $\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1,1+m} \rangle$ は、

$$\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1,1+m} \rangle = \begin{vmatrix} c_0 & c_1 & c_2 & \cdots & c_{m-1} \\ c_{-1} & c_0 & c_1 & \cdots & c_{m-2} \\ c_{-2} & c_{-1} & c_0 & \cdots & c_{m-3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{-m+1} & c_{-m+2} & c_{-m+3} & \cdots & c_0 \end{vmatrix} \tag{6.1.119}$$

となる。ただし、 c_0 は 6.1.3 節により、

$$c_0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{(1 - \alpha_1 e^{i\theta})(1 - \alpha_2 e^{-i\theta})}{\sqrt{(1 - \alpha_1 e^{i\theta})(1 - \alpha_1 e^{-i\theta})(1 - \alpha_2 e^{i\theta})(1 - \alpha_2 e^{-i\theta})}} d\theta \tag{6.1.120}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} C(e^{i\theta}) d\theta \tag{6.1.121}$$

である。

これより、 c_r の表式について考える。 c_r は、

$$\begin{aligned}
c_r &= -(1 - z_2^2)[0, 1 + r]_{\text{RL}} \\
&= -(1 - z_2^2) \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-i(1+r)\theta_2} \frac{1 - z_1^2 - z_2 e^{i\theta_2} (1 + z_1^2 + 2z_1 \cos \theta_1)}{(1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_1(1 - z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1 - z_1^2) \cos \theta_2} d\theta_1 d\theta_2 \\
&= -(1 - z_2^2) \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ir\theta_2} \frac{(1 - z_1^2)e^{-i\theta_2} - z_2(1 + z_1^2) - 2z_1 z_2 \cos \theta_1}{(1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_1(1 - z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1 - z_1^2) \cos \theta_2} d\theta_1 d\theta_2 \\
&= -(1 - z_2^2) \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ir\theta_2} \frac{(1 - z_1^2)e^{-i\theta_2} - z_2(1 + z_1^2)}{(1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_1(1 - z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1 - z_1^2) \cos \theta_2} d\theta_1 d\theta_2 \\
&\quad - (1 - z_2^2) \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ir\theta_2} \frac{-2z_1 z_2 \cos \theta_1}{(1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_1(1 - z_2^2) \cos \theta_1 - 2z_2(1 - z_1^2) \cos \theta_2} d\theta_1 d\theta_2
\end{aligned} \tag{6.1.122}$$

と変形できる。ここで θ_1 での積分を実行するが、右辺第 1 項の積分は (5.3.19) と同じである。また、右辺第 2 項は、

$$I' = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\cos \theta_1}{u \cos \theta_1 + v} d\theta_1 \tag{6.1.123}$$

を計算すればよいが、この被積分関数は、

$$\begin{aligned}
\frac{\cos \theta_1}{u \cos \theta_1 + v} &= \frac{1}{u} \frac{u \cos \theta_1 + v - v}{u \cos \theta_1 + v} \\
&= \frac{1}{u} - \frac{v}{u} \frac{1}{u \cos \theta_1 + v}
\end{aligned} \tag{6.1.124}$$

と変形できるため、

$$\begin{aligned}
I' &= \frac{1}{u} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_1 - \frac{v}{u} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{u \cos \theta_1 + v} d\theta_1 \\
&= \frac{2\pi}{u} - \frac{v}{u} I
\end{aligned} \tag{6.1.125}$$

となる。ただし、 u 、 v は (5.3.17)、(5.3.18) である。よって、

$$\begin{aligned}
c_r &= -(1 - z_2^2) \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ir\theta} \frac{(1 - z_1^2)e^{-i\theta} - z_2(1 + z_1^2)}{\sqrt{(v+u)(v-u)}} d\theta \\
&\quad - (1 - z_2^2) \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ir\theta} \frac{v}{u} \frac{2z_1 z_2}{\sqrt{(v+u)(v-u)}} d\theta \\
&\quad + (1 - z_2^2) \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ir\theta} \frac{2z_1 z_2}{u} d\theta \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ir\theta} \left(-(1 - z_2^2) \frac{(1 - z_1^2)e^{-i\theta} - z_2(1 + z_1^2)}{\sqrt{(v+u)(v-u)}} - (1 - z_2^2) \frac{v}{u} \frac{2z_1 z_2}{\sqrt{(v+u)(v-u)}} \right) d\theta \\
&\quad + (1 - z_2^2) \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ir\theta} \frac{2z_1 z_2}{u} d\theta
\end{aligned} \tag{6.1.126}$$

となる。

まず、右辺第 1 項の被積分関数を計算すると、

$$\begin{aligned}
& -(1-z_2^2) \frac{(1-z_1^2)e^{-i\theta} - z_2(1+z_1^2)}{\sqrt{(v+u)(v-u)}} - (1-z_2^2) \frac{v}{u} \frac{2z_1z_2}{\sqrt{(v+u)(v-u)}} \\
&= -(1-z_2^2) \frac{(1-z_1^2)e^{-i\theta} - z_2(1+z_1^2)}{\sqrt{(v+u)(v-u)}} - (1-z_2^2) \frac{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta}{-2z_1(1-z_2^2)} \cdot \frac{2z_1z_2}{\sqrt{(v+u)(v-u)}} \\
&= \frac{-(1-z_2^2)(1-z_1^2)e^{-i\theta} + z_2(1-z_2^2)(1+z_1^2) + z_2(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2^2(1-z_1^2)\cos\theta}{\sqrt{(v+u)(v-u)}} \\
&= \frac{2z_2(1+z_1^2) - z_2^2(1-z_1^2)e^{i\theta} - (1-z_1^2)e^{-i\theta}}{\sqrt{(v+u)(v-u)}} \tag{6.1.127}
\end{aligned}$$

となる。また、第 2 項の積分を実行すると、

$$\begin{aligned}
(1-z_2^2) \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ir\theta} \frac{2z_1z_2}{u} d\theta &= (1-z_2^2) \frac{2z_1z_2}{u} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ir\theta} d\theta \\
&= -\frac{z_2}{2\pi} \left[-\frac{1}{ir} e^{-ir\theta} \right]_{-\pi}^{\pi} \\
&= \frac{z_2}{2\pi} \frac{1}{ir} (e^{-ir\pi} - e^{ir\pi}) = 0 \tag{6.1.128}
\end{aligned}$$

となる。したがって、

$$\begin{aligned}
c_r &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-ir\theta} \\
&\times \frac{2z_2(1+z_1^2) - z_2^2(1-z_1^2)e^{i\theta} - (1-z_1^2)e^{-i\theta}}{\sqrt{\{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta - 2z_1(1-z_2^2)\}\{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta + 2z_1(1-z_2^2)\}}} \tag{6.1.129}
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ir\theta} C(e^{i\theta}) d\theta \tag{6.1.130}$$

となる。同様に、 $r \rightarrow -r$ とすると、

$$\begin{aligned}
c_{-r} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{ir\theta} \\
&\times \frac{2z_2(1+z_1^2) - z_2^2(1-z_1^2)e^{i\theta} - (1-z_1^2)e^{-i\theta}}{\sqrt{\{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta - 2z_1(1-z_2^2)\}\{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2)\cos\theta + 2z_1(1-z_2^2)\}}} \tag{6.1.131}
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{ir\theta} C(e^{i\theta}) d\theta \tag{6.1.132}$$

となる。

よって、(6.1.119) の成分は任意の r に対して、

$$c_r = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-ir\theta} C(e^{i\theta}) d\theta \tag{6.1.133}$$

となる。この c_r は r のみに依存する関数であるので、(6.1.119) は Toeplitz 行列式となっていることが分かる。したがって、 $\langle \sigma_{1,1} \sigma_{1,1+m} \rangle$ は (6.1.119) の Toeplitz 行列式を解くことにより求めることができる。この $m \rightarrow \infty$ の極限が自発磁化の 2 乗を与えるので、第 7 章では無限次元の Toeplitz 行列式を解くことになる。

6.2 第2量子化を用いる方法による相関関数

格子点 (n, m) と (n, m') の間の相関関数 $\langle \sigma_{n,m} \sigma_{n,m'} \rangle$ を求める。これは、

$$\langle \sigma_{n,m} \sigma_{n,m'} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_i = \pm 1} \sigma_{n,m} \sigma_{n,m'} e^{-\beta \mathcal{H}} \quad (6.2.1)$$

$$= \frac{\text{tr} \sigma_{n,m}^x \sigma_{n,m'}^x V^N}{\text{tr} V^N} \quad (6.2.2)$$

$$= \frac{\sum_{\alpha} \langle \Psi_{\alpha} | \sigma_{n,m}^x \sigma_{n,m'}^x | \Psi_{\alpha} \rangle \Lambda_{\alpha}}{\sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}} \quad (6.2.3)$$

となる。ただし、 $\sigma_{n,m}^x$ は Pauli の行列の z 成分であり、 V は2次元 Ising モデルの転送行列である。また、 $\{\Lambda_{\alpha}, |\Psi_{\alpha}\rangle\}$ を V の固有値およびそれに対応する固有関数とする。ここで、 $N \rightarrow \infty$ の極限を考えると、 V の最大固有値の寄与のみが残り、第3章の議論により、

$$\langle \sigma_{n,m} \sigma_{n,m'} \rangle = \begin{cases} \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\langle \Psi_0^+ | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_0^+ \rangle \Lambda_{\max}^+ + \langle \Psi_{q=0}^- | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_{q=0}^- \rangle \Lambda_{\max}^-}{\Lambda_{\max}^+ + \Lambda_{\max}^-} & T < T_c \\ \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\langle \Psi_0^+ | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_0^+ \rangle \Lambda_{\max}^+}{\Lambda_{\max}^+} & T > T_c \end{cases} \\ = \begin{cases} \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{2} (\langle \Psi_0^+ | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_0^+ \rangle + \langle \Psi_{q=0}^- | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_{q=0}^- \rangle) & T < T_c \\ \lim_{M \rightarrow \infty} \langle \Psi_0^+ | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_0^+ \rangle & T > T_c \end{cases} \quad (6.2.4)$$

となる。ただし、 $|\Psi_0^+\rangle$ は固有値 Λ_{\max}^+ をとる場合の固有関数であり ξ 粒子の真空状態を表す。 $|\Psi_{q=0}^-\rangle$ は固有値 Λ_{\max}^- をとる場合の固有関数であり $\xi_{q=0}$ 粒子が1つ存在し、他の $\xi_{q \neq 0}$ 粒子の真空状態を表す。また、

$$\Lambda_{\max}^+ = \Lambda_{\max}^- \quad (T < T_c) \quad (6.2.5)$$

$$\Lambda_{\max}^+ > \Lambda_{\max}^- \quad (T > T_c) \quad (6.2.6)$$

となることを用いた。また、簡単のため、添字の n を省略した。

・ $\langle \Psi_0^+ | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_0^+ \rangle$ の値

まず、 $\sigma_m^x \sigma_{m'}^x$ の表式を変更する。(3.2.9)、(3.2.10) を用いて、

$$a_j^x \equiv a_j^{\dagger} + a_j \quad (6.2.7)$$

$$i a_j^y \equiv a_j^{\dagger} - a_j \quad (6.2.8)$$

と定義する。ここで、(付録 C.21)、(付録 C.22) を Pauli の行列を用いて書き直すと、

$$\sigma_j^- = (-1)^{j-1} \sigma_1^z \sigma_2^z \cdots \sigma_{j-1}^z a_j \quad (6.2.9)$$

$$\sigma_j^+ = (-1)^{j-1} \sigma_1^z \sigma_2^z \cdots \sigma_{j-1}^z a_j^{\dagger} \quad (6.2.10)$$

となる。

また、(付録 C.23) より、

$$\begin{aligned}
\sigma_j^z &= 2a_j^\dagger a_j - 1 \\
&= -\left(-a_j^\dagger a_j + a_j a_j^\dagger\right) \\
&= -\left(a_j^{\dagger 2} - a_j^\dagger a_j + a_j a_j^\dagger - a_j^2\right) \\
&= -\left(a_j^\dagger + a_j\right)\left(a_j^\dagger - a_j\right) \\
&= -a_j^x (ia_j^y)
\end{aligned} \tag{6.2.11}$$

となるので、

$$\sigma_j^- = a_1^x (ia_1^y) a_2^x (ia_2^y) \cdots a_{j-1}^x (ia_{j-1}^y) a_j \tag{6.2.12}$$

$$\sigma_j^+ = a_1^x (ia_1^y) a_2^x (ia_2^y) \cdots a_{j-1}^x (ia_{j-1}^y) a_j^\dagger \tag{6.2.13}$$

となる。ここで、

$$\sigma_j^x = \sigma_j^+ + \sigma_j^- \tag{6.2.14}$$

であるので、(6.2.12)、(6.2.13) の両辺を足せば、

$$\sigma_j^x = a_1^x (ia_1^y) a_2^x (ia_2^y) \cdots a_{j-1}^x (ia_{j-1}^y) a_j^x \tag{6.2.15}$$

となる。したがって、 $m' > m$ の場合を考えると、

$$\sigma_m^x \sigma_{m'}^x = a_1^x (ia_1^y) a_2^x (ia_2^y) \cdots a_{m-1}^x (ia_{m-1}^y) a_m^x a_1^x (ia_1^y) a_2^x (ia_2^y) \cdots a_{m'-1}^x (ia_{m'-1}^y) a_{m'}^x \tag{6.2.16}$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned}
\{a_i^x, ia_j^y\}_+ &= \{a_i^\dagger + a_i, a_j^\dagger - a_j\}_+ \\
&= \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\}_+ - \{a_i^\dagger, a_j\}_+ + \{a_i, a_j^\dagger\}_+ - \{a_i, a_j\}_+ \\
&= -\delta_{i,j} + \delta_{i,j} = 0
\end{aligned} \tag{6.2.17}$$

となり、 a_i^x 、 ia_j^y は反可換である。また、

$$(a_j^x)^2 = (a_j^\dagger + a_j)^2 = [a_j^\dagger, a_j] = 1 \tag{6.2.18}$$

$$(ia_j^y)^2 = (a_j^\dagger - a_j)^2 = -[a_j^\dagger, a_j] = -1 \tag{6.2.19}$$

であるので、

$$a_j^x (ia_j^y) a_j^x (ia_j^y) = -a_j^x a_j^x (ia_j^y) (ia_j^y) = 1 \tag{6.2.20}$$

となる。よって、

$$\sigma_m^x \sigma_{m'}^x = (ia_m^y) (a_{m+1}^x) (ia_{m+1}^y) \cdots (a_{m'-1}^x) (ia_{m'-1}^y) (a_{m'}^x) \tag{6.2.21}$$

となり、 $2(m' - m)$ 個の演算子の積となる。この真空期待値を評価するために Wick の定理 [5, pp. 166–169] を用いる。

(Wick の定理)

ϕ_j を場の演算子とし、 ϕ_j が、

$$\phi_j = \phi_j^+ + \phi_j^- \quad (6.2.22)$$

と消滅演算子の部分と、生成演算子の部分に分けられるとする。また、これらが Fermi 演算子であると
する。このとき、偶数個の演算子の積の真空期待値は、

$$\begin{aligned} \langle 0 | \phi_1 \phi_2 \cdots \phi_n | 0 \rangle \\ = \sum_p' \delta_p \langle 0 | \phi_{p_1} \phi_{p_2} | 0 \rangle \langle 0 | \phi_{p_3} \phi_{p_4} | 0 \rangle \cdots \langle 0 | \phi_{p_{n-1}} \phi_{p_n} | 0 \rangle \end{aligned} \quad (6.2.23)$$

と演算子の対の真空期待値の積に展開できる。ただし、 \sum_p' は、

$$p_1 < p_2, p_3 < p_4, \cdots, p_{n-1} < p_n \quad (6.2.24)$$

$$p_1 < p_3 < \cdots < p_{n-1} \quad (6.2.25)$$

となる。

簡単のため (6.2.21) の右辺の積の順序を、

$$\sigma_m^x \sigma_{m'}^x = (ia_m^y)(ia_{m+1}^y) \cdots (ia_{m'-1}^y)(a_{m+1}^y)(a_{m+2}^x) \cdots (a_{m'}^x) \quad (6.2.26)$$

と換える。このとき、 a_j^x 、 ia_j^y はともに ξ 粒子の生成演算子の部分と消滅演算子の部分の線形結合で表すこと
ができる。よって、この演算子の積に対し Wick の定理を適用でき、 $\langle \Psi_0^+ | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_0^+ \rangle$ は、 $\langle \Psi_0^+ | a_j^x a_k^x | \Psi_0^+ \rangle$ 、
 $\langle \Psi_0^+ | (ia_j^y)(ia_k^y) | \Psi_0^+ \rangle$ 、 $\langle \Psi_0^+ | (ia_j^y)a_k^x | \Psi_0^+ \rangle$ の積に展開できる。そのため、これらの値を求める。(3.3.1)、(3.3.2)
より、 η_q を ξ で表すと、

$$\eta_q = \cos \phi_q \xi_q - \sin \phi_q \xi_{-q}^\dagger \quad (6.2.27)$$

となるため、

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{M}} e^{-i\pi/4} \sum_q e^{iqj} \left(\cos \phi_q \xi_q - \sin \phi_q \xi_{-q}^\dagger \right) \quad (6.2.28)$$

$$a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{M}} e^{i\pi/4} \sum_q e^{-iqj} \left(\cos \phi_q \xi_q^\dagger - \sin \phi_q \xi_{-q} \right) \quad (6.2.29)$$

となる。ただし、ここでは、 V^+ の場合を考えているため、 q は (3.2.15) の値をとる。これより、 a_j^x および、
 ia_j^y は、

$$a_j^x = \frac{1}{\sqrt{M}} \left\{ e^{i\pi/4} \sum_q e^{-iqj} \left(\cos \phi_q \xi_q^\dagger - \sin \phi_q \xi_{-q} \right) + e^{-i\pi/4} \sum_q e^{iqj} \left(\cos \phi_q \xi_q - \sin \phi_q \xi_{-q}^\dagger \right) \right\} \quad (6.2.30)$$

$$ia_j^y = \frac{1}{\sqrt{M}} \left\{ e^{i\pi/4} \sum_q e^{-iqj} \left(\cos \phi_q \xi_q^\dagger - \sin \phi_q \xi_{-q} \right) - e^{-i\pi/4} \sum_q e^{iqj} \left(\cos \phi_q \xi_q - \sin \phi_q \xi_{-q}^\dagger \right) \right\} \quad (6.2.31)$$

となる。

これに $|\Psi_0^+\rangle$ を作用させると、

$$a_j^x |\Psi_0^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \left\{ e^{i\pi/4} \sum_q e^{-iqj} \cos \phi_q |\Psi_q^+\rangle - e^{-i\pi/4} \sum_q e^{iqj} \sin \phi_q |\Psi_{-q}^+\rangle \right\} \quad (6.2.32)$$

$$ia_j^y |\Psi_0^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \left\{ e^{i\pi/4} \sum_q e^{-iqj} \cos \phi_q |\Psi_q^+\rangle + e^{-i\pi/4} \sum_q e^{iqj} \sin \phi_q |\Psi_{-q}^+\rangle \right\} \quad (6.2.33)$$

$$\langle \Psi_0^+ | a_j^x = \frac{1}{\sqrt{M}} \left\{ -e^{i\pi/4} \sum_q e^{-iqj} \sin \phi_q \langle \Psi_{-q}^+ | + e^{-i\pi/4} \sum_q e^{iqj} \cos \phi_q \langle \Psi_q^+ | \right\} \quad (6.2.34)$$

$$\langle \Psi_0^+ | ia_j^y = \frac{1}{\sqrt{M}} \left\{ -e^{i\pi/4} \sum_q e^{-iqj} \sin \phi_q \langle \Psi_{-q}^+ | - e^{-i\pi/4} \sum_q e^{iqj} \cos \phi_q \langle \Psi_q^+ | \right\} \quad (6.2.35)$$

となる。ここで、和を $q > 0$ の部分と $q < 0$ の部分に分け、 $q < 0$ の部分に対して $q \rightarrow -q$ と変換すると、 $q > 0$ の和のみで書くことができ、

$$a_j^x |\Psi_0^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{q>0} \left\{ e^{i\pi/4} e^{-iqj} \cos \phi_q |\Psi_q^+\rangle + e^{i\pi/4} e^{iqj} \cos \phi_q |\Psi_{-q}^+\rangle \right. \\ \left. - e^{-i\pi/4} e^{iqj} \sin \phi_q |\Psi_{-q}^+\rangle + e^{-i\pi/4} e^{-iqj} \sin \phi_q |\Psi_q^+\rangle \right\} \quad (6.2.36)$$

$$ia_j^y |\Psi_0^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{q>0} \left\{ e^{i\pi/4} e^{-iqj} \cos \phi_q |\Psi_q^+\rangle + e^{i\pi/4} e^{iqj} \cos \phi_q |\Psi_{-q}^+\rangle \right. \\ \left. + e^{-i\pi/4} e^{iqj} \sin \phi_q |\Psi_{-q}^+\rangle - e^{-i\pi/4} e^{-iqj} \sin \phi_q |\Psi_q^+\rangle \right\} \quad (6.2.37)$$

$$\langle \Psi_0^+ | a_j^x = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{q>0} \left\{ -e^{i\pi/4} e^{-iqj} \sin \phi_q \langle \Psi_{-q}^+ | + e^{i\pi/4} e^{iqj} \sin \phi_q \langle \Psi_q^+ | \right. \\ \left. + e^{-i\pi/4} e^{iqj} \cos \phi_q \langle \Psi_q^+ | + e^{-i\pi/4} e^{-iqj} \cos \phi_q \langle \Psi_{-q}^+ | \right\} \quad (6.2.38)$$

$$\langle \Psi_0^+ | ia_j^y = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{q>0} \left\{ -e^{i\pi/4} e^{-iqj} \sin \phi_q \langle \Psi_{-q}^+ | + e^{i\pi/4} e^{iqj} \sin \phi_q \langle \Psi_q^+ | \right. \\ \left. - e^{-i\pi/4} e^{iqj} \cos \phi_q \langle \Psi_q^+ | - e^{-i\pi/4} e^{-iqj} \cos \phi_q \langle \Psi_{-q}^+ | \right\} \quad (6.2.39)$$

となる。ただし、

$$\phi_{-q} = -\phi_q \quad (6.2.40)$$

となることを用いた。これは、(3.2.69)、(3.2.70)、(3.2.71) より、

$$A_{-q} = A_q \quad , \quad B_{-q} = B_q \quad , \quad C_{-q} = -C_q \quad (6.2.41)$$

となるので、(3.2.78) より、

$$\tan 2\phi_{-q} = \frac{2C_{-q}}{B_{-q} - A_{-q}} = -\frac{2C_q}{B_q - A_q} = -\tan 2\phi_q = \tan(-2\phi_q) \quad (6.2.42)$$

となることより導かれる。

$\langle \Psi_0^+ | i a_j^y a_k^x | \Psi_0^+ \rangle$ を計算すると、

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_0^+ | i a_j^y a_k^x | \Psi_0^+ \rangle &= \frac{1}{M} \sum_{q>0} \left\{ e^{iq(j-k)} \left(e^{i\pi/4} \sin \phi_q - e^{-i\pi/4} \cos \phi_q \right) \left(e^{i\pi/4} \cos \phi_q + e^{-i\pi/4} \sin \phi_q \right) \right. \\
&\quad \left. + e^{-iq(j-k)} \left(-e^{i\pi/4} \sin \phi_q - e^{-i\pi/4} \cos \phi_q \right) \left(e^{i\pi/4} \cos \phi_q - e^{-i\pi/4} \sin \phi_q \right) \right\} \\
&= \frac{1}{M} \sum_{q>0} \left\{ e^{iq(j-k)} (i \sin 2\phi_q - \cos 2\phi_q) + e^{-iq(j-k)} (-i \sin 2\phi_q - \cos 2\phi_q) \right\} \\
&= \frac{1}{M} \left\{ \sum_{q>0} e^{iq(j-k)} (i \sin 2\phi_q - \cos 2\phi_q) + \sum_{q<0} e^{iq(j-k)} (i \sin 2\phi_q - \cos 2\phi_q) \right\} \\
&= \frac{1}{M} \sum_q e^{iq(j-k)} (i \sin 2\phi_q - \cos 2\phi_q) \\
&= -\frac{1}{M} \sum_q e^{iq(j-k)} e^{-i2\phi_q} \tag{6.2.43}
\end{aligned}$$

となる。また、 $\langle \Psi_0^+ | a_j^x a_k^x | \Psi_0^+ \rangle$ は、

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_0^+ | a_j^x a_k^x | \Psi_0^+ \rangle &= \frac{1}{M} \sum_{q>0} \left\{ e^{iq(j-k)} \left(e^{i\pi/4} \sin \phi_q + e^{-i\pi/4} \cos \phi_q \right) \left(e^{i\pi/4} \cos \phi_q + e^{-i\pi/4} \sin \phi_q \right) \right. \\
&\quad \left. + e^{-iq(j-k)} \left(-e^{i\pi/4} \sin \phi_q + e^{-i\pi/4} \cos \phi_q \right) \left(e^{i\pi/4} \cos \phi_q - e^{-i\pi/4} \sin \phi_q \right) \right\} \\
&= \frac{1}{M} \sum_{q>0} \left\{ e^{iq(j-k)} + e^{-iq(j-k)} \right\} \\
&= \frac{1}{M} \left\{ \sum_{q>0} e^{iq(j-k)} + \sum_{q<0} e^{iq(j-k)} \right\} \\
&= \frac{1}{M} \sum_q e^{iq(j-k)} \\
&= \delta_{j,k} \tag{6.2.44}
\end{aligned}$$

となり、 $j \neq k$ の場合 0 となる。最後に、 $\langle \Psi_0^+ | (i a_j^y) (i a_k^y) | \Psi_0^+ \rangle$ は、

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_0^+ | i a_j^y i a_k^y | \Psi_0^+ \rangle &= \frac{1}{M} \sum_{q>0} \left\{ e^{iq(j-k)} \left(e^{i\pi/4} \sin \phi_q - e^{-i\pi/4} \cos \phi_q \right) \left(e^{i\pi/4} \cos \phi_q - e^{-i\pi/4} \sin \phi_q \right) \right. \\
&\quad \left. + e^{-iq(j-k)} \left(-e^{i\pi/4} \sin \phi_q - e^{-i\pi/4} \cos \phi_q \right) \left(e^{i\pi/4} \cos \phi_q + e^{-i\pi/4} \sin \phi_q \right) \right\} \\
&= -\frac{1}{M} \sum_{q>0} \left\{ e^{iq(j-k)} + e^{-iq(j-k)} \right\} \\
&= -\frac{1}{M} \left\{ \sum_{q>0} e^{iq(j-k)} + \sum_{q<0} e^{iq(j-k)} \right\} \\
&= -\frac{1}{M} \sum_q e^{iq(j-k)} \\
&= -\delta_{j,k} \tag{6.2.45}
\end{aligned}$$

となり、 $j \neq k$ の場合 0 となる。

これより、

$$\begin{aligned} c_{j,k} &\equiv \langle \Psi_0^+ | i a_j^y a_{k+1}^x | \Psi_0^+ \rangle \\ &= -\frac{1}{M} \sum_q e^{iq(j-k)} e^{-i2\phi_q} e^{-iq} \end{aligned} \quad (6.2.46)$$

とおくと、Wick の定理より、

$$\langle \Psi_0^+ | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_0^+ \rangle = \sum_p \delta_p c_{m,P_m} c_{m+1,P_{m+1}} \cdots c_{m'-1,P_{m'-1}} \quad (6.2.47)$$

となる。この右辺は行列式であり、書き方を変更すると、

$$\langle \Psi_0^+ | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_0^+ \rangle = \begin{vmatrix} c_{m,m} & c_{m,m+1} & \cdots & c_{m,m'-1} \\ c_{m+1,m} & c_{m+1,m+1} & \cdots & c_{m+1,m'-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{m'-1,m} & c_{m'-1,m+1} & \cdots & c_{m'-1,m'-1} \end{vmatrix} \quad (6.2.48)$$

となる。

次に、 $c_{j,k}$ に含まれる $e^{-i2\phi_q}$ について考える。これは、(3.2.78) を用いて求めることができる。実際、

$$\begin{aligned} \tan 2\phi_q &= \frac{2C_q}{B_q - A_q} \\ \frac{1 - e^{-i4\phi_q}}{1 + e^{-i4\phi_q}} &= \frac{2iC_q}{B_q - A_q} \\ (B_q - A_q + 2iC_q)e^{-i4\phi_q} &= B_q - A_q - 2iC_q \\ e^{-i4\phi_q} &= \frac{B_q - A_q - 2iC_q}{B_q - A_q + 2iC_q} \end{aligned} \quad (6.2.49)$$

となる。これより、

$$\begin{aligned} e^{-i2\phi_q} &= \pm \sqrt{\frac{B_q - A_q - 2iC_q}{B_q - A_q + 2iC_q}} \\ &= \pm \sqrt{\frac{(B_q - A_q - 2iC_q)^2}{(B_q - A_q + 2iC_q)(B_q - A_q - 2iC_q)}} \\ &= \pm \frac{-(B_q - A_q - 2iC_q)}{\sqrt{(B_q - A_q + 2iC_q)(B_q - A_q - 2iC_q)}} \end{aligned} \quad (6.2.50)$$

となる。まず、 $B_q - A_q$ の値を求めると、

$$\begin{aligned} B_q - A_q &= e^{-2K_1^*} (\sinh K_2 \sin q)^2 + e^{2K_1^*} (\cosh K_2 - \sinh K_2 \cos q)^2 \\ &\quad - e^{-2K_1^*} (\cosh K_2 + \sinh K_2 \cos q)^2 - e^{2K_1^*} (\sinh K_2 \sin q)^2 \\ &= (e^{2K_1^*} - e^{-2K_1^*}) (\cosh^2 K_2 + \sinh^2 K_2 \cos^2 q - \sinh K_2 \sin^2 q) \\ &\quad - 2 (e^{2K_1^*} + e^{-2K_1^*}) \cosh K_2 \sinh K_2 \cos q \\ &= 2 \sinh 2K_1^* (\cosh^2 K_2 + \sinh^2 K_2 \cos 2q) - 2 \cosh 2K_1^* \sinh 2K_2 \cos q \end{aligned} \quad (6.2.51)$$

となる。これより、 $B_q - A_q - 2iC_q$ は、

$$\begin{aligned}
B_q - A_q - 2iC_q &= 2 \sinh 2K_1^* (\cosh^2 K_2 + \sinh^2 K_2 \cos 2q) - 2 \cosh 2K_1^* \sinh 2K_2 \cos q \\
&\quad - 2i(2 \sinh K_2 \sin q)(\cosh 2K_1^* \cosh K_2 - \sinh 2K_1^* \sinh K_2 \cos q) \\
&= 2 \sinh 2K_1^* \cosh^2 K_2 - 2 \cosh 2K_1^* \sinh 2K_2 (\cos q + i \sin q) + 2 \sinh 2K_1^* \sinh^2 K_2 (\cos 2q + i \sin 2q) \\
&= 2 \sinh 2K_1^* \cosh^2 K_2 - 2 \cosh 2K_1^* \sinh 2K_2 e^{iq} + 2 \sinh 2K_1^* \sinh^2 K_2 e^{i2q} \quad (6.2.52)
\end{aligned}$$

となる。ここで、(3.3.41)、(3.3.42) および、

$$\cosh^2 K_2 = \frac{1}{1 - z_2^2} \quad (6.2.53)$$

$$\sinh^2 K_2 = \cosh^2 K_2 - 1 = \frac{1}{1 - z_2^2} - 1 = \frac{z_2^2}{1 - z_2^2} \quad (6.2.54)$$

$$\sinh 2K_2 = 2 \sinh K_2 \cosh K_2 = 2 \tanh K_2 \cosh^2 K_2 = \frac{2z_2}{1 - z_2^2} \quad (6.2.55)$$

より、

$$\begin{aligned}
B_q - A_q - 2iC_q &= \frac{1}{z_1} (1 - z_1^2) \frac{1}{1 - z_2^2} - \frac{1}{z_1} (1 + z_1^2) \frac{2z_2}{1 - z_2^2} e^{iq} + \frac{1}{z_1} (1 - z_1^2) \frac{z_2^2}{1 - z_2^2} e^{i2q} \\
&= \frac{1}{z_1(1 - z_2^2)} \{ (1 - z_1^2) - 2z_2(1 + z_1^2)e^{iq} + z_2^2(1 - z_1^2)e^{i2q} \} \quad (6.2.56)
\end{aligned}$$

となる。同様に、 $B_q - A_q + 2iC_q$ は、

$$\begin{aligned}
B_q - A_q + 2iC_q &= 2 \sinh 2K_1^* (\cosh^2 K_2 + \sinh^2 K_2 \cos 2q) - 2 \cosh 2K_1^* \sinh 2K_2 \cos q \\
&\quad + 2i(2 \sinh K_2 \sin q)(\cosh 2K_1^* \cosh K_2 - \sinh 2K_1^* \sinh K_2 \cos q) \\
&= 2 \sinh 2K_1^* \cosh^2 K_2 - 2 \cosh 2K_1^* \sinh 2K_2 (\cos q - i \sin q) + 2 \sinh 2K_1^* \sinh^2 K_2 (\cos 2q - i \sin 2q) \\
&= 2 \sinh 2K_1^* \cosh^2 K_2 - 2 \cosh 2K_1^* \sinh 2K_2 e^{-iq} + 2 \sinh 2K_1^* \sinh^2 K_2 e^{-i2q} \quad (6.2.57)
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{z_1(1 - z_2^2)} \{ (1 - z_1^2) - 2z_2(1 + z_1^2)e^{-iq} + z_2^2(1 - z_1^2)e^{-i2q} \} \quad (6.2.58)$$

となる。また、

$$\begin{aligned}
&(B_q - A_q + 2iC_q)(B_q - A_q - 2iC_q) \\
&= \frac{1}{z_1^2(1 - z_2^2)^2} \{ (1 - z_1^2) - 2z_2(1 + z_1^2)e^{-iq} + z_2^2(1 - z_1^2)e^{-i2q} \} \\
&\quad \times \{ (1 - z_1^2) - 2z_2(1 + z_1^2)e^{iq} + z_2^2(1 - z_1^2)e^{i2q} \} \\
&= \frac{1}{z_1^2(1 - z_2^2)^2} \{ z_2^2(1 - z_1^2)^2 (e^{i2q} + e^{-i2q}) - 2z_2(1 + z_2^2)(1 + z_1^2)(1 - z_1^2) (e^{iq} + e^{-iq}) \\
&\quad + (1 - z_1^2)^2 + 4z_2^2(1 + z_1^2)^2 + z_2^4(1 - z_1^2)^2 \} \quad (6.2.59)
\end{aligned}$$

となる。ここで、

$$e^{i2q} + e^{-i2q} = 2(2 \cos^2 q - 1) = 4 \cos^2 q - 2 \quad (6.2.60)$$

および、

$$\begin{aligned}
&(1 - z_1^2)^2 + 4z_2^2(1 + z_1^2)^2 + z_2^4(1 - z_1^2)^2 - 2z_2^2(1 - z_1^2)^2 \\
&= 4z_2^2(1 + z_1^2)^2 + (1 - z_2^2)^2(1 - z_1^2)^2 \\
&= (1 + z_1^2)^2(1 + z_2^2)^2 - 4z_1^2(1 - z_2^2)^2 \quad (6.2.61)
\end{aligned}$$

を用いると、

$$\begin{aligned}
& (B_q - A_q + 2iC_q)(B_q - A_q - 2iC_q) \\
&= \frac{1}{z_1^2(1-z_2^2)^2} \{4z_2^2(1-z_1^2)^2 \cos^2 q \\
&\quad - 4z_2(1+z_2^2)(1+z_1^2)(1-z_1^2) \cos q + (1+z_1^2)^2(1+z_2^2)^2 - 4z_1^2(1-z_2^2)^2\} \\
&= \frac{1}{z_1^2(1-z_2^2)^2} \{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2) \cos q - 2z_1(1-z_2^2)^2\} \\
&\quad \times \{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2) \cos q + 2z_1(1-z_2^2)^2\} \tag{6.2.62}
\end{aligned}$$

となる。よって、

$$e^{-i2\phi_q} = \pm \frac{-(1-z_1^2) + 2z_2(1+z_1^2)e^{iq} - z_2^2(1-z_1^2)e^{i2q}}{\sqrt{\{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2) \cos q - 2z_1(1-z_2^2)^2\} \{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2) \cos q + 2z_1(1-z_2^2)^2\}}} \tag{6.2.63}$$

となる。

したがって、

$$\begin{aligned}
c_{j,k} &= \pm \frac{1}{M} \sum_q e^{iq(j-k)} \\
&\times \frac{2z_2(1+z_1^2) - z_2^2(1-z_1^2)e^{iq} - (1-z_1^2)e^{-iq}}{\sqrt{\{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2) \cos q - 2z_1(1-z_2^2)^2\} \{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_2(1-z_1^2) \cos q + 2z_1(1-z_2^2)^2\}}} \tag{6.2.64}
\end{aligned}$$

となる。ここで、(5.3.33) の表記を用いると、

$$c_{j,k} = \pm \frac{1}{M} \sum_q e^{iq(j-k)} C(e^{iq}) \tag{6.2.65}$$

となる。 $M \rightarrow \infty$ の極限をとると、和を積分に置き換えることができ、

$$\lim_{M \rightarrow \infty} c_{j,k} = \pm \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{iq(j-k)} C(e^{iq}) \tag{6.2.66}$$

となる。ここで、 $c_{j,k}$ は j, k に独立に依存せず $k-j \equiv r$ に依存するので、

$$\lim_{M \rightarrow \infty} c_{j,k} \equiv c_r = \pm \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-irq} C(e^{iq}) \tag{6.2.67}$$

となる。この正負は相関関数が正になるように定める必要があり、正をとる必要がある。

よって、

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \langle \Psi_0^+ | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_0^+ \rangle = \begin{vmatrix} c_0 & c_1 & \cdots & c_{m'-m-1} \\ c_{-1} & c_0 & \cdots & c_{m'-m-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{m-m'+1} & c_{m-m'+2} & \cdots & c_0 \end{vmatrix} \tag{6.2.68}$$

となり、各成分 c_r は、

$$c_r = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-irq} C(e^{iq}) \tag{6.2.69}$$

となる。

・ $\langle \Psi_{q=0}^- | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_{q=0}^- \rangle$ の値

ここでも Wick の定理を用いたが、この場合の期待値は真空期待値ではなく $q = 0$ の粒子が 1 つ存在する状態に対する期待値である。そのため、Wick の定理をそのまま用いることはできないが、Fermi 粒子であるため $q = 0$ の粒子の生成消滅演算子の扱いに注意すれば、Wick の定理と同様の関係を示すことができる。つまり、 $\langle \Psi_0^+ | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_0^+ \rangle$ を求めた際と同様に、 $\langle \Psi_{q=0}^- | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_{q=0}^- \rangle$ は $\langle \Psi_{q=0}^- | a_j^x a_k^x | \Psi_{q=0}^- \rangle$ 、 $\langle \Psi_{q=0}^- | (ia_j^y)(ia_k^y) | \Psi_{q=0}^- \rangle$ 、 $\langle \Psi_{q=0}^- | (ia_j^y)a_k^x | \Psi_{q=0}^- \rangle$ の積に展開できる。そのため、これらの値を求める。ただし、 q は (3.2.17) をとる。このため、

$$a_j^x | \Psi_{q=0}^- \rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \left\{ e^{i\pi/4} \sum_{q \neq 0, \pi} e^{-iqj} \cos \phi_q | \Psi_{q,0}^- \rangle - e^{-i\pi/4} \sum_{q \neq 0, \pi} e^{iqj} \sin \phi_q | \Psi_{-q,0}^- \rangle + e^{-i\pi/4} | \Psi_0^- \rangle + e^{i\pi/4} e^{-i\pi j} | \Psi_{\pi,0}^- \rangle \right\} \quad (6.2.70)$$

$$ia_j^y | \Psi_{q=0}^- \rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \left\{ e^{i\pi/4} \sum_{q \neq 0, \pi} e^{-iqj} \cos \phi_q | \Psi_{q,0}^- \rangle + e^{-i\pi/4} \sum_{q \neq 0, \pi} e^{iqj} \sin \phi_q | \Psi_{-q,0}^- \rangle - e^{-i\pi/4} | \Psi_0^- \rangle + e^{i\pi/4} e^{-i\pi j} | \Psi_{\pi,0}^- \rangle \right\} \quad (6.2.71)$$

$$\langle \Psi_{q=0}^- | a_j^x = \frac{1}{\sqrt{M}} \left\{ -e^{i\pi/4} \sum_{q \neq 0, \pi} e^{-iqj} \sin \phi_q \langle \Psi_{-q,0}^- | + e^{-i\pi/4} \sum_{q \neq 0, \pi} e^{iqj} \cos \phi_q \langle \Psi_{q,0}^- | + e^{i\pi/4} \langle \Psi_0^- | + e^{-i\pi/4} e^{i\pi j} \langle \Psi_{\pi,0}^- | \right\} \quad (6.2.72)$$

$$\langle \Psi_{q=0}^- | ia_j^y = \frac{1}{\sqrt{M}} \left\{ -e^{i\pi/4} \sum_{q \neq 0, \pi} e^{-iqj} \sin \phi_q \langle \Psi_{-q,0}^- | - e^{-i\pi/4} \sum_{q \neq 0, \pi} e^{iqj} \cos \phi_q \langle \Psi_{q,0}^- | + e^{i\pi/4} \langle \Psi_0^- | - e^{-i\pi/4} e^{i\pi j} \langle \Psi_{\pi,0}^- | \right\} \quad (6.2.73)$$

となる。ただし、 $| \Psi_{q,0}^- \rangle$ は ξ_q 粒子が 1 つと ξ_0 粒子が 1 つ存在する状態であり、 $| \Psi_{-q,0}^- \rangle$ は ξ_{-q} 粒子が 1 つと ξ_0 粒子が 1 つ存在する状態である。また、 $| \Psi_0^- \rangle$ は真空状態である。ここで、(3.2.78) を用いると、

$$\tan 2\phi_0 = 0 \quad \rightarrow \quad \phi_0 = 0 \quad (6.2.74)$$

$$\tan 2\phi_\pi = 0 \quad \rightarrow \quad \phi_\pi = 0 \quad (6.2.75)$$

となることを用いた。ここで、 $q \neq 0, \pi$ の部分においては $\langle \Psi_0^+ | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_0^+ \rangle$ を求めた際と同様に和を $q > 0$ の部分と $q < 0$ の部分に分け、 $q < 0$ の部分に対して $q \rightarrow -q$ と変換すると、 $q > 0$ の和のみで書くことができ、

$$a_j^x | \Psi_{q=0}^- \rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \left\{ \sum_{q > 0, q \neq 0, \pi} \left(e^{i\pi/4} e^{-iqj} \cos \phi_q | \Psi_{q,0}^- \rangle + e^{i\pi/4} e^{iqj} \cos \phi_q | \Psi_{-q,0}^- \rangle \right) \right. \\ \left. - e^{-i\pi/4} e^{iqj} \sin \phi_q | \Psi_{-q,0}^- \rangle + e^{-i\pi/4} e^{-iqj} \sin \phi_q | \Psi_{q,0}^- \rangle \right) \\ \left. + e^{-i\pi/4} | \Psi_0^- \rangle + e^{i\pi/4} e^{-i\pi j} | \Psi_{\pi,0}^- \rangle \right\} \quad (6.2.76)$$

$$\begin{aligned}
ia_j^y |\Psi_{q=0}^- \rangle &= \frac{1}{\sqrt{M}} \left\{ \sum_{q>0, q \neq 0, \pi} \left(e^{i\pi/4} e^{-iqj} \cos \phi_q |\Psi_{q,0}^- \rangle + e^{i\pi/4} e^{iqj} \cos \phi_q |\Psi_{-q,0}^- \rangle \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + e^{-i\pi/4} e^{iqj} \sin \phi_q |\Psi_{-q,0}^- \rangle - e^{-i\pi/4} e^{-iqj} \sin \phi_q |\Psi_{q,0}^- \rangle \right) \right. \\
&\quad \left. - e^{-i\pi/4} |\Psi_0^- \rangle + e^{i\pi/4} e^{-i\pi j} |\Psi_{\pi,0}^- \rangle \right\} \tag{6.2.77}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_{q=0}^- | a_j^x &= \frac{1}{\sqrt{M}} \left\{ \sum_{q>0, q \neq 0, \pi} \left(-e^{i\pi/4} e^{-iqj} \sin \phi_q \langle \Psi_{-q,0}^- | + e^{i\pi/4} e^{iqj} \sin \phi_q \langle \Psi_{q,0}^- | \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + e^{-i\pi/4} e^{iqj} \cos \phi_q \langle \Psi_{q,0}^- | + e^{-i\pi/4} e^{-iqj} \cos \phi_q \langle \Psi_{-q,0}^- | \right) \right. \\
&\quad \left. + e^{i\pi/4} \langle \Psi_0^- | + e^{-i\pi/4} e^{i\pi j} \langle \Psi_{\pi,0}^- | \right\} \tag{6.2.78}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_{q=0}^- | ia_j^y &= \frac{1}{\sqrt{M}} \left\{ \sum_{q>0, q \neq 0, \pi} \left(-e^{i\pi/4} e^{-iqj} \sin \phi_q \langle \Psi_{-q,0}^- | + e^{i\pi/4} e^{iqj} \sin \phi_q \langle \Psi_{q,0}^- | \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - e^{-i\pi/4} e^{iqj} \cos \phi_q \langle \Psi_{q,0}^- | - e^{-i\pi/4} e^{-iqj} \cos \phi_q \langle \Psi_{-q,0}^- | \right) \right. \\
&\quad \left. + e^{i\pi/4} \langle \Psi_0^- | - e^{-i\pi/4} e^{i\pi j} \langle \Psi_{\pi,0}^- | \right\} \tag{6.2.79}
\end{aligned}$$

となる。

$q \neq 0, \pi$ の部分においては $\langle \Psi_0^+ | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_0^+ \rangle$ を求めた際と同様に計算すると、 $\langle \Psi_{q=0}^- | (ia_j^y) a_k^x | \Psi_{q=0}^- \rangle$ は、

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_{q=0}^- | (ia_j^y) a_k^x | \Psi_{q=0}^- \rangle &= \frac{1}{M} \left\{ - \sum_{q \neq 0, \pi} e^{iq(j-k)} e^{-i2\phi_q} + 1 - e^{i\pi(j-k)} \right\} \\
&= \frac{1}{M} \left\{ - \sum_{q \neq 0, \pi} e^{iq(j-k)} e^{-i2\phi_q} + e^{-i2\phi_0} - e^{i\pi(j-k)} e^{-i2\phi_\pi} \right\} \\
&= \frac{1}{M} \left\{ - \sum_q e^{iq(j-k)} e^{-i2\phi_q} + 2e^{-i2\phi_0} \right\} \tag{6.2.80}
\end{aligned}$$

となる。ただし、 $e^{-i2\phi_0} = e^{-i2\phi_\pi} = 1$ となることを用いた。また、 $\langle \Psi_{q=0}^- | a_j^x a_k^x | \Psi_{q=0}^- \rangle$ は、

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_{q=0}^- | a_j^x a_k^x | \Psi_{q=0}^- \rangle &= \frac{1}{M} \left\{ \sum_{q \neq 0, \pi} e^{iq(j-k)} + 1 + e^{i\pi(j-k)} \right\} \\
&= \frac{1}{M} \sum_q e^{iq(j-k)} \\
&= \delta_{j,k} \tag{6.2.81}
\end{aligned}$$

となり、 $j \neq k$ の場合 0 となる。

最後に、 $\langle \Psi_{q=0}^- | (ia_j^y)(ia_k^y) | \Psi_{q=0}^- \rangle$ は、

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{q=0}^- | (ia_j^y)(ia_k^y) | \Psi_{q=0}^- \rangle &= \frac{1}{M} \left\{ - \sum_{q \neq 0, \pi} e^{iq(j-k)} - 1 - e^{i\pi(j-k)} \right\} \\ &= -\frac{1}{M} \sum_q e^{iq(j-k)} \\ &= -\delta_{j,k} \end{aligned} \quad (6.2.82)$$

となり、 $j \neq k$ の場合 0 となる。

これより、

$$\begin{aligned} c_{j,k} &\equiv \langle \Psi_{q=0}^- | (ia_j^y) a_{k+1}^x | \Psi_{q=0}^- \rangle \\ &= \frac{1}{M} \left\{ - \sum_q e^{iq(j-k)} e^{-i2\phi_q} e^{-iq} + 2e^{-i2\phi_0} \right\} \end{aligned} \quad (6.2.83)$$

とおくと $\langle \Psi_0^+ | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_0^+ \rangle$ のときと同様に、

$$\langle \Psi_{q=0}^- | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_{q=0}^- \rangle = \sum_p c_{m,p_m} c_{m+1,p_{m+1}} \cdots c_{m'-1,p_{m'-1}} \quad (6.2.84)$$

となる。(6.2.83) の第 1 項は (6.2.63) を用いて、

$$c_{j,k} = \frac{1}{M} \left\{ \pm \sum_q e^{iq(j-k)} C(e^{iq}) + 2e^{-i2\phi_0} \right\} \quad (6.2.85)$$

となる。 $M \rightarrow \infty$ の極限をとると、和を積分に置き換えることができ、

$$\lim_{M \rightarrow \infty} c_{j,k} = \pm \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{iq(j-k)} C(e^{iq}) \quad (6.2.86)$$

となる。ここで、 $c_{j,k}$ は j, k に独立に依存せず $k - j \equiv r$ に依存するので、

$$\lim_{M \rightarrow \infty} c_{j,k} \equiv c_r = \pm \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-irq} C(e^{iq}) \quad (6.2.87)$$

となる。この正負は相関関数が正になるように定める必要があり、正をとる必要がある。

よって、

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \langle \Psi_{q=0}^- | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_{q=0}^- \rangle = \begin{vmatrix} c_0 & c_1 & \cdots & c_{m'-m-1} \\ c_{-1} & c_0 & \cdots & c_{m'-m-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{m-m'+1} & c_{m-m'+2} & \cdots & c_0 \end{vmatrix} \quad (6.2.88)$$

となり、各成分 c_r は、

$$c_r = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-irq} C(e^{iq}) \quad (6.2.89)$$

となる。

したがって、

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \langle \Psi_0^+ | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_0^+ \rangle = \lim_{M \rightarrow \infty} \langle \Psi_{q=0}^- | \sigma_m^x \sigma_{m'}^x | \Psi_{q=0}^- \rangle \quad (6.2.90)$$

となることがわかる。これより、 $\langle \sigma_{n,m} \sigma_{n,m'} \rangle$ は、転移温度 T_c 以上でも以下でも同様の表記で表すことができ、

$$\langle \sigma_{n,m} \sigma_{n,m'} \rangle = \begin{vmatrix} c_0 & c_1 & \cdots & c_{m'-m-1} \\ c_{-1} & c_0 & \cdots & c_{m'-m-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{m-m'+1} & c_{m-m'+2} & \cdots & c_0 \end{vmatrix} \quad (6.2.91)$$

となり、各成分 c_r は、

$$c_r = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-irq} C(e^{iq}) \quad (6.2.92)$$

となる。ただし、 $(m, m') = (1, 1+m)$ 、 $q \rightarrow \theta$ とすれば、6.1.4 節の結果と完全に一致する。

7 自発磁化

第6章で求めた相関関数を用いて自発磁化を求める。自発磁化を求める際、無限次元の Toeplitz 行列式を解く必要がある。この性質を表す定理が Szegő の定理である。まず 7.1 節では、Szegő の定理を導くために必要な Wiener-Hopf Sum Equations の性質 [8, ppt.203–215] について議論する。また 7.2 節では、Szegő の定理 [8, ppt.218–244] を導く。最後に 7.3 節では、Szegő の定理を用いて自発磁化 [13] を求め温度依存性を議論する。

7.1 Wiener-Hopf Sum Equations

Wiener-Hopf Sum Equations は、

$$\sum_{m=0}^{\infty} c_{n-m} x_m = y_n \quad (n \geq 0) \quad (7.1.1)$$

という方程式で与えられる。ただし、 c_{n-m} 、 y_n は既知であり、 x_m は未知である。また、 c_{n-m} は $n-m$ のみに依存し、 n 、 m に独立には依存しない。ここでは、

$$\sum_{n=0}^{\infty} |y_n| < \infty \quad (7.1.2)$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_{n-m}| < \infty \quad (7.1.3)$$

となる場合を考えることとする。また、興味のある解 x_n は、

$$\sum_{n=0}^{\infty} |x_n| < \infty \quad (7.1.4)$$

となるものである。ここで、

$$y_n = 0 \quad (n < 0) \quad (7.1.5)$$

とし、新しく v_n を、

$$v_n = 0 \quad (n \geq 0) \quad (7.1.6)$$

$$v_n = \sum_{m=0}^{\infty} c_{n-m} x_m \quad (n < 0) \quad (7.1.7)$$

と定義する。このとき、

$$\sum_{n=-\infty}^{-1} |v_n| = \sum_{n=-\infty}^{-1} \left| \sum_{m=0}^{\infty} c_{n-m} x_m \right| < \sum_{n=-\infty}^{-1} |c_n| \sum_{m=0}^{\infty} |x_m| < \infty \quad (7.1.8)$$

となる。この v_n を用いると、

$$\sum_{m=0}^{\infty} c_{n-m} x_m = y_n + v_n \quad (-\infty < n < \infty) \quad (7.1.9)$$

とすべての n で成立する方程式に拡張することができる。この式に対する x_m を決めれば、(7.1.1) を満たす x_m を求めることができる。

このとき、 x_n 、 y_n 、 v_n 、 c_n をフーリエ係数として、

$$X(e^{i\theta}) = \sum_{n=0}^{\infty} x_n e^{in\theta} \quad (7.1.10)$$

$$Y(e^{i\theta}) = \sum_{n=0}^{\infty} y_n e^{in\theta} \quad (7.1.11)$$

$$V(e^{i\theta}) = \sum_{n=-\infty}^{-1} v_n e^{in\theta} \quad (7.1.12)$$

$$C(e^{i\theta}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\theta} \quad (7.1.13)$$

と定義すると、このいずれも収束する。ここで、一般化して考えるために、

$$\xi \equiv e^{i\theta} \quad |\xi| = 1 \quad (7.1.14)$$

とおくと、

$$X(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} x_n \xi^n \quad (7.1.15)$$

$$Y(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} y_n \xi^n \quad (7.1.16)$$

$$V(\xi) = \sum_{n=-\infty}^{-1} v_n \xi^n \quad (7.1.17)$$

$$C(\xi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \xi^n \quad (7.1.18)$$

となる。ここで、(7.1.9) に ξ^n をかけ $n(-\infty < n < \infty)$ で和をとると、左辺は、

$$\begin{aligned} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} c_{n-m} x_m \xi^n &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} c_{n-m} x_m \xi^m \xi^{n-m} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} x_m \xi^m \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_{n-m} \xi^{n-m} \\ &= X(\xi)C(\xi) \end{aligned} \quad (7.1.19)$$

となり、右辺は、

$$\begin{aligned} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (y_n + v_n) \xi^n &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} y_n \xi^n + \sum_{n=-\infty}^{\infty} v_n \xi^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} y_n \xi^n + \sum_{n=-\infty}^{-1} v_n \xi^n \\ &= Y(\xi) + V(\xi) \end{aligned} \quad (7.1.20)$$

となるので、(7.1.9) は、

$$X(\xi)C(\xi) = Y(\xi) + V(\xi) \quad (7.1.21)$$

となる。

次に、+ 関数、- 関数を導入する。

- + 関数： $|\xi| < 1$ で正則、 $|\xi| \leq 1$ で連続
+ 関数 $A(\xi)$ は、

$$A(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n \quad (7.1.22)$$

で定義される。ただし、

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n < \infty \quad (7.1.23)$$

である。

- - 関数： $|\xi| > 1$ で正則、 $|\xi| \geq 1$ で連続
- 関数 $A(\xi)$ は、

$$A(\xi) = \sum_{n=-\infty}^{-1} a_n \xi^n \quad (7.1.24)$$

で定義される。ただし、

$$\sum_{n=-\infty}^{-1} a_n < \infty \quad (7.1.25)$$

である。

ここでは、 a_0 (定数) 項を + 関数に入れて定義した。そのため、- 関数には a_0 (定数) 項は存在していない。これより、 $X(\xi)$ 、 $Y(\xi)$ は + 関数、 $V(\xi)$ は - 関数である。また、 $|\xi| = 1$ のとき、

$$A(\xi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \xi^n \quad \sum_{n=-\infty}^{\infty} |a_n| < \infty \quad (7.1.26)$$

と展開される場合、 $[A(\xi)]_+$ を $A(\xi)$ の + 関数の部分、 $[A(\xi)]_-$ を $A(\xi)$ の - 関数の部分とすると、

$$[A(\xi)]_+ = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n \quad (|\xi| \leq 1) \quad (7.1.27)$$

$$[A(\xi)]_- = \sum_{n=-\infty}^{-1} a_n \xi^n \quad (|\xi| \geq 1) \quad (7.1.28)$$

となる。これより、 $|\xi| = 1$ のとき、

$$\begin{aligned} A(\xi) &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n + \sum_{n=-\infty}^{-1} a_n \xi^n \\ &= [A(\xi)]_+ + [A(\xi)]_- \end{aligned} \quad (7.1.29)$$

となる。次に、

$$f(\xi')_+ \equiv \frac{[F(\xi')]_+}{\xi' - \xi} \quad (7.1.30)$$

および、

$$f(\xi')_- \equiv \frac{[F(\xi')]_-}{\xi' - \xi} \quad (7.1.31)$$

という複素関数について考える。

1. $f(\xi')_+$ について

$[F(\xi')]_+$ は $|\xi'| < 1$ で正則であるから、 $|\xi'| = 1$ の単位円の内側で正則である。つまり、図 169 の斜線部分で正則である。

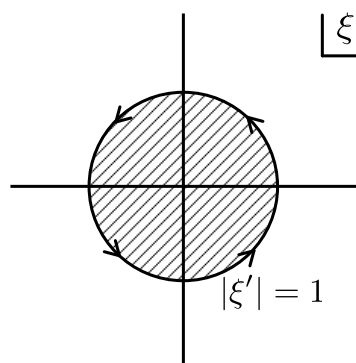


図 169 $f(\xi')_+$ の積分経路

(a) $|\xi| > 1$ のとき

ξ は単位円 $|\xi'| = 1$ の外側であるため、単位円 $|\xi'| = 1$ を 1 周する閉じた経路に対して $f(\xi')_+$ は極を持たない。すなわち、コーシーの積分定理により、

$$0 = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\xi'|=1} d\xi' \frac{[F(\xi')]_+}{\xi' - \xi} \quad (7.1.32)$$

となる。

(b) $|\xi| < 1$ のとき

ξ は単位円 $|\xi'| = 1$ の内側であるため、単位円 $|\xi'| = 1$ を 1 周する閉じた経路に対して $f(\xi')_+$ は $\xi' = \xi$ において 1 位の極を持つ。すなわち、コーシーの積分公式により、

$$[F(\xi)]_+ = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\xi'|=1} d\xi' \frac{[F(\xi')]_+}{\xi' - \xi} \quad (7.1.33)$$

となる。

2. $f(\xi')_-$ について

$[F(\xi')]_-$ は $|\xi'| > 1$ で正則であるから、 $|\xi'| = 1$ の単位円の外側で正則である。つまり、図 170 の斜線部分で正則である。ここで、単位円 $|\xi'| = 1$ を 1 周する閉じた経路を c 、その外側を 1 周する閉じた

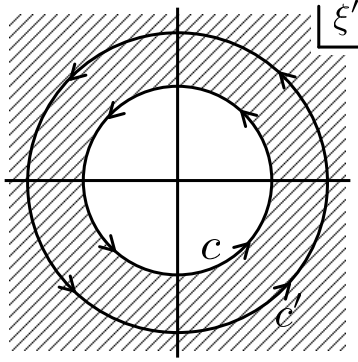


図 170 $f(\xi')_+$ の積分経路 c, c'

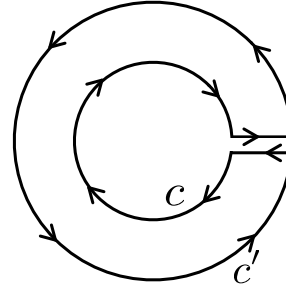


図 171 積分経路 c''

経路を c' とする。このとき、経路 c, c' に囲まれた領域を 1 周する経路を c'' とする。 $f(\xi')_-$ を経路 c'' (図 171) で積分すると、

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{c''} d\xi' \frac{[F(\xi')]_-}{\xi' - \xi} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{c'} d\xi' \frac{[F(\xi')]_-}{\xi' - \xi} - \frac{1}{2\pi i} \oint_c d\xi' \frac{[F(\xi')]_-}{\xi' - \xi} \quad (7.1.34)$$

となる。ここで、 c' を無限大の円にとると、

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{c'} d\xi' \frac{[F(\xi')]_-}{\xi' - \xi} \rightarrow 0 \quad (7.1.35)$$

となるため、

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{c''} d\xi' \frac{[F(\xi')]_-}{\xi' - \xi} = -\frac{1}{2\pi i} \oint_c d\xi' \frac{[F(\xi')]_-}{\xi' - \xi} \quad (7.1.36)$$

となる。

(a) $|\xi| > 1$ のとき

ξ は単位円 $|\xi'| = 1$ の外側であるため、 ξ は経路 c'' の内部に含まれ $f(\xi')_-$ は $\xi' = \xi$ で極を持つ。すなわち、コーシーの積分公式により、

$$[F(\xi)]_- = \frac{1}{2\pi i} \oint_{c''} d\xi' \frac{[F(\xi')]_-}{\xi' - \xi} = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{|\xi'|=1} d\xi' \frac{[F(\xi')]_-}{\xi' - \xi} \quad (7.1.37)$$

となる。

(b) $|\xi| < 1$ のとき

ξ は単位円 $|\xi'| = 1$ の内側であるため、 ξ は経路 c'' の外部であり $f(\xi')_-$ は極を持たない。すなわち、コーシーの積分定理により、

$$0 = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\xi'|=1} d\xi' \frac{[F(\xi')]_-}{\xi' - \xi} \quad (7.1.38)$$

となる。

まず、 $|\xi| > 1$ のとき、(7.1.32) と (7.1.37) を足すことにより、

$$[F(\xi)]_- = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{|\xi'|=1} d\xi' \frac{F(\xi')}{\xi' - \xi} \quad (7.1.39)$$

となる。また、 $|\xi| < 1$ のとき、(7.1.33) と (7.1.38) を足すことにより、

$$[F(\xi)]_+ = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\xi'|=1} d\xi' \frac{F(\xi')}{\xi' - \xi} \quad (7.1.40)$$

となる。

次に、 $C(\xi)$ を、

$$C(\xi) = P(\xi)^{-1} Q(\xi^{-1})^{-1} \quad (7.1.41)$$

とおくこととする。ただし、 $P(\xi)$ 、 $Q(\xi)$ はともに + 関数であり、

$$P(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n \xi^n \quad \sum_{n=0}^{\infty} |p_n| < \infty \quad (7.1.42)$$

$$Q(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} q_n \xi^n \quad \sum_{n=0}^{\infty} |q_n| < \infty \quad (7.1.43)$$

と展開できる。これより、

$$Q(\xi^{-1}) = \sum_{n=0}^{\infty} q_n \xi^{-n} = \sum_{n=-\infty}^{-1} q_{-n} \xi^n + q_0 \quad (7.1.44)$$

となり、 $Q(\xi^{-1})$ は - 関数と q_0 (定数) の和となる。よって、(7.1.41) は $C(\xi)$ を + 関数と - 関数の積に展開した形となっている。ただし、

$$Q(0) = q_0 \quad (7.1.45)$$

となる。ここで、 $G_+(\xi)$ 、 $G_-(\xi)$ を、

$$P(\xi) \equiv e^{G_+(\xi)} \quad (7.1.46)$$

$$Q(\xi^{-1}) \equiv e^{G_-(\xi)} \quad (7.1.47)$$

とおく。(7.1.46) の左辺が + 関数であることより $G_+(\xi)$ は + 関数であることは明らかである。 $G_-(\xi)$ が - 関数であるとする、(7.1.47) において - 関数が $\xi \rightarrow \infty$ の極限で 0 となる性質を用いると、

$$q_0 = e^0 = 1 \quad (7.1.48)$$

となる。このように q_0 をおけば $G_-(\xi)$ は - 関数であることが分かる。ここで、

〈Wiener-Lévy の定理〉: $C(\xi)$ が単位円 $|\xi| = 1$ 上で 0 でなければ $\ln C(e^{i\theta})$ は $0 < \theta < 2\pi$ で連続となる。このとき、

$$\ln C(e^{2\pi i}) = \ln C(e^{0i}) \quad (7.1.49)$$

とカットがなければ、 $\ln C(\xi)$ はローラン級数に展開できる。

が成立する。すなわち、

$$\ln C(\xi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n \xi^n \quad (|\xi| = 1) \quad (7.1.50)$$

と展開することができる。 $[\ln C(\xi)]_+$ を $\ln C(\xi)$ の + 関数の部分、 $[\ln C(\xi)]_-$ を $\ln C(\xi)$ の - 関数の部分とすると、

$$[\ln C(\xi)]_+ = \sum_{n=0}^{\infty} g_n \xi^n \quad (|\xi| \leq 1) \quad (7.1.51)$$

$$[\ln C(\xi)]_- = \sum_{n=-\infty}^{-1} g_n \xi^n \quad (|\xi| \geq 1) \quad (7.1.52)$$

となる。これより、 $|\xi| = 1$ のとき、

$$\ln C(\xi) = [\ln C(\xi)]_+ + [\ln C(\xi)]_- \quad (7.1.53)$$

となる。ここで、(7.1.41) より、

$$\begin{aligned} \ln C(\xi) &= \ln P(\xi)^{-1} Q(\xi^{-1})^{-1} \\ &= -\ln P(\xi) - \ln Q(\xi^{-1}) \end{aligned} \quad (7.1.54)$$

となるから、

$$\ln P(\xi) = G_+(\xi) = -[\ln C(\xi)]_+ \quad (7.1.55)$$

$$\ln Q(\xi^{-1}) = G_-(\xi) = -[\ln C(\xi)]_- \quad (7.1.56)$$

となる。また、(7.1.39)、(7.1.40) を用いると、

$$G_+(\xi) = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{|\xi'|=1} d\xi' \frac{\ln C(\xi')}{\xi' - \xi} \quad |\xi| < 1 \quad (7.1.57)$$

$$G_-(\xi) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\xi'|=1} d\xi' \frac{\ln C(\xi')}{\xi' - \xi} \quad |\xi| > 1 \quad (7.1.58)$$

となる。

次に、

$$C(\xi) = e^{-G_+(\xi)} e^{-G_-(\xi)} \quad (|\xi| = 1) \quad (7.1.59)$$

であるから、(7.1.21) に代入すると、

$$e^{-G_+(\xi)} X(\xi) = e^{G_-(\xi)} Y(\xi) + e^{G_-(\xi)} V(\xi) \quad (7.1.60)$$

となる。 $e^{-G_+(\xi)} X(\xi)$ は $e^{-G_+(\xi)}$ 、 $X(\xi)$ がともに + 関数であるから + 関数である。また、 $e^{G_-(\xi)} V(\xi)$ は $e^{G_-(\xi)}$ 、 $V(\xi)$ が - 関数であるから - 関数である。最後に、 $e^{G_-(\xi)} Y(\xi)$ は $e^{G_-(\xi)}$ が - 関数、 $Y(\xi)$ が + 関数であるから + 関数でも - 関数でもない。よって、 $e^{G_-(\xi)} Y(\xi)$ は + 関数、- 関数にわけ、

$$e^{G_-(\xi)} Y(\xi) = [e^{G_-(\xi)} Y(\xi)]_+ + [e^{G_-(\xi)} Y(\xi)]_- \quad (7.1.61)$$

とする。これより、(7.1.60) は、

$$e^{-G_+(\xi)} X(\xi) - [e^{G_-(\xi)} Y(\xi)]_+ = e^{G_-(\xi)} V(\xi) + [e^{G_-(\xi)} Y(\xi)]_- \quad (7.1.62)$$

となる。この左辺は + 関数、右辺は - 関数である。ここで、

$$e^{-G_+(\xi)} X(\xi) - [e^{G_-(\xi)} Y(\xi)]_+ = E(\xi) \quad (|\xi| \leq 1) \quad (7.1.63)$$

$$e^{G_-(\xi)} V(\xi) + [e^{G_-(\xi)} Y(\xi)]_- = E(\xi) \quad (|\xi| \geq 1) \quad (7.1.64)$$

とおく。(7.1.63) より $E(\xi)$ は $|\xi| < 1$ で正則である必要があり、 $E(\xi)$ は + 関数である必要がある。このため、

$$E(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} e_n \xi^n \quad , \quad \sum_{n=0}^{\infty} |e_n| < \infty \quad (7.1.65)$$

と展開することができる。これを (7.1.64) に代入し成立するためには、 $E(\xi)$ は $|\xi| > 1$ で正則である必要があり、 $E(\xi)$ は - 関数である必要がある。ここで、- 関数では $n = 0$ の定数項がないため、すべての n において、

$$e_n = 0 \quad (7.1.66)$$

となっている必要がある。よって、すべての ξ に対して、

$$E(\xi) = 0 \quad (7.1.67)$$

となっている必要があるため、

$$e^{-G+(\xi)} X(\xi) - [e^{G-(\xi)} Y(\xi)]_+ = 0 \quad (|\xi| \leq 1) \quad (7.1.68)$$

$$e^{G-(\xi)} V(\xi) + [e^{G-(\xi)} Y(\xi)]_- = 0 \quad (|\xi| \geq 1) \quad (7.1.69)$$

となる。したがって、 $X(\xi)$ は、

$$X(\xi) = e^{G+(\xi)} [e^{G-(\xi)} Y(\xi)]_+ \quad (|\xi| \leq 1) \quad (7.1.70)$$

となる。

ここで、

$$\oint_{|\xi|=1} \xi^{-n-1} \xi^m d\xi = \oint_{|\xi|=1} \frac{1}{\xi^{n-m+1}} d\xi \quad (7.1.71)$$

という積分について考える。

- $n - m + 1 > 1$ ($n > m$) のとき

$\xi = 0$ で $n - m + 1$ 位の極を持つ。 $\xi = 0$ での留数は、

$$\text{Res}[0] = \frac{1}{(n-m)!} \lim_{\xi \rightarrow 0} \frac{d^{n-m}}{d\xi^{n-m}} \xi^{n-m+1} \frac{1}{\xi^{n-m+1}} = 0 \quad (7.1.72)$$

となるので、

$$\oint_{|\xi|=1} \frac{1}{\xi^{n-m+1}} d\xi = 0 \quad (7.1.73)$$

となる。

- $n - m + 1 = 1$ ($n = m$) のとき

$\xi = 0$ で 1 位の極を持つ。 $\xi = 0$ での留数は、

$$\text{Res}[0] = \lim_{\xi \rightarrow 0} \xi \frac{1}{\xi} = 1 \quad (7.1.74)$$

となるので、

$$\oint_{|\xi|=1} \frac{1}{\xi^{n-m+1}} d\xi = 2\pi i \quad (7.1.75)$$

となる。

- $n - m + 1 < 1$ ($n < m$) のとき
極はないので、

$$\oint_{|\xi|=1} \frac{1}{\xi^{n-m+1}} d\xi = 0 \quad (7.1.76)$$

となる。

これより、

$$\oint_{|\xi|=1} \frac{1}{\xi^{n-m+1}} d\xi = 2\pi i \delta_{n,m} \quad (7.1.77)$$

となる。

よって、

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\xi|=1} d\xi \xi^{-n-1} X(\xi) &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\xi|=1} d\xi \xi^{-n-1} \sum_{m=0}^{\infty} x_m \xi^m \\ &= \frac{1}{2\pi i} \sum_{m=0}^{\infty} x_m \oint_{|\xi|=1} \frac{1}{\xi^{n-m+1}} d\xi \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} x_m \delta_{n,m} \\ &= x_n \quad (n \geq 0) \end{aligned} \quad (7.1.78)$$

となるので、

$$x_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\xi|=1} d\xi \xi^{-n-1} e^{G_+(\xi)} [e^{G_-(\xi)} Y(\xi)]_+ \quad (|\xi| \leq 1) \quad (7.1.79)$$

となる。これが、Wiener-Hopf Sum Equations の解である。

7.2 Szegő の定理

D_N を $N \times N$ の Toeplitz 行列式とする。すなわち、

$$D_N = \begin{vmatrix} c_0 & c_{-1} & c_{-2} & \cdots & c_{-N+1} \\ c_1 & c_0 & c_{-1} & \cdots & c_{-N+2} \\ c_2 & c_1 & c_0 & \cdots & c_{-N+3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{N-1} & c_{N-2} & c_{N-3} & \cdots & c_0 \end{vmatrix} \quad (7.2.1)$$

である。ただし、 c_n は、

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-in\theta} C(e^{i\theta}) \quad (7.2.2)$$

である。ここで、もう1つ $N \times N$ の Toeplitz 行列式 \bar{D}_N を導入する。すなわち、

$$\bar{D}_N = \begin{vmatrix} \bar{c}_0 & \bar{c}_{-1} & \bar{c}_{-2} & \cdots & \bar{c}_{-N+1} \\ \bar{c}_1 & \bar{c}_0 & \bar{c}_{-1} & \cdots & \bar{c}_{-N+2} \\ \bar{c}_2 & \bar{c}_1 & \bar{c}_0 & \cdots & \bar{c}_{-N+3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{c}_{N-1} & \bar{c}_{N-2} & \bar{c}_{N-3} & \cdots & \bar{c}_0 \end{vmatrix} \quad (7.2.3)$$

である。ただし、 c_n は、(7.2.2) と同様に定義すると、

$$\bar{c}_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-in\theta} \bar{C}(e^{i\theta}) \quad (7.2.4)$$

である。このとき、 \bar{C} は、

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\theta \ln \bar{C}(e^{i\theta}) = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \ln C(e^{i\theta}) \quad (7.2.5)$$

を満たすこととする。このとき、 D_N/\bar{D}_N の N が大きいところでの振る舞いを調べる。

まず、(7.2.5) を満たすように $\bar{C}(e^{i\theta})$ を、

$$\bar{C}(e^{i\theta}) = C(e^{i\theta})(1 - \alpha e^{-i\theta}) \quad |\alpha| < 1 \quad (7.2.6)$$

とおく。 $z = \alpha e^{-i\theta}$ とおくことにより、

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\theta \ln(1 - \alpha e^{-i\theta}) = i \oint_{|z|=\alpha} \frac{\ln(1-z)}{z} = 0 \quad (7.2.7)$$

となるため、

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \ln \bar{C}(e^{i\theta}) &= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \ln C(e^{i\theta}) + \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \ln(1 - \alpha e^{-i\theta}) \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \ln C(e^{i\theta}) \end{aligned} \quad (7.2.8)$$

となり、(7.2.5) を満たしている。

このとき、

$$\begin{aligned} \bar{c}_n &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-in\theta} C(e^{i\theta})(1 - \alpha e^{-i\theta}) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-in\theta} C(e^{i\theta}) - \frac{\alpha}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-i(n+1)\theta} C(e^{i\theta}) \\ &= c_n - \alpha c_{n+1} \end{aligned} \quad (7.2.9)$$

となるから、

$$\bar{D}_N = \begin{vmatrix} c_0 - \alpha c_1 & c_{-1} - \alpha c_0 & c_{-2} - \alpha c_{-1} & \cdots & c_{-N+1} - \alpha c_{-N+2} \\ c_1 - \alpha c_2 & c_0 - \alpha c_1 & c_{-1} - \alpha c_0 & \cdots & c_{-N+2} - \alpha c_{-N+3} \\ c_2 - \alpha c_3 & c_1 - \alpha c_2 & c_0 - \alpha c_1 & \cdots & c_{-N+3} - \alpha c_{-N+4} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{N-1} - \alpha c_N & c_{N-2} - \alpha c_{N-1} & c_{N-3} - \alpha c_{N-2} & \cdots & c_0 - \alpha c_1 \end{vmatrix} \quad (7.2.10)$$

となる。ここで、

$$\bar{D}_N = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ c_1 & c_0 - \alpha c_1 & c_{-1} - \alpha c_0 & c_{-2} - \alpha c_{-1} & \cdots & c_{-N+1} - \alpha c_{-N+2} \\ c_2 & c_1 - \alpha c_2 & c_0 - \alpha c_1 & c_{-1} - \alpha c_0 & \cdots & c_{-N+2} - \alpha c_{-N+3} \\ c_3 & c_2 - \alpha c_3 & c_1 - \alpha c_2 & c_0 - \alpha c_1 & \cdots & c_{-N+3} - \alpha c_{-N+4} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_N & c_{N-1} - \alpha c_N & c_{N-2} - \alpha c_{N-1} & c_{N-3} - \alpha c_{N-2} & \cdots & c_0 - \alpha c_1 \end{vmatrix} \quad (7.2.11)$$

と $N + 1 \times N + 1$ 行列にしても値は変わらない。ある列に他の列の何倍かを加えても、行列の値は変わらないので、

$$\bar{D}_N = \begin{vmatrix} 1 & \alpha & \alpha^2 & \alpha^3 & \cdots & \alpha^N \\ c_1 & c_0 & c_{-1} & c_{-2} & \cdots & c_{-N+1} \\ c_2 & c_1 & c_0 & c_{-1} & \cdots & c_{-N+2} \\ c_3 & c_2 & c_1 & c_0 & \cdots & c_{-N+3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ c_n & c_{N-1} & c_{N-2} & c_{N-3} & \cdots & c_0 \end{vmatrix} \equiv \det \bar{D}_N \quad (7.2.12)$$

と変形できる。ここで、 $\bar{x}_j^{(N)}$ を成分とする $N + 1$ 次元の縦ベクトル \bar{x} が、

$$\bar{D}_N \bar{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (7.2.13)$$

を満たすとする。このとき、各行に対して、

$$\sum_{m=0}^N \alpha^m \bar{x}_m^{(N)} = 1 \quad (7.2.14)$$

$$\sum_{m=0}^N c_{n-m} \bar{x}_m^{(N)} = 0 \quad (1 \leq n \leq N) \quad (7.2.15)$$

が成立している必要がある。ここで、クラームルの公式より、 $\bar{x}_0^{(N)}$ は、

$$\bar{x}_0^{(N)} = \frac{\begin{vmatrix} 1 & \alpha & \alpha^2 & \alpha^3 & \cdots & \alpha^N \\ 0 & c_0 & c_{-1} & c_{-2} & \cdots & c_{-N+1} \\ 0 & c_1 & c_0 & c_{-1} & \cdots & c_{-N+2} \\ 0 & c_2 & c_1 & c_0 & \cdots & c_{-N+3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ 0 & c_{N-1} & c_{N-2} & c_{N-3} & \cdots & c_0 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \alpha & \alpha^2 & \alpha^3 & \cdots & \alpha^N \\ c_1 & c_0 & c_{-1} & c_{-2} & \cdots & c_{-N+1} \\ c_2 & c_1 & c_0 & c_{-1} & \cdots & c_{-N+2} \\ c_3 & c_2 & c_1 & c_0 & \cdots & c_{-N+3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ c_n & c_{N-1} & c_{N-2} & c_{N-3} & \cdots & c_0 \end{vmatrix}} = \frac{D_N}{\bar{D}_N} \quad (7.2.16)$$

となる。

$N \rightarrow \infty$ の極限においても、同様の関係が成立すると考えられるので、

$$\bar{x}_0^{(\infty)} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{D_N}{\bar{D}_N} \quad (7.2.17)$$

となる。また、 $\bar{x}_j^{(\infty)}$ は、

$$\sum_{m=0}^{\infty} \alpha^m \bar{x}_m^{(\infty)} = 1 \quad (7.2.18)$$

$$\sum_{m=0}^{\infty} c_{n-m} \bar{x}_m^{(\infty)} = 0 \quad (1 \leq n) \quad (7.2.19)$$

を満たす。ここで、 $n = 0$ のとき、

$$\sum_{m=0}^{\infty} c_{-m} \bar{x}_m^{(\infty)} \equiv y_0 \quad (7.2.20)$$

と定義する。すると、この式と (7.2.19) により、

$$\sum_{m=0}^{\infty} c_{n-m} \bar{x}_m^{(\infty)} = y_0 \delta_{n,0} \quad (0 \leq n) \quad (7.2.21)$$

となり、これは Wiener-Hopf sum equation である。よって、この $\bar{x}_m^{(\infty)}$ は 7.1 節の議論を用いて決めることができる。

まず、 $Y(\xi)$ は、

$$Y(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \xi^n y_0 \delta_{n,0} = y_0 \quad (7.2.22)$$

となるため、 $\bar{X}^{(\infty)}(\xi)$ は、

$$\bar{X}^{(\infty)}(\xi) = P(\xi)[Q(\xi^{-1})y_0]_+ = y_0 P(\xi)[Q(\xi^{-1})]_+ \quad (7.2.23)$$

となる。ここで、 $Q(\xi^{-1})$ は $-$ 関数足す q_0 (定数) であるから、 $Q(\xi^{-1})$ の $+$ 関数の部分は定数項のみであり、

$$[Q(\xi^{-1})]_+ = Q(0) = q_0 = 1 \quad (7.2.24)$$

となる。よって、

$$\bar{X}^{(\infty)}(\xi) = y_0 P(\xi) \quad (7.2.25)$$

となる。ここで、

$$\bar{X}^{(\infty)}(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{x}_n^{(\infty)} \xi^n \quad (7.2.26)$$

であるから、 $\xi = \alpha$ とすると、(7.2.18) より、

$$\bar{X}^{(\infty)}(\alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{x}_n^{(\infty)} \alpha^n = 1 \quad (7.2.27)$$

となる。つまり、

$$\bar{X}^{(\infty)}(\alpha) = y_0 P(\alpha) = 1 \quad (7.2.28)$$

となる。この関係により y_0 が決まり、

$$y_0 = \frac{1}{P(\alpha)} \quad (7.2.29)$$

となる。よって、

$$\overline{X}^{(\infty)}(\xi) = \frac{P(\xi)}{P(\alpha)} \quad (7.2.30)$$

となる。これより、 $\bar{x}_0^{(\infty)}$ は、

$$\begin{aligned} \bar{x}_0^{(\infty)} &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\xi|=1} d\xi \xi^{-1} \overline{X}^{(\infty)}(\xi) \\ &= \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{P(\alpha)} \oint_{|\xi|=1} \frac{P(\xi)}{\xi} d\xi \\ &= \frac{P(0)}{P(\alpha)} \end{aligned} \quad (7.2.31)$$

となる。よって、

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{D_N}{\overline{D}_N} = \frac{P(0)}{P(\alpha)} \quad (7.2.32)$$

となる。

次に、 $\ln C(\xi)$ 、 $\ln \overline{C}(\xi)$ は、 $|\xi| = 1$ のとき、

$$\ln C(\xi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n \xi^n = \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{in\theta} \quad (7.2.33)$$

$$\ln \overline{C}(\xi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \bar{g}_n \xi^n = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \bar{g}_n e^{in\theta} \quad (7.2.34)$$

と展開することができる。このとき、 g_n は、

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-in\theta} \ln C(e^{i\theta}) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-in\theta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} g_m e^{im\theta} \\ &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} g_m \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-i(n-m)\theta} d\theta \\ &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} g_m \delta_{n,m} \\ &= g_n \end{aligned} \quad (7.2.35)$$

となる。また、同様に、 \bar{g}_n は、

$$\bar{g}_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-in\theta} \ln \overline{C}(e^{i\theta}) \quad (7.2.36)$$

となる。これより、

$$\begin{aligned} \bar{g}_n &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-in\theta} \ln C(e^{i\theta}) (1 - \alpha e^{-i\theta}) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-in\theta} \ln C(e^{i\theta}) + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-in\theta} \ln(1 - \alpha e^{-i\theta}) \\ &\equiv g_n + I \end{aligned} \quad (7.2.37)$$

となる。

積分 I で、 $\alpha e^{-i\theta} = z$ とおくと、

$$I = -\frac{1}{2\pi i} \frac{1}{\alpha^n} \oint_{|z|=\alpha} z^{n-1} \ln(1-z) dz \quad (7.2.38)$$

となる。積分 I は以下のように分類される。

- $n \geq 1$ のとき

積分経路の内部に極が存在しないため、コーシーの定理により、

$$I = 0 \quad (7.2.39)$$

となる。

- $n = 0$ のとき

$z = 0$ で 1 位の極を持つので、

$$\begin{aligned} I &= -\frac{1}{2\pi i} \frac{1}{\alpha^n} \oint_{|z|=\alpha} \frac{\ln(1-z)}{z} dz \\ &= 0 \end{aligned} \quad (7.2.40)$$

となる。

- $n \leq -1$ のとき

$z = 0$ で $1 - n$ 位の極を持つので、

$$I = -\frac{1}{2\pi i} \frac{1}{\alpha^n} \oint_{|z|=\alpha} \frac{\ln(1-z)}{z^{1-n}} dz \quad (7.2.41)$$

となる。ここで、留数は、

$$\begin{aligned} \text{Res}[0] &= \frac{1}{(-n)!} \lim_{z \rightarrow 0} \frac{d^{-n}}{dz^{-n}} z^{1-n} \frac{\ln(1-z)}{z^{1-n}} \\ &= \frac{(-n-1)!}{(-n)!} = -\frac{1}{n} \end{aligned} \quad (7.2.42)$$

となるので、

$$\begin{aligned} I &= -\frac{1}{2\pi i} \alpha^{-n} 2\pi i \left(-\frac{1}{n} \right) \\ &= \frac{\alpha^{-n}}{n} \end{aligned} \quad (7.2.43)$$

となる。

よって、まとめると、

$$\bar{g}_n = \begin{cases} g_n & (n \geq 0) \\ g_n + \frac{\alpha^{-n}}{n} & (n < 0) \end{cases} \quad (7.2.44)$$

となる。

次に、

$$\frac{P(0)}{P(\xi)} = \frac{e^{G_+(0)}}{e^{G_+(\xi)}} = \exp[G_+(0) - G_+(\xi)] \quad (7.2.45)$$

であり、

$$G_+(\xi) = -[\ln C(\xi)]_+ \quad (7.2.46)$$

であるから、

$$\frac{P(0)}{P(\xi)} = \exp\{[\ln C(\xi)]_+ - [\ln C(0)]_+\} \quad (7.2.47)$$

となる。ここで、

$$[\ln C(\xi)]_+ = \sum_{n=0}^{\infty} g_n \xi^n \quad (7.2.48)$$

$$[\ln C(0)]_+ = g_0 \quad (7.2.49)$$

となるので、

$$\frac{P(0)}{P(\xi)} = \exp\left[\sum_{n=0}^{\infty} g_n \xi^n - g_0\right] = \exp\left[\sum_{n=1}^{\infty} g_n \xi^n\right] \quad (7.2.50)$$

となる。したがって、

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{D_N}{\bar{D}_N} = \frac{P(0)}{P(\alpha)} = \exp\left[\sum_{n=1}^{\infty} g_n \alpha^n\right] \quad (7.2.51)$$

となる。(7.2.44)において、 $n \rightarrow -n$ とすると、

$$\bar{g}_{-n} = \begin{cases} g_{-n} & (n \leq 0) \\ g_{-n} - \frac{\alpha^n}{n} & (n > 0) \end{cases} \quad (7.2.52)$$

となるから、

$$\alpha^n = n(g_{-n} - \bar{g}_{-n}) \quad (n > 0) \quad (7.2.53)$$

となる。よって、

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} g_n \alpha^n &= \sum_{n=1}^{\infty} g_n n (g_{-n} - \bar{g}_{-n}) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} n (g_n g_{-n} - g_n \bar{g}_{-n}) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} n (g_n g_{-n} - \bar{g}_n \bar{g}_{-n}) \end{aligned} \quad (7.2.54)$$

となるので、

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{D_N}{\bar{D}_N} = \exp\left[\sum_{n=1}^{\infty} n (g_n g_{-n} - \bar{g}_n \bar{g}_{-n})\right] \quad (7.2.55)$$

となる。

ここで、 $\bar{C}(e^{i\theta})$ は (7.2.5) を満たすように任意に決めることができるのだから、

$$\bar{C}(e^{i\theta}) \equiv \mu \text{ (定数)} \quad (7.2.56)$$

とおく。すると、 μ は、

$$\mu = \exp \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \ln C(e^{i\theta}) \right] \quad (7.2.57)$$

となる。このとき、

$$\begin{aligned} \bar{c}_n &= \frac{1}{2\pi} \mu \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-in\theta} \\ &= \frac{1}{2\pi i} \mu \oint_{|\xi|=1} d\xi \frac{1}{\xi^{n+1}} \end{aligned} \quad (7.2.58)$$

となる。 \bar{c}_n は以下のように分類される。

- $n = 0$ のとき
 $\xi = 0$ で 1 位の極を持つから、

$$\bar{c}_0 = \mu \quad (7.2.59)$$

となる。

- $n \geq 1$ のとき
 $\xi = 0$ で 2 位以上の極を持つから、

$$\text{Res}[0] = \frac{1}{n!} \lim_{\xi \rightarrow 0} \frac{d^n}{d\xi^n} \xi^{n+1} \frac{1}{\xi^{n+1}} = 0 \quad (7.2.60)$$

となり、

$$\bar{c}_n = 0 \quad (7.2.61)$$

となる。

- $n \leq -1$ のとき
積分経路の内部に極は存在しないので、

$$\bar{c}_n = 0 \quad (7.2.62)$$

となる。

よって、

$$\bar{c}_n = \mu \delta_{n,0} \quad (7.2.63)$$

となる。よって、 \bar{D}_N は対角成分のみ μ という値を持つので、

$$\bar{D}_N = \mu^N \quad (7.2.64)$$

となる。また、

$$\begin{aligned}\bar{g}_n &= \frac{1}{2\pi} \ln \mu \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-in\theta} \\ &= \ln \mu \delta_{n,0}\end{aligned}\quad (7.2.65)$$

となる。したがって、 $n > 0$ では、 $\bar{g}_n = 0$ となり、

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{D_N}{\bar{D}_N} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{D_N}{\mu^N} = \exp \left[\sum_{n=1}^{\infty} n g_n g_{-n} \right] \quad (7.2.66)$$

となる。ただし、

$$\mu = \exp \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \ln C(e^{i\theta}) \right] \quad (7.2.67)$$

$$g_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-in\theta} \ln C(e^{i\theta}) \quad (7.2.68)$$

である。これより、Toeplitz 行列式の値を評価できる。これが Szegő の定理である。

7.3 自発磁化の表記および温度依存性

自発磁化 M は $\langle \sigma_i \rangle$ で与えられるため、相関関数を用いて、

$$M^2 = \lim_{m \rightarrow \infty} \langle \sigma_{1,1} \sigma_{1,1+m} \rangle = \lim_{m \rightarrow \infty} D_m \quad (7.3.1)$$

となる。 D_m は m 次の Toeplitz 行列式を表す。これより、無限次元の Toeplitz 行列式を評価する必要があるが、これは 7.2 節で導いた Szegő の定理により与えられる。Szegő の定理を用いて、 T_c 以下、以上の場合の自発磁化をそれぞれ評価する。

- $T < T_c$ のとき ($0 \leq \alpha_1 \leq 1, \alpha_2 < 1$)

まず、 μ を求める。 $C(e^{i\theta})$ の値を実際に代入し計算すると、

$$\begin{aligned}\ln \mu &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \ln C(e^{i\theta}) d\theta \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \ln \frac{(1 - \alpha_1 e^{i\theta})(1 - \alpha_2 e^{-i\theta})}{\sqrt{(1 - \alpha_1 e^{i\theta})(1 - \alpha_1 e^{-i\theta})(1 - \alpha_2 e^{i\theta})(1 - \alpha_2 e^{-i\theta})}} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \left[\frac{1}{2} \ln(1 - \alpha_1 e^{i\theta}) + \frac{1}{2} \ln(1 - \alpha_2 e^{-i\theta}) - \frac{1}{2} \ln(1 - \alpha_1 e^{-i\theta}) - \frac{1}{2} \ln(1 - \alpha_2 e^{i\theta}) \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \left[\frac{1}{2} \ln(1 - \alpha_1 e^{i\theta}) + \frac{1}{2} \ln(1 - \alpha_2 e^{-i\theta}) - \frac{1}{2} \ln(1 - \alpha_1 e^{i\theta}) - \frac{1}{2} \ln(1 - \alpha_2 e^{-i\theta}) \right] = 0\end{aligned}\quad (7.3.2)$$

となる。ただし、最後の变形では第 3 項、第 4 項で $\theta \rightarrow -\theta$ と変換した。これより、 μ は、

$$\mu = 1 \quad (7.3.3)$$

となる。また、この計算により g_0 も求まり、

$$g_0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \ln C(e^{i\theta}) d\theta = 0 \quad (7.3.4)$$

となる。次に g_n を求める。(7.2.68) を逆変換すると、

$$\ln C(e^{i\theta}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n e^{in\theta} = \sum_{n=1}^{\infty} (g_n e^{in\theta} + g_{-n} e^{-in\theta}) \quad (7.3.5)$$

となる。ただし、 $g_0 = 0$ となることを用いた。これより、

$$\frac{1}{2} \ln(1 - \alpha_1 e^{i\theta}) + \frac{1}{2} \ln(1 - \alpha_2 e^{-i\theta}) - \frac{1}{2} \ln(1 - \alpha_1 e^{-i\theta}) - \frac{1}{2} \ln(1 - \alpha_2 e^{i\theta}) = \sum_{n=1}^{\infty} (g_n e^{in\theta} + g_{-n} e^{-in\theta}) \quad (7.3.6)$$

となる。ここで、 $0 \leq \alpha_1 \leq 1, \alpha_2 < 1$ のとき、 $j = 1, 2$ のとき、

$$\ln(1 - \alpha_j e^{i\theta}) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} (\alpha_j e^{i\theta})^n \quad (7.3.7)$$

$$\ln(1 - \alpha_j e^{-i\theta}) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} (\alpha_j e^{-i\theta})^n \quad (7.3.8)$$

となることを用いると、

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} (\alpha_1 e^{i\theta})^n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} (\alpha_2 e^{-i\theta})^n + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} (\alpha_1 e^{-i\theta})^n + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} (\alpha_2 e^{i\theta})^n &= \sum_{n=1}^{\infty} (g_n e^{in\theta} + g_{-n} e^{-in\theta}) \\ \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{1}{2n} (\alpha_2^n - \alpha_1^n) e^{in\theta} - \frac{1}{2n} (\alpha_2^n - \alpha_1^n) e^{-in\theta} \right] &= \sum_{n=1}^{\infty} (g_n e^{in\theta} + g_{-n} e^{-in\theta}) \end{aligned} \quad (7.3.9)$$

となるため、

$$g_n = \frac{1}{2n} (\alpha_2^n - \alpha_1^n) = -g_{-n} \quad (7.3.10)$$

となる。よって、

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} n g_n g_{-n} &= - \sum_{n=1}^{\infty} n \frac{1}{4n^2} (\alpha_2^n - \alpha_1^n)^2 \\ &= -\frac{1}{4} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \alpha_2^{2n} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \alpha_1^{2n} - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \alpha_1^n \alpha_2^n \right] \\ &= \frac{1}{4} \ln(1 - \alpha_2^2) + \frac{1}{4} \ln(1 - \alpha_1^2) - \frac{1}{2} \ln(1 - \alpha_1 \alpha_2) \\ &= \ln \left[\frac{(1 - \alpha_1^2)(1 - \alpha_2^2)}{(1 - \alpha_1 \alpha_2)^2} \right]^{\frac{1}{4}} \end{aligned} \quad (7.3.11)$$

となる。したがって、

$$\lim_{m \rightarrow \infty} D_m = \left[\frac{(1 - \alpha_1^2)(1 - \alpha_2^2)}{(1 - \alpha_1 \alpha_2)^2} \right]^{\frac{1}{4}} \quad (7.3.12)$$

$$= \left[1 - \frac{(\alpha_1 - \alpha_2)^2}{(1 - \alpha_1 \alpha_2)^2} \right]^{\frac{1}{4}} \quad (7.3.13)$$

となる。ここで、

$$1 - \alpha_1 \alpha_2 = 1 - \frac{(1 - z_1)^2}{(1 + z_1)^2} = \frac{4z_1}{(1 + z_1)^2} \quad (7.3.14)$$

$$\alpha_1 - \alpha_2 = \frac{1 - z_1 - z_2^2 + z_1 z_2^2}{z_2(1 + z_1)} \quad (7.3.15)$$

となるから、

$$\begin{aligned} \frac{(\alpha_1 - \alpha_2)^2}{(1 - \alpha_1 \alpha_2)^2} &= \frac{(1 - z_1 - z_2^2 + z_1 z_2^2)^2}{z_2^2(1 + z_1)^2} \cdot \frac{(1 + z_1)^4}{16z_1^2} \\ &= \frac{(1 - z_1^2)^2(1 - z_2^2)^2}{16z_1^2 z_2^2} \end{aligned} \quad (7.3.16)$$

となる。よって、

$$\lim_{m \rightarrow \infty} D_m = \left[1 - \frac{(1 - z_1^2)^2(1 - z_2^2)^2}{16z_1^2 z_2^2} \right]^{\frac{1}{4}} \quad (7.3.17)$$

となる。

これより、自発磁化 M は、

$$M^2 = \left[1 - \frac{(1 - z_1^2)^2(1 - z_2^2)^2}{16z_1^2 z_2^2} \right]^{\frac{1}{4}} \quad (7.3.18)$$

となり、

$$|M| = \left[1 - \frac{(1 - z_1^2)^2(1 - z_2^2)^2}{16z_1^2 z_2^2} \right]^{\frac{1}{8}} \quad (7.3.19)$$

$$= \left[1 - \frac{(1 - \tanh^2 K_1)^2(1 - \tanh^2 K_2)^2}{16 \tanh^2 K_1 \tanh^2 K_2} \right]^{\frac{1}{8}} \quad (7.3.20)$$

$$= \left[1 - \frac{1}{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} \right]^{\frac{1}{8}} \quad (7.3.21)$$

となる。

- $T > T_c$ のとき ($0 \leq \alpha_1 \leq 1, \alpha_2 > 1$)

μ に関しては $T < T_c$ の場合と同様であるから、 $\mu = 1$ であり、 $g_0 = 0$ も成立する。 g_n について考える。まず、

$$\begin{aligned} \ln C(e^{i\theta}) &= \ln \frac{(1 - \alpha_1 e^{i\theta})(1 - \alpha_2 e^{-i\theta})}{\sqrt{(1 - \alpha_1 e^{i\theta})(1 - \alpha_1 e^{-i\theta})(1 - \alpha_2 e^{i\theta})(1 - \alpha_2 e^{-i\theta})}} \\ &= \ln \frac{(1 - \alpha_1 e^{i\theta})(1/\alpha_2 e^{i\theta} - 1)e^{-i\theta}}{\sqrt{(1 - \alpha_1 e^{i\theta})(1 - \alpha_1 e^{-i\theta})(1/\alpha_2 e^{-i\theta} - 1)(1/\alpha_2 e^{i\theta} - 1)}} \\ &= \frac{1}{2} \ln(1 - \alpha_1 e^{i\theta}) + \frac{1}{2} \ln(1 - 1/\alpha_2 e^{i\theta}) - \frac{1}{2} \ln(1 - \alpha_1 e^{-i\theta}) - \frac{1}{2} \ln(1 - 1/\alpha_2 e^{-i\theta}) - i\theta \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} (\alpha_1 e^{i\theta})^n - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} (1/\alpha_2 e^{i\theta})^n + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} (\alpha_1 e^{-i\theta})^n + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} (1/\alpha_2 e^{-i\theta})^n - i\theta \end{aligned} \quad (7.3.22)$$

となる。ここで、付録 J より、

$$-i\theta = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} (e^{in\theta} - e^{-in\theta}) \quad (7.3.23)$$

という関係が成立する。これより、

$$\ln C(e^{i\theta}) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{1}{2n} \{-\alpha_1^n - (1/\alpha_2)^n + 2(-1)^n\} e^{in\theta} + \frac{1}{2n} \{\alpha_1^n + (1/\alpha_2)^n - 2(-1)^n\} e^{-in\theta} \right] \quad (7.3.24)$$

となるから、

$$g_n = \frac{1}{2n} \{-\alpha_1^n - (1/\alpha_2)^n + 2(-1)^n\} = -g_n \quad (7.3.25)$$

となる。よって、

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} n g_n g_{-n} &= - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{4n} \{-\alpha_1^n - (1/\alpha_2)^n + 2(-1)^n\}^2 \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \left[-\frac{1}{n} + \frac{(-1)^n}{n} \{\alpha_1^n - (1/\alpha_2)^n\} - \frac{1}{4n} \{\alpha_1^n + (1/\alpha_2)^n\}^2 \right] \end{aligned} \quad (7.3.26)$$

となる。ここで、

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} = \infty \quad (7.3.27)$$

となるため、

$$\sum_{n=1}^{\infty} n g_n g_{-n} = -\infty \quad (7.3.28)$$

となる。したがって、自発磁化は、

$$M^2 = \lim_{m \rightarrow \infty} D_m = e^{-\infty} = 0 \quad (7.3.29)$$

となる。

したがって、自発磁化の温度依存性は以下ようになる。

・ $T < T_c$ のとき

$$|M| = \left[1 - \frac{1}{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} \right]^{\frac{1}{8}} \quad (7.3.30)$$

・ $T > T_c$ のとき

$$M = 0 \quad (7.3.31)$$

T_c 以下において T_c 近傍の振る舞いについて考える。(5.4.82) を用いると、

$$\frac{1}{\sinh^2 2K_1 \sinh^2 2K_2} \cong 1 - 2\beta_c \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) (J_1 \coth \beta_c J_1 + J_2 \coth \beta_c J_2) \quad (7.3.32)$$

となるので、

$$|M| \cong \left[2\beta_c \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) (J_1 \coth \beta_c J_1 + J_2 \coth \beta_c J_2) \right]^{\frac{1}{8}} \quad (7.3.33)$$

$$\propto \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{\frac{1}{8}} \quad (7.3.34)$$

となる。ここで、臨界指数 β は自発磁化 M に対して、

$$M \propto \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|^{\beta} \quad (7.3.35)$$

で定義される。これより、2次元 Ising モデルの臨界指数 β は、

$$\beta = \frac{1}{8} \quad (7.3.36)$$

となる。

実際に自発磁化を数値的に評価したものが図 172 となる。

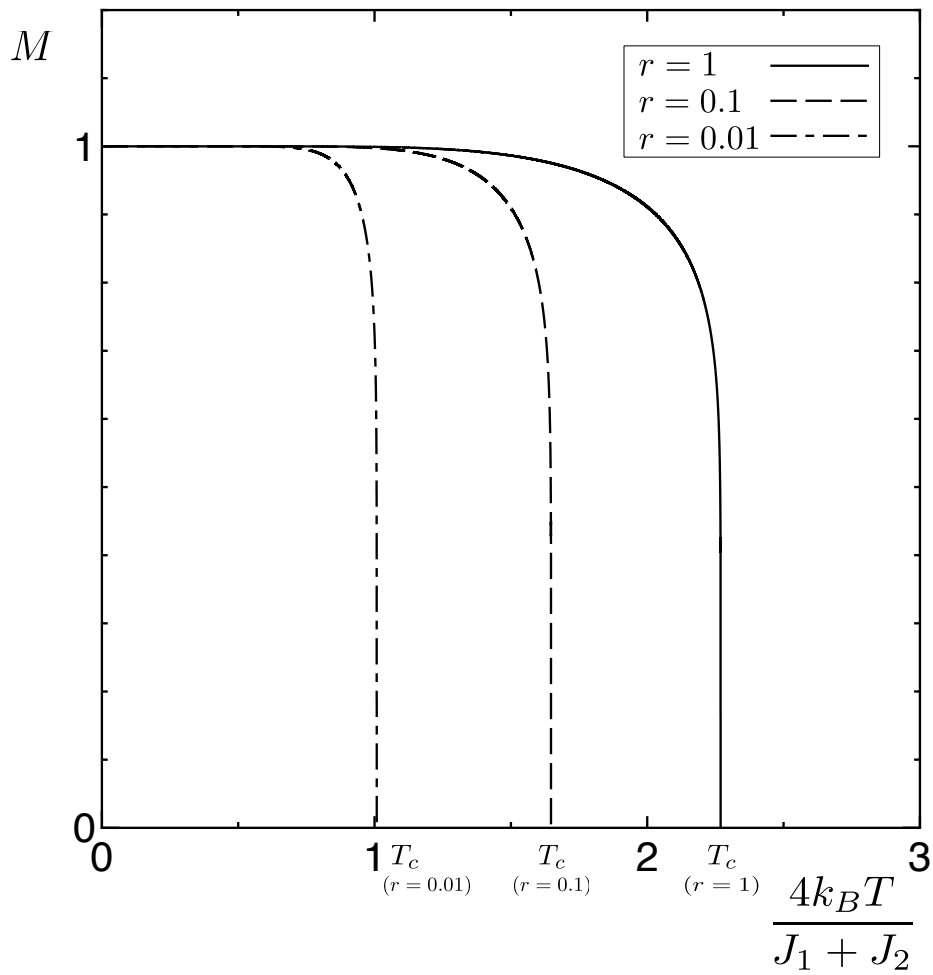


図 172 自発磁化の温度依存性

このように自発磁化は転移温度以下では有限の値を持ち、転移温度以上では0である。また、絶対0度では1の値をとる。絶対0度においてスピンのある1方向に完全にそろっていて、温度の上昇とともに徐々に逆向きのスピンが増していく。そして、転移温度となったところでスピンは上下方向に完全にランダムな方向を向く。つまり、転移温度で秩序 – 無秩序転移が起こっていることが分かる。

8 まとめと今後の展望

本論文では、強磁性体のモデルである2次元 Ising モデルの無限系について Helmholtz の自由エネルギー、内部エネルギー、比熱、相関関数、自発磁化の表式を求めた。その際、

1. 第2量子化を用いる方法
2. dimer 統計を用いる方法

の2通りの方法で行ったがどちらも全く同じ結果を示した。この2つの方法は全く異なった方法であり、同じ結果が導かれるのは非常に興味深い。

導出された結果より、内部エネルギーに発散は生じず、比熱に発散が生じたため2次元 Ising モデルの相転移は2次相転移であることが確認できた。また、横方向と縦方向で相互作用の強さが異なる場合、相互作用の比をある程度小さく (10^{-2} 程度) しても転移温度は有限の値を持ち、絶対0度 (1次元 Ising モデル) に近づきにくいことが確認された。これは相互作用が強い方向に1次元 Ising モデルの性質が現れ、全体として大きなスピンの2次元 Ising モデルの性質が生じるためであると考えられる。

また、比熱、自発磁化の表式より転移点近傍の温度依存性を示し、臨界指数を求めると、

$$\alpha = 0 \quad (\log) \quad (8.1)$$

$$\beta = \frac{1}{8} \quad (8.2)$$

となる。この臨界指数は横方向および縦方向の相互作用の強さには依存せず異方的な場合も常に一定の値をとる。これは、ユニバーサリティを反映していると考えられる。この結果から、ハイパー・スケーリング [4, pp.59-60]、

$$\alpha = 2 - d\nu \quad (8.3)$$

$$\beta = \frac{\nu(d-2+\eta)}{2} \quad (8.4)$$

$$\gamma = \nu(2-\eta) \quad (8.5)$$

$$\delta = \frac{d+2-\eta}{d-2+\eta} \quad (8.6)$$

を用いて他の臨界指数 γ 、 δ 、 ν 、 η を求めると、

$$\gamma = \frac{7}{4} \quad (8.7)$$

$$\delta = 15 \quad (8.8)$$

$$\nu = 1 \quad (8.9)$$

$$\eta = \frac{1}{4} \quad (8.10)$$

となる。ただし、 d はモデルの次元を表すので、ここでは $d = 2$ である。

また、それぞれの臨界指数の定義は、

$$C \propto \left| 1 - \frac{T_c}{T} \right|^{-\alpha} \quad (T > T_c) \quad (8.11)$$

$$M \propto \left| 1 - \frac{T_c}{T} \right|^{\beta} \quad (T < T_c) \quad (8.12)$$

$$\chi \propto \left| 1 - \frac{T_c}{T} \right|^{-\gamma} \quad (T > T_c) \quad (8.13)$$

$$M \propto |H|^{\frac{1}{\delta}} \quad (T = T_c) \quad (8.14)$$

$$\xi \propto \left| 1 - \frac{T_c}{T} \right|^{-\nu} \quad (T > T_c) \quad (8.15)$$

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle \propto r^{-d+2-\eta} \quad (T = T_c) \quad (8.16)$$

となる。ただし、 C は比熱、 M は自発磁化、 χ は磁化率、 H は磁場、 ξ は相関距離、 $\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle$ は距離 r だけ離れたスピン間の相関関数である。よって、2次元 Ising モデルの臨界指数をまとめると、表 7 となる。

表 7 2次元 Ising モデルの臨界指数

臨界指数	α	β	γ	δ	ν	η
2次元 Ising モデル	0	$\frac{1}{8}$	$\frac{7}{4}$	15	1	$\frac{1}{4}$

最後に今後の展望について述べる。今回は無限系のみ評価を行った。有限系を考えるためには Helmholtz の自由エネルギーを求める際、第 2 量子化による方法では (3.3.35) において、和を積分に変えるのではなく和をそのまま実行すればよい。また、dimer 統計を用いる方法では $6NM \times 6NM$ の行列 A_1, A_2, A_3, A_4 の行列式を実際に計算すればよい。しかし、どちらの場合も計算量が多くなる上に、このままでは解析的な表式で表すのは困難である。このため、有限系の評価を行うためには別の方法を考える必要があり、今後の課題となる。

また、本論文では 1次元、2次元 (外場なし) の Ising モデルを扱ったが、3次元 Ising モデルおよび、外場が存在する 2次元 Ising モデルの厳密解は現在までに得られていない。そのため、これらの系を扱うためには数値計算による解析を行う必要がある。これも今後の課題となる。

謝辞

指導教官の飛田和男先生には卒業研究の1年間大変お世話になりました。講義、輪講では物性物理学、統計物理学の興味を膨らませていただきました。また、本論文の作成にあたっては多くの助言、ご指導をしていただき、完成に至ることができました。ありがとうございます。

また、吉永尚孝先生をはじめとする吉永研究室のメンバーの皆様には公私共々大変お世話になりました。物理学科の諸先生方には、講義を通して物理の楽しさ、難解さを教えていただきました。諸先生方にはこの場を借りて感謝いたします。

最後に、飛田研究室同期の松本茂紀君には、討論や輪講の準備など一緒に充実した日々を過ごせたこと、感謝します。

付録 A $\exp[a\sigma^i] = I \cosh a + \sigma^i \sinh a$ の証明

A は直交行列 U により対角化されるとすると、

$$U^{-1} \exp[A]U = \exp[U^{-1}AU] \quad (\text{付録 A.1})$$

という関係が成立することを示す。

証明) $\exp[A]$ は、

$$\exp[A] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n \quad (\text{付録 A.2})$$

と展開できる。これより、

$$\begin{aligned} U^{-1} \exp[A]U &= U^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n U \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} U^{-1} A^n U \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} U^{-1} \overbrace{AA \cdots A}^n U \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} U^{-1} AUU^{-1} AUU^{-1} A \cdots AUU^{-1} AU \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (U^{-1}AU)^n \\ &= \exp[U^{-1}AU] \end{aligned} \quad (\text{付録 A.3})$$

となる。(証明終)

この関係を用いて σ^x 、 σ^y 、 σ^z のそれぞれの場合について考える。

- $\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ の場合

固有値は ± 1 であるから、それぞれの規格化された固有空間は、

$$W(1; \sigma^x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{付録 A.4})$$

$$W(-1; \sigma^x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (\text{付録 A.5})$$

となる。これより、直交行列 U およびその逆行列 U^{-1} は、

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{付録 A.6})$$

$$U^{-1} = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} \quad (\text{付録 A.7})$$

となる。つまり、 σ^x を対角化すると、

$$\begin{aligned} U^{-1}\sigma^xU &= \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{付録 A.8})$$

となる。したがって、(付録 A.1) 式を用いると、

$$\exp[a\sigma^x] = U \exp[U^{-1}a\sigma^xU] U^{-1} \quad (\text{付録 A.9})$$

$$\begin{aligned} &= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^a & 0 \\ 0 & e^{-a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cosh a & \sinh a \\ \sinh a & \cosh a \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{付録 A.10})$$

$$= I \cosh a + \sigma^x \sinh a \quad (\text{付録 A.11})$$

となり、 σ^x は与式を満たしていることがわかる。

- $\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ の場合

固有値は ± 1 であるから、それぞれの規格化された固有空間は、

$$W(1; \sigma^y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \quad (\text{付録 A.12})$$

$$W(-1; \sigma^y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad (\text{付録 A.13})$$

となる。これより、直交行列 U およびその逆行列 U^{-1} は、

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix} \quad (\text{付録 A.14})$$

$$U^{-1} = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 1/2 & i/2 \\ 1/2 & -i/2 \end{pmatrix} \quad (\text{付録 A.15})$$

と表せる。つまり、 σ^y を対角化すると、

$$\begin{aligned} U^{-1}\sigma^yU &= \begin{pmatrix} 1/2 & i/2 \\ 1/2 & -i/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{付録 A.16})$$

となる。したがって、(付録 A.1) 式を用いると、

$$\exp[a\sigma^y] = U \exp[U^{-1}a\sigma^yU] U^{-1} \quad (\text{付録 A.17})$$

$$\begin{aligned} &= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^a & 0 \\ 0 & e^{-a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & i/2 \\ 1/2 & -i/2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cosh a & -i \sinh a \\ i \sinh a & \cosh a \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{付録 A.18})$$

$$= I \cosh a + \sigma^y \sinh a \quad (\text{付録 A.19})$$

となり、 σ^y は与式を満たしていることがわかる。

- $\sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ の場合
 σ^z は既に対角行列であるから、

$$\begin{aligned} \exp[a\sigma^z] &= \begin{pmatrix} e^a & 0 \\ 0 & e^{-a} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cosh a + \sinh a & 0 \\ 0 & \cosh a - \sinh a \end{pmatrix} \\ &= I \cosh a + \sigma^z \sinh a \end{aligned} \tag{付録 A.20}$$

となり、 σ^z は与式を満たしていることがわかる。

したがって、 $i = x, y, z$ において、

$$\exp[a\sigma^i] = I \cosh a + \sigma^i \sinh a \tag{付録 A.21}$$

$$= \cosh a (I + \sigma^i \tanh a) \tag{付録 A.22}$$

が成立していることがわかる。

また、この関係は $\exp[a\sigma^i]$ を単にテイラー展開することによっても示すことができる。実際にテイラー展開すると、

$$\begin{aligned} \exp[a\sigma^i] &= 1 + a\sigma^i + \frac{a^2}{2!}(\sigma^i)^2 + \frac{a^3}{3!}(\sigma^i)^3 + \cdots \\ &= I(1 + \frac{a^2}{2!} + \cdots) + \sigma^i(a + \frac{a^3}{3!} + \cdots) \\ &= I \cosh a + \sigma^i \sinh a \end{aligned} \tag{付録 A.23}$$

となる。ただし、 $(\sigma^i)^2 = I$ となることを用いた。

付録 B $e^{i\pi S^+ S^-} = e^{i\pi \sigma^+ \sigma^-} = -2S^z$ の証明

まず、 $\hbar = 1$ とする単位系においてスピン 1/2 のスピン演算子は、

$$S^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{付録 B.1}$$

$$S^y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{付録 B.2}$$

$$S^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{付録 B.3}$$

である。これより、昇降演算子 S^\pm は、

$$S^+ = S^x + iS^y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{付録 B.4}$$

$$S^- = S^x - iS^y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{付録 B.5}$$

となる。つまり、

$$S^+S^- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{付録 B.6})$$

となるため、

$$e^{i\pi S^+S^-} = \begin{pmatrix} e^{i\pi} & 0 \\ 0 & e^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = -2S^z \quad (\text{付録 B.7})$$

となる。

また、

$$\sigma^\pm = \frac{1}{2}(\sigma^x \pm i\sigma^y) = S^x \pm iS^y = S^\pm \quad (\text{付録 B.8})$$

であるから、

$$e^{i\pi\sigma^+\sigma^-} = -2S^z \quad (\text{付録 B.9})$$

となることもわかる。

付録 C スピン演算子の性質

スピン 1/2 の昇降演算子 S_j^\pm は、

$$[S_j^\pm, S_{j'}^\pm] = 0 \quad (j \neq j') \quad (\text{付録 C.1})$$

$$\{S_j^+, S_j^-\}_+ = 1 \quad (\text{付録 C.2})$$

$$(S_j^+)^2 = (S_j^-)^2 = 0 \quad (\text{付録 C.3})$$

を満たすことが知られている。ここで、

$$a_j \equiv (-2)^{j-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^- \quad (\text{付録 C.4})$$

$$a_j^\dagger \equiv (-2)^{j-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^+ \quad (\text{付録 C.5})$$

と定義される演算子について考えることとする。これは (付録 B.9) より、

$$a_j = \exp\left(i\pi \sum_{i=1}^{j-1} \sigma_i^+ \sigma_i^-\right) \sigma_j^- \quad (\text{付録 C.6})$$

$$a_j^\dagger = \exp\left(i\pi \sum_{i=1}^{j-1} \sigma_i^+ \sigma_i^-\right) \sigma_j^+ \quad (\text{付録 C.7})$$

と書くこともできる。これより、 a_j 、 a_j^\dagger の性質は、

$$\{a_j, a_{j'}^\dagger\}_+ = \delta_{jj'} \quad (\text{付録 C.8})$$

$$\{a_j, a_{j'}\}_+ = \{a_j^\dagger, a_{j'}^\dagger\}_+ = 0 \quad (\text{付録 C.9})$$

となる。これについて証明する。

証明) S^x 、 S^y 、 S^z はスピンが 1/2 のスピン演算子であるから、

$$\{S_j^x, S_j^y\}_+ = \{S_j^y, S_j^x\}_+ = \{S_j^z, S_j^x\}_+ = 0 \quad (\text{付録 C.10})$$

という関係が成立している。これより、

$$\begin{aligned}\{S_j^z, S_j^+\}_+ &= \{S_j^z, S_j^x + iS_j^y\}_+ \\ &= \{S_j^z, S_j^x\}_+ + i\{S_j^z, S_j^y\}_+ \\ &= 0\end{aligned}\tag{付録 C.11}$$

$$\begin{aligned}\{S_j^z, S_j^-\}_+ &= \{S_j^z, S_j^x - iS_j^y\}_+ \\ &= \{S_j^z, S_j^x\}_+ - i\{S_j^z, S_j^y\}_+ \\ &= 0\end{aligned}\tag{付録 C.12}$$

となる。

まず、(付録 C.8) について考えることとする。 $j = j'$ の場合は、

$$\begin{aligned}\{a_j, a_j^\dagger\}_+ &= \{(-2)^{j-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^-, (-2)^{j-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^+\}_+ \\ &= (-2)^{2(j-1)} (S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^- S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^+ + S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^+ S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^-) \\ &= (-2)^{2(j-1)} (S_1^z)^2 (S_2^z)^2 \cdots (S_{j-1}^z)^2 (S_j^- S_j^+ + S_j^+ S_j^-) \\ &= \{S_j^+, S_j^-\}_+ \\ &= 1\end{aligned}\tag{付録 C.13}$$

となる。また、 $j \neq j' (j > j')$ の場合は、

$$\begin{aligned}\{a_j, a_{j'}^\dagger\}_+ &= \left\{ (-2)^{j-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^-, (-2)^{j'-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j'-1}^z S_{j'}^+ \right\}_+ \\ &= (-2)^{j+j'-2} (S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^- S_1^z S_2^z \cdots S_{j'-1}^z S_{j'}^+ + S_1^z S_2^z \cdots S_{j'-1}^z S_{j'}^+ S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^-) \\ &= (-2)^{j-j'} (S_{j'}^z S_{j'+1}^z \cdots S_{j-1}^z S_j^+ S_{j'}^+ + S_{j'}^+ S_{j'}^z S_{j'+1}^z \cdots S_{j-1}^z S_j^-) \\ &= (-2)^{j-j'} \{S_{j'}^z, S_{j'}^+\}_+ S_{j'+1}^z \cdots S_{j-1}^z S_j^- \\ &= 0\end{aligned}\tag{付録 C.14}$$

となる。 $j \neq j' (j < j')$ の場合も同様に示すことができるので (付録 C.8) は示すことができた。

次に、(付録 C.9) について考えることとする。 $j = j'$ の場合は、

$$\begin{aligned}\{a_j, a_j\}_+ &= \{(-2)^{j-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^-, (-2)^{j-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^-\}_+ \\ &= 2(S_j^-)^2 \\ &= 0\end{aligned}\tag{付録 C.15}$$

$$\begin{aligned}\{a_j^\dagger, a_j^\dagger\}_+ &= \{(-2)^{j-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^+, (-2)^{j-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^+\}_+ \\ &= 2(S_j^+)^2 \\ &= 0\end{aligned}\tag{付録 C.16}$$

となる。

また、 $j \neq j' (j > j')$ の場合は、

$$\begin{aligned} \{a_j, a_{j'}\}_+ &= \left\{ (-2)^{j-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^-, (-2)^{j'-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j'-1}^z S_{j'}^- \right\}_+ \\ &= (-2)^{j-j'} \{S_{j'}^z, S_j^-\}_+ S_{j'+1}^z \cdots S_{j-1}^z S_j^- \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{付録 C.17})$$

$$\begin{aligned} \{a_j^\dagger, a_{j'}^\dagger\}_+ &= \left\{ (-2)^{j-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^+, (-2)^{j'-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j'-1}^z S_{j'}^+ \right\}_+ \\ &= (-2)^{j-j'} \{S_{j'}^z, S_j^+\}_+ S_{j'+1}^z \cdots S_{j-1}^z S_j^+ \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{付録 C.18})$$

となる。 $j \neq j' (j < j')$ の場合も同様に示すことができるので (付録 C.9) は示すことができる。(証明終)

これより、 a_j^\dagger, a_j はフェルミ粒子の生成、消滅演算子となっていることがわかり、(付録 C.4)、(付録 C.5) または (付録 C.6)、(付録 C.7) とおくことによりスピン 1/2 のスピン演算子がフェルミ演算子に変換される。これを Jordan-Wigner 変換という。

ここで、 $a_j^\dagger a_j$ の値は、

$$\begin{aligned} a_j^\dagger a_j &= (-2)^{2(j-1)} S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^+ S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z S_j^- \\ &= (-2)^{2(j-1)} (S_1^z)^2 (S_2^z)^2 \cdots (S_{j-1}^z)^2 S_j^+ S_j^- \\ &= S_j^+ S_j^- \equiv n_j \end{aligned} \quad (\text{付録 C.19})$$

となる。ただし、 $(S_j^z)^2 = 1/4$ となることを利用した。ここで、

$$S_j^+ S_j^- = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{付録 C.20})$$

であるから、 $S_j^+ S_j^-$ の固有値は 0 または 1 である。したがって、 $n_j = a_j^\dagger a_j$ も 0 または 1 の値をとる。ここで、(付録 C.4)、(付録 C.5) に $S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z$ を演算すると、

$$S_j^- = (-2)^{j-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z a_j \quad (\text{付録 C.21})$$

$$S_j^+ = (-2)^{j-1} S_1^z S_2^z \cdots S_{j-1}^z a_j^\dagger \quad (\text{付録 C.22})$$

となり、 S_j^z は、

$$\begin{aligned} S_j^z &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= S_j^+ S_j^- - \frac{1}{2} \\ &= n_j - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (\text{付録 C.23})$$

となるから、

$$\begin{aligned} S_j^- &= (-2)^{j-1} \left(n_1 - \frac{1}{2}\right) \left(n_2 - \frac{1}{2}\right) \cdots \left(n_{j-1} - \frac{1}{2}\right) a_j \\ &= (1 - 2n_1)(1 - 2n_2) \cdots (1 - 2n_{j-1}) a_j \end{aligned} \quad (\text{付録 C.24})$$

$$\begin{aligned} S_j^+ &= (-2)^{j-1} \left(n_1 - \frac{1}{2}\right) \left(n_2 - \frac{1}{2}\right) \cdots \left(n_{j-1} - \frac{1}{2}\right) a_j^\dagger \\ &= (1 - 2n_1)(1 - 2n_2) \cdots (1 - 2n_{j-1}) a_j^\dagger \end{aligned} \quad (\text{付録 C.25})$$

となる。ただし、 $n_j = 0, 1$ であるから、

$$(1 - 2n_j)^2 = 1 \quad (\text{付録 C.26})$$

となる。

次に境界条件について考えることとする。まず、(付録 C.8)、(付録 C.9) より、

$$a_j a_j^\dagger + a_j^\dagger a_j = 1 \quad (\text{付録 C.27})$$

$$(a_j)^2 = a_j a_j = 0 \quad (\text{付録 C.28})$$

$$(a_j^\dagger)^2 = a_j^\dagger a_j^\dagger = 0 \quad (\text{付録 C.29})$$

である。これより、 $j \neq N$ のとき、

$$\begin{aligned} S_j^+ S_{j+1}^- &= a_j^\dagger (1 - 2n_j) a_{j+1} \\ &= a_j^\dagger a_{j+1} - 2a_j^\dagger a_j^\dagger a_j a_{j+1} \\ &= a_j^\dagger a_{j+1} \end{aligned} \quad (\text{付録 C.30})$$

$$\begin{aligned} S_j^- S_{j+1}^+ &= a_j (1 - 2n_j) a_{j+1}^\dagger \\ &= a_j a_{j+1}^\dagger - 2a_j a_j^\dagger a_j a_{j+1}^\dagger \\ &= a_j a_{j+1}^\dagger - 2(1 - a_j^\dagger a_j) a_j a_{j+1}^\dagger \\ &= -a_j a_{j+1}^\dagger + 2a_j^\dagger a_j a_j a_{j+1}^\dagger \\ &= -a_j a_{j+1}^\dagger = a_{j+1}^\dagger a_j \end{aligned} \quad (\text{付録 C.31})$$

$$\begin{aligned} S_j^+ S_{j+1}^+ &= a_j (1 - 2n_j) a_{j+1} \\ &= a_j a_{j+1} - 2a_j a_j^\dagger a_j a_{j+1} \\ &= a_j a_{j+1} - 2a_j (1 - a_j a_j^\dagger) a_{j+1} \\ &= -a_j a_{j+1} = a_{j+1} a_j \end{aligned} \quad (\text{付録 C.32})$$

$$\begin{aligned} S_j^- S_{j+1}^- &= a_j^\dagger (1 - 2n_j) a_{j+1}^\dagger \\ &= a_j^\dagger a_{j+1}^\dagger - 2a_j^\dagger a_j^\dagger a_j a_{j+1}^\dagger \\ &= a_j^\dagger a_{j+1}^\dagger \end{aligned} \quad (\text{付録 C.33})$$

となる。また、

$$S_j^x = \frac{1}{2} (S_j^+ + S_j^-) \quad (\text{付録 C.34})$$

$$S_j^y = \frac{1}{2i} (S_j^+ - S_j^-) \quad (\text{付録 C.35})$$

であるから、(付録 C.30) ~ (付録 C.33) を用いると、

$$\begin{aligned}
S_j^x S_{j+1}^x &= \frac{1}{4} (S_j^+ + S_j^-) (S_{j+1}^+ + S_{j+1}^-) \\
&= \frac{1}{4} (S_j^+ S_{j+1}^+ + S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+ + S_j^- S_{j+1}^-) \\
&= \frac{1}{4} (-a_j a_{j+1} + a_j^\dagger a_{j+1} - a_j a_{j+1}^\dagger + a_j^\dagger a_{j+1}^\dagger) \\
&= \frac{1}{4} (a_j^\dagger - a_j) (a_{j+1}^\dagger + a_{j+1})
\end{aligned} \tag{付録 C.36}$$

$$\begin{aligned}
S_j^y S_{j+1}^y &= -\frac{1}{4} (S_j^+ - S_j^-) (S_{j+1}^+ - S_{j+1}^-) \\
&= -\frac{1}{4} (S_j^+ S_{j+1}^+ - S_j^+ S_{j+1}^- - S_j^- S_{j+1}^+ + S_j^- S_{j+1}^-) \\
&= -\frac{1}{4} (-a_j a_{j+1} - a_j^\dagger a_{j+1} + a_j a_{j+1}^\dagger + a_j^\dagger a_{j+1}^\dagger) \\
&= -\frac{1}{4} (a_j^\dagger + a_j) (a_{j+1}^\dagger - a_{j+1})
\end{aligned} \tag{付録 C.37}$$

となる。また、

$$\begin{aligned}
S_j^z S_{j+1}^z &= \left(n_j - \frac{1}{2}\right) \left(n_{j+1} - \frac{1}{2}\right) \\
&= n_j n_{j+1} - \frac{1}{2}(n_j + n_{j+1}) + \frac{1}{4}
\end{aligned} \tag{付録 C.38}$$

である。ここで、境界条件が、

$$S_{N+1} = S_1 \tag{付録 C.39}$$

の場合を考えると、

$$\begin{aligned}
S_N^+ S_1^- &= (1 - 2n_1) \cdots (1 - 2n_{N-1}) a_N^\dagger a_1 \\
&= (1 - 2n_1) \cdots (1 - 2n_{N-1}) (1 - 2n_N)^2 a_N^\dagger a_1 \\
&= (-)^{\mathcal{N}} (1 - 2n_N) a_N^\dagger a_1 \\
&= (-)^{\mathcal{N}} (a_N^\dagger a_1 - 2a_N^\dagger a_N a_N^\dagger a_1) \\
&= (-)^{\mathcal{N}} \left\{ a_N^\dagger a_1 - 2a_N^\dagger (1 - a_N^\dagger a_N) a_1 \right\} \\
&= -(-)^{\mathcal{N}} a_N^\dagger a_1
\end{aligned} \tag{付録 C.40}$$

$$\begin{aligned}
S_N^- S_1^+ &= (1 - 2n_1) \cdots (1 - 2n_{N-1}) a_N a_1^\dagger \\
&= (1 - 2n_1) \cdots (1 - 2n_{N-1}) (1 - 2n_N)^2 a_N a_1^\dagger \\
&= (-)^{\mathcal{N}} (1 - 2n_N) a_N a_1^\dagger \\
&= (-)^{\mathcal{N}} (a_N a_1^\dagger - 2a_N^\dagger a_N a_N a_1^\dagger) \\
&= (-)^{\mathcal{N}} a_N a_1^\dagger
\end{aligned} \tag{付録 C.41}$$

$$\begin{aligned}
S_N^+ S_1^+ &= (1 - 2n_1) \cdots (1 - 2n_{N-1}) a_N^\dagger a_1^\dagger \\
&= (1 - 2n_1) \cdots (1 - 2n_{N-1}) (1 - 2n_N)^2 a_N^\dagger a_1^\dagger \\
&= (-)^{\mathcal{N}} (1 - 2n_N) a_N^\dagger a_1^\dagger \\
&= (-)^{\mathcal{N}} \left(a_N^\dagger a_1^\dagger - 2a_N^\dagger a_N a_N^\dagger a_1^\dagger \right) \\
&= (-)^{\mathcal{N}} \left\{ a_N^\dagger a_1^\dagger - 2a_N^\dagger (1 - a_N^\dagger a_N) a_1^\dagger \right\} \\
&= -(-)^{\mathcal{N}} a_N^\dagger a_1^\dagger
\end{aligned} \tag{付録 C.42}$$

$$\begin{aligned}
S_N^- S_1^- &= (1 - 2n_1) \cdots (1 - 2n_{N-1}) a_N a_1 \\
&= (1 - 2n_1) \cdots (1 - 2n_{N-1}) (1 - 2n_N)^2 a_N a_1 \\
&= (-)^{\mathcal{N}} (1 - 2n_N) a_N a_1 \\
&= (-)^{\mathcal{N}} \left(a_N a_1 - 2a_N^\dagger a_N a_N a_1 \right) \\
&= (-)^{\mathcal{N}} a_N a_1
\end{aligned} \tag{付録 C.43}$$

となる。これらを用いると、

$$\begin{aligned}
S_N^x S_1^x &= \frac{1}{4} (S_N^+ S_1^+ + S_N^+ S_1^- + S_N^- S_1^+ + S_N^- S_1^-) \\
&= \frac{1}{4} (-)^{\mathcal{N}} \left(-a_N^\dagger a_1^\dagger - a_N^\dagger a_1 + a_N a_1^\dagger + a_N a_1 \right) \\
&= -\frac{1}{4} (-)^{\mathcal{N}} \left(a_N^\dagger - a_N \right) \left(a_1^\dagger + a_1 \right)
\end{aligned} \tag{付録 C.44}$$

$$\begin{aligned}
S_N^y S_1^y &= -\frac{1}{4} (S_N^+ S_1^+ - S_N^+ S_1^- - S_N^- S_1^+ + S_N^- S_1^-) \\
&= -\frac{1}{4} (-)^{\mathcal{N}} \left(-a_N^\dagger a_1^\dagger + a_N^\dagger a_1 - a_N a_1^\dagger + a_N a_1 \right) \\
&= \frac{1}{4} (-)^{\mathcal{N}} \left(a_N^\dagger + a_N \right) \left(a_1^\dagger - a_1 \right)
\end{aligned} \tag{付録 C.45}$$

となる。ただし、

$$\mathcal{N} = \sum_{j=1}^N S_j^+ S_j^- = \sum_{j=1}^N n_j \tag{付録 C.46}$$

であり、

$$(-)^{\mathcal{N}} \equiv (1 - 2n_1) \cdots (1 - 2n_{N-1}) (1 - 2n_N) \tag{付録 C.47}$$

とおいた。つまり、 \mathcal{N} は上向き (励起状態) のスピンの個数である。したがって、 N が偶数の場合 $(-)^{\mathcal{N}}$ は \mathcal{N} が偶数 (上向きのスピンの個数が偶数個) の場合 $+1$ となり、 \mathcal{N} が奇数 (上向きのスピンの個数が奇数個) の場合 -1 となる。

これより、

$$\sum_{j=1}^N S_j^x S_{j+1}^x = \sum_{j=1}^{N-1} \frac{1}{4} \left(a_j^\dagger - a_j \right) \left(a_{j+1}^\dagger + a_{j+1} \right) - \frac{1}{4} (-)^{\mathcal{N}} \left(a_N^\dagger - a_N \right) \left(a_1^\dagger + a_1 \right) \tag{付録 C.48}$$

$$\sum_{j=1}^N S_j^y S_{j+1}^y = -\sum_{j=1}^{N-1} \frac{1}{4} \left(a_j^\dagger + a_j \right) \left(a_{j+1}^\dagger - a_{j+1} \right) + \frac{1}{4} (-)^{\mathcal{N}} \left(a_N^\dagger + a_N \right) \left(a_1^\dagger - a_1 \right) \tag{付録 C.49}$$

とかくことができる。このとき、

$$a_{N+1} = -a_1 \quad a_{N+1}^\dagger = -a_1^\dagger \quad \mathcal{N} \text{ が偶数のとき} \quad (\text{付録 C.50})$$

$$a_{N+1} = a_1 \quad a_{N+1}^\dagger = a_1^\dagger \quad \mathcal{N} \text{ が奇数のとき} \quad (\text{付録 C.51})$$

とすれば、境界の部分も和に入れることができ、

$$\sum_{j=1}^N S_j^x S_{j+1}^x = \frac{1}{4} \sum_{j=1}^N (a_j^\dagger - a_j) (a_{j+1}^\dagger + a_{j+1}) \quad (\text{付録 C.52})$$

$$\sum_{j=1}^N S_j^y S_{j+1}^y = -\frac{1}{4} \sum_{j=1}^N (a_j^\dagger + a_j) (a_{j+1}^\dagger - a_{j+1}) \quad (\text{付録 C.53})$$

となる。したがって、

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N (S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y) &= \frac{1}{4} \sum_{j=1}^N \left\{ (a_j^\dagger - a_j) (a_{j+1}^\dagger + a_{j+1}) - (a_j^\dagger + a_j) (a_{j+1}^\dagger - a_{j+1}) \right\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (a_j^\dagger a_{j+1} + a_{j+1}^\dagger a_j) \end{aligned} \quad (\text{付録 C.54})$$

となる。

付録 D V_q の評価

1) q が (3.2.15) をとる場合 ($q = 0, \pi$ の項はなし)

このとき、

$$\sum_m a_m^\dagger a_m = \sum_m \frac{1}{M} \sum_{q, q'} e^{i(q'-q)m} \eta_q^\dagger \eta_{q'} = \frac{1}{M} \sum_{q, q'} \left(\sum_m e^{i(q'-q)m} \right) \eta_q^\dagger \eta_{q'} \quad (\text{付録 D.1})$$

となる。ここで、

$$\sum_m e^{i(q'-q)m} = M \delta_{qq'} \quad (\text{付録 D.2})$$

となるから、

$$\begin{aligned} \sum_m a_m^\dagger a_m &= \frac{1}{M} \sum_{q, q'} M \delta_{qq'} \eta_q^\dagger \eta_{q'} \\ &= \sum_q \eta_q^\dagger \eta_q \\ &= \sum_{0 \leq q \leq \pi} (\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q}) \end{aligned} \quad (\text{付録 D.3})$$

となる。また、

$$\sum_{0 \leq q \leq \pi} = \frac{M}{2} \quad (\text{付録 D.4})$$

であるから、

$$\sum_m = 2 \sum_{0 \leq q \leq \pi} \quad (\text{付録 D.5})$$

となり、

$$\begin{aligned} V_1 &= (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \exp \left[-2K_1^* \sum_{0 \leq q \leq \pi} \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} - 1 \right) \right] \\ &= (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \prod_{0 \leq q \leq \pi} \exp \left[-2K_1^* \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} - 1 \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{付録 D.6})$$

となる。

また、 V_2 は、

$$\begin{aligned} V_2 &= \exp \left[K_2 \sum_m \left(a_m^\dagger - a_m \right) \left(a_{m+1}^\dagger + a_{m+1} \right) \right] \\ &= \exp \left[K_2 \sum_m \left(a_m^\dagger a_{m+1}^\dagger + a_m^\dagger a_{m+1} - a_m a_{m+1}^\dagger - a_m a_{m+1} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{付録 D.7})$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} \sum_m a_m^\dagger a_{m+1}^\dagger &= \sum_m \frac{1}{M} e^{i\pi/2} \sum_{q,q'} e^{-i(q+q')m} e^{-iq'} \eta_q^\dagger \eta_{q'}^\dagger \\ &= \frac{1}{M} i \sum_{q,q'} \left(\sum_m e^{-i(q+q')m} \right) e^{-iq'} \eta_q^\dagger \eta_{q'}^\dagger \\ &= \frac{1}{M} i \sum_{q,q'} M \delta_{q,-q'} e^{-iq'} \eta_q^\dagger \eta_{q'}^\dagger \\ &= i \sum_q e^{iq} \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger \\ &= i \sum_{0 \leq q \leq \pi} \left(e^{iq} \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger + e^{-iq} \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \right) \end{aligned} \quad (\text{付録 D.8})$$

$$\begin{aligned} \sum_m a_m a_{m+1} &= \sum_m \frac{1}{M} e^{-i\pi/2} \sum_{q,q'} e^{i(q+q')m} e^{iq'} \eta_q \eta_{q'} \\ &= -\frac{1}{M} i \sum_{q,q'} \left(\sum_m e^{i(q+q')m} \right) e^{iq'} \eta_q \eta_{q'} \\ &= -\frac{1}{M} i \sum_{q,q'} M \delta_{q,-q'} e^{iq'} \eta_q \eta_{q'} \\ &= -i \sum_q e^{-iq} \eta_q \eta_{-q} \\ &= -i \sum_{0 \leq q \leq \pi} \left(e^{-iq} \eta_q \eta_{-q} + e^{iq} \eta_{-q} \eta_q \right) \end{aligned} \quad (\text{付録 D.9})$$

となるから、

$$\sum_m \left(a_m^\dagger a_{m+1}^\dagger - a_m a_{m+1} \right) = \sum_{0 \leq q \leq \pi} i \left\{ e^{iq} \left(\eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger + \eta_{-q} \eta_q \right) + e^{-iq} \left(\eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger + \eta_q \eta_{-q} \right) \right\} \quad (\text{付録 D.10})$$

となる。ここで、 η_q 、 $\eta_{q'}^\dagger$ は、

$$\{\eta_q, \eta_{q'}^\dagger\}_+ = \delta_{qq'} \quad (\text{付録 D.11})$$

$$\{\eta_q, \eta_{q'}\}_+ = \{\eta_q^\dagger, \eta_{q'}^\dagger\}_+ = 0 \quad (\text{付録 D.12})$$

という関係を満たすので、

$$\begin{aligned} \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger &= -\eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \\ \eta_{-q} \eta_q &= -\eta_q \eta_{-q} \end{aligned} \quad (\text{付録 D.13})$$

となり、

$$\begin{aligned} \sum_m (a_m^\dagger a_{m+1}^\dagger - a_m a_{m+1}) &= \sum_{0 \leq q \leq \pi} (-i) (e^{iq} - e^{-iq}) (\eta_q \eta_{-q} + \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger) \\ &= 2 \sum_{0 \leq q \leq \pi} \sin q (\eta_q \eta_{-q} + \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger) \end{aligned} \quad (\text{付録 D.14})$$

となる。

また、

$$\begin{aligned} \sum_m a_m^\dagger a_{m+1} &= \sum_m \frac{1}{M} \sum_{q, q'} e^{-i(q-q')m} e^{iq'} \eta_q^\dagger \eta_{q'} \\ &= \frac{1}{M} \sum_{q, q'} \left(\sum_m e^{-i(q-q')m} \right) e^{iq'} \eta_q^\dagger \eta_{q'} \\ &= \frac{1}{M} \sum_{q, q'} M \delta_{q, q'} e^{iq'} \eta_q^\dagger \eta_{q'} \\ &= \sum_q e^{iq} \eta_q^\dagger \eta_q \\ &= \sum_{0 \leq q \leq \pi} (e^{iq} \eta_q^\dagger \eta_q + e^{-iq} \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q}) \end{aligned} \quad (\text{付録 D.15})$$

$$\begin{aligned} \sum_m a_m a_{m+1}^\dagger &= - \sum_m a_{m+1}^\dagger a_m \\ &= - \sum_m \frac{1}{M} \sum_{q, q'} e^{-i(q-q')m} e^{-iq} \eta_q^\dagger \eta_{q'} \\ &= - \frac{1}{M} \sum_{q, q'} \left(\sum_m e^{-i(q-q')m} \right) e^{-iq} \eta_q^\dagger \eta_{q'} \\ &= - \frac{1}{M} \sum_{q, q'} M \delta_{q, q'} e^{-iq} \eta_q^\dagger \eta_{q'} \\ &= - \sum_q e^{-iq} \eta_q^\dagger \eta_q \\ &= - \sum_{0 \leq q \leq \pi} (e^{-iq} \eta_q^\dagger \eta_q + e^{iq} \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q}) \end{aligned} \quad (\text{付録 D.16})$$

となるから、

$$\begin{aligned}\sum_m \left(a_m^\dagger a_{m+1} - a_m a_{m+1}^\dagger \right) &= \sum_{0 \leq q \leq \pi} (e^{iq} + e^{-iq}) \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) \\ &= 2 \sum_{0 \leq q \leq \pi} \cos q \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right)\end{aligned}\quad (\text{付録 D.17})$$

となる。したがって、 V_2 は、

$$\begin{aligned}V_2 &= \exp \left[K_2 \sum_{0 \leq q \leq \pi} \left\{ 2 \cos q \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) + 2 \sin q \left(\eta_q \eta_{-q} + \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \right) \right\} \right] \\ &= \prod_{0 \leq q \leq \pi} \exp \left[2K_2 \left\{ \cos q \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) + \sin q \left(\eta_q \eta_{-q} + \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \right) \right\} \right]\end{aligned}\quad (\text{付録 D.18})$$

となる。

よって、

$$\begin{aligned}V^\pm &= (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \prod_{0 \leq q \leq \pi} \exp \left[K_2 \left\{ \cos q \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) + \sin q \left(\eta_q \eta_{-q} + \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \right) \right\} \right] \\ &\quad \times \exp \left[-2K_1^* \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} - 1 \right) \right] \\ &\quad \times \exp \left[K_2 \left\{ \cos q \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) + \sin q \left(\eta_q \eta_{-q} + \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \right) \right\} \right]\end{aligned}\quad (\text{付録 D.19})$$

$$\equiv (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \prod_{0 \leq q \leq \pi} V_q \quad (\text{付録 D.20})$$

となる。ただし、

$$V_q = (V_{2q})^{\frac{1}{2}} V_{1q} (V_{2q})^{\frac{1}{2}} \quad (\text{付録 D.21})$$

$$V_{1q} = \exp \left[-2K_1^* \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} - 1 \right) \right] \quad (\text{付録 D.22})$$

$$V_{2q} = \exp \left[2K_2 \left\{ \cos q \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) + \sin q \left(\eta_q \eta_{-q} + \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \right) \right\} \right] \quad (\text{付録 D.23})$$

である。

2) q が (3.2.17) をとる場合 ($q = 0, \pi$ の項あり)

このとき、

$$\begin{aligned}\sum_m a_m^\dagger a_m &= \sum_m \frac{1}{M} \sum_{q, q' \neq 0, \pi} e^{i(q'-q)m} \eta_q^\dagger \eta_{q'} + \sum_m \frac{1}{M} \eta_0^\dagger \eta_0 + \sum_m \frac{1}{M} \eta_\pi^\dagger \eta_\pi \\ &= \sum_{0 < q < \pi} \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) + \eta_0^\dagger \eta_0 + \eta_\pi^\dagger \eta_\pi\end{aligned}\quad (\text{付録 D.24})$$

となる。ただし、 $\sum_{0 < q < \pi}$ は $0, \pi$ 以外の q についての和を表すこととする。すると、

$$\sum_{0 < q < \pi} = \frac{M-2}{2} \quad (\text{付録 D.25})$$

となるので、

$$\sum_m \frac{1}{2} = \frac{M}{2} = \sum_{0 < q < \pi} + 1 \quad (\text{付録 D.26})$$

となる。したがって、

$$\sum_m \left(a_m^\dagger a_m - \frac{1}{2} \right) = \sum_{0 < q < \pi} \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} - 1 \right) + \eta_0^\dagger \eta_0 + \eta_\pi^\dagger \eta_\pi - 1 \quad (\text{付録 D.27})$$

となる。よって、 V_1 は、

$$\begin{aligned} V_1 &= (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \exp \left[-2K_1^* \left\{ \sum_{0 < q < \pi} \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} - 1 \right) + \eta_0^\dagger \eta_0 + \eta_\pi^\dagger \eta_\pi - 1 \right\} \right] \\ &\equiv (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \prod_{0 \leq q \leq \pi} V_{1q} \end{aligned} \quad (\text{付録 D.28})$$

となる。ただし、 $\prod_{0 \leq q \leq \pi}$ は 0、 π も含めた q のすべての値の積に関してとるものとする。また、

$$V_{1q} = \exp \left[-2K_1^* \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} - 1 \right) \right] \quad (q \neq 0, \pi) \quad (\text{付録 D.29})$$

$$V_{10} = \exp \left[-2K_1^* \left(\eta_0^\dagger \eta_0 - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (\text{付録 D.30})$$

$$V_{1\pi} = \exp \left[-2K_1^* \left(\eta_\pi^\dagger \eta_\pi - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (\text{付録 D.31})$$

である。

次に、

$$\begin{aligned} \sum_m a_m^\dagger a_{m+1}^\dagger &= \sum_m \frac{1}{M} e^{i\pi/2} \sum_{q, q' \neq 0, \pi} e^{-i(q+q')m} e^{-iq'} \eta_q^\dagger \eta_{q'}^\dagger + \sum_m \frac{1}{M} e^{i\pi/2} \eta_0^\dagger \eta_0^\dagger + \sum_m \frac{1}{M} e^{i\pi/2} e^{-2\pi im} e^{-i\pi} \eta_\pi^\dagger \eta_\pi^\dagger \\ &= i \sum_{0 < q < \pi} \left(e^{iq} \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger + e^{-iq} \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \right) \end{aligned} \quad (\text{付録 D.32})$$

となる。ただし、

$$\{\eta_0^\dagger, \eta_0^\dagger\}_+ = 2\eta_0^\dagger \eta_0^\dagger = 0 \quad (\text{付録 D.33})$$

$$\{\eta_\pi^\dagger, \eta_\pi^\dagger\}_+ = 2\eta_\pi^\dagger \eta_\pi^\dagger = 0 \quad (\text{付録 D.34})$$

となることを用いた。また、

$$\begin{aligned} \sum_m a_m a_{m+1} &= \sum_m \frac{1}{M} e^{-i\pi/2} \sum_{q, q' \neq 0, \pi} e^{i(q+q')m} e^{iq'} \eta_q \eta_{q'} + \sum_m \frac{1}{M} e^{-i\pi/2} \eta_0 \eta_0 + \sum_m \frac{1}{M} e^{-i\pi/2} e^{2\pi im} e^{i\pi} \eta_\pi \eta_\pi \\ &= -i \sum_{0 < q < \pi} \left(e^{-iq} \eta_q \eta_{-q} + e^{iq} \eta_{-q} \eta_q \right) \end{aligned} \quad (\text{付録 D.35})$$

となる。ただし、

$$\{\eta_0, \eta_0\}_+ = 2\eta_0 \eta_0 = 0 \quad (\text{付録 D.36})$$

$$\{\eta_\pi, \eta_\pi\}_+ = 2\eta_\pi \eta_\pi = 0 \quad (\text{付録 D.37})$$

となることを用いた。

また、

$$\begin{aligned} \sum_m a_m^\dagger a_{m+1} &= \sum_m \frac{1}{M} \sum_{q, q' \neq 0, \pi} e^{-i(q-q')m} e^{iq'} \eta_q^\dagger \eta_{q'} + \sum_m \frac{1}{M} \eta_0^\dagger \eta_0 + \sum_m \frac{1}{M} e^{-i\pi} \eta_\pi^\dagger \eta_\pi \\ &= \sum_{0 < q < \pi} \left(e^{iq} \eta_q^\dagger \eta_q + e^{-iq} \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) + \eta_0^\dagger \eta_0 - \eta_\pi^\dagger \eta_\pi \end{aligned} \quad (\text{付録 D.38})$$

$$\begin{aligned} \sum_m a_m a_{m+1}^\dagger &= - \sum_m a_{m+1}^\dagger a_m \\ &= - \sum_m \frac{1}{M} \sum_{q, q' \neq 0, \pi} e^{-i(q-q')m} e^{-iq} \eta_q^\dagger \eta_{q'} - \sum_m \frac{1}{M} \eta_0^\dagger \eta_0 - \sum_m \frac{1}{M} e^{i\pi} \eta_\pi^\dagger \eta_\pi \\ &= - \sum_{0 < q < \pi} \left(e^{-iq} \eta_q^\dagger \eta_q + e^{iq} \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) - \eta_0^\dagger \eta_0 + \eta_\pi^\dagger \eta_\pi \end{aligned} \quad (\text{付録 D.39})$$

となる。すなわち、

$$\begin{aligned} V_2 &= \exp \left[K_2 \left\{ i \sum_{0 < q < \pi} \left(e^{iq} \eta_q^\dagger \eta_{-q}^\dagger + e^{-iq} \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \right) + \sum_{0 < q < \pi} \left(e^{iq} \eta_q^\dagger \eta_q + e^{-iq} \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) + \eta_0^\dagger \eta_0 - \eta_\pi^\dagger \eta_\pi \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sum_{0 < q < \pi} \left(e^{-iq} \eta_q^\dagger \eta_q + e^{iq} \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) + \eta_0^\dagger \eta_0 - \eta_\pi^\dagger \eta_\pi + i \sum_{0 < q < \pi} \left(e^{-iq} \eta_q \eta_{-q} + e^{iq} \eta_{-q} \eta_q \right) \right\} \right] \end{aligned} \quad (\text{付録 D.40})$$

$$\begin{aligned} &= \exp \left[K_2 \sum_{0 < q < \pi} \left\{ 2 \cos q \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) + 2 \sin q \left(\eta_q \eta_{-q} + \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \right) \right\} + 2K_2 \left(\eta_0^\dagger \eta_0 - \frac{1}{2} \right) - 2K_2 \left(\eta_\pi^\dagger \eta_\pi - \frac{1}{2} \right) \right] \\ &\equiv \prod_{0 \leq q \leq \pi} V_{2q} \end{aligned} \quad (\text{付録 D.41})$$

となる。ただし、 $\prod_{0 \leq q \leq \pi}$ は、 0 、 π も含めた q のすべての値の積に関してとるものとする。また、

$$V_{2q} = \exp \left[2K_2 \left\{ \cos q \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) + \sin q \left(\eta_q \eta_{-q} + \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \right) \right\} \right] \quad (\text{付録 D.42})$$

$$V_{20} = \exp \left[2K_2 \left(\eta_0^\dagger \eta_0 - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (\text{付録 D.43})$$

$$V_{2\pi} = \exp \left[-2K_2 \left(\eta_\pi^\dagger \eta_\pi - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (\text{付録 D.44})$$

となる。

したがって、 V^\pm は、

$$V^\pm = (2 \sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}} \prod_{0 \leq q \leq \pi} V_q \quad (\text{付録 D.45})$$

となる。ただし、

$$V_q = (V_{2q})^{\frac{1}{2}} V_{1q} (V_{2q})^{\frac{1}{2}} \quad (\text{付録 D.46})$$

$$V_{1q} = \exp \left[-2K_1^* \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} - 1 \right) \right] \quad (\text{付録 D.47})$$

$$V_{2q} = \exp \left[2K_2 \left\{ \cos q \left(\eta_q^\dagger \eta_q + \eta_{-q}^\dagger \eta_{-q} \right) + \sin q \left(\eta_q \eta_{-q} + \eta_{-q}^\dagger \eta_q^\dagger \right) \right\} \right] \quad (\text{付録 D.48})$$

$$V_0 = \exp \left[-2 \left(K_1^* - K_2 \right) \left(\eta_0^\dagger \eta_0 - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (\text{付録 D.49})$$

$$V_\pi = \exp \left[-2 \left(K_1^* + K_2 \right) \left(\eta_\pi^\dagger \eta_\pi - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (\text{付録 D.50})$$

である。

付録 E 恒等式 $\int_0^\pi \ln(2 \cosh \varepsilon - 2 \cos x) dx = \pi \varepsilon$ の導出

まず、

$$\int_0^\pi \ln(a + b \cos x) dx = \pi \ln a + \int_0^\pi \ln(1 + c \cos x) dx \quad (\text{付録 E.1})$$

という積分について考えることとする。ただし、

$$-1 < c \equiv \frac{b}{a} < 1 \quad (\text{付録 E.2})$$

であるとする。ここで、(付録 E.1) の右辺第二項を、

$$I(c) \equiv \int_0^\pi \ln(1 + c \cos x) dx \quad (\text{付録 E.3})$$

とおく。これを c で 1 階微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial I(c)}{\partial c} &= \int_0^\pi \frac{\cos x}{1 + c \cos x} dx \\ &= \int_0^\pi \frac{\cos x(1 - c \cos x)}{1 - c^2 \cos^2 x} dx \\ &= \int_0^\pi \frac{\cos x}{1 - c^2 \cos^2 x} dx + \int_0^\pi \frac{-c \cos^2 x}{1 - c^2 \cos^2 x} dx \end{aligned} \quad (\text{付録 E.4})$$

となるが、

$$\int_0^\pi \frac{\cos x}{1 - c^2 \cos^2 x} dx = 0 \quad (\text{付録 E.5})$$

$$\int_0^\pi \frac{-c \cos^2 x}{1 - c^2 \cos^2 x} dx = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{-c \cos^2 x}{1 - c^2 \cos^2 x} dx \quad (\text{付録 E.6})$$

となるため、

$$\begin{aligned} \frac{\partial I(c)}{\partial c} &= 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{-c \cos^2 x}{1 - c^2 \cos^2 x} dx \\ &= \frac{2}{c} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{-c^2 \cos^2 x}{1 - c^2 \cos^2 x} dx \\ &= \frac{2}{c} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left(1 - \frac{1}{1 - c^2 \cos^2 x} \right) dx \\ &= \frac{\pi}{c} - \frac{2}{c} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{1 - c^2 \cos^2 x} dx \end{aligned} \quad (\text{付録 E.7})$$

となる。次にこの式の右辺第二項の積分を、

$$I_1(c) \equiv \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{1 - c^2 \cos^2 x} dx \quad (\text{付録 E.8})$$

とおく。この積分を解くために、

$$\tan x = y \quad (\text{付録 E.9})$$

と変数変換すると、

$$\frac{1}{\cos^2 x} dx = dy \quad (\text{付録 E.10})$$

となる。また積分区間は、

$$\begin{array}{l|l} x & 0 \rightarrow \frac{\pi}{2} \\ y & 0 \rightarrow \infty \end{array}$$

となる。よって、

$$\begin{aligned} I_1(c) &= \int_0^\infty \frac{\cos^2 x}{1 - c^2 \cos^2 x} dy \\ &= \int_0^\infty \frac{1}{1/\cos^2 x - c^2} dy \end{aligned} \quad (\text{付録 E.11})$$

となるが、

$$\frac{1}{\cos^2 x} = 1 + \tan^2 x = 1 + y^2 \quad (\text{付録 E.12})$$

となるため、

$$\begin{aligned} I_1(c) &= \int_0^\infty \frac{1}{y^2 + 1 - c^2} dy \\ &= \frac{1}{1 - c^2} \int_0^\infty \frac{1}{1 + \left(\frac{y}{\sqrt{1-c^2}}\right)^2} dy \end{aligned} \quad (\text{付録 E.13})$$

となる。ここで、

$$Y = \frac{y}{\sqrt{1-c^2}} \quad (\text{付録 E.14})$$

と変数変換すると、

$$\begin{aligned} I_1(c) &= \frac{\sqrt{1-c^2}}{1-c^2} \int_0^\infty \frac{1}{1+Y^2} dY \\ &= \frac{1}{\sqrt{1-c^2}} [\tanh^{-1} Y]_0^\infty \\ &= \frac{1}{\sqrt{1-c^2}} \frac{\pi}{2} \end{aligned} \quad (\text{付録 E.15})$$

となる。したがって、

$$\begin{aligned} \frac{\partial I(c)}{\partial c} &= \frac{\pi}{c} - \frac{2}{c} \frac{1}{\sqrt{1-c^2}} \frac{\pi}{2} \\ &= \frac{\pi}{c} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1-c^2}}\right) \end{aligned} \quad (\text{付録 E.16})$$

となる。これより、

$$I(c) = \pi \int_0^c \frac{1}{c} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1-c^2}}\right) dc \quad (\text{付録 E.17})$$

となる。この右辺の積分を解くために、

$$t = \sqrt{1 - c^2} \quad (\text{付録 E.18})$$

と変数変換すると、

$$dc = -\frac{t}{\sqrt{1-t^2}} dt \quad (\text{付録 E.19})$$

となる。また積分区間は、

$$\frac{c}{t} \left| \begin{array}{l} 0 \\ 1 \end{array} \right. \rightarrow \frac{c}{\sqrt{1-c^2}}$$

となる。よって、

$$\begin{aligned} I(c) &= \pi \int_1^{\sqrt{1-c^2}} \frac{1}{\sqrt{1-t^2}} \left(1 - \frac{1}{t}\right) \left(-\frac{t}{\sqrt{1-t^2}}\right) dt \\ &= \pi \int_1^{\sqrt{1-c^2}} \frac{1}{1-t^2} (1-t) dt \\ &= \pi \int_1^{\sqrt{1-c^2}} \frac{1}{1+t} dt \\ &= \pi [\ln(1+t)]_1^{\sqrt{1-c^2}} \\ &= \pi \ln \left[\frac{1}{2} (1 + \sqrt{1-c^2}) \right] \end{aligned} \quad (\text{付録 E.20})$$

となる。

これより、

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \ln(a + b \cos x) dx &= \pi \ln a + \pi \ln \left[\frac{1}{2} (1 + \sqrt{1-c^2}) \right] \\ &= \pi \ln \left[\frac{1}{2} (a + \sqrt{a^2 - b^2}) \right] \end{aligned} \quad (\text{付録 E.21})$$

となる。ここで、

$$a = 2 \cosh \varepsilon \quad (\text{付録 E.22})$$

$$b = -2 \quad (\text{付録 E.23})$$

とおくと、

$$\begin{aligned} \sqrt{a^2 - b^2} &= 2\sqrt{\cosh^2 \varepsilon - 1} \\ &= 2 \sinh \varepsilon \end{aligned} \quad (\text{付録 E.24})$$

となるから、

$$\begin{aligned} \ln \left[\frac{1}{2} (a + \sqrt{a^2 - b^2}) \right] &= \ln \left[\frac{1}{2} (2 \cosh \varepsilon + 2 \sinh \varepsilon) \right] \\ &= \ln e^\varepsilon = \varepsilon \end{aligned} \quad (\text{付録 E.25})$$

となる。よって、恒等式、

$$\int_0^\pi \ln(2 \cosh \varepsilon - 2 \cos x) dx = \pi \varepsilon \quad (\text{付録 E.26})$$

が導かれる。

付録 F $\frac{dK(k)}{dk}$ について

$K(k)$ を k で微分すると、

$$\frac{dK(k)}{dk} = k^{-1}k'^{-2} [E(k) - k'^2 K(k)] \quad (\text{付録 F.1})$$

という関係が成立する。

証明) まず、

$$\Delta \equiv (1 - k^2 \sin^2 \phi)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{付録 F.2})$$

とおくと、

$$\sin^2 \phi = k^{-2}(1 - \Delta^2) \quad (\text{付録 F.3})$$

となる。これより、 $K(k)$ は、

$$K(k) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\phi}{(1 - k^2 \sin^2 \phi)^{\frac{1}{2}}} = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \Delta^{-1} d\phi \quad (\text{付録 F.4})$$

り、 k で 1 階微分したものは、

$$\frac{dK(k)}{dk} = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{k \sin^2 \phi}{(1 - k^2 \sin^2 \phi)^{\frac{3}{2}}} d\phi = k^{-1} \int_0^{\frac{\pi}{2}} [\Delta^{-3} - \Delta^{-1}] d\phi = k^{-1} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \Delta^{-3} d\phi - k^{-1} K(k) \quad (\text{付録 F.5})$$

となる。この右辺第 1 項の積分を計算するために、 $\frac{\sin \phi \cos \phi}{\Delta}$ の ϕ 微分を考える。ここで、

$$\frac{\partial}{\partial \phi} \sin \phi \cos \phi = \cos^2 \phi - \sin^2 \phi \quad (\text{付録 F.6})$$

$$\frac{\partial}{\partial \phi} \Delta = -\frac{k^2 \sin \phi \cos \phi}{\Delta} \quad (\text{付録 F.7})$$

となるから、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\sin \phi \cos \phi}{\Delta} &= \frac{(\cos^2 \phi - \sin^2 \phi)\Delta + k^2 \sin^2 \phi \cos^2 \phi \Delta^{-1}}{\Delta^2} \\ &= \frac{(\cos^2 \phi - \sin^2 \phi)(1 - k^2 \sin^2 \phi) + k^2 \sin^2 \phi \cos^2 \phi}{\Delta^3} \\ &= \frac{(1 - \sin^2 \phi - \sin^2 \phi)(1 - k^2 \sin^2 \phi) + k^2 \sin^2 \phi (1 - \sin^2 \phi)}{\Delta^3} \\ &= \frac{1 - 2 \sin^2 \phi + k^2 \sin^4 \phi}{\Delta^3} \end{aligned} \quad (\text{付録 F.8})$$

となる。また、

$$\Delta^4 = 1 - 2k^2 \sin^2 \phi + k^4 \sin^4 \phi \quad (\text{付録 F.9})$$

であるから、

$$1 - 2 \sin^2 \phi + k^2 \sin^4 \phi = k^{-2} \Delta^4 - k^{-2} + 1 \quad (\text{付録 F.10})$$

となる。ここで、

$$k'^2 = 1 - k^2 \quad (\text{付録 F.11})$$

とおくことにより、

$$\frac{\partial \sin \phi \cos \phi}{\partial \phi} \frac{1}{\Delta} = \frac{k^{-2}(\Delta^4 - k'^2)}{\Delta^3} \quad (\text{付録 F.12})$$

となる。これより、

$$\Delta^{-3} = k'^{-2} \Delta - k^2 k'^{-2} \frac{\partial \sin \phi \cos \phi}{\partial \phi} \frac{1}{\Delta} \quad (\text{付録 F.13})$$

となり、これを ϕ で積分すると、

$$\begin{aligned} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \Delta^{-3} d\phi &= k'^{-2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \Delta d\phi - k^2 k'^{-2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\partial \sin \phi \cos \phi}{\partial \phi} \frac{1}{\Delta} d\phi \\ &= k'^{-2} E(k) - k^2 k'^{-2} \left[\frac{\sin \phi \cos \phi}{\Delta} \right]_0^{\frac{\pi}{2}} \\ &= k'^{-2} E(k) \end{aligned} \quad (\text{付録 F.14})$$

となる。ただし、第 2 種完全楕円積分 $E(k)$ が、

$$E(k) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} (1 - k^2 \sin^2 \phi)^{\frac{1}{2}} d\phi = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \Delta d\phi \quad (\text{付録 F.15})$$

となることを用いた。これより、

$$\frac{dK(k)}{dk} = k^{-1} k'^{-2} E(k) - k^{-1} K(k) = k^{-1} k'^{-2} [E(k) - k'^2 K(k)] \quad (\text{付録 F.16})$$

となる。(証明終)

付録 G 完全楕円積分の $k \rightarrow 1$ の極限の振る舞い

・第 1 種完全楕円積分 $K(k)$ の振る舞い
まず、

$$k'^2 = 1 - k^2 \quad (\text{付録 G.1})$$

とおくと、 $K(k)$ は、

$$\begin{aligned} K(k) &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\phi}{(1 - k^2 \sin^2 \phi)^{\frac{1}{2}}} \\ &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\phi}{(\cos^2 \phi + k'^2 \sin^2 \phi)^{\frac{1}{2}}} \end{aligned} \quad (\text{付録 G.2})$$

と変形できる。ここで、

$$\frac{\varepsilon}{|k'|} \gg 1 \quad , \quad \frac{1}{\varepsilon} \gg 1 \quad (\varepsilon \ll 1) \quad (\text{付録 G.3})$$

を満たす ε を導入する。これを用いて、

$$K(k) = \int_{\frac{\pi}{2}-\varepsilon}^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\phi}{(\cos^2 \phi + k'^2 \sin^2 \phi)^{\frac{1}{2}}} + \int_0^{\frac{\pi}{2}-\varepsilon} \frac{d\phi}{(\cos^2 \phi + k'^2 \sin^2 \phi)^{\frac{1}{2}}} \quad (\text{付録 G.4})$$

$$\equiv I_1 + I_2 \quad (\text{付録 G.5})$$

と2つの積分にわけろ。

まず、 I_1 は、

$$\phi = \frac{1}{2}\pi - t \quad (\text{付録 G.6})$$

と変数変換すると、

$$d\phi = -dt \quad (\text{付録 G.7})$$

となる。また積分区間は、

$$\begin{array}{c|c} \phi & \frac{\pi}{2} - \varepsilon \rightarrow \frac{\pi}{2} \\ \hline t & \varepsilon \rightarrow 0 \end{array}$$

となる。よって、

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{\varepsilon}^0 \frac{-dt}{\{\cos^2(\frac{1}{2}\pi - t) + k'^2 \sin^2(\frac{1}{2}\pi - t)\}^{\frac{1}{2}}} \\ &= \int_0^{\varepsilon} \frac{dt}{(\sin^2 t + k'^2 \cos^2 t)^{\frac{1}{2}}} \end{aligned} \quad (\text{付録 G.8})$$

となる。ここで、 $\varepsilon \ll 1$ であるから、 $t \ll 1$ であり、

$$\sin t \cong t \quad (\text{付録 G.9})$$

$$\cos t \cong 1 \quad (\text{付録 G.10})$$

と近似すると、

$$\begin{aligned} I_1 &\cong \int_0^{\varepsilon} \frac{dt}{(k'^2 + t^2)^{\frac{1}{2}}} \\ &= \left[\ln \left| t + \sqrt{t^2 + k'^2} \right| \right]_0^{\varepsilon} \\ &= \ln \frac{\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 + k'^2}}{|k'|} \\ &= \ln \frac{\varepsilon}{|k'|} \left(1 + \sqrt{1 + k'^2/\varepsilon^2} \right) \end{aligned} \quad (\text{付録 G.11})$$

となる。ここで、 $\varepsilon/|k'| \gg 1$ より、 $k'^2/\varepsilon^2 \ll 1$ であるから、

$$I_1 \cong \ln \frac{2\varepsilon}{|k'|} \quad (\text{付録 G.12})$$

と近似できる。

次に、 I_2 では $\phi < \frac{\pi}{2} - \varepsilon$ の範囲では、 $\cos \phi$ に比べると $k' \sin \phi$ は k' が小さいので無視できる。よって、

$$\begin{aligned} I_2 &\cong \int_0^{\frac{\pi}{2}-\varepsilon} \frac{d\phi}{\cos \phi} \\ &= \left[\ln \left| \frac{1 + \tan \frac{\phi}{2}}{1 - \tan \frac{\phi}{2}} \right| \right]_0^{\frac{\pi}{2}-\varepsilon} \\ &= \ln \left| \frac{1 + \tan \left(\frac{\pi}{4} - \frac{\varepsilon}{2} \right)}{1 - \tan \left(\frac{\pi}{4} - \frac{\varepsilon}{2} \right)} \right| \end{aligned} \quad (\text{付録 G.13})$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned} \tan \left(\frac{\pi}{4} - \frac{\varepsilon}{2} \right) &= \frac{1 - \tan \frac{\varepsilon}{2}}{1 + \tan \frac{\varepsilon}{2}} \\ &\cong \frac{1 - \frac{\varepsilon}{2}}{1 + \frac{\varepsilon}{2}} \end{aligned} \quad (\text{付録 G.14})$$

となる。よって、

$$I_2 \cong \ln \left| \frac{1 + \frac{1 - \frac{\varepsilon}{2}}{1 + \frac{\varepsilon}{2}}}{1 - \frac{1 - \frac{\varepsilon}{2}}{1 + \frac{\varepsilon}{2}}} \right| = \ln \frac{2}{\varepsilon} \quad (\text{付録 G.15})$$

となる。

したがって、 $K(k)$ は $k \rightarrow 1$ の極限で、

$$K(k) \cong \ln \frac{2\varepsilon}{|k'|} + \ln \frac{2}{\varepsilon} = \ln \frac{4}{|k'|} \quad (\text{付録 G.16})$$

と近似される。

・第2種完全楕円積分 $E(k)$ の振る舞い

$E(k)$ は $k \rightarrow 1$ で特異性は示さず、

$$\begin{aligned} E(k) &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} (1 - k^2 \sin^2 \phi)^{\frac{1}{2}} d\phi \\ &\cong \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos \phi d\phi \\ &= 1 \end{aligned} \quad (\text{付録 G.17})$$

となる。

・第3種完全楕円積分 $\Pi_1(\nu, k)$ の振る舞い

まず、

$$\begin{aligned} \Pi_1(\nu, k) &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\phi}{(1 + \nu \sin^2 \phi)(1 - k^2 \sin^2 \phi)^{\frac{1}{2}}} \\ &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\phi}{(1 + \nu)(1 - k^2 \sin^2 \phi)^{\frac{1}{2}}} + \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{(1 - k^2 \sin^2 \phi)^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{1}{1 + \nu \sin^2 \phi} - \frac{1}{1 + \nu} \right) d\phi \\ &= \frac{1}{1 + \nu} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\phi}{(1 - k^2 \sin^2 \phi)^{\frac{1}{2}}} + \frac{\nu}{1 + \nu} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\cos^2 \phi}{(1 + \nu \sin^2 \phi)(1 - k^2 \sin^2 \phi)^{\frac{1}{2}}} d\phi \end{aligned} \quad (\text{付録 G.18})$$

$$\equiv \frac{1}{1 + \nu} K(k) + \frac{\nu}{1 + \nu} I_3 \quad (\text{付録 G.19})$$

と変形できる。 I_3 は、 $k \rightarrow 1$ の極限では、

$$I_3 \cong \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\cos \phi}{1 + \nu \sin^2 \phi} d\phi \quad (\text{付録 G.20})$$

と近似できる。ここで、

$$\nu^{\frac{1}{2}} \sin \phi = t \quad (\text{付録 G.21})$$

と変数変換すると、

$$\nu^{\frac{1}{2}} \cos \phi d\phi = dt \quad (\text{付録 G.22})$$

となる。また積分区間は、

$$\begin{array}{c|c} \phi & 0 \rightarrow \frac{\pi}{2} \\ \hline t & 0 \rightarrow \nu^{\frac{1}{2}} \end{array}$$

となる。よって、

$$I_3 \cong \nu^{-\frac{1}{2}} \int_0^{\nu^{\frac{1}{2}}} \frac{dt}{1+t^2} = \nu^{-\frac{1}{2}} \tan^{-1} \nu^{\frac{1}{2}} \quad (\text{付録 G.23})$$

と近似される。

したがって、

$$\Pi_1(\nu, k) \cong \frac{1}{1+\nu} \ln \frac{4}{|k'|} + \frac{\nu^{\frac{1}{2}}}{1+\nu} \tan^{-1} \nu^{\frac{1}{2}} \quad (\text{付録 G.24})$$

と近似される。

付録 H $\frac{\partial}{\partial k} \Pi_1(\nu, k)$ について

$\Pi_1(\nu, k)$ を k で微分すると、

$$\frac{\partial \Pi_1(\nu, k)}{\partial k} = \frac{k}{k^2 + \nu} [k'^{-2} E(k) - \Pi_1(\nu, k)] \quad (\text{付録 H.1})$$

という関係が成立する。

証明) $\Pi_1(\nu, k)$ は、

$$\Pi_1(\nu, k) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{(1 + \nu \sin^2 \phi)(1 - k^2 \sin^2 \phi)^{\frac{1}{2}}} d\phi \quad (\text{付録 H.2})$$

であるから、これを k で微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Pi_1(\nu, k)}{\partial k} &= k \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin^2 \phi}{(1 + \nu \sin^2 \phi)(1 - k^2 \sin^2 \phi)^{\frac{3}{2}}} d\phi \\ &= k \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin^2 \phi}{(1 + \nu \sin^2 \phi)(1 - k^2 \sin^2 \phi) \Delta} d\phi \end{aligned} \quad (\text{付録 H.3})$$

となる。ただし、 Δ は (付録 F.2) で定義される。ここで、

$$\frac{\sin^2 \phi}{(1 + \nu \sin^2 \phi)(1 - k^2 \sin^2 \phi)} = \frac{1}{k^2 + \nu} \left(\frac{1}{1 - k^2 \sin^2 \phi} - \frac{1}{1 + \nu \sin^2 \phi} \right) \quad (\text{付録 H.4})$$

となるから、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Pi_1(\nu, k)}{\partial k} &= \frac{k}{k^2 + \nu} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left\{ \frac{1}{(1 - k^2 \sin^2 \phi) \Delta} - \frac{1}{(1 + \nu \sin^2 \phi) \Delta} \right\} d\phi \\ &= \frac{k}{k^2 + \nu} \left\{ \int_0^{\frac{\pi}{2}} \Delta^{-3} d\phi - \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{(1 + \nu \sin^2 \phi)(1 - k^2 \sin^2 \phi)^{\frac{1}{2}}} d\phi \right\} \\ &= \frac{k}{k^2 + \nu} [k'^{-2} E(k) - \Pi_1(\nu, k)] \end{aligned} \quad (\text{付録 H.5})$$

となる。ただし、変形の途中で (付録 F.14) を用いた。(証明終)

付録 I $\frac{\partial \Pi_1(\nu, k)}{\partial \nu}$ について

$\Pi_1(\nu, k)$ を ν で微分すると、

$$\frac{\partial \Pi_1(\nu, k)}{\partial \nu} = \frac{1}{2(1 + \nu)(1 + k^2 \nu^{-1})} \left\{ \left(\frac{k^2}{\nu^2} - 1 \right) \Pi_1(\nu, k) - \frac{1}{\nu^2} (k^2 + \nu) K(k) - \frac{1}{\nu} E(k) \right\} \quad (\text{付録 I.1})$$

という関係が成立する。

証明) $\Pi_1(\nu, k)$ を ν で微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Pi_1(\nu, k)}{\partial \nu} &= - \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\sin^2 \phi}{(1 + \nu \sin^2 \phi)^2 \Delta} d\phi \\ &= \frac{1}{\nu} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{(1 + \nu \sin^2 \phi)^2 \Delta} d\phi - \frac{1}{\nu} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{(1 + \nu \sin^2 \phi) \Delta} d\phi \\ &= \frac{1}{\nu} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{(1 + \nu \sin^2 \phi)^2 \Delta} d\phi - \frac{1}{\nu} \Pi_1(\nu, k) \end{aligned} \quad (\text{付録 I.2})$$

となる。この右辺第 1 項の積分を計算するために、 $\frac{\Delta \sin \phi \cos \phi}{1 + \nu \sin^2 \phi}$ の ϕ 微分を考える。ここで、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \phi} (\Delta \sin \phi \cos \phi) &= \sin \phi \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \Delta + \Delta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) \\ &= -\frac{k^2}{\Delta} \sin^2 \phi \cos^2 \phi + \Delta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) \end{aligned} \quad (\text{付録 I.3})$$

$$\frac{\partial}{\partial \phi} (1 + \nu \sin^2 \phi) = 2\nu \sin \phi \cos \phi \quad (\text{付録 I.4})$$

となるから、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\Delta \sin \phi \cos \phi}{1 + \nu \sin^2 \phi} &= \frac{\{\Delta (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi) - k^2 \Delta^{-1} \sin^2 \phi \cos^2 \phi\} (1 + \nu \sin^2 \phi) - 2\Delta \nu \sin^2 \phi \cos^2 \phi}{(1 + \nu \sin^2 \phi)^2} \\ &= \frac{\{(1 - k^2 \sin^2 \phi)(1 - 2 \sin^2 \phi) - k^2 \sin^2 \phi (1 - \sin^2 \phi)\} (1 + \nu \sin^2 \phi) - 2\nu (1 - k^2 \sin^2 \phi) \sin^2 \phi (1 - \sin^2 \phi)}{(1 + \nu \sin^2 \phi)^2 \Delta} \\ &= \frac{1 - (2 + 2k^2 + \nu) \sin^2 \phi + 3k^2 \sin^4 \phi + \nu k^2 \sin^6 \phi}{(1 + \nu \sin^2 \phi)^2 \Delta} \end{aligned} \quad (\text{付録 I.5})$$

となる。まず、

$$(1 + \nu \sin^2 \phi)^3 = 1 + 3\nu \sin^2 \phi + 3\nu^2 \sin^4 \phi + \nu^3 \sin^6 \phi \quad (\text{付録 I.6})$$

より、

$$\nu k^2 \sin^6 \phi = k^2 \nu^{-2} \{(1 + \nu \sin^2 \phi)^3 - 3\nu^2 \sin^4 \phi - 3\nu \sin^2 \phi - 1\} \quad (\text{付録 I.7})$$

となるので、

$$\frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\Delta \sin \phi \cos \phi}{1 + \nu \sin^2 \phi} = \frac{k^2 \nu^{-2} (1 + \nu \sin^2 \phi)^3 + 1 - k^2 \nu^{-2} - (2 + 2k^2 + \nu + 3k^2 \nu^{-1}) \sin^2 \phi}{(1 + \nu \sin^2 \phi)^2 \Delta} \quad (\text{付録 I.8})$$

となる。また、

$$\begin{aligned} (2 + 2k^2 + \nu + 3k^2 \nu^{-1}) \sin^2 \phi &= \{1 + 2\nu^{-1}(1 + k^2) + 3k^2 \nu^{-2}\} \nu \sin^2 \phi \\ &= \{1 + 2\nu^{-1}(1 + k^2) + 3k^2 \nu^{-2}\} (1 + \nu \sin^2 \phi) - \{1 + 2\nu^{-1}(1 + k^2) + 3k^2 \nu^{-2}\} \end{aligned} \quad (\text{付録 I.9})$$

となるから、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\Delta \sin \phi \cos \phi}{1 + \nu \sin^2 \phi} &= \frac{k^2 \nu^{-2} (1 + \nu \sin^2 \phi)^3 + 1 - k^2 \nu^{-2} - \{1 + 2\nu^{-1}(1 + k^2) + 3k^2 \nu^{-2}\} (1 + \nu \sin^2 \phi) + \{1 + 2\nu^{-1}(1 + k^2) + 3k^2 \nu^{-2}\}}{(1 + \nu \sin^2 \phi)^2 \Delta} \\ &= \frac{2(1 + \nu^{-1})(1 + k^2 \nu^{-1}) - \{1 + 2\nu^{-1}(1 + k^2) + 3k^2 \nu^{-2}\} (1 + \nu \sin^2 \phi) + k^2 \nu^{-2} (1 + \nu \sin^2 \phi)^3}{(1 + \nu \sin^2 \phi)^2 \Delta} \\ &= \frac{2(1 + \nu^{-1})(1 + k^2 \nu^{-1})}{(1 + \nu \sin^2 \phi)^2 \Delta} - \frac{1 + 2\nu^{-1}(1 + k^2) + 3k^2 \nu^{-2}}{(1 + \nu \sin^2 \phi) \Delta} + \frac{k^2 \nu^{-2} (1 + \nu \sin^2 \phi)}{\Delta} \end{aligned} \quad (\text{付録 I.10})$$

となる。この両辺を ϕ で積分する。まず、左辺の積分は、

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\Delta \sin \phi \cos \phi}{1 + \nu \sin^2 \phi} d\phi = \left[\frac{\Delta \sin \phi \cos \phi}{1 + \nu \sin^2 \phi} \right]_0^{\frac{\pi}{2}} = 0 \quad (\text{付録 I.11})$$

となるから、

$$\begin{aligned} 2(1 + \nu^{-1})(1 + k^2 \nu^{-1}) \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{(1 + \nu \sin^2 \phi)^2 \Delta} d\phi &= [1 + 2\nu^{-1}(1 + k^2) + 3k^2 \nu^{-2}] \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{(1 + \nu \sin^2 \phi) \Delta} d\phi - k^2 \nu^{-2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{(1 + \nu \sin^2 \phi)}{\Delta} d\phi \\ &= [1 + 2\nu^{-1}(1 + k^2) + 3k^2 \nu^{-2}] \Pi_1(\nu, k) - \nu^{-2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{k^2 + \nu - \nu(1 - k^2 \sin^2 \phi)}{\Delta} d\phi \\ &= [1 + 2\nu^{-1}(1 + k^2) + 3k^2 \nu^{-2}] \Pi_1(\nu, k) - \nu^{-2} \left[(k^2 + \nu) \int_0^{\frac{\pi}{2}} \Delta^{-1} d\phi - \nu \int_0^{\frac{\pi}{2}} \Delta d\phi \right] \\ &= [1 + 2\nu^{-1}(1 + k^2) + 3k^2 \nu^{-2}] \Pi_1(\nu, k) - \nu^{-2} [(k^2 + \nu)K(k) - \nu E(k)] \end{aligned} \quad (\text{付録 I.12})$$

となる。よって、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Pi_1(\nu, k)}{\partial \nu} &= \frac{1}{\nu} \frac{1}{2(1 + \nu^{-1})(1 + k^2 \nu^{-1})} \left\{ \left[1 + \frac{2}{\nu}(1 + k^2) + \frac{3k^2}{\nu^2} \right] \Pi_1(\nu, k) - \frac{1}{\nu^2} [(k^2 + \nu)K(k) - \nu E(k)] \right\} - \frac{1}{\nu} \Pi_1(\nu, k) \\ &= \frac{1}{2(1 + \nu)(1 + k^2 \nu^{-1})} \left\{ \left(\frac{k^2}{\nu^2} - 1 \right) \Pi_1(\nu, k) - \frac{1}{\nu^2} (k^2 + \nu)K(k) - \frac{1}{\nu} E(k) \right\} \end{aligned} \quad (\text{付録 I.13})$$

となる。(証明終)

付録 J $-i\theta = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} (e^{in\theta} - e^{-in\theta})$ の証明

$f(\theta)$ という関数を変数 n でフーリエ変換すると、

$$f(\theta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{f}(n)e^{in\theta} \quad (\text{付録 J.1})$$

となる。また、逆変換は、

$$\tilde{f}(n) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(\theta)e^{-in\theta} d\theta \quad (\text{付録 J.2})$$

となる。ここで、 $f(\theta) = \theta$ の場合を考える。まず、 $n = 0$ の場合 $\tilde{f}(0)$ は、

$$\begin{aligned} \tilde{f}(0) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \theta d\theta \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[\frac{1}{2}\theta^2 \right]_{-\pi}^{\pi} = 0 \end{aligned} \quad (\text{付録 J.3})$$

となる。また、 $n \neq 0$ の場合 $\tilde{f}(n)$ は、

$$\begin{aligned} \tilde{f}(n) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \theta e^{-in\theta} d\theta \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[\theta \frac{i}{n} e^{-in\theta} \right]_{-\pi}^{\pi} - \frac{1}{2\pi} \frac{i}{n} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-in\theta} d\theta \\ &= \frac{1}{2\pi} \frac{i}{n} (\pi e^{-in\pi} + \pi e^{in\pi}) \\ &= \frac{i}{n} \cos n\pi \\ &= \frac{i}{n} (-1)^n \end{aligned} \quad (\text{付録 J.4})$$

となる。したがって、

$$\begin{aligned} \theta &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{i}{n} (-1)^n e^{in\theta} \\ &= i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} (e^{in\theta} - e^{-in\theta}) \end{aligned} \quad (\text{付録 J.5})$$

となる。ただし、1行目の和では $n \neq 0$ で和をとるものとする。よって、

$$-i\theta = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} (e^{in\theta} - e^{-in\theta}) \quad (\text{付録 J.6})$$

となる。

参考文献

- [1] L.Onsager : Phys. Rev. **65**, 117 (1944)
- [2] C.N.Yang : Phys. Rev. **85**, 808 (1952)
- [3] T.D.Schlutz and D.C.Mattis , E.D.Lieb : Rev. Mod. Phys. **36**, 856 (1964)
- [4] 西森 秀稔 『相転移・臨界現象の統計物理』新物理学シリーズ 35 (培風館, 2005)
- [5] 中西 襄 『場の量子論』新物理学シリーズ 19 (培風館, 1984)
- [6] M.Kac and J.C.Ward : Phys. Rev. **88**, 1332 (1952)
- [7] P.B.Potts and J.C.Ward : Progr. theor. Phys. **13**, 38 (1955)
- [8] B.M.MacCoy and T.T.Wu 『The Two-Dimensional Ising Model』 (Harvard University Press , 1973)
- [9] 広田良吾 『直接法によるソリトンの数理』(岩波書店, 1992)
- [10] M.E.Fisher : J. Math. Phys. **7**, 1776 (1966)
- [11] P.W.Kasteleyn : J. Math. Phys. **4**, 287 (1963)
- [12] 小口 武彦 『磁性体の統計理論』物理学選書 12 (裳華房, 1970)
- [13] E.W.Montroll and P.B.Potts , J.C.Ward : J. Math. Phys. **4**, 308 (1963)
- [14] 斎藤 正彦 『線型代数入門』(東京大学出版, 1970)