

南部陽一郎の2次元イジングモデル厳密解（固有値問題解）の論文を読む

2018.9.26 鈴木 実

はじめに

2次元イジングモデルは Onsager によって最初に厳密に解かれたのであるが [1], 南部陽一郎もほぼ同時期に, 全く別の方法で固有値問題を解いて同じ式に到達している. その結果は, 伏見康治大阪大学教授に勧められて論文化しているのだが, これが南部陽一郎の二つの処女論文の一つだったという [2].

Onsager の論文は数学的に難解でかつ長大であるのに対し, 南部の論文 [3] は, 同じ2次元イジングモデルの厳密解を扱いながら, 短く, 簡潔である. 本 HP では, Onsager の論文の説明をすでに掲載しているが, 南部の解法が Onsager の解法とどのように違うのかということも, 非常に興味を引くところである. そこで, 本稿では南部の論文を, Onsager の場合と同じように, 詳細に省略せずに辿ってみることにしよう.

この論文は, 当時の考えで極力短く書くことを求められていたためだと思われるが, 説明が充分でない. さらに, この論文には, 誤植, 不注意な細かい誤り, 勘違いによる誤りなどが一々挙げられないほど沢山あって, それが論文を読み進む上で大きな障害になると考えられる. 実際, 読み進むうちに, そういうところで止まってしまう, そのため, 初学者や学部学生では読み通すのはかなり困難であって, この論文の核心の部分把握するのは少し難しいと思われる. そこで, この本稿では, 誤植や細かい誤りの部分などを正しい記述に直して記述している.

それにしても, 驚くべきことに, 途中これほど細かい誤りがあるにも拘らず, 最後の式は正しく導かれているのである. 恐らく, 南部は詳細な計算をしなくても, 結果の式を正しく把握していたのだろうとしか思えない.

1 Introduction

2次元イジングモデルは Onsager によって厳密に解かれたわけであるが, その手法は数学的に複雑で, より簡潔な手法というもの模索されていた. その一つとして, 南部が見出した解法が挙げられる. 南部は量子力学の演算子を用いることで, 2次元イジングモデルと等価で, かつ, より簡単な固有値問題へと変換することによりこの難解な固有値問題を解く手法を見出したのである. このような取り組みは伏見と庄司によってすでに一つの結果が得られていたが, 南部の方法はより簡単で, この二人とは独立に得られたものであるとの記述が論文にある.

2 Preliminary Considerations

Onsager が扱った2次元イジングモデルでは, 分配関数は $\exp(-\beta H)$ という行列 (演算子) の跡を求めることに等しい. 系が大きい場合は, 結局, $\exp(-\beta H)$ の最大固有値を求めることに帰するのであるが, その指数関数の指数部にはハミルトニアンが含まれていて, それが, s_i と C_i が非可換で, それ以外は可換であるという演算子で表されているため, 対角化が非常に困難になっている.

Onsager は四元数演算子を導入してリー代数を構築し, 指数部分にあった非可換な演算子を指数部から巧みに下ろして, その結果対角化することに成功している. 南部は, 四元数演算子の代わりに, 量子力学で出てくる生成消滅演算子から派生させた反可換演算子を考えることによってより簡単な対角化方法を考えることに成

功している。この方法も非常に巧みであって、そういう手法が他の量子論の固有値問題に応用できるのではないかという観点から、最後の節で一般化を試みている。思わず、成る程、と膝を打ちたくくなるような非常に面白い方法である。

この節では、スピン演算子から生成消滅演算子へ、さらに四元数演算子と同等な反可換演算子から成る対演算子へと展開させる考え方を述べて、実際の問題を解くための数学的な準備をする。ただし、この節では指数関数の中の演算子を扱わないので、この後の節への直接的な準備ではないので、イジングモデルとの関わりを強く求めすぎると少し期待外れになる。

* * * * *

最初に、 N 個の 1 次元粒子列を考える。粒子は 1 種類しかないとする。 N 個の 1 次元スピン列を考えてもよい。次の P を考えよう。

$$P = \sum_{n=1}^N P_{n,n+1} = \sum \frac{1 + \sigma_n \cdot \sigma_{n+1}}{2} \quad (O-1)$$

σ_n は n 位置でスピン成分 $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ を持つ。 z 方向のスピン固有状態を考え、重ね合わせ状態は考えないことにしよう。スピンの $+z$ 方向を向いているときを 1、 $-z$ 方向を向いているときを -1 とする。 $+z$ 方向スピンの数を S とすると、 $-z$ 方向スピンの数は $N - S$ であるから、 $\sum \sigma_{n,z} = (+1)S + (-1)(N - S) = 2S - N$ となる。

n 位置と $n+1$ の位置のスピンを考えると、 $\sigma_n \cdot \sigma_{n+1}$ は両方が同じ向きの際に 1、反対向きの際に -1 になる。これを次のように粒子の存在、非存在に対応させる。すなわち、スピン 1 を粒子が存在する場合、スピン -1 を粒子が存在しない場合とする。そうすると、式 (O-1) 右辺の $P_{n,n+1}$ は、両方に存在するか両方共存在しないときに 1、どちらか一方に存在するときに 0 となる。

式 (O-1) の $P_{n,n+1}$ を演算子と考えると、 $P_{n,n+1}$ は n 位置と $n+1$ の位置にある粒子を交換する演算子と考えられる。そうすると、両方の位置に粒子が存在する時は、この演算で何も変わらないから、演算前後の状態は同じであるので、演算前の状態による $P_{n,n+1}$ の期待値は 1 になる。一方の位置が空席の場合は、演算によって異なる状態になるので、期待値は 0 になると考える。

以上のような演算を、 n 位置には粒子はただか 1 個しか入らないとして、粒子を 1 個加える演算子を a_n^+ 、1 個差し引く演算子を a_n として表すことを考える。 n 位置に粒子が存在する時は $a_n^+|1\rangle = 0$ 、存在しない時は $a_n|0\rangle = 0$ となる。隣り合う 2 つの位置に関する演算であるので、 n 位置と $n+1$ 位置の粒子の入り方には 4 種類ある。その 4 種類に対応して、0 にならない a_n^+ と a_n の組み合わせは、

$$a_n a_{n+1}^+, \quad a_n^+ a_{n+1}, \quad a_n^+ a_n a_{n+1}^+ a_{n+1}, \quad a_n a_n^+ a_{n+1} a_{n+1}^+ \quad (1)$$

の 4 通りがあげられる。最初の 2 項は、どちらか一方に粒子が存在する場合の演算で 1 になり、最後の 2 項は両方に存在するか、両方に存在しない場合の演算で 1 になる。それ以外の状態に作用した場合は 0 になる。上の 4 つの式は粒子が存在する場合の数は 4 通りにそれぞれ対応している。

したがって、式 (1) の 4 項を加えた全体の期待値は、 l_n を n 位置の粒子の数とすると、 l_n, l_{n+1} に対して、両方同じ場合は最後の 2 項の固有状態になるので 1、どちらか一方に存在する場合は前の状態が異なる状態に移るので直交して 0 になる。したがって、4 つの全ての状態に対応して粒子を交換する演算と同じになるから、これを演算子 $P_{n,n+1}$ と表すと、

$$P_{n,n+1} = a_n a_{n+1}^+ + a_n^+ a_{n+1} + a_n^+ a_n a_{n+1}^+ a_{n+1} + a_n a_n^+ a_{n+1} a_{n+1}^+ \quad (2)$$

と書くことができる。

論文では a_n^+ と a_n を 2 次正方行列で次のように表現している.

$$a_n^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad a_n = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{O-2})$$

これでも問題はないと考えられるが, そもそも, s_z を ± 1 増減する昇降演算子はスピン演算子 s_x, s_y, s_z から a_n^+ と a_n がこの昇降演算子に対応していると考えてもよい. したがって, その場合, これらの演算子にパウリの行列 (式 (5)) を用いた場合は,

$$a_n^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad a_n = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

となる. これに対応する状態をベクトルで表すと, 粒子が存在する場合と存在しない場合に対応してそれぞれ,

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

となる.

以下では, 論文の表現 (O-2) に従って a_n^+ と a_n を表すことにしよう. 粒子の存在を示すベクトルの式 (4) を論文の演算子の表現 (O-2) に対応するベクトルにするには, 式 (4) の両者を交換すれば良い.

スピンとの関係を考えるときには, 次のスピンに関するパウリの行列を考えれば良い.

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5)$$

明らかに, これから,

$$\sigma_x = a_n^+ + a_n \quad (6)$$

$$\sigma_y = i(a_n^+ - a_n) \quad (7)$$

$$\sigma_z = a_n a_n^+ - a_n^+ a_n = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (8)$$

$$a_n^+ = \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y) \quad (9)$$

$$a_n = \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y) \quad (10)$$

という関係が成り立つことがわかる. 式 (9), (10) では量子力学の通常の昇降演算子の関係式と符号が異なる. その理由は式 (O-2) が逆に定義されているためで, 式 (3) を用いた場合は, 式 (7), (9), (10) の虚数単位の符号を逆にすればよい. (ここではそうはしない.)

いま,

$$\boldsymbol{\sigma}_n = \begin{pmatrix} \sigma_{nx} \\ \sigma_{ny} \\ \sigma_{nz} \end{pmatrix} \quad (11)$$

とすると,

$$\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_{n+1} = \sigma_{nx}\sigma_{n+1,x} + \sigma_{ny}\sigma_{n+1,y} + \sigma_{nz}\sigma_{n+1,z} \quad (12)$$

となる. 式 (6)–(8) から,

$$\begin{aligned} \sigma_{nx}\sigma_{n+1,x} + \sigma_{ny}\sigma_{n+1,y} &= (a_n^+ + a_n)(a_{n+1}^+ + a_{n+1}) - (a_n^+ - a_n)(a_{n+1}^+ - a_{n+1}) \\ &= a_n^+ a_{n+1} + a_n a_{n+1}^+ + a_n^+ a_{n+1} + a_n a_{n+1}^+ \\ &= 2a_n^+ a_{n+1} + 2a_n a_{n+1}^+ \end{aligned} \quad (13)$$

となる.

$$\begin{aligned}
\sigma_{nz}\sigma_{n+1,z} &= (a_n a_n^+ - a_n^+ a_n)(a_{n+1} a_{n+1}^+ - a_{n+1}^+ a_{n+1}) \\
&= a_n a_n^+ a_{n+1} a_{n+1}^+ + a_n^+ a_n a_{n+1}^+ a_{n+1} - a_n a_n^+ a_{n+1}^+ a_{n+1} - a_n^+ a_n a_{n+1} a_{n+1}^+ \\
&= a_n a_n^+ a_{n+1} a_{n+1}^+ + a_n^+ a_n a_{n+1}^+ a_{n+1} - a_n a_n^+ (1 - a_{n+1} a_{n+1}^+) - a_n^+ a_n (1 - a_{n+1}^+ a_{n+1}) \\
&= 2a_n a_n^+ a_{n+1} a_{n+1}^+ + 2a_n^+ a_n a_{n+1}^+ a_{n+1} - a_n a_n^+ - a_n^+ a_n \\
&= 2a_n a_n^+ a_{n+1} a_{n+1}^+ + 2a_n^+ a_n a_{n+1}^+ a_{n+1} - 1
\end{aligned} \tag{14}$$

となる. したがって, 式 (13), (14) を式 (12) に代入することにより,

$$\sigma_n \cdot \sigma_{n+1} = 2a_n^+ a_{n+1} + 2a_n a_{n+1}^+ + 2a_n a_n^+ a_{n+1} a_{n+1}^+ + 2a_n^+ a_n a_{n+1}^+ a_{n+1} - 1 \tag{15}$$

となる. これより, 式 (2) と比較することにより, 直接,

$$P_{n,n+1} = \frac{1 + \sigma_n \cdot \sigma_{n+1}}{2} \tag{16}$$

という式が得られる. ここで,

$$P_{n,n+1} = a_n^+ a_{n+1} + a_n a_{n+1}^+ + a_n a_n^+ a_{n+1} a_{n+1}^+ + a_n^+ a_n a_{n+1}^+ a_{n+1} \tag{17}$$

である. 論文では第2項の a_n と a_{n+1}^+ の順番が逆である. 変数の配置は都合の良い方を選べばよい. 論文のほうは, 最初の2項が全体でエルミートになっていて, 物理的な整合性が考慮されている.

式 (17) から,

$$P = \sum_{n=1}^N P_{n,n+1} = \sum_{n=1}^N \frac{1 + \sigma_n \cdot \sigma_{n+1}}{2} \tag{再 O-1}$$

となる.

式 (17) はさらに,

$$\begin{aligned}
P_{n,n+1} &= a_n^+ a_{n+1} + a_n a_{n+1}^+ + (1 - a_n^+ a_n)(1 - a_{n+1}^+ a_{n+1}) + a_n^+ a_n a_{n+1}^+ a_{n+1} \\
&= a_n^+ a_{n+1} + a_n a_{n+1}^+ - a_n^+ a_n - a_{n+1}^+ a_{n+1} + 2a_n^+ a_n a_{n+1}^+ a_{n+1} + 1
\end{aligned} \tag{18}$$

とすることができる. 周期的な境界条件を取り入れると, $a_{a+N} = a_n$ であるから, $a_n^+ a_n$ と $a_{n+1}^+ a_{n+1}$ の1から N までの総和は同じである. したがって,

$$\begin{aligned}
P &= \sum_{n=1}^N P_{n,n+1} \\
&= \sum_{n=1}^N (a_n^+ a_{n+1} + a_n a_{n+1}^+ - a_n^+ a_n - a_{n+1}^+ a_{n+1} + 2a_n^+ a_n a_{n+1}^+ a_{n+1} + 1) \\
&= \sum_{n=1}^N (a_n^+ a_{n+1} + a_n a_{n+1}^+ - 2a_n^+ a_n + 2a_n^+ a_n a_{n+1}^+ a_{n+1}) + N
\end{aligned} \tag{19}$$

となる.

式 (19) は, 式 (17) と同様に, 論文の式 (O-3) と第2項の演算子の順番が異なる点に注意を要する. この後で, 反交換関係が導入されるが, このままでは都合が悪い. それで式 (17) あるいは式 (19) を, 演算子の部分とそのエルミート共役の和の形にしておきたい. つまり, 全体としてエルミート演算子にしたい. そのためには, 式 (19) の第2項の演算子の順番を変えて $a_{n+1}^+ a_n$ とすればよい. そうすると, 第2項は第1項のエルミート共役になり, 第3項と第4項はもともとそれ自身がエルミート共役に等しく, つまり自己随伴であるから,

全体としてエルミート演算子になる。そのように変更すると、結局、論文の式 (O-3) と一致するようになる。したがって、

$$P = \sum_{n=1}^N (a_n^+ a_{n+1} + a_{n+1}^+ a_n - 2a_n^+ a_n + 2a_n^+ a_n a_{n+1}^+ a_{n+1}) + N \quad (\text{O-3-1})$$

となる。

式 (19) の第 2 項をエルミートになるように演算子の順序を変えるのは少し唐突に感じるかもしれないが、これは物理量がエルミートでなければならないという要請から来る。

式 (16) に含まれる σ_n と σ_{n+1} はエルミートであるが、 $\sigma_n \cdot \sigma_{n+1}$ は必ずしもエルミートとは限らない。したがって、異なる位置の間の相互作用エネルギーはエルミートになるように定義しないとイケない。本来は、 $(\sigma_n \cdot \sigma_{n+1} + \sigma_{n+1} \cdot \sigma_n)/2$ のような形に定義するのも一つの考えである。ここでは、したがって、論文では、上に述べたような演算子の順序にすることによりエルミートにしているということになる。

* * * * *

ここまでの意味は、スピン演算子の 2 次の積は生成消滅演算子の 2 次と 4 次の積で表すことができるということである。以下では、これらの演算子に交換関係あるいは反交換関係を導入することを考えよう。

量子力学では、生成消滅演算子 a_n^+ , a_m は可換か、そうでなければ反交換である。式 (3) から明らかなように、

$$a_n^+ a_n + a_n a_n^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 1 \quad (\text{20})$$

であるから、今の場合は反交換関係を考えれば良い。 a_n^+ , a_m に反交換関係を導入しても、 P では n に関する総和になるので、そうすることの影響はない。したがって、次の反交換関係が矛盾なく導入される。

$$[a_n, a_m^+]_+ = \delta_{nm}, \quad [a_n, a_m]_+ = [a_n^+, a_m^+]_+ = 0 \quad (\text{O-4})$$

ここで、次のような a_n , a_n^+ のフーリエ変換を考える。

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N a_n e^{\frac{2\pi i}{N} kn} \quad (\text{21})$$

$$a_k^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N a_n e^{-\frac{2\pi i}{N} kn} \quad (\text{22})$$

a_n および a_n^+ は a_k , a_k^+ を用いて次のようにフーリエ逆変換される。

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N a_k e^{-\frac{2\pi i}{N} nk} \quad (\text{23})$$

$$a_n^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N a_k e^{\frac{2\pi i}{N} nk} \quad (\text{24})$$

これにより、任意の a_n の組み合わせが a_k の線形結合で表される。 a_n^+ も同様である。

式 (O-3-1) にフーリエ変換を適用する前に以下の準備が必要である。

まず、式 (19) または式 (O-3-1) の小括弧内の後ろの 2 項を次のように変形する。

$$\begin{aligned} -a_n^+ a_n + a_n^+ a_n a_{n+1}^+ a_{n+1} &= -(1 - a_n a_n^+) + (1 - a_n a_n^+)(1 - a_{n+1} a_{n+1}^+) \\ &= -1 + a_n a_n^+ + 1 - a_n a_n^+ - a_{n+1} a_{n+1}^+ + a_n a_n^+ a_{n+1} a_{n+1}^+ \\ &= -a_{n+1} a_{n+1}^+ + a_n a_n^+ a_{n+1} a_{n+1}^+ \end{aligned} \quad (\text{25})$$

最後の式の第1項は n で総和をとると $a_n a_n^+$ と同じであるから、これを考慮すると式 (19) は

$$P = \sum_{n=1}^N (a_n^+ a_{n+1} - a_n^+ a_n + a_n^+ a_n a_{n+1}^+ a_{n+1} + \text{C.C.}) + N \quad (26)$$

と書くことができる。この式はさらに、定数項を無視して、次のように書くことができる。

$$P = \sum_{n,m=1}^N (a_n^+ a_m \delta(n-m+1) - a_n^+ a_m \delta(n-m) + a_n^+ a_n a_m^+ a_m \delta(n-m+1) + \text{C.C.}) \quad (27)$$

ここで、次の関係に注目する¹。

$$\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N e^{\frac{2\pi i}{N} k(n-m)} = \delta_{n,m} \quad (28)$$

この式で、 $\delta_{n,m}$ はクロネッカーのデルタであるが、これを論文のように $\delta(n-m)$ と書くことにしよう。そうすると、 $\delta(n-m) = \delta(m-n)$ ということに注意して、式 (27) は、

$$\begin{aligned} P &= \sum_{n,m=1}^N \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (a_n^+ a_m e^{\frac{2\pi i}{N} k(-n+m-1)} - a_n^+ a_m e^{\frac{2\pi i}{N} k(-n+m)} + \text{C.C.}) \\ &\quad + \sum_{n,m=1}^N (a_n^+ a_n a_m^+ a_m \delta(n-m+1) + \text{C.C.}) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n,m=1}^N \sum_{k=1}^N (a_n^+ e^{-\frac{2\pi i}{N} kn} a_m e^{\frac{2\pi i}{N} km} e^{-\frac{2\pi i}{N} k} - a_n^+ e^{-\frac{2\pi i}{N} kn} a_m e^{\frac{2\pi i}{N} km} + \text{C.C.}) \\ &\quad + \sum_{n,m=1}^N (a_n^+ a_n a_m^+ a_m \delta(n-m+1) + \text{C.C.}) \\ &= \sum_{k=1}^N (a_k^+ a_k e^{-\frac{2\pi i}{N} k} - a_k^+ a_k + \text{C.C.}) + \sum_{n,m=1}^N (a_n^+ a_n a_m^+ a_m \delta(n-m+1) + \text{C.C.}) \end{aligned} \quad (29)$$

となる。ここで、最後の式の複素共役項の部分を考えて、

$$\begin{aligned} a_n a_n^+ a_m a_m^+ &= -a_m^+ a_n a_n^+ a_m + a_n^+ a_n \\ &= a_m^+ a_n^+ a_n a_m - a_m^+ a_m + a_n^+ a_n \\ &= a_m^+ a_m a_n^+ a_n - a_m^+ a_m + a_n^+ a_n \end{aligned} \quad (30)$$

となることがわかる。第2項と第3項は総和をとることで相殺する。また

$$a_m^+ a_m a_n^+ a_n \delta(n-m+1) = a_n^+ a_n a_m^+ a_m \delta(m-n+1) = a_n^+ a_n a_m^+ a_m \delta(n-m-1) \quad (31)$$

¹ $n \neq 0$ のとき、

$$\sum_{k=1}^N e^{\frac{2\pi i}{N} nk} = \frac{e^{\frac{2\pi i}{N} n} (1 - e^{\frac{2\pi i}{N} n N})}{1 - e^{\frac{2\pi i}{N} n}} = \frac{e^{\frac{2\pi i}{N} nk} (1 - e^{2\pi i n})}{1 - e^{\frac{2\pi i}{N} n}} = 0$$

となる。一方、 $n = 0$ のとき、

$$\sum_{k=1}^N e^{\frac{2\pi i}{N} nk} = \sum_{k=1}^N 1 = N$$

である。したがって、2式をまとめると、次式になる。

$$\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N e^{\frac{2\pi i}{N} nk} = \delta_{n,0}$$

であるから、

$$P = \sum_{k=1}^N (a_k^+ a_k e^{-\frac{2\pi i}{N}k} - a_k^+ a_k + \text{C.C.}) + \sum_{n,m=1}^N a_n^+ a_n a_m^+ a_m \delta(n-m \pm 1) \quad (\text{O-5})$$

$$= \sum_{k=1}^N 2a_k^+ a_k \left(\cos \frac{2\pi}{N}k - 1\right) + \sum_{n,m=1}^N a_n^+ a_n a_m^+ a_m \delta(n-m \pm 1) \quad (\text{O-6})$$

という関係式が成り立つ。

この式は、論文で述べられているように、1つのハミルトニアンに相当し、第1項はブロッホのスピนว、あるいは格子振動と同じである。第2項は、普通短距離力で小さいから、散乱を表す摂動項として扱う。この状態は、磁化が完全に近い低温の磁性体の場合に近い。

ここの例は、スピン演算子を生成消滅演算子で表すことができるということ、および、スピン間相互作用エネルギーは反対称演算子の2次と4次の項で表されるということを示す。

* * * * *

反交換関係を有する演算子の集合は、直交性があるので上の例のような使い方があるので便利だという。

生成消滅演算子 a_n^+ , a_n を使う代わりに、 $a_n^+ + a_n$, $i(a_n^+ - a_n)$ を使っても上の例と同様な使い方ができると論文には書かれている。そもそも、 $a_n^+ + a_n$, $i(a_n^+ - a_n)$ は式(6)-(8)からわかるように、 σ_{nx} , σ_{ny} であるから、 $a_n^+ + a_n = \sigma_{nx}$, $i(a_n^+ - a_n) = \sigma_{ny}$ であつて、ともにエルミート演算子であり、 a_n^+ , a_n の反交換関係を引き継いでいるから、 σ_{nx} , σ_{ny} の演算子においては反交換関係が成り立つ。式(O-4)により、この演算子の間の反交換関係は、

$$\begin{aligned} \sigma_{nx} \sigma_{my} &= (a_n^+ + a_n) i(a_m^+ - a_m) = i(a_n^+ a_m^+ - a_n^+ a_m + a_n a_m^+ - a_n a_m) \\ \sigma_{my} \sigma_{nx} &= i(a_m^+ - a_m) (a_n^+ + a_n) = i(a_m^+ a_n^+ + a_m^+ a_n - a_m a_n^+ - a_m a_n) \end{aligned}$$

であるから、

$$[\sigma_{nx}, \sigma_{my}]_+ = i([a_n^+, a_m^+]_+ + [a_m^+, a_n]_+ - [a_n^+, a_m]_+ - [a_n, a_m]_+) = i(\delta_{m,n} - \delta_{n,m}) = 0 \quad (32)$$

となる。これは、式(O-4)あるいは、この後で出てくる式(O-7)とは少し異なる反交換関係を示している。

次に、

$$\begin{aligned} \sigma_{nx} \sigma_{mx} &= (a_n^+ + a_n)(a_m^+ + a_m) = a_n^+ a_m^+ + a_n^+ a_m + a_n a_m^+ + a_n a_m \\ \sigma_{mx} \sigma_{nx} &= (a_m^+ + a_m)(a_n^+ + a_n) = a_m^+ a_n^+ + a_m^+ a_n + a_m a_n^+ + a_m a_n \end{aligned}$$

であるから、

$$[\sigma_{nx}, \sigma_{mx}]_+ = [a_n^+, a_m^+]_+ + [a_m^+, a_n]_+ + [a_n^+, a_m]_+ + [a_n, a_m]_+ = \delta_{m,n} + \delta_{n,m} = 2\delta_{m,n} \quad (33)$$

である。

同様に、

$$\begin{aligned} \sigma_{ny} \sigma_{my} &= -(a_n^+ - a_n)(a_m^+ - a_m) = -a_n^+ a_m^+ + a_n^+ a_m + a_n a_m^+ - a_n a_m \\ \sigma_{my} \sigma_{ny} &= -(a_m^+ - a_m)(a_n^+ - a_n) = -a_m^+ a_n^+ + a_m^+ a_n + a_m a_n^+ - a_m a_n \end{aligned}$$

であるから、

$$[\sigma_{ny}, \sigma_{my}]_+ = [a_n^+, a_m^+]_+ + [a_m^+, a_n]_+ + [a_n^+, a_m]_+ + [a_n, a_m]_+ = \delta_{m,n} + \delta_{n,m} = 2\delta_{m,n} \quad (34)$$

となる。以上をまとめると、

$$\begin{aligned} [\sigma_{nx}, \sigma_{my}]_+ &= 0 \\ [\sigma_{nx}, \sigma_{mx}]_+ &= 2\delta_{m,n} \\ [\sigma_{ny}, \sigma_{my}]_+ &= 2\delta_{m,n} \end{aligned} \quad (35)$$

となる。

式 (33), (34) から、

$$\sigma_{nx}^2 = \sigma_{my}^2 = 1 \quad (36)$$

である。

ちなみに、スピン角運動量演算子の交換関係は

$$[\sigma_{nx}, \sigma_{ny}]_- = 2i\sigma_{nz} \quad (37)$$

である。

σ_{nx} と σ_{ny} は、 a_n^+ , a_n の 1 次結合として表されるから、 a_n^+ , a_n と同じような反交換関係成り立ちそうであるが、全く同じにはならない。

スピン間相互作用を表す演算子として、上のような生成消滅演算子 a_n^+ , a_n や、スピン演算子と同じ $a_n^+ + a_n$, $i(a_n^+ - a_n)$ を一般化した、次のような反交換関係の演算子 x_r を考えることができる。

$$[x_r, x_s]_+ = 2\delta_{rs}, \quad r, s = 1, \dots, 2N \quad (O-7)$$

上の式から、 $x_r^2 = 1$ であるから、この後で述べるような意味で、 x_r と x_s が直交すれば $2N$ 次元ベクトル空間の基底を形成すると言える。

$2N$ まで必要なことは、 a_n^+ , a_n が N まであることに対応する。論文には $2N$ 個の演算子 x_r が互いに直交するということの直接的な説明はないが、ここでは、この演算子が作用する $2N$ 次元ベクトル空間の任意のベクトルによる $x_r x_s$ の期待値が 0 であるときに x_r と x_s が直交すると定義することにしよう。以下、このことを具体的に示してみよう。

x_r の具体的な表現としては、 $2N$ 個の 2 次正方行列の直積の形を考える。その直積の成分としては、

$$S = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (38)$$

$$C = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (39)$$

および、 2×2 の単位行列 E を考える。このとき、 $C^\dagger C = E$, $C^\dagger = C$, $C^2 = S^2 = E$, $CS = -SC$ ということにまず注意しよう。ここで、 \dagger は転置複素共役を表す。

以上の S , C , E を用いて、 x_r は、 $2N$ 個の行列の直積で、直積の r 番目の行列要素を S 、それよりも上の行列要素を C 、 r 番目より下の行列要素は全て単位行列 E とするものである。すなわち、 x_r は次の $2N$ 個の 2 次正方行列の直積である。

$$x_r = \overbrace{C \otimes \cdots \otimes C}^{r-1} \otimes S \otimes E \otimes \cdots \otimes E \quad (40)$$

これが直交基底になることを見てみよう。

まず、 $r = s$ のときは、 $x_r x_s$ は $E \otimes \cdots \otimes E$ という単位行列の直積になる。また、 x_r と x_s は反交換であることがわかる。つまり、式 (O-7) が満たされることがわかる。

次に、 $r \neq s$ のときは、 x_r と x_s が直交することを、次の形の 2 次元ベクトルの直積で表される 2^{2N} 次元ベクトルによる期待値をとるという場合で考えてみよう。

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (41)$$

$r \neq s$ であれば、 x_r と x_s では S の位置が異なるために、 $x_r x_r$ は必ず、 E または C を 1 個以上、あるいはその両方を含む。したがって、 $x_r x_r$ を $2N$ 次元ベクトルに作用させたとき、この直積ベクトルの対応する部分の成分は反転するので、このベクトルで期待値をとれば 0 になることがわかる。これは任意のベクトルについても言えることであるから、期待値は必ず 0 になることがわかる。つまり、直交する。

式 (O-7) で表される演算子の数は $2N$ であるが、式 (41) が張るベクトル空間は 2^{2N} 次元ベクトル空間の部分空間である。

このような x_r の意味は、 x_r と x_s は反可換でありながら、 $x_r x_s$ のような 2 次積は、 x_r または x_s を含まない任意の x_i の多項式と可換になるから、 x_r はそういう特別な演算子の系を作ることができるということである。実は、このような演算子の系は、イジングモデルを固有値問題に還元したときに現れる演算子系でも見られる。この演算子は、スピン相互作用を一部行列化したために出て来る演算子である。イジングモデルでは、必然的にこのような演算子を扱わざるを得ず、そうした特定の関係の演算子を含む固有値問題を処理する必要がある。イジングモデルにおけるこのような特殊な演算子系から、これと等価な反交換関係を有する演算子系として x_r のような演算子系への変換を考えれば、イジングモデルの固有値問題が解きやすくなる可能性があるということである。

そういうことで、ここで、 x_r のような反交換関係を有する演算子を用いて隣接位置のスピン間相互作用を表すことを考えてみよう。すなわち、表現する対象となるのは、もう一つの例として、

$$P' = \sum_{n=1}^N (\sigma_{nx} \sigma_{n+1,x} + \sigma_{ny} \sigma_{n+1,y}) \equiv \sum_{n=1}^N (A_n + B_n) \quad (O-8)$$

である。ただし、

$$A_n = \sigma_{nx} \sigma_{n+1,x} \quad (42)$$

$$B_n = \sigma_{ny} \sigma_{n+1,y} \quad (43)$$

である。

ここで、演算子 A_n 、 B_n の間の交換関係、反交換関係を調べてみよう。まず、

$$[A_n, A_m]_- = \sigma_{nx} \sigma_{n+1,x} \sigma_{mx} \sigma_{m+1,x} - \sigma_{mx} \sigma_{m+1,x} \sigma_{nx} \sigma_{n+1,x} \quad (44)$$

であるから、 $m = n$ のときは明らかに $[A_n, A_m]_- = 0$ が成り立つ。

$m = n + 1$ のとき、式 (33)、(35) から、

$$\begin{aligned} [A_n, A_{n+1}]_- &= \sigma_{nx} \sigma_{n+1,x} \sigma_{n+1,x} \sigma_{n+2,x} - \sigma_{n+1,x} \sigma_{n+2,x} \sigma_{nx} \sigma_{n+1,x} \\ &= \sigma_{nx} \sigma_{n+2,x} - \sigma_{n+2,x} \sigma_{nx} = 2\sigma_{nx} \sigma_{n+2,x} \neq 0 \end{aligned} \quad (45)$$

である。

$m = n - 1$ のときも、式 (33)、(35) から、

$$\begin{aligned} [A_n, A_{n-1}]_- &= \sigma_{nx} \sigma_{n+1,x} \sigma_{n-1,x} \sigma_{nx} - \sigma_{n-1,x} \sigma_{nx} \sigma_{nx} \sigma_{n+1,x} \\ &= \sigma_{n+1,x} \sigma_{n-1,x} - \sigma_{n-1,x} \sigma_{n+1,x} = 2\sigma_{n+1,x} \sigma_{n-1,x} \neq 0 \end{aligned} \quad (46)$$

である.

B_n と B_m についても同様に,

$$[B_n, B_m]_- = \sigma_{ny}\sigma_{n+1,y}\sigma_{my}\sigma_{m+1,y} - \sigma_{my}\sigma_{m+1,y}\sigma_{ny}\sigma_{n+1,y} \quad (47)$$

であるから, $m = n$ のときには, $[B_n, B_m]_- = 0$ である.

次に, $m = n + 1$ のとき, 式 (33), (35) から,

$$\begin{aligned} [B_n, B_m]_- &= \sigma_{ny}\sigma_{n+1,y}\sigma_{n+1,y}\sigma_{n+2,y} - \sigma_{n+1,y}\sigma_{n+2,y}\sigma_{ny}\sigma_{n+1,y} \\ &= \sigma_{ny}\sigma_{n+2,y} - \sigma_{n+2,y}\sigma_{ny} = 2\sigma_{ny}\sigma_{n+2,y} \neq 0 \end{aligned} \quad (48)$$

である.

$m = n - 1$ のときも, 式 (33), (35) から, $[A_n, A_m]_-$ と同様に,

$$[B_n, B_m]_- = 2\sigma_{n+1,y}\sigma_{n-1,y} \neq 0 \quad (49)$$

が導かれる.

次に,

$$[A_n, B_m]_- = \sigma_{nx}\sigma_{n+1,x}\sigma_{my}\sigma_{m+1,y} - \sigma_{my}\sigma_{m+1,y}\sigma_{nx}\sigma_{n+1,x} \quad (50)$$

を考えよう. 式 (32) より, 任意の m, n に関して, σ_{nx} と σ_{my} には反交換関係が成り立つから, 1 回の置換で符号が変換し, 上式第 2 項で, $\sigma_{nx}\sigma_{n+1,x}$ がその項の先頭に移動するのに符号の変化はない. ということなので, 上式は 0 である. すなわち,

$$[A_n, B_m]_- = 0 \quad (51)$$

である.

次に, 反交換子 $[A_n, A_m]_+$, $[B_n, B_m]_+$ を考えよう.

$$[A_n, A_m]_+ = \sigma_{nx}\sigma_{n+1,x}\sigma_{mx}\sigma_{m+1,x} + \sigma_{mx}\sigma_{m+1,x}\sigma_{nx}\sigma_{n+1,x} \quad (52)$$

で, $m = n$ のとき,

$$[A_n, A_n]_+ = -2\sigma_{nx}\sigma_{n+1,x}\sigma_{n+1,x}\sigma_{nx} = -2\sigma_{nx}\sigma_{nx} = -2 \quad (53)$$

したがって,

$$A_n^2 = -1 \quad (54)$$

である.

$m = n + 1$ のとき,

$$\begin{aligned} [A_n, A_{n+1}]_+ &= \sigma_{nx}\sigma_{n+1,x}\sigma_{n+1,x}\sigma_{n+2,x} + \sigma_{n+1,x}\sigma_{n+2,x}\sigma_{nx}\sigma_{n+1,x} \\ &= \sigma_{nx}\sigma_{n+2,x} + \sigma_{n+1,x}\sigma_{n+1,x}\sigma_{n+2,x}\sigma_{nx} = \sigma_{nx}\sigma_{n+2,x} + \sigma_{n+2,x}\sigma_{nx} \\ &= \sigma_{nx}\sigma_{n+2,x} - \sigma_{nx}\sigma_{n+2,x} = 0 \end{aligned} \quad (55)$$

$m = n - 1$ のときも,

$$\begin{aligned} [A_n, A_{n-1}]_+ &= \sigma_{nx}\sigma_{n+1,x}\sigma_{n-1,x}\sigma_{n,x} + \sigma_{n-1,x}\sigma_{n,x}\sigma_{nx}\sigma_{n+1,x} \\ &= \sigma_{n+1,x}\sigma_{n-1,x} + \sigma_{n-1,x}\sigma_{n+1,x} = 0 \end{aligned} \quad (56)$$

である. したがって,

$$[A_n, A_{n\pm 1}]_+ = 0 \quad (57)$$

である.

それ以外は,

$$[A_n, A_m]_+ = 2\sigma_{nx}\sigma_{n+1,x}\sigma_{mx}\sigma_{m+1,x} \neq 0 \quad (58)$$

となる.

$[B_n, B_m]_+$ についても同様の関係が成り立つ.

以上の結果は, 論文の式 (O-9) とは一致しない. しかし, σ_{nx} と σ_{my} の反交換関係を示す式 (32)–(34) の条件を一旦無視して, 通常のスピン演算子で成り立つ交換関係と反交換関係, すなわち, $n \neq m$ のときは交換関係が成り立ち, $m = n$ のときには反交換関係が成り立つとしよう. つまり,

$$\begin{aligned} [\sigma_{nx}, \sigma_{ny}]_- &= 2i\sigma_{nz} \\ [\sigma_{nx}, \sigma_{my}]_- &= 0 \quad (n \neq m) \\ [\sigma_{nx}, \sigma_{mx}]_- &= [\sigma_{ny}, \sigma_{my}]_- = 0 \\ [\sigma_{nx}, \sigma_{ny}]_+ &= 0 \\ \sigma_{nx}^2 &= \sigma_{ny}^2 = 1 \end{aligned} \quad (59)$$

である.

式 (59) を式 (44), (47) それぞれの第 1 式に適用すると, すぐに

$$[A_n, A_m]_- = [B_n, B_m]_- = 0 \quad (O-9-1)$$

が成り立つことがわかる.

$[A_n, B_m]_-$ に関しては, 式 (50) に式 (59) を適用する.

まず $m = n$ のとき, および $m \neq \pm 1$ のときは明らかに $[A_n, B_m]_- = 0$ である.

$m = n + 1$ のとき,

$$\begin{aligned} [A_n, B_{n+1}]_- &= \sigma_{nx}\sigma_{n+1,x}\sigma_{n+1,y}\sigma_{n+2,y} - \sigma_{n+1,y}\sigma_{n+2,y}\sigma_{nx}\sigma_{n+1,x} \\ &= \sigma_{nx}\sigma_{n+1,x}\sigma_{n+1,y}\sigma_{n+2,y} - \sigma_{nx}\sigma_{n+1,y}\sigma_{n+1,x}\sigma_{n+2,y} \\ &= \sigma_{nx}[\sigma_{n+1,x}, \sigma_{n+1,y}]_- \sigma_{n+2,y} = 2i\sigma_{nx}\sigma_{n+1,z}\sigma_{n+2,y} \neq 0, \end{aligned} \quad (60)$$

$m = n - 1$ のとき,

$$\begin{aligned} [A_n, B_{n-1}]_- &= \sigma_{nx}\sigma_{n+1,x}\sigma_{n-1,y}\sigma_{n,y} - \sigma_{n-1,y}\sigma_{n,y}\sigma_{nx}\sigma_{n+1,x} \\ &= \sigma_{nx}\sigma_{n,y}\sigma_{n+1,x}\sigma_{n-1,y} - \sigma_{n,y}\sigma_{nx}\sigma_{n+1,x}\sigma_{n-1,y} \\ &= [\sigma_{n,x}, \sigma_{n,y}]_- \sigma_{n+1,x}\sigma_{n-1,y} = 2i\sigma_{n,z}\sigma_{n+1,x}\sigma_{n-1,y} \neq 0, \end{aligned} \quad (61)$$

となるから, 結局,

$$[A_n, B_m]_- = 0 \quad \text{if} \quad n = m \quad \text{or} \quad |n - m| \neq 1 \quad (O-9-2)$$

が成り立つ.

次に, $[A_n, B_{n\pm 1}]_+$ の場合を考えよう. $m = n + 1$ のとき, 式 (59) を用いて,

$$\begin{aligned} [A_n, B_{n+1}]_+ &= \sigma_{nx}\sigma_{n+1,x}\sigma_{n+1,y}\sigma_{n+2,y} + \sigma_{n+1,y}\sigma_{n+2,y}\sigma_{nx}\sigma_{n+1,x} \\ &= \sigma_{nx}\sigma_{n+1,x}\sigma_{n+1,y}\sigma_{n+2,y} + \sigma_{nx}\sigma_{n+1,y}\sigma_{n+1,x}\sigma_{n+2,y} \\ &= \sigma_{nx}[\sigma_{n+1,x}, \sigma_{n+1,y}]_+ \sigma_{n+2,y} = 0 \end{aligned} \quad (62)$$

となる.

$m = n - 1$ のときも、式 (59) の第 4 式を用いて、

$$\begin{aligned} [A_n, B_{n+1}]_+ &= \sigma_{nx}\sigma_{n+1,x}\sigma_{n-1,y}\sigma_{n,y} + \sigma_{n-1,y}\sigma_{n,y}\sigma_{nx}\sigma_{n+1,x} \\ &= [\sigma_{n,x}, \sigma_{n,y}]_+ \sigma_{n+1,x}\sigma_{n-1,y} = 0 \end{aligned} \quad (63)$$

となる。また、式 (59) の第 5 式を用いて、

$$\begin{aligned} A_n^2 &= \sigma_{nx}\sigma_{n+1,x}\sigma_{nx}\sigma_{n+1,x} = \sigma_{nx}^2\sigma_{n+1,x}^2 = 1 \\ B_n^2 &= \sigma_{ny}\sigma_{n+1,y}\sigma_{ny}\sigma_{n+1,y} = \sigma_{ny}^2\sigma_{n+1,y}^2 = 1 \end{aligned}$$

となるから、結局、

$$[A_n, B_{n\pm 1}]_+ = 0, \quad A_n^2 = B_n^2 = 1 \quad (\text{O-9-3})$$

が成り立つ。

* * * * *

上で述べた演算子 A_n と B_n の間には、隣り合う位置で反可換で、それ以外では可換という、少し特別な反交換関係と交換関係が成り立つ。このような演算子は、スピン演算子 σ_{nx} 、 σ_{ny} から構成できたが、南部は反可換な $2N$ 個の演算子 $x_n (n = 1, \dots, 2N)$ から構成できると述べている。この演算子 x_n は次の反交換関係を満たす。

$$[x_r, x_s]_+ = 2\delta_{rs}, \quad r, s = 1, \dots, 2N \quad (\text{再 O-7})$$

また、 $x_{2N+1} = x_1$ という周期的条件を満たす。

N が偶数の場合を考える。そのとき、 A_n と B_n は次のように構成される。

$$\begin{aligned} A_n &= ix_{2n}x_{2n+1}, \\ B_n &= ix_{2n-1}x_{2n+2}, \end{aligned} \quad (\text{O-10})$$

こうして構成された A_n と B_n が式 (O-9) の関係式を満足することを確かめてみよう。

$$[A_n, A_m]_- = -(x_{2n}x_{2n+1}x_{2m}x_{2m+1} - x_{2m}x_{2m+1}x_{2n}x_{2n+1}) \quad (64)$$

において、 $m = n$ のときは明らかに 0 である。

$m \neq n$ のときは、 $2m$ と $2m + 1$ は $2n$ および $2n + 1$ のいずれとも一致しない。したがって、第 2 項は偶数の置換で第 1 項に等しくなり、2 項は相殺してこれも 0 となる。

次に、

$$[B_n, B_m]_- = -(x_{2n-1}x_{2n+2}x_{2m-1}x_{2m+2} - x_{2m-1}x_{2m+2}x_{2n-1}x_{2n+2}) \quad (65)$$

において、 $m = n$ のときは明らかに 0 である。

$m \neq n$ のときは、 $2m - 1$ と $2m + 2$ は $2n - 1$ および $2n + 2$ のいずれとも一致しない。したがって、偶数の置換で 2 項は相殺することになって、これも 0 となる。

次に、

$$[A_n, B_m]_- = -(x_{2n}x_{2n+1}x_{2m-1}x_{2m+2} - x_{2m-1}x_{2m+2}x_{2n}x_{2n+1}) \quad (66)$$

において、 $m = n$ のときは、偶数回の置換で 2 項が相殺するようになるので、明らかに 0 である。

$m \neq n \pm 1$ のときは、 $2m - 1$ 、 $2m + 2$ 、 $2n - 1$ および $2n + 2$ はすべて異なる。したがって、偶数の置換で 2 項は相殺することになって、これも 0 となる。

残った

$$[A_n, B_{n+1}]_+ = -(x_{2n}x_{2n+1}x_{2n+1}x_{2n+4} + x_{2n+1}x_{2n+4}x_{2n}x_{2n+1}) \quad (67)$$

および,

$$[A_n, B_{n-1}]_+ = -(x_{2n}x_{2n+1}x_{2n-3}x_{2n} + x_{2n-3}x_{2n}x_{2n}x_{2n+1}) \quad (68)$$

において, いずれも第2項を奇数回の置換で第1項と同じにすることができるので, 相殺して0になる.

また, 式 (O-7) より $x_r^2 = 1$ であるから,

$$\begin{aligned} A_n^2 &= -x_{2n}x_{2n+1}x_{2n}x_{2n+1} = x_{2n}^2x_{2n+1}^2 = 1, \\ B_n^2 &= -x_{2n-1}x_{2n+2}x_{2n-1}x_{2n+2} = x_{2n-1}^2x_{2n+2}^2 = 1, \end{aligned}$$

が成り立つ.

結局, 以上をまとめると,

$$\begin{aligned} [A_n, A_m]_- &= [B_n, B_m]_- = 0, \\ [A_n, B_m]_- &= 0, \quad \text{if } n = m \quad \text{or} \quad |n - m| \neq 1 \\ [A_n, B_{n\pm 1}]_+ &= 0, \quad A_n^2 = B_n^2 = 1 \end{aligned} \quad (\text{O-9})$$

が成り立つ.

* * * * *

式 (59) の交換関係および反交換関係が成り立つとしよう. そうすると,

$$\prod_{n=1}^N A_n = \sigma_{1x}\sigma_{2x}\sigma_{2x}\sigma_{3x}\cdots\sigma_{Nx}\sigma_{N+1,x} = \sigma_{1x}^2\sigma_{2x}^2\sigma_{3x}^2\cdots\sigma_{Nx}^2 = 1 \quad (69)$$

および, 同様にして,

$$\prod_{n=1}^N B_n = \sigma_{1y}\sigma_{2y}\sigma_{2y}\sigma_{3y}\cdots\sigma_{Ny}\sigma_{N+1,y} = \sigma_{1y}^2\sigma_{2y}^2\sigma_{3y}^2\cdots\sigma_{Ny}^2 = 1 \quad (70)$$

となる.

一方, 式 (O-10) の定義と式 (O-7) の交換関係を用いた場合は, 第1式で, x_{2N} を $2N-1$ 回反交換置換して先頭まで持ってくることで, 第2式では, x_4, x_6, \dots を $N-1$ 回右側へ1回反交換置換することを考えて,

$$\begin{aligned} \prod_{n=1}^N A_n &= \prod_{n=1}^N x_{2n}x_{2n+1} \\ &= i^N (x_2x_3)(x_4x_5)\cdots(x_{2N}x_1) = -i^N x_1(x_2x_3)(x_4x_5)\cdots x_{2N} \end{aligned} \quad (71)$$

$$\begin{aligned} \prod_{n=1}^N B_n &= \prod_{n=1}^N x_{2n-1}x_{2n+2} \\ &= i^N (x_1x_4)(x_3x_6)(x_5x_8)\cdots(x_{2N-1}x_{2N+2}) \\ &= i^N (-1)^{N-1} x_1(x_3x_4)(x_5x_6)(x_7x_8)\cdots(x_{2N-1}x_{2N})x_{2N+2} \\ &= i^N (-1)^{N-1} x_1x_2x_3x_4x_5\cdots x_{2N-1}x_{2N} \end{aligned} \quad (72)$$

となる.

ここで, x を

$$-i^N x_1x_2x_3\cdots x_{2N} \equiv x \quad (73)$$

と定義しよう.

そうすると, N は偶数であることに注意すると,

$$\prod_{n=1}^N A_n = \prod_{n=1}^N B_n = x \quad (74)$$

である.

また, 式 (O-7) より $x_n^2 = 1$ であるから,

$$x^2 = i^{2N} (x_1 x_2 \cdots x_{2N})^2 = x_1^2 x_2^2 \cdots x_{2N}^2 = 1 \quad (75)$$

となる. ²したがって,

$$x = \pm 1 \quad (76)$$

である.

これは, 反交換演算子 x_n の系が, $x = 1$ と $x = -1$ の 2 つの等価な演算子空間にわけることができて, それぞれの空間の演算子は式 (O-8) の A_n と B_n の下で全く同等に振る舞うことを意味している.

このような関係は, Onsager[1] の論文に出てくる演算子 $C = C_1 C_2 \cdots C_N = \pm 1$ の関係と比較できる. Onsager の場合は, それぞれに対応して固有ベクトル空間が 2 つの等価な部分ベクトル空間に対応するという関係があった. また, 固有ベクトル関数を見出す際に重要な働きをしている.

* * * * *

式 (O-8) の P' を, x_n と y_n をフーリエ変換した x_k と y_k で表すことを考えよう. ただし,

$$x_k \equiv \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{n=1}^N x_{2n} e^{\frac{2\pi i}{N} kn}, \quad k = -N, -(N-1), \dots, N \quad (77)$$

$$y_k \equiv \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{n=1}^N x_{2n-1} e^{\frac{2\pi i}{N} kn}, \quad k = -N, -(N-1), \dots, N \quad (78)$$

である.

x_k, y_k の反交換関係を調べてみよう. x_n の反交換関係 (O-7) を考慮すると,

$$\begin{aligned} x_k x_{-l} &= \frac{1}{2N} \sum_{n,m=1}^N x_{2n} x_{2m} e^{\frac{2\pi i}{N} kn} e^{-\frac{2\pi i}{N} lm} \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{n,m=1}^N (-x_{2m} x_{2n} + 2\delta_{nm}) e^{\frac{2\pi i}{N} kn} e^{-\frac{2\pi i}{N} lm} \\ &= -x_{-l} x_k + \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{\frac{2\pi i}{N} (k-l)n} = -x_{-l} x_k + \delta_{kl} \end{aligned}$$

したがって,

$$[x_k, x_{-l}]_+ = \delta_{kl} \quad (O-12'-1)$$

が成り立つ.

2

$$x_1 x_2 \cdots x_{2N} x_1 x_2 \cdots x_{2N}$$

を考え, 右側の x_1 を左側の x_1 の隣に持つてくるのに $2N-1$ 回の反交換置換, 次に右側の x_2 を左側の x_2 の隣に持つてくるのに $2N-2$ 回, 以下, x_{2N-1} の 1 回置換まで, $1+2+\cdots+2N-1 = N(2N-1)$ 回の置換が必要である. N は偶数であるから, 偶数回の置換でその次の式が得られる.

y_k の反交換関係についても、全く同じ式展開により、

$$[y_k, y_{-l}]_+ = \delta_{kl} \quad (\text{O-12}'-2)$$

が成り立つ。

また、

$$\begin{aligned} x_k y_{-l} &= \frac{1}{2N} \sum_{n,m=1}^N x_{2n} x_{2m-1} e^{\frac{2\pi i}{N} kn} e^{-\frac{2\pi i}{N} lm} \\ &= \frac{1}{2N} \sum_{n,m=1}^N -x_{2m-1} x_{2n} e^{\frac{2\pi i}{N} kn} e^{-\frac{2\pi i}{N} lm} = -y_{-l} x_k \end{aligned}$$

したがって、

$$[x_k, y_{-l}]_+ = 0 \quad (\text{O-12}'-3)$$

が成り立つ。

ここで、次式により z_k を定義する。

$$z_k = x_k y_{-k} e^{-\frac{2\pi i}{N} k} - x_{-k} y_k e^{\frac{2\pi i}{N} k} \quad (79)$$

これにより、 z_k と z_l の交換関係を考えよう。

まず、 $l = k$ のとき可換であることは自明である。

$l = -k$ のとき、式 (79) から $z_{-k} = -z_k$ である。したがって、 z_k と z_{-k} は可換である。

$l \neq \pm k$ のとき、 x_k, x_{-l}, y_k, y_{-l} は、どの2つも交換して符号が反転する。

結局、

$$[z_k z_l]_- = 0 \quad (\text{O-12}'-4)$$

である。

以上の関係を用いて、式 (O-8) をフーリエ変換することを考えよう。 $x_{2N+n} = x_n$ という関係を考慮すると、

$$\begin{aligned} P' &= \sum_{n=1}^N (A_n + B_n) = i \sum_{n=1}^N (x_{2n} x_{2n+1} + x_{2n-1} x_{2n+2}) \\ &= i \sum_{n,m=1}^N (x_{2n} x_{2m+1} + x_{2n-1} x_{2m+2}) \delta_{nm} \\ &= \frac{i}{N} \sum_{k=1}^N \sum_{n,m=1}^N (x_{2n} x_{2m+1} + x_{2n-1} x_{2m+2}) e^{\frac{2\pi i}{N} k(n-m)} \\ &= \frac{i}{N} \sum_{k=1}^N \sum_{n,m=1}^N (x_{2n} e^{\frac{2\pi i}{N} kn} x_{2m+1} e^{-\frac{2\pi i}{N} km} + x_{2n-1} e^{\frac{2\pi i}{N} kn} x_{2m+2} e^{-\frac{2\pi i}{N} km}) \\ &= \frac{i}{N} \sum_{k=1}^N \sum_{n,m=1}^N (x_{2n} e^{\frac{2\pi i}{N} kn} x_{2m+1} e^{-\frac{2\pi i}{N} km} + x_{2n-1} e^{\frac{2\pi i}{N} k(n-1)} x_{2m+2} e^{-\frac{2\pi i}{N} k(m+1)} e^{\frac{2\pi i}{N} 2k}) \\ &= \frac{i}{N} \sum_{k=1}^N \sum_{n,m=1}^N (x_{2n} e^{\frac{2\pi i}{N} kn} x_{2m+1} e^{-\frac{2\pi i}{N} km} + x_{2n+1} e^{\frac{2\pi i}{N} kn} x_{2m} e^{-\frac{2\pi i}{N} km} e^{\frac{2\pi i}{N} 2k}) \\ &= 2i \sum_{k=1}^N (x_k y_{-k} + y_k x_{-k} e^{\frac{2\pi i}{N} 2k}) \end{aligned} \quad (80)$$

式 (77), (78) から x_k, y_k は周期 N の周期関数である。したがって、式 (85) の被総和関数 $\phi(k)$ は周期 N の周期関数である。このことに注意して、1 から N までの総和を次のように変形する。

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^N \phi(k) &= \sum_{k=1}^{N/2} \phi(k) + \sum_{k=N/2+1}^N \phi(k) = \sum_{k=1}^{N/2} \phi(k) + \sum_{k=-N/2+1}^0 \phi(k) \\ &= \sum_{k=1}^{N/2} \phi(k) + \sum_{k=-N/2}^{-1} \phi(k) + \phi(0) - \phi(-N/2) \\ &= \sum_{k=1}^{N/2} \phi(k) + \sum_{k=1}^{N/2} \phi(-k) + \phi(0) - \phi(-N/2)\end{aligned}$$

$\phi(k) = x_k y_{-k} + y_k x_{-k} e^{\frac{2\pi i}{N} 2k}$ で、 $\phi(0) = \phi(N)$, $x_N = x_{-N}$, $y_N = y_{-N}$ であるから、

$$\begin{aligned}\phi(0) - \phi(-N/2) &= x_N y_{-N} + y_N x_{-N} - x_{-N/2} y_{N/2} - y_{-N/2} x_{N/2} \\ &= x_N y_{-N} + y_{-N} x_N - x_{N/2} y_{-N/2} - y_{-N/2} x_{N/2} \\ &= [x_N, y_{-N}]_+ - [x_{N/2}, y_{-N/2}]_+ = 0\end{aligned}$$

したがって、

$$\sum_{k=1}^N \phi(k) = \sum_{k=1}^{N/2} \{\phi(k) + \phi(-k)\} \quad (81)$$

である。これを式 (80) に適用すると、

$$\begin{aligned}P' &= 2i \sum_{k=1}^{N/2} (x_k y_{-k} + y_k x_{-k} e^{\frac{2\pi i}{N} 2k} + x_{-k} y_k + y_{-k} x_k e^{-\frac{2\pi i}{N} 2k}) \\ &= 2i \sum_{k=1}^{N/2} \{x_k y_{-k} (1 - e^{-\frac{2\pi i}{N} 2k}) + x_{-k} y_k (1 - e^{\frac{2\pi i}{N} 2k})\} \quad (82)\end{aligned}$$

ここで、 $1 - e^{i\theta} = -2i \sin \frac{\theta}{2} e^{i\theta/2}$ であるから、この式は、

$$\begin{aligned}P' &= 2i \sum_{k=1}^{N/2} [x_k y_{-k} \{-2i \sin(-\frac{2\pi k}{N}) e^{-\frac{2\pi i}{N} k}\} + x_{-k} y_k \{-2i \sin \frac{2\pi k}{N} e^{\frac{2\pi i}{N} k}\}] \\ &= -4 \sum_{k=1}^{N/2} (x_k y_{-k} e^{-\frac{2\pi i}{N} k} - x_{-k} y_k e^{\frac{2\pi i}{N} k}) \sin \frac{2\pi k}{N} \\ &= -4 \sum_{k=1}^{N/2} z_k \sin \frac{2\pi k}{N} \quad (O-12)\end{aligned}$$

これから、 P' の固有値は $z_k \sin(2\pi k/N)$ の固有値の総和になることがわかる。

z_k の固有値は、交換関係を示す式 (O-12') から導くことができる。式 (O-2) の場合と同様に、反交換子が 1 になる場合の 2 次正方行列による表現は

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{と} \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (83)$$

である。

一方、反交換子が 0 になる場合は、

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{と} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (84)$$

または,

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{と} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (85)$$

である. これから式 (O-12') の反交換関係を満たすような表現を作るには, これらの行列の直積を作ればよい. そのとき, 他方の行列は可換な行列にしておくか, より簡単には, 単位行列にしておけばよい. そうすると,

$$\begin{aligned} x_k &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & x_{-k} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ y_k &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & y_{-k} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (86)$$

とすれば, $[x_k, x_{-k}]_+ = 1$, $[y_k, y_{-k}]_+ = 1$ となるのがわかる. 直積の行列の前後を同時に交換してもよい.

次に, $[x_k, y_{-k}]_+ = [x_k, y_k]_+ = 0$ を満たすには, 式 (84) と式 (85) を見て, y_k と y_{-k} の行列因子の順序を交換して, x_k と x_{-k} の 2 番目の行列因子の単位行列を式 (84) または式 (85) の 2 番目の行列に変えればよいということがわかる. そうすると, 結局,

$$\begin{aligned} x_k &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, & x_{-k} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ y_k &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, & y_{-k} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (87)$$

となり, 論文の式に一致する.

以上から,

$$\begin{aligned} z_k &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{2\pi i}{N}k} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} e^{\frac{2\pi i}{N}k} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} e^{-\frac{2\pi i}{N}k} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} e^{\frac{2\pi i}{N}k} \\ &= - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\frac{2\pi i}{N}k} & 0 \\ 0 & e^{\frac{2\pi i}{N}k} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (88)$$

となる. これから, 固有値を ε_k とすると, 永年方程式は,

$$\varepsilon_k^2 (\varepsilon_k^2 - e^{-\frac{2\pi i}{N}k} e^{\frac{2\pi i}{N}k}) = 0,$$

すなわち,

$$\varepsilon_k^2 (\varepsilon_k^2 - 1) = 0$$

となり, これより, $\varepsilon_k = 0, 0, 1, -1$ が得られる.

実際の行列表現は, x_k が x_l や y_l と式 (O-12') の反交換関係にあるから, これを満たす x_k の表現を得るには, 式 (87) のような 2 つの 2 次正方行列の直積からなる行列, すなわち 4 次正方行列を N 個合わせて直積を作った行列を考える必要がある. 直感的には, k は $-N$ から N までであるから, $2N$ 個の直積にして, x_k と x_{-k} をそれぞれ k 番目と $-k$ 番目の直積因子として配置すればよさそうに見えるが, そうすると x_k と x_{-k} の間の反交換関係を満たすことができない. そのため, そうはしないで, x_{-k} と y_{-k} の表現を, x_k と y_k とは別

に、4次正方行列の N 個の直積として、式 (87) の行列を k 番目の直積因子にすれば、 x_k と x_{-k} の間の反交換関係を満たすことができるようになる。

このような行列表現で、 $k \neq l$ のときに反可換とするには、式 (83) と (84) の関係を式 (87) に適用することを考えればよい。一例として、 x_k, x_{-k}, y_k, y_{-k} の直接行列表現を式 (87) にして、それを k 番目の直積因子にし、 k よりも大きい直積因子を単位行列 E とし、 k よりも小さい直積因子を

$$K = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (89)$$

とすれば $-N \geq k \geq N$ における x_k の反対称関係式が満たされることは容易にわかる。

x_k ($k = 1, \dots, N$) を含む直積行列の表現を大文字で X_k と表すことにしよう。そうすると、

$$X_k = \underbrace{K \otimes K}_{k-1} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \underbrace{E \otimes \dots \otimes E}_{N-k} = \underbrace{K \otimes \dots \otimes K}_{k-1} \otimes x_k \otimes \underbrace{E \otimes \dots \otimes E}_{N-k} \quad (90)$$

となる。これから明らかに、 Z_k は、

$$Z_k = \underbrace{E \otimes E}_{k-1} \otimes z_k \otimes \underbrace{E \otimes E}_{N-k} \quad (91)$$

となる。

x_{-k}, y_k, y_{-k} も同様である。

z_k を対角化する4次正方行列を q とする。すなわち、

$$q^{-1} z_k q = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (92)$$

とすると、

$$Q = \underbrace{q \otimes \dots \otimes q}_N \quad (93)$$

は Z_k ($k = 1, \dots, N$) を同時に対角化できることがわかる。つまり、式 (O-12) の P' は Q によって対角化される。すなわち、

$$Q^{-1} P' Q = \sum_{k=1}^{N/2} (Q^{-1} Z_k Q) \sin \frac{2\pi k}{N} = \sum_{k=1}^{N/2} \underbrace{E \otimes \dots \otimes E}_{k-1} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \underbrace{E \otimes \dots \otimes E}_{N-k} \sin \frac{2\pi k}{N} \quad (94)$$

となる。

Z_k は 4^N 次正方行列であるから、対角項が 4^N 個で、 $Z_k \sin 2\pi k/N$ の固有値は重複を含めて 4^N 個存在する。この直積行列の固有値の値は、1番目のブロックから N 番目まで各ブロックの固有値から1個取り出し、これを全て掛けたものになる。つまり、 4^N 種類存在するが、 k 番目のブロックが z_k の場合、そのブロックの固有値は $\varepsilon = 1, -1, 0, 0$ であり、それ以外のブロックの固有値は全て1である。したがって、 Z_k の固有値には3種類しかなく、 $1/4$ が1、 $1/4$ が-1、残りが0になる。 k は1から N まで変化するので、 z_k ブロックの場所も変化するが、 z_k 以外は全て単位行列であるから、 Z_k は k に依存せず全て等しい。結局、 P' の固有値は、 $\sin 2\pi k/N$ の $k = 1$ から $N/2$ までの総和、同じく $-\sin 2\pi k/N$ の $k = 1$ から $N/2$ までの総和、それと0にな

となる。これより,

$$R_k = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (97)$$

となる。したがって,

$$R_k^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (98)$$

であるから,

$$R_k^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = R_k \quad (\text{O-16})$$

である。ついでに,

$$R_k^4 = R_k^2 \quad (99)$$

が成り立つ。

式 (97) から, R_k の固有値は $0, 0, 1, -1$ であることがわかる。これは, z_k の固有値と同じである。(論文で固有値が ε_k^2 とあるのは, ε_k の誤り)

ここで, 式 (O-16) と式 (99) を用いることにより,

$$\begin{aligned} \exp(2i\theta R_k) &= 1 + (2i\theta R_k) + \frac{1}{2!}(2i\theta R_k)^2 + \frac{1}{3!}(2i\theta R_k)^3 + \frac{1}{4!}(2i\theta)^4 + \cdots \\ &= 1 + \left\{ -\frac{1}{2!}(2\theta)^2 + \frac{1}{4!}(2\theta)^4 + \cdots \right\} R_k^2 + i \left\{ (2\theta) - \frac{1}{3!}(2\theta)^3 + \cdots \right\} R_k \\ &= 1 + \frac{1}{2!}(\cos 2\theta - 1)R_k^2 + i \sin(2\theta)R_k \end{aligned} \quad (\text{O-15}')$$

となる。

結局,

$$\prod_{n=1}^N (\cos \theta + \sin \theta x_{2n} x_{2n+1}) = \prod_{n=1}^{N/2} \{1 + (\cos 2\theta - 1)R_k^2 + i \sin(2\theta)R_k\} \quad (100)$$

という関係式が得られる。この式で, $\theta = \pi/2$ とおくと, 左辺は式 (73) より,

$$x_2 x_3 \cdots x_{2N} x_{2N+1} = -x_1 x_2 \cdots x_{2N} = (i)^N x = (-1)^{N/2} x$$

となり,

$$(-1)^{N/2} x = \prod_{n=1}^{N/2} (1 - 2R_k^2) \quad (101)$$

となる。 $x = 1$ のときには,

$$(-1)^{N/2} = \prod_{n=1}^{N/2} (1 - 2R_k^2) \quad (102)$$

という関係になる。

論文では R_k を固有値で置き換えて,

$$(-1)^{N/2} = \prod_{n=1}^{N/2} (1 - 2\varepsilon_k^2) \quad (103)$$

という関係式から 0 でない ε_k の数がわかると書いている. これから確実に言えることは, $N/2$ が奇数のときには, 0 でない ε_k の数は奇数であるということである. 具体的に固有値を考える場合は, 式 (89) 以降の直積による表現を考えなければならない.

スピン演算子の 2 次式で表される演算子の固有値は, 反交換関係をもつ演算子を導入することによって求めることが可能になる. しかし, 演算子が $\sigma_n \cdot \sigma_{n+1}$ のような場合は 4 次のスピン演算子の項が出て来るのでこの方法は必ずしも有効ではない.

* * * * *

3 Onsager's Problem

ここでは Onsager の取り扱った 2 次元イジングモデル [1] を考える. 2 次元イジングモデルの相互作用エネルギー E は,

$$E = J \sum s_i s'_i + J' \sum s_i s_{i+1} \quad (\text{O-19})$$

となる. J は縦方向の隣り合うスピン間相互作用エネルギー, J' は横方向の隣り合うスピン間相互作用エネルギーである. s_i はある横方向列 (row) において i 番目の位置のスピンで ± 1 をとる. s'_i は 1 つ上の列で i 番目の位置のスピンである. 横方向のスピン数は N 個である. $N + 1$ 個目が周期的になって 1 個目と同じになる. スピン列を 1 列加えるごとに横方向の相互作用エネルギーと下のスピン列の間の相互作用エネルギーが追加されるので, 1 列追加するごとに, 式 (O-19) のエネルギーが追加される. このエネルギーが単位となって, 2 次元スピン格子のエネルギーが表される. そのときの分配関数は $Z = \text{Tr} \exp(-\sum E/k_B T)$ となる. 横の列の間の相互作用を行列に変換すると, つまり演算子にすると, それが c_n となり, 跡 (トレース) をとるべき演算子は,

$$H = \exp(\beta \sum_{n=1}^N s_n s_{n+1}) \exp(\alpha \sum_{n=1}^N c_n) \quad (\text{O-20})$$

を単位としてその冪で表される. したがって, 分配関数を求めるのは, 式 (O-20) の固有値を求めることに帰着する. ここで, $\beta = -J'/k_B T$, $\alpha = -J/k_B T$ である. 詳しい説明は, [4] にある.

c_n や s_n はベクトル $\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_N)$ に作用する演算子で, c_n は μ_n を $-\mu_n$ に符号反転し, s_n は μ_n の値 (1 または -1) を表す. s_n と c_n , および μ を行列とベクトルで表すと,

$$s_n = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad c_n = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mu_n = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ or } \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (104)$$

である. 全体では, この行列の N 重の直積, およびベクトルの N 重の直積になる.

それぞれの演算子には,

$$\begin{aligned} s_n^2 &= c_n^2 = 1, \\ [s_n, c_n]_+ &= 0 \\ [s_n, s_m]_- &= [s_n, c_m]_- = [c_n, c_m]_- = 0, \quad (n \neq m) \end{aligned} \quad (\text{O-20}')$$

式 (O-20) の固有値を求めるのは, 演算子が指数関数の指数部にあるために, 普通の線形代数のように簡単ではない. 南部は, この演算子の固有値を前節で述べた反交換関係を有する $2N$ 個の演算子 x_{2n} , x_{2n+1} を

用いて求めようとするのである。ただし、この問題では、前節で固有値を求めた演算子が、今度は指数部にあるので、前節ほど簡単ではない。

固有値問題を解くために、

$$\begin{aligned} s_n s_{n+1} &\equiv S_n \\ c_n &\equiv C_n \end{aligned} \quad (\text{O-21-2})$$

とおく。そうすると、式 (O-20) は

$$H = \exp\left(\beta \sum_{n=1}^N S_n\right) \exp\left(\alpha \sum_{n=1}^N C_n\right) \quad (\text{O-21-1})$$

となる。

式 (O-21') には $[S_n, C_{n\pm 1}]$ と書いてあるが、これは明らかに $[S_n, C_{n+\frac{1}{2}\pm\frac{1}{2}}]$ の誤りである。そう理解すると、式 (O-20') より、

$$\begin{aligned} S_n C_{n+1} &= s_n s_{n+1} c_{n+1} = -s_n c_{n+1} s_{n+1} = -c_{n+1} s_n s_{n+1} = -C_{n+1} S_n \\ S_n C_n &= s_n s_{n+1} c_n = s_n c_n s_{n+1} = -c_n s_n s_{n+1} = -C_n S_n \end{aligned} \quad (105)$$

である。したがって、

$$\begin{aligned} [S_n, C_{n+1}]_+ &= 0 \\ [S_n, C_n]_+ &= 0 \end{aligned} \quad (106)$$

が成り立つ。つまり、反可換である。それ以外は可換であることは式 (O-20') から明らかである。

次に、 $s_{N+1} = s_1$ であるから、

$$\begin{aligned} S &\equiv S_1 S_2 \cdots S_N \\ &= s_1 s_2 s_2 s_3 \cdots s_N s_{N+1} = s_1 s_2^2 s_3^2 \cdots s_N^2 s_{N+1} \\ &= s_1^2 s_2^2 s_3^2 \cdots s_N^2 = 1 \end{aligned} \quad (107)$$

さらに、

$$C \equiv C_1 C_2 \cdots C_N \quad (108)$$

とおくと、

$$C^2 = C_1^2 C_2^2 \cdots C_N^2 = c_1^2 c_2^2 \cdots c_N^2 = 1 \quad (109)$$

であるから、

$$C = \pm 1 \quad (110)$$

が成り立つ。

ここで、論文には

$$\begin{aligned} s_n s_{n+1} &= i(a_n^+ - a_n)(a_{n+1}^+ + a_{n+1}), \quad c_n = 2a_n^+ a_n - 1 \\ a_{n+1}^+ + a_{n+1} &= c_1 c_2 \cdots c_{n-1} s_n, \quad i(a_n^+ - a_n) = c_1 c_2 \cdots c_n s_n \\ [a_n, a_m^+]_+ &= \delta_{nm} \end{aligned} \quad (\text{O-22})$$

と $s_n s_{n+1}$ と c_n を第二量子化の演算子で置き換える方法を紹介している。これは前節でも述べてあるが、生成消滅演算子に反交換関係を導入すると、 s_n と s_{n+1} の間にも反交換関係が入ってしまうが、これは実際と異なる。つまり、この手法は s_n と s_{n+1} が個別に現れるような場合も含めた一般的な体系としてではなく、 $s_n s_{n+1}$

が対になっている場合の手法と理解しなければならない。その場合は、 $s_n s_{n+1}$ を分解しないで1つの演算子と考えればよい。そうすると、式 (O-21'-1) のような反可換な生成消滅演算子による置き換えを考えることができるということである。

上のように考えると、良さそうであるが、式 (O-21'-1) の第2式は、 $a_n^2 = 0$ であるから、

$$\begin{aligned} c_n^2 &= (2a_n^+ a_n - 1)^2 = 4a_n^+ a_n a_n^+ a_n - 4a_n^+ a_n + 1 \\ &= 4a_n^+ a_n (1 - a_n a_n^+) - 4a_n^+ a_n + 1 \\ &= 4a_n^+ a_n - 4a_n^+ a_n + 1 = 1 \end{aligned} \quad (111)$$

となる。あるいは、

$$c_n = 2a_n^+ a_n - 1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (112)$$

となるので $c_n^2 = 1$ は自明である。これで $c_n^2 = 1$ は満たされるが、符号反転の働きはない。また、その次の式も式 (O-21'-1) の第1式と整合がとれているように思われるが、 s_n や c_n の表現と十分に論理的な整合がとれていない。例えば、

$$\begin{aligned} s_{n+1} s_n &= i(a_{n+1}^+ + a_{n+1})(a_n^+ - a_n) \\ &= i(c_1 c_2 \cdots c_n s_{n+1})(c_1 c_2 \cdots c_n s_n) \\ &= i s_{n+1} s_n \\ s_n s_{n+1} &= i(a_n^+ - a_n)(a_{n+1}^+ + a_{n+1}) \\ &= i(c_1 c_2 \cdots c_n s_n)(c_1 c_2 \cdots c_n s_{n+1}) \\ &= i c_n s_n c_n s_{n+1} = -i s_n c_n^2 s_{n+1} \\ &= -i s_n s_{n+1} \end{aligned} \quad (113)$$

というおかしなことが起こる。これは、 s_n を個別に定義しているところから発している。したがって、南部もこの部分を飛ばしたように、ここでも深く立ち入るのはやめることにしよう。

* * * * *

南部は、 S_n と C_n を表すのに、次のように、反交換関係を有する $2N$ 個の演算子 x_n を用いた。

$$\begin{aligned} S_n &= i x_{2n} x_{2n+1}, \\ C_n &= i x_{2n-1} x_{2n}, \\ [x_r, x_s] &= 2\delta_{rs} \quad (r, s = 1, 2, \dots, 2N) \end{aligned} \quad (O-23-1)$$

このように定義すると、 $(s_n s_{n+1})^2 = 1$ に対応して、

$$S_n^2 = -x_{2n} x_{2n+1} x_{2n} x_{2n+1} = x_{2n}^2 x_{2n+1}^2 = 1 \quad (114)$$

となり、 $c_n^2 = 1$ に対応して、

$$C_n^2 = -x_{2n-1} x_{2n} x_{2n-1} x_{2n} = x_{2n-1}^2 x_{2n}^2 = 1 \quad (115)$$

が成り立つ。

さらに、

$$\begin{aligned} S &= \prod_{n=1}^N S_n = i^N x_2 x_3 x_4 x_5 \cdots x_{2N} x_{2N+1} = -i^N x_1 x_2 x_3 x_4 x_5 \cdots x_{2N} = -X \\ C &= \prod_{n=1}^N C_n = i^N x_1 x_2 x_3 x_4 \cdots x_{2N-1} x_{2N} \equiv X \end{aligned} \quad (116)$$

とすると,

$$\begin{aligned}
S^2 &= (-1)^N (x_2 x_3 x_4 x_5 \cdots x_{2N} x_{2N+1}) (x_2 x_3 x_4 x_5 \cdots x_{2N} x_{2N+1}) \\
&= (-1)^N (-1) (x_4 x_5 \cdots x_{2N} x_{2N+1}) (x_2^2 x_3^2 x_4 x_5 \cdots x_{2N} x_{2N+1}) \\
&\cdots \\
&= (-1)^N (-1)^N (x_2^2 x_3^2 x_4^2 x_5^2 \cdots x_{2N}^2 x_{2N+1}^2) = 1
\end{aligned} \tag{117}$$

である. さらに, C^2 も同様に,

$$\begin{aligned}
C^2 &= (-1)^N (x_1 x_2 x_3 x_4 \cdots x_{2N-1} x_{2N}) (x_1 x_2 x_3 x_4 \cdots x_{2N-1} x_{2N}) \\
&= (-1)^N (-1) (x_3 x_4 \cdots x_{2N-1} x_{2N}) (x_1^2 x_2^2 x_3 x_4 \cdots x_{2N-1} x_{2N}) \\
&\cdots \\
&= (-1)^N (-1)^N (x_1^2 x_2^2 x_3^2 x_4^2 \cdots x_{2N-1}^2 x_{2N}^2) = 1
\end{aligned} \tag{118}$$

となり, さらに,

$$\begin{aligned}
S_n C_{n+1} &= x_{2n} x_{2n+1} x_{2n+1} x_{2n+2} = -x_{2n+1} x_{2n} x_{2n+1} x_{2n+2} \\
&= -x_{2n+1} x_{2n+2} x_{2n} x_{2n+1} = -C_{n+1} S_n \\
S_n C_n &= x_{2n} x_{2n+1} x_{2n-1} x_{2n} = x_{2n-1} x_{2n} x_{2n+1} x_{2n} \\
&= -x_{2n-1} x_{2n} x_{2n} x_{2n+1} = -C_n S_n
\end{aligned} \tag{119}$$

である. したがって,

$$\begin{aligned}
[S_n, C_{n+1}]_+ &= 0 \\
[S_n, C_n]_+ &= 0
\end{aligned} \tag{再 106}$$

が成り立ち, 式 (O-21) と式 (O-23) は辻褄があっていることがわかる.

式 (116)–(117) から,

$$S^2 = C^2 = X^2 = 1 \tag{120}$$

であるから, $S = \pm 1$, $C = \pm 1$, $X = \pm 1$ である.

もし, $X = 1$ を満たすような x_n の演算子部分空間にあれば, 式 (116) から $C = 1$ である. もし, $C = -1$ の部分空間を選びたいのであれば, 上の部分空間の x_1 , x_2 に対して,

$$C_1 = -ix_1 x_2 \tag{O-23'}$$

とすればよい.

$C = 1$ と $C = -1$ はこれを変現するベクトル部分空間を 2 つにわけが, 南部の方法ではベクトルを特定しないで固有値を得ることができる. したがって, ここでは C の値についてはこれ以上触れない.

式 (O-20) の表記に式 (O-23) を用いると,

$$H = \exp(i\beta \sum_{n=1}^N x_{2n} x_{2n+1}) \exp(i\alpha \sum_{n=1}^N x_{2n-1} x_{2n}) \equiv H_2 H_1 \tag{O-24}$$

となる.

いま, 次のような演算子 U を考えよう.

$$U = \exp\left(\frac{\theta}{2} x_r x_s\right) = \cos \frac{\theta}{2} + \sin \frac{\theta}{2} x_r x_s \tag{O-25}$$

実際、上のように表すことができることは、

$$\begin{aligned}
(x_r x_s)^2 &= x_r x_s x_r x_s = -x_r^2 x_s^2 = -1 \\
(x_r x_s)^3 &= (x_r x_s)^2 (x_r x_s) = -(x_r x_s) \\
(x_r x_s)^4 &= (x_r x_s)^2 (x_r x_s)^2 = 1 \\
(x_r x_s)^5 &= (x_r x_s)^2 (x_r x_s)^2 (x_r x_s) = (x_r x_s) \\
&\dots
\end{aligned}$$

となることに注意すれば、

$$\begin{aligned}
\exp\left(\frac{\theta}{2} x_r x_s\right) &= 1 + \frac{\theta}{2} (x_r x_s) + \frac{1}{2!} \left(\frac{\theta}{2}\right)^2 (x_r x_s)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{\theta}{2}\right)^3 (x_r x_s)^3 + \frac{1}{4!} \left(\frac{\theta}{2}\right)^4 (x_r x_s)^4 + \dots \\
&= \left(1 - \frac{1}{2!} \left(\frac{\theta}{2}\right)^2 + \frac{1}{4!} \left(\frac{\theta}{2}\right)^4 + \dots\right) + \left\{\frac{\theta}{2} - \frac{1}{3!} \left(\frac{\theta}{2}\right)^3 + \dots\right\} (x_r x_s) \\
&= \cos \frac{\theta}{2} + \sin \frac{\theta}{2} (x_r x_s)
\end{aligned} \tag{121}$$

とすることができることからわかる。

次に、

$$U^{-1} = \exp\left(-\frac{\theta}{2} x_r x_s\right) = \cos \frac{\theta}{2} - \sin \frac{\theta}{2} x_r x_s \tag{122}$$

である。実際、

$$\begin{aligned}
U^{-1}U &= \left(\cos \frac{\theta}{2} - \sin \frac{\theta}{2} x_r x_s\right) \left(\cos \frac{\theta}{2} + \sin \frac{\theta}{2} x_r x_s\right) \\
&= \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2} (x_r x_s)^2 - \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} (x_r x_s - x_r x_s) \\
&= \cos^2 \frac{\theta}{2} + \sin^2 \frac{\theta}{2} = 1
\end{aligned} \tag{123}$$

となり、逆演算子になっていることがわかる⁵。

ここで、演算子の行列表現も可能であることから、 U を用いた $U^{-1} x_r U$ という演算を相似変換と呼ぶことにして、 x_r の U による相似変換 $U^{-1} x_r U$ を考えてみよう。式 (O-25) と式 (122) を用いると、

$$\begin{aligned}
U^{-1} x_r U &= \left(\cos \frac{\theta}{2} - \sin \frac{\theta}{2} x_r x_s\right) x_r \left(\cos \frac{\theta}{2} + \sin \frac{\theta}{2} x_r x_s\right) \\
&= \cos^2 \frac{\theta}{2} x_r - \sin^2 \frac{\theta}{2} (x_r x_s) x_r (x_r x_s) + \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} (x_r x_r x_s - x_r x_r x_s) \\
&= \cos^2 \frac{\theta}{2} x_r - \sin^2 \frac{\theta}{2} x_r + 2 \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} x_s \\
&= \cos \theta x_r + \sin \theta x_s
\end{aligned} \tag{O-26-1}$$

となる。

⁵式 (122) で、指数部が可換でない場合には、

$$\exp\left(\frac{\theta}{2} x_r x_s\right) \exp\left(-\frac{\theta}{2} x_r x_s\right) = \exp\left(\frac{\theta}{2} x_r x_s - \frac{\theta}{2} x_r x_s\right)$$

が成り立つとは必ずしも言えない。

また、ここでは、

$$(x_r x_s)^2 = x_r x_s x_r x_s = -x_r x_s^2 x_r = -x_r^2 = -1$$

という関係も用いた。

相似変換 $U^{-1}x_sU$ についても同様に,

$$\begin{aligned}
U^{-1}x_sU &= (\cos \frac{\theta}{2} - \sin \frac{\theta}{2}x_r x_s)x_s(\cos \frac{\theta}{2} + \sin \frac{\theta}{2}x_r x_s) \\
&= \cos^2 \frac{\theta}{2}x_s - \sin^2 \frac{\theta}{2}(x_r x_s)x_s(x_r x_s) + \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}(x_s x_r x_s - x_r x_s x_s) \\
&= \cos^2 \frac{\theta}{2}x_s - \sin^2 \frac{\theta}{2}x_s - 2 \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}x_r \\
&= -\sin \theta x_r + \cos \theta x_s
\end{aligned} \tag{O-26-2}$$

となる.

上の2つ式で, x_r, x_s を基底ベクトルとみなしたとき, $U^{-1}x_rU$ と $U^{-1}x_sU$ は, 原点を通り x_r と x_s が作る平面に垂直な軸の周りに, それぞれ x_r と x_s を θ だけ回転してできる新しい基底ベクトルとなる⁶.

ちなみに, x_r を x_r 軸座標, x_s を x_s 軸座標とすると, $U^{-1}x_rU$ は点 (x_r, x_s) を原点を中心として $-\theta$ だけ回転した点の x_r 軸座標になる. 同様に, $U^{-1}x_sU$ は $-\theta$ だけ回転した点の x_s 軸座標になる. 座標軸を回転した時は, 上記の点は新しい座標軸の座標になる. しかし, ここでの x_r, x_s を基底ベクトルと考えれば, 最初に示したベクトルの回転という考え方がここでは適している.

$n \neq r, s$ の場合には,

$$\begin{aligned}
U^{-1}x_nU &= (\cos \frac{\theta}{2} - \sin \frac{\theta}{2}x_r x_s)x_n(\cos \frac{\theta}{2} + \sin \frac{\theta}{2}x_r x_s) \\
&= \cos^2 \frac{\theta}{2}x_n - \sin^2 \frac{\theta}{2}(x_r x_s)x_n(x_r x_s) + \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}(x_n x_r x_s - x_r x_s x_n) \\
&= \cos^2 \frac{\theta}{2}x_n + \sin^2 \frac{\theta}{2}x_n - 2 \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}(x_r x_s x_n - x_r x_s x_n) \\
&= x_n
\end{aligned} \tag{O-26-3}$$

となる. つまり, x_r, x_s 以外の基底ベクトルは全て回転軸上にあるということになる.

ここで, 式 (O-26-1), (O-26-2) で表される座標回転の相似変換を, x_n を基底ベクトルとみなして行列表示すると,

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

となる. ここで, $U = \exp(x_r x_s \frac{\theta}{2})$ であるから, 回転の角度が U の $\theta/2$ の2倍になっていることに注意しておこう. この行列表現の固有値は簡単に得られて, $\exp(\pm i\theta)$ であることがわかる. H の固有値を求めるときにこの関係が重要になる.

以上のことから, 式 (O-24) を考えると, $Hx_{2n}H^{-1}$ により ($H^{-1}x_{2n}H$ でないことに注意⁷) x_{2n} は,

$$\begin{aligned}
Hx_{2n}H^{-1} &= (H_2H_1)x_{2n}(H_1^{-1}H_2^{-1}) \\
&= \exp(i\beta \sum x_{2n}x_{2n+1}) \exp(i\alpha \sum x_{2n-1}x_{2n})x_{2n} \exp(-i\alpha \sum x_{2n-1}x_{2n}) \exp(-i\beta \sum x_{2n}x_{2n+1}) \\
&= \exp(i\beta x_{2n}x_{2n+1}) \exp(i\alpha x_{2n-1}x_{2n})x_{2n} \exp(-i\alpha x_{2n-1}x_{2n}) \exp(-i\beta x_{2n}x_{2n+1})
\end{aligned} \tag{124}$$

⁶このことは, 次の3次元の場合を考えればわかりやすい. x 軸方向の単位ベクトルを \mathbf{e}_x , y 軸方向の単位ベクトルを \mathbf{e}_y とし, これを z 軸の周りに θ だけ回転した時のそれぞれの単位ベクトルを $\mathbf{e}'_x, \mathbf{e}'_y$ とすると, ベクトル合成により,

$$\begin{aligned}
\mathbf{e}'_x &= \mathbf{e}_x \cos \theta + \mathbf{e}_y \sin \theta \\
\mathbf{e}'_y &= -\mathbf{e}_x \sin \theta + \mathbf{e}_y \cos \theta
\end{aligned}$$

となる.

⁷論文で最初に $2\alpha i$, 次に $2\beta i$ 回転させる, とあるのでその場合は回転演算子は H_1H_2 である. もし回転演算子が $H = H_2H_1$ なら, 最初に $2\beta i$, 次に $2\alpha i$ 回転させることになる. ここでは回転演算子を $H^{-1} = H_1^{-1}H_2^{-1}$ とした. つまり, 演算は $Hx_{2n}H^{-1}$ である. その時の回転は, 最初に $-2\alpha i$, 次に $-2\beta i$ となる. いずれの場合でも, 最後の結果は変わらない. このように混乱してしまうのは, 論文で「最初に $2\beta i$, 次に $2\alpha i$ 」と記述すべきところを誤ったのではないかと思われる.

とすることができる。これから、 H^{-1} は、相似変換 $Hx_{2n}H^{-1}$ により、 x_{2n} を、最初に、 x_{2n-1} と x_{2n} を含む平面内で $-2i\alpha$ 回転し、その後、 x_{2n-1} と x_{2n} の1次結合の新しい基底ベクトルを x_{2n-2} と x_{2n-1} を含む平面内および x_{2n} と x_{2n+1} を含む平面内でそれぞれ $-2i\beta$ 回転させるということがわかる。

以下では、 $H = H_2H_1$ の固有値を求めることを考えよう。

まず、 H は、 x'_n によるその表現がユニタリ-行列のように見えるが、エルミートである。実際、式(5)-(7)より x_r はエルミートであるから、

$$H^\dagger = \exp(-i \sum x'_{2n+1} x'_{2n} \gamma_n) = \exp(i \sum x'_{2n} x'_{2n+1} \gamma_n) = H \quad (125)$$

となり、ユニタリ-ではなくエルミートである。したがって、 H の固有値は実数である。

また、論文で述べられているように、 H は一般に $\{x_n\}$ から線形変換によって得られる適当な座標系 $\{x'_n\}$ により、

$$H = \exp(i \sum x'_{2n} x'_{2n+1} \gamma_n) \quad (O-27)$$

のようなジョルダン標準形に表される。ジョルダン標準形とあるが、具体的には、2次正方行列の N 個の直積として、

$$\exp(ix'_2 x'_3 \gamma_1) \otimes \cdots \otimes \exp(ix'_{2n} x'_{2n+1} \gamma_n) \otimes \cdots \otimes \exp(ix'_{2N} x'_{2N+1} \gamma_N)$$

のように表したほうがわかりやすい。

次に、論文にあるように、 $|ix'_{2n} x'_{2n+1}| = 1$ であるから、 $(ix'_{2n} x'_{2n+1})^2 = 1$ となるので、その解 ± 1 が $ix'_{2n} x'_{2n+1}$ の固有値になる⁸。したがって、 $\exp(ix'_{2n} x'_{2n+1} \gamma_n)$ の固有値は $\exp(\pm \gamma_n)$ となる。いまの場合、直積 $\prod \otimes ix'_{2n} x'_{2n+1} \gamma_n$ を考えれば、これが作用するベクトル空間は 2^N 次元で、 $\exp(\sum ix'_{2n} x'_{2n+1} \gamma_n) = \prod \otimes \exp(ix'_{2n} x'_{2n+1} \gamma_n)$ の固有値は対角化された行列表現である

$$\begin{pmatrix} e^{\gamma_1} & 0 \\ 0 & e^{-\gamma_1} \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} e^{\gamma_n} & 0 \\ 0 & e^{-\gamma_n} \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} e^{\gamma_N} & 0 \\ 0 & e^{-\gamma_N} \end{pmatrix} \quad (126)$$

の対角部分で表され、 2^N 種類ある。したがって、固有値の一般式は、 ε_n を1または -1 を表すパラメータとすると、 $\prod e^{2\varepsilon_n \gamma_n} = e^{\sum \varepsilon_n 2\gamma_n}$ となる。種類の数 2^N は、 n 個の ε_n の全ての組み合わせの数に対応している。したがって、この固有値を 2^N 次元の固有ベクトル Ψ を使って一般的に表すと、論文の式

$$H\Psi = \exp\left[\sum_{n=1}^N \varepsilon_n \gamma_n\right]\Psi, \quad \varepsilon_n = \pm 1 \quad (O-28)$$

となるのである。

さて、 $\exp(ix'_{2n} x'_{2n+1} \gamma_n)$ を基底ベクトルの回転の演算子と考え、基底ベクトル x_n による行列表現を考えてみよう。式(O-24)と同様にして、

$$\begin{aligned} & H^{-1} x'_{2n} H \\ &= \exp(-ix'_{2n} x'_{2n+1} \gamma_n) x'_{2n} \exp(ix'_{2n} x'_{2n+1} \gamma_n) = \cosh 2\gamma x'_{2n} + i \sinh 2\gamma x'_{2n+1} \end{aligned} \quad (127)$$

$$\begin{aligned} & H^{-1} x'_{2n+1} H \\ &= \exp(-ix'_{2n} x'_{2n+1} \gamma_n) x'_{2n+1} \exp(ix'_{2n} x'_{2n+1} \gamma_n) = -i \sinh 2\gamma x'_{2n} + \cosh 2\gamma x'_{2n+1} \end{aligned} \quad (128)$$

となることがわかる。基底ベクトルの回転演算子は $\exp(ix'_{2n} x'_{2n+1} \gamma_n)$ のかわりに、 $\exp(ix'_{2n-1} x'_{2n} \gamma_n)$ でも構わない。実際、

$$\begin{aligned} & \exp(-ix'_{2n-1} x'_{2n} \gamma_n) x'_{2n-1} \exp(ix'_{2n-1} x'_{2n} \gamma_n) = \cosh 2\gamma x'_{2n-1} + i \sinh 2\gamma x'_{2n} \\ & \exp(-ix'_{2n-1} x'_{2n} \gamma_n) x'_{2n} \exp(ix'_{2n-1} x'_{2n} \gamma_n) = -i \sinh 2\gamma x'_{2n-1} + \cosh 2\gamma x'_{2n} \end{aligned} \quad (129)$$

⁸もし、正方行列 W の多項式 $f(W)$ において $f(W) = 0$ が成り立つなら、 $f(x) = 0$ の解が行列 W の固有値である。一般には、 $e^{\pm\theta}$ が固有値になるが、 $ix'_{2n} x'_{2n+1}$ がエルミートであるから、固有値は ± 1 になる。

となつて, $\exp(ix'_{2n}x'_{2n+1}\gamma_n)$ でも, $\exp(ix'_{2n-1}x'_{2n}\gamma_n)$ の場合でも, その行列表現は同じである.

以上のようにして, 基底ベクトル回転の表現行列の固有値は次の永年方程式を解くことにより得られる.

$$\begin{vmatrix} \cosh 2\gamma - \lambda & i \sinh 2\gamma \\ -i \sinh 2\gamma & \cosh 2\gamma - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

結局, 固有値は $\lambda = e^{\pm 2\gamma_n}$ となる.

上の結果で重要なことは, H を回転の演算子とみなしたときに, その回転を表す行列の固有値が H の固有値の 2 乗になっているということである. これが意味することは, 基底ベクトル回転の行列表現の固有値を求めれば, それから直接 H の固有値が求められるということである. 一方, 座標系 x'_n による行列表現は, 座標系 x_n による行列表現から相似変換によって得られるので, x_n による行列表現の固有値と同じである. したがって, 2^N 次元ベクトル空間における H の固有値は, H による回転を x_n を用いて表現した行列の固有値を求めればよいということになる.

これが, 論文で述べられているように, 2^N 次元ベクトル空間で計算するのではなく, $2N$ 次元ベクトル空間での計算で H の固有値が求められるということの意味である.

以上のことを念頭において, H の固有値を求めよう.

まず, x_n を用いて表現した $H = H_2H_1$ による回転の行列を Q と書くことにしよう. 次のようにして, Q の成分を求める.

x_r を H_1^{-1} で回転 (相似変換) して得られる演算子を y_r とする. すなわち,

$$y_{2n-1} = H_1x_{2n-1}H_1^{-1}, \quad y_{2n} = H_1x_{2n}H_1^{-1} \quad (130)$$

同様に,

$$z_{2n-1} = H_2y_{2n-1}H_2^{-1}, \quad z_{2n} = H_2y_{2n}H_2^{-1} \quad (131)$$

とする. そうすると, 式 (O-26-1)-(O-26-3) より,

$$\begin{aligned} y_{2n-1} &= H_1x_{2n-1}H_1^{-1} \\ &= \exp(\alpha'x_{2n-1}x_{2n})x_{2n-1} \exp(-\alpha'x_{2n-1}x_{2n}) \\ &= \cos 2\alpha'x_{2n-1} - \sin 2\alpha'x_{2n} \\ y_{2n} &= H_1x_{2n}H_1^{-1} \\ &= \exp(\alpha'x_{2n-1}x_{2n})x_{2n} \exp(-\alpha'x_{2n-1}x_{2n}) \\ &= \sin 2\alpha'x_{2n-1} + \cos 2\alpha'x_{2n} \end{aligned} \quad (132)$$

となる. ただし, $\alpha' = i\alpha$, $\beta' = i\beta$ とした.

次に, z_{2n} を求めるのであるが, 論文のようにはできない. なぜなら, $x_{2n-1}x_{2n} = y_{2n-1}y_{2n}$ が成り立つことは示せるが,⁹

9

$$\begin{aligned} y_{2n-1}y_{2n} &= (\cos 2\alpha'x_{2n-1} - \sin 2\alpha'x_{2n})(\sin 2\alpha'x_{2n-1} + \cos 2\alpha'x_{2n}) \\ &= \cos 2\alpha' \sin 2\alpha'x_{2n-1}^2 + \cos^2 2\alpha'x_{2n-1}x_{2n} - \sin^2 2\alpha'x_{2n}x_{2n-1} - \sin 2\alpha' \cos 2\alpha'x_{2n}^2 \\ &= \cos^2 2\alpha'x_{2n-1}x_{2n} + \sin^2 2\alpha'x_{2n-1}x_{2n} = x_{2n-1}x_{2n} \end{aligned}$$

となる. ついでに,

$$\begin{aligned} [y_{2n-1}, y_{2n}]_+ &= 0 \\ y_{2n}^2 &= \cos^2 2\alpha'x_{2n-1}^2 + \sin^2 2\alpha'x_{2n}^2 + \cos 2\alpha' \sin 2\alpha'[x_{2n-1}, x_{2n}] = 1 \end{aligned}$$

も成り立つ.

これから，固有値を求める永年方程式は，

$$\begin{aligned} ax_{2n-2} + (d - \lambda)x_{2n-1} - bx_{2n} + cx_{2n+1} &= 0 \\ cx_{2n-2} + bx_{2n-1} + (d - \lambda)x_{2n} - ax_{2n+1} &= 0 \end{aligned} \quad (138)$$

となり，これを整理すると，

$$\begin{aligned} bx_{2n} - cx_{2n+1} &= ax_{2n-2} - (\lambda - d)x_{2n-1} \\ (\lambda - d)x_{2n} + ax_{2n+1} &= cx_{2n-2} + bx_{2n-1} \end{aligned} \quad (139)$$

と書くことができる．ここで，

$$\begin{pmatrix} x_{2n} \\ x_{2n+1} \end{pmatrix} = \psi_n, \quad \begin{pmatrix} x_{2n-2} \\ x_{2n-1} \end{pmatrix} = \psi_{n-1} \quad (140)$$

および，

$$A = \begin{pmatrix} b & -c \\ \lambda - d & a \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} a & -\lambda + d \\ c & b \end{pmatrix} \quad (141)$$

とすると，式 (139) は，

$$A\psi_n = B\psi_{n-1} \quad (142)$$

となる．この式は論文の式 (O-32) と形の上で同じである．したがって，これから

$$\psi_n = A^{-1}B\psi_{n-1} \equiv C\psi_{n-1} \quad (143)$$

とし， C を定義すると，

$$\psi_n = C^{n-1}\psi_1 \quad (144)$$

となる． $x_{2(N+n)} = x_{2n}$ の周期性から， $\psi_{N+n} = \psi_n$ の周期性が成り立ち， $\psi_{N+1} = \psi_1$ である．したがって， E を単位行列として，

$$(E - C^N)\psi_1 = 0 \quad (145)$$

となる． ψ_1 が nontrivial な解を持つためには係数の行列式が 0 となり，

$$|E - C^N| = 0 \quad (146)$$

となる．ここで，1 の N 乗根を ξ_k ， $\varphi_k = 2\pi k/N$ とすると，

$$\xi_k = \exp \frac{2\pi i k}{N} = \exp(i\varphi_k), \quad (k = 1, \dots, N) \quad (147)$$

であるから，

$$|\xi_k E - C| = 0, \quad (148)$$

すなわち，

$$|\xi_k A - B| = 0, \quad (149)$$

となる．これから，

$$\begin{vmatrix} \xi_k b - a & -\xi_k c + \lambda - d \\ \xi_k (\lambda - d) - c & \xi_k a - b \end{vmatrix} = 0 \quad (150)$$

となる．ここで， $a \rightarrow -b$ ， $b \rightarrow -a$ とすると，式 (150) は論文の式 (O-33'') と一致することがわかる．つまり，式 (O-28') で誤っても正しい結果が得られていることになる．

この方程式は次の 2 次方程式になる．簡単のために， ξ_k を ξ と書くと，

$$\xi \lambda^2 - \lambda(\xi^2 c + 2d\xi + c) + \xi(a^2 + b^2 + c^2 + d^2) - (1 + \xi^2)(cd - ab) = 0 \quad (O-34)$$

となる。これに式 (135), すなわち式 (O-28''') を代入すると,

$$\begin{aligned} a^2 + b^2 + c^2 + d^2 &= \cos^2 2\alpha' \sin^2 2\beta' + \sin^2 2\alpha' \cos^2 2\beta' + \sin^2 2\alpha' \sin^2 2\beta' + \cos^2 2\alpha' \cos^2 2\beta' \\ &= (\sin^2 2\alpha' + \cos^2 2\alpha')(\sin^2 2\beta' + \cos^2 2\beta') = 1 \\ ab - cd &= \cos 2\alpha' \sin 2\beta' \sin 2\alpha' \cos 2\beta' - \sin 2\alpha' \sin 2\beta' \cos 2\alpha' \cos 2\beta' = 0 \end{aligned} \quad (151)$$

であるから, 式 (O-34) は,

$$\xi\lambda^2 - \lambda(\xi^2 c + 2d\xi + c) + \xi = 0 \quad (152)$$

となる。したがって,

$$\lambda^2 - \lambda\{2d + (\xi + \xi^{-1})c\} + 1 = 0 \quad (153)$$

である。式 (134) を代入すると,

$$\lambda^2 - 2\lambda(\cos 2\alpha' \cos 2\beta' + \sin 2\alpha' \sin 2\beta' \cos \varphi_k) + 1 = 0 \quad (O-34')$$

となる。2次方程式の根と係数の関係から2つの根の積が1となるので, 2つの根を

$$e^{\pm 2i\gamma_k} \quad (154)$$

とおくことができる。このようにおくのは, H の固有値が $e^{\pm i\gamma_k}$ であることに対応させている。

したがって, 2つの根の和から,

$$e^{2i\gamma_k} + e^{-2i\gamma_k} = 2(\cos 2\alpha' \cos 2\beta' + \sin 2\alpha' \sin 2\beta' \cos \varphi_k) \quad (O-35-1)$$

となるので, $\cos 2i\gamma_k = \cosh 2\gamma_k$, $\cos 2\alpha' = \cosh 2\alpha$, $\cos 2\beta' = \cosh 2\beta$, $\sin 2\alpha' = i \sinh 2\alpha$, $\sin 2\beta' = i \sinh 2\beta$ のように α, β に戻すと,

$$\cosh 2\gamma_k = \cosh 2\alpha \cosh 2\beta - \sinh 2\alpha \sinh 2\beta \cos \varphi_k \quad (O-35-2)$$

となる。これは Onsager が求めた固有値に関する関係式と同じである。ただし, γ_k の定義は Onsager の γ_r とは異なる。

式 (O-35) から γ_k を求めることができる。得られた γ_k をもとに, H の固有値の最大値 λ_{\max} は, 明らかに,

$$\lambda_{\max} = \exp\left(\sum_{k=1}^N |\gamma_k|\right) \quad (O-36)$$

となる。

この式から2次元イジングモデルの熱力学的な性質を計算するには Onsager[1] が論文に書いているような計算をする必要がある。ただし, 固有値を求める方法に関しては Onsager の方法と比べて非常に簡潔であると言える。

* * * * *

上で述べたような固有値を求める方法はハニカム構造格子の場合にも必要な変更を加えると応用可能だそうである [5]。ここではこのことについては述べない。

この方法は, 隣接イオンが3個以上の場合には適用できない。実際, 3次元の立方晶の場合は式 (O-1) で示されて, これを生成消滅演算子で表すと式 (O-5) になって, これに式 (O-22) を用いれば, x_r の2次式と4次式で表されることがわかる。結局,

$$\begin{aligned} H &= \exp\left[\beta \sum (s_{nm} s_{n,m+1} + s_{nm} s_{n+1,m})\right] \exp\left[\alpha \sum c_{nm}\right] \\ &= \exp\left[i\beta \sum h_r\right] \exp\left[\alpha \sum k_s\right] \\ h &= x_1 x_3'', \quad x_4 x_2'', \quad k = x_1 x_2 x_3 x_4 \end{aligned} \quad (O-37)$$

と表されることがわかる。

次に、南部は x_r の 4 次式と 2 次式の関係が Dual transformation として 3 次元でも現れることを指摘している。その例として、立方晶格子の原子を立方体の隣り合う頂点間の midpoint におくと、4 個の原子が 1 つの面上に並び、そこだけで 1 つの 4 体相互作用エネルギー $\mu s_1 s_2 s_3 s_4$ が定義される。このエネルギーを対象とする原子を含む xy 面, zx 面, yz 面という 3 つの面をセットにして全ての原子に関して総和を取れば全ての相互作用を計算することになる。

一方、同じ立方格子を考え、原子を体心位置においたときの相互作用エネルギーは上下左右の 2 体相互作用で表すことができ、1 つの原子を注目することにより、 x 正方向, y 正方向, z 正方向の 3 つをセットにすることにして、全ての原子についてこれを総和することにより全ての相互作用を計算することができる。

もともと、dual transformation は、2 次元イジングモデルにおいて、横方向の相互作用と縦方向の相互作用を交換しても全体としての全エネルギーの表現は係数を除いて同じにならなければならないという、相似形を示している。南部らの上の指摘は、そのままであれば、確かに 4 体相互作用と 2 体相互作用は互いに dual transformation で移動可能であると言える。

しかし、ここで対象としている立方格子は厳密には同じではない。立方体の隣り合う頂点間の midpoint に原子を置いた格子は、実は面心立方格子から対向する 1 対の面上の原子を除いたものであることが、1 つの稜の方向へ格子定数の半分移動することで確認することができる。つまり、後者の単純立方格子とは違うので、2 つの結晶格子は等価な原子配置とはいえないから、厳密な dual transformation とは言えない。したがって、Onsager や Kramers and Wannier[6] の言う dual transformation とは少し異なる。

* * * * *

4 Kramers-Wannier's method of approach.

2 次元イジング・モデルでは、分配関数を計算するために、Onsager のように、2 次元格子面の長方形の左端と右端をつないで円筒にする円筒モデルと、1 本の糸で円を描きながら螺旋状に円筒を作るという螺旋モデル、あるいは Kramers-Wannier モデルがある [7]。数式で表すと、横のスピン列を 1 列追加する度に、前者は

$$E = \sum_{n=1}^N H' s_n s_{n+1} + \sum_{n=1}^N H^* C_n \quad (155)$$

が追加され、後者の Kramers-Wannier モデルの場合は、

$$E = \sum_{n=1}^N (H' s_{n-1} s_n + H^* C_n) \quad (156)$$

となる。両方同じように見えるが、前者はまず横方向の相互作用エネルギーを加え、その後で下の列との相互作用エネルギーを加算するのに対して、後者ではスピン 1 個を追加する度に、追加したスピンと横のスピンとの相互作用エネルギーを加え、次に下のスピンとの相互作用エネルギーを追加し、これを N 回繰り返すという操作である。数式的には同じように見えるが、スピン追加の操作を分配関数の変化として考えると、それぞれの変化の量は因子として、前者は

$$H = \exp\left(\sum_{n=1}^N H' s_n s_{n+1}\right) \exp\left(\sum_{n=1}^N H^* C_n\right) \quad (157)$$

が掛けられ、後者は、

$$H = \prod_{n=1}^N \exp(H' s_{n-1} s_n + H^* C_n) \quad (158)$$

が掛けられる。Kramers-Wannier[6]ではこの段階でまとめているが、相互作用を横と縦方向で別々に加えれば、

$$H = \prod_{n=1}^N \exp(H' s_{n-1} s_n) \exp(H^* C_n) \quad (159)$$

とすることもできる。ただし、 $s_{n-1} s_n$ と C_n は可換ではないので、式(158)と式(159)は等しくないが、物理的には両者は一致しないといけない。

式(O-21)と式(O-23)を用いて、 $s_{n-1} s_n$ と C_n を x_r へと書き換えると、式(157)と式(159)は次のように表すことができる。

$$H = \exp(i\beta \sum_{n=1}^N x_{2n} x_{2n+1}) \exp(i\alpha \sum_{n=1}^N x_{2n-1} x_{2n}) \quad (160)$$

$$H = \prod_{n=1}^N \exp(i\beta x_{2n} x_{2n+1}) \exp(i\alpha x_{2n+1} x_{2n}) \quad (161)$$

ここで、Onsagerモデルの式(157)をKramers-Wannierモデルの式(159)に変換してみよう。論文にあるように、 $H_2 H_1$ を $H_1 H_2$ に変えてから変換する。このように変えても、物理的には同じものを表すから、問題ない。そうすると、

$$\begin{aligned} H_1 H_2 &= \exp(i\alpha \sum_{n=1}^N x_{2n-1} x_{2n}) \exp(i\beta \sum_{n=1}^N x_{2n} x_{2n+1}) \\ &= \exp(i\alpha x_1 x_2) \exp(i\alpha x_3 x_4) \cdots \exp(i\alpha x_{2N-1} x_{2N}) \exp(i\beta x_2 x_3) \exp(i\beta x_4 x_5) \cdots \exp(i\beta x_{2N} x_{2N+1}) \end{aligned}$$

となる。ここで、指数の和が指数関数の積になったのは、和のそれぞれの項が可換だからである。

次に、 $\exp(i\beta x_2 x_3)$ から始まる項を左の方へ移動し、指数部に x_r の同じ項を含む項の手前まで移動すると、2つの項を単位とする移動であるから符号変化がない。同様にして、次の $\exp(i\beta x_4 x_5)$ についても符号変換のないところまで移動する。このようにして全て移動すると、上の式は

$$\begin{aligned} H_1 H_2 &= \exp(i\alpha x_1 x_2) \exp(i\alpha x_3 x_4) \exp(i\beta x_2 x_3) \exp(i\alpha x_5 x_6) \exp(i\beta x_4 x_5) \cdots \exp(i\alpha x_{2N-1} x_{2N}) \exp(i\beta x_{2N} x_{2N+1}) \\ &= \exp(i\alpha x_1 x_2) \left[\prod_{n=2}^N \exp(i\alpha x_{2n-1} x_{2n}) \exp(i\beta x_{2n-2} x_{2n-1}) \right] e^{i\beta x_{2N} x_{2N+1}} \\ &= \exp(i\alpha x_1 x_2) \left[\prod_{n=1}^{N-1} \exp(i\alpha x_{2n+1} x_{2n+2}) \exp(i\beta x_{2n} x_{2n+1}) \right] \exp(i\beta x_{2N} x_{2N+1}) \end{aligned} \quad (O-38)$$

と書くことができる。さらに、

$$\begin{aligned} &= \exp(i\alpha x_1 x_2) \left[\prod_{n=1}^{N-1} \exp(i\alpha x_{2n+1} x_{2n+2}) \exp(i\beta x_{2n} x_{2n+1}) \right] \\ &\quad \times \exp(i\alpha x_{2N+1} x_{2N+2}) \exp(i\beta x_{2N} x_{2N+1}) \exp(-i\beta x_{2N} x_{2N+1}) \exp(-i\alpha x_{2N+1} x_{2N+2}) \exp(i\beta x_{2N} x_{2N+1}) \\ &= \exp(i\alpha x_1 x_2) \left[\prod_{n=1}^N \exp(i\alpha x_{2n+1} x_{2n+2}) \exp(i\beta x_{2n} x_{2n+1}) \right] \\ &\quad \times \exp(-i\beta x_{2N} x_{2N+1}) \exp(-i\alpha x_{2N+1} x_{2N+2}) \exp(i\beta x_{2N} x_{2N+1}) \end{aligned} \quad (162)$$

とすることができる。Nが十分大きい時には上の式で最初の1因子、最後の3因子は省略することができる。そうすると、

$$H_1 H_2 = \left[\prod_{n=1}^N \exp(i\alpha x_{2n+1} x_{2n+2}) \exp(i\beta x_{2n} x_{2n+1}) \right] \quad (O-38'-1)$$

とすることができる。ここで、

$$H_n = \exp(i\alpha x_{2n+1}x_{2n+2}) \exp(i\beta x_{2n}x_{2n+1}) \quad (\text{O-38'-2})$$

とおけば、

$$H = \prod_{n=1}^N H_n = H_1 H_2 \cdots H_N \quad (\text{O-38'-3})$$

となる。この式の H_1, H_2 は式 (O-38) で示されている H_1, H_2 とは異なるが、混同する恐れもないのでそのままにする。

* * * * *

論文では、式 (O-38') の後で、 H_n の順番を逆にした演算子を考えると都合が良いと書いている。これは式 (O-38') の H が $H_1 H_2 H_3 \cdots H_n$ という順番になっているのを $H_n \cdots H_3 H_2 H_1$ としたいということである。もともと H はエルミートであるから、 H のエルミート共役をとれば、 H_n の順番も逆になり、もとの H と等しい。そういうことで、以下では $H = H^\dagger = H_n \cdots H_3 H_2 H_1$ を考えることにしよう。すなわち、

$$H = H_n \cdots H_3 H_2 H_1 \quad (163)$$

である。このとき、 H_n は式 (O-38'-2) のかわりに、

$$H_n = \exp(i\beta x_{2n}x_{2n+1}) \exp(i\alpha x_{2n+1}x_{2n+2}) \quad (\text{O-38'-4})$$

となる。

式 (O-38') より下の部分は表記が乱れているので、注意して読み進む必要がある。

式 (O-28) のような、 H が作用する 2^N 次元ベクトル空間の 1 つのベクトル Ψ_0 を考えよう。さらに、 Ψ_n を次のようにして逐次定義する¹⁰。

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= H_1 \Psi_0 \\ \Psi_2 &= H_2 \Psi_1 \\ \Psi_3 &= H_3 \Psi_2 \\ &\dots \\ \Psi_n &= H_n \Psi_{n-1} \end{aligned} \quad (164)$$

これから、一般に、

$$\Psi_n = H_n H_{n-1} \cdots H_2 H_1 \Psi_0 \quad (\text{O-39})$$

となる。しかし、この式のままでは、後の部分で整合しなくなるが、この式に合うように以下の計算を合わせることにする。

次に、 x_r を x_{r+2} に相似変換する演算子を P を考えよう。演算子 P の具体的な形はこの後で出てくる。この P を用いると、

$$x_{r+2} = P x_r P^{-1}, \quad x_{2(n+1)} = P x_{2n} P^{-1}, \quad P^{-1} x_{r+2} P = x_r, \quad P^{-1} x_{2(n+1)} P = x_{2n} \quad (165)$$

のように変換できる。したがって、式 (O-38'-4) に式 (165) を適用すれば、

$$H_n = P H_{n-1} P^{-1} \quad (166)$$

¹⁰この定義は論文の式 (O-40) と異なる。論文の定義では式 (O-39) と合わなくなる。

となることがわかる。いま、式 (O-38'-4) で $n = N$ として、 $H_0 = H_N$ を

$$H_0 = \exp(i\beta x_{2N} x_1) \exp(i\alpha x_1 x_2) \quad (\text{O-39'-1})$$

とおけば、式 (166) から、

$$H_n = P^n H_0 P^{-n} \quad (\text{O-39'-2})$$

となることがわかる。

次に、式 (163), (O-39'-2) から、

$$\Psi_{n+1} = H_{n+1} \Psi_n = P^{n+1} H_0 P^{-n-1} \Psi_n \quad (167)$$

とする。ここで、 Ψ'_n を次のように定義する¹¹。

$$\Psi'_n = P^{-n-1} \Psi_n, \quad \Psi_n = P^{n+1} \Psi'_n. \quad (168)$$

そうすると、式 (167) は

$$P^{n+2} \Psi'_{n+1} = P^{n+1} H_0 P^{-n-1} P^{n+1} \Psi'_n \quad (169)$$

と変形できるから、

$$\Psi'_{n+1} = P^{-1} H_0 \Psi'_n \quad (170)$$

となる。ここで、

$$A = P^{-1} H_0 \quad (171)$$

とおけば、

$$\Psi'_{n+1} = A \Psi'_n \quad (172)$$

である。ここで、 $A = P^{-1} H_0$ は直接 n を含まない。そうすると、一見 Ψ'_n は n に依存しないように見えて Ψ'_n は一定のように見えるが、 P は x_r に関する演算を行うので、必ずしもそうはならない。したがって、一般に、 $\Psi'_n \neq \Psi'_m$ ($n \neq m$) である。

一方、 Ψ_n は原子を 1 周分追加した時に Ψ_{n+N} となり、鎖が半無限長の場合は、1 周分追加しても全く同じになって周期的になるので $\Psi_{n+N} = \Psi_n$ である。鎖が十分長い時には 1 周分追加しても変化分および n 依存性は小さいと考えられるから、 Ψ_{n+N} は元の Ψ_n に非常に近いものと考えられる。ここでは一般に定数倍とし、その定数を E とする。すなわち、

$$\Psi_{n+N} = E \Psi_n \quad (173)$$

である。したがって、これを用いると、

$$\Psi'_{n+N} = P^{-n-N-1} \Psi_{n+N} = P^{-n-N-1} E \Psi_n = P^{-N} E P^{-n-1} \Psi_n = P^{-N} E \Psi'_n \quad (174)$$

となる。一方、式 (172) から、

$$\Psi'_{n+N} = A^N \Psi'_n \quad (175)$$

となるから、左辺を式 (174) に代入して、

$$E \Psi'_n = P^N A^N \Psi'_n \quad (176)$$

という式を得る。

ここで、 P^N について考えてみよう。式 (O-38'-2) から明らかなように、 H_n は x_r の添字 r は $2n$ を基準にしているので、 P^N による相似変換によって x_r の添字は $2N$ の整数倍だけ増加するということができる。 x_r は

¹¹この定義も論文の式 (O-40'') と少し異なる。しかし、このように定義しないと、式 (164) の定義と整合がとれず、後で不具合が生じる。

r に $2N$ を法として依存しているので, P^N による相似変換によって変化しない. 結局, 回転の演算子として P^N は何も変化を与えないということがわかる. これから P^N は単位演算子とみなしてもよいということがわかる. つまり $P^N = 1$ である. そうすると, 式 (174) は,

$$\Psi'_{n+N} = E\Psi'_n \quad (177)$$

となり, 式 (176) は,

$$E\Psi'_n = A^N\Psi'_n \quad (178)$$

となる. これから, A^N の固有値は E で, A の固有値を λ とすると,

$$A\Psi'_n = \lambda\Psi'_n, \quad \lambda^N = E \quad (179)$$

となることがわかる.

次に, 式 (164) と式 (O-39) から

$$\Psi_N = H\Psi_0 \quad (180)$$

とすることができる. 式 (173) を用いれば,

$$H\Psi_0 = E\Psi_0 \quad (181)$$

である. この式はシュレディンガーの方程式の形をしており, H の固有値は E である.

また, 式 (O-39) と式 (O-39'-2) から,

$$\begin{aligned} \Psi_N &= H\Psi_0 \\ &= (P^N H_0 P^{-N})(P^{N-1} H_0 P^{-N+1})(P^{N-2} H_0 P^{-N+2}) \cdots (P^2 H_0 P^{-2})(P^1 H_0 P^{-1})\Psi_0 \\ &= P^{N+1}(P^{-1} H_0)(P^{-1} H_0)(P^{-1} H_0) \cdots (P^{-1} H_0)(P^{-1} H_0)P^{-1}\Psi_0 \\ &= P^{N+1}(P^{-1} H_0)^N P^{-1}\Psi_0 \\ &= P^{N+1} A^N \Psi'_0 \end{aligned} \quad (182)$$

となるので, これから,

$$\Psi'_N = E\Psi'_0 = A^N \Psi'_0 \quad (183)$$

となる. これは式 (178) で $n = 0$ の場合である.

以上から, H の固有値は E であり, A^N の固有値と同じであることがわかる. したがって, H の固有値は, A の固有値 λ を求めればよいということになる.

A の固有値が λ であり, 共通の固有ベクトル Ψ'_n ($n = 1, \dots, N$) を持つということは, 螺旋形モデルの場合, 鎖が十分長ければ鎖のどこを起点と考えるとも同等であるから, Ψ'_n が共通の固有ベクトルになるということである.

* * * * *

ここで, 演算子 P の具体的な式を見てみよう. 次の式は南部が論文に示した式で, その仕組みを考えると, 実に良く考えられていることがわかる. このような機能をもつ演算子は簡単に考えられそうに思うが, ほとんどの場合, 必ずどこかで齟齬が生じる. ところが, 次の式はそれがほとんど回避されているので, 非常に巧みな式であることがよくわかる. さて, その P は,

$$\begin{aligned} P &= \exp\left[\frac{\pi}{4}x_1x_{2N-1}\right] \exp\left[-\frac{\pi}{4}x_1x_{2N-3}\right] \cdots \exp\left[\pm\frac{\pi}{4}x_1x_3\right] \\ &\quad \times \exp\left[\frac{\pi}{4}x_2x_{2N}\right] \exp\left[-\frac{\pi}{4}x_2x_{2N-2}\right] \cdots \exp\left[\pm\frac{\pi}{4}x_2x_4\right] \end{aligned} \quad (O-42)$$

と表される。この式の働きを見るために、次の関係を知っておくとわかりやすい。式 (O-25), (O-26) から、

$$\begin{aligned}
\exp\left[\frac{\pi}{4}x_1x_2\right]x_1\exp\left[-\frac{\pi}{4}x_1x_2\right] &= \frac{1}{2}(1+x_1x_2)x_1(1-x_1x_2) \\
&= \frac{1}{2}(1+x_1x_2)(x_1-x_2) = \frac{1}{2}(x_1-x_2-x_2-x_1) = -x_2 \\
\exp\left[-\frac{\pi}{4}x_1x_2\right]x_1\exp\left[\frac{\pi}{4}x_1x_2\right] &= \frac{1}{2}(1-x_1x_2)x_1(1+x_1x_2) \\
&= \frac{1}{2}(1-x_1x_2)(x_1+x_2) = \frac{1}{2}(x_1+x_2+x_2-x_1) = x_2 \\
\exp\left[\frac{\pi}{4}x_1x_2\right]x_2\exp\left[-\frac{\pi}{4}x_1x_2\right] &= \frac{1}{2}(1+x_1x_2)x_2(1-x_1x_2) \\
&= \frac{1}{2}(1+x_1x_2)(x_2+x_1) = \frac{1}{2}(x_2+x_1+x_1-x_2) = x_1 \\
\exp\left[-\frac{\pi}{4}x_1x_2\right]x_2\exp\left[\frac{\pi}{4}x_1x_2\right] &= \frac{1}{2}(1-x_1x_2)x_2(1+x_1x_2) \\
&= \frac{1}{2}(1-x_1x_2)(x_2-x_1) = \frac{1}{2}(x_2-x_1-x_1-x_2) = -x_1
\end{aligned} \tag{O-42'}$$

となる。これからわかることは、 $\exp[\frac{\pi}{4}x_r x_s]$ という演算子の相似変換により、 x_r は x_s に、 x_s は $-x_r$ に変化するということである。式 (O-42) の P による演算を考えると、 x_r の添字が含まれていない P の因数は x_r と可換になるので、 x_r と x_{r+2} を含む因子は全て相殺することになる。そうすると、 r が奇数の場合、 x_r は一度 x_1 に変換され、次いで x_{r+2} に変換されて、結局、2段階の過程を経て目的とする変換がなされることになる。 r が偶数の場合も同様である。

例として、 x_{2N-3} の場合に考えてみよう。式 (O-42) と式 (O-42') を用いて、

$$\begin{aligned}
P x_{2N-3} P^{-1} &= \exp\left[\frac{\pi}{4}x_1x_{2N-1}\right]\exp\left[-\frac{\pi}{4}x_1x_{2N-3}\right]x_{2N-3}\exp\left[\frac{\pi}{4}x_1x_{2N-1}\right]\exp\left[-\frac{\pi}{4}x_1x_{2N-3}\right] \\
&= \exp\left[\frac{\pi}{4}x_1x_{2N-1}\right](-x_1)\exp\left[-\frac{\pi}{4}x_1x_{2N-3}\right] \\
&= x_{2N-1}
\end{aligned} \tag{184}$$

となり、 x_{2N-3} が x_{2N-1} に変換されるのがわかる。途中、 x_{2N-1} が x_1 に変わり、次いで x_{2N-3} に変わり、 x_{2N-3} はその後の x_1x_{2n-1} と一致する部分がないので、両側の同じ因子によって相殺されるので、上の式展開のように、現れてこない。添字が奇数の場合、 x_3 から x_{2N-3} までは上と同じ演算によって n が $n+1$ に変換される。

x_{2N-1} の場合は、簡単に、

$$\begin{aligned}
P x_{2N-1} P^{-1} &= \exp\left[\frac{\pi}{4}x_1x_{2N-1}\right]x_{2N-1}\exp\left[\frac{\pi}{4}x_1x_{2N-1}\right] \\
&= x_1 = x_{2N+1}
\end{aligned} \tag{185}$$

となる。

また、 x_1 の場合は、

$$\begin{aligned}
P x_1 P^{-1} &= \exp\left[\pm\frac{\pi}{4}x_1x_3\right]x_1\exp\left[\mp\frac{\pi}{4}x_1x_3\right] \\
&= \pm x_3
\end{aligned} \tag{186}$$

となる。

以上のように、 x_{2n-1} ($2 \leq n \leq N-1$) は2段階で、 x_{2N-1} と x_1 の場合は1段階で変換される。 x_1 の場合は、 N が偶数なら正、 N が奇数なら負となる。

x_{2n} の変換の場合でも同様である。すなわち、 x_{2n} ($2 \leq n \leq N-1$) は2段階で、 x_{2N} と x_2 の場合は1段階で変換される。 x_2 の場合は、 N が偶数なら正、 N が奇数なら負となる。

最後の因子で符号が正負変わるところはあるが、 P は $\exp(ix_r x_s \delta)$ の形を有する因子の積であるから、相似変換により座標を回転する演算子である。したがって、 $A = H_0 P^{-1}$ も座標回転演算子である。これは前節 Onsager のモデルで取り扱われた固有値問題を解く際的前提と同じで、 A による相似変換 $Ax A^{-1}$ の $2N$ 次元行列表現の固有値が、式 (126) と同様に、 A の 2^N 次元ベクトル空間の固有値と一致するというを示す。

それでは A の固有値を求める段階に進もう。

* * * * *

Onsager 問題のときには、相似変換の行列表現を求めてから直接永年方程式を解いて固有値を求めた。ここでは南部は、固有ベクトルの形から求める手法を取っている。 x を x_r の 1 次結合による座標とし、これを A により相似変換した座標を x' とすると、

$$Ax A^{-1} = x'$$

である。 x が固有ベクトルの場合は、

$$Ax A^{-1} = \lambda x \quad (187)$$

となる¹²。ここで南部は、鋭い洞察力によって、固有ベクトルの形を次のようにおいている。

$$x = \sum_{n=1}^{N-1} \lambda^{n-1} (ax_{2n-1} + bx_{2n}) + cx_{2N} + \lambda^{N-1} ax_{2N-1} \quad (O-43)$$

これを式 (187) に代入すると、

$$P^{-1}(H_0 x H_0^{-1})P = \lambda x$$

となるので、式 (O-39'-1) に照らして、これを $H_0 x_1 H_0^{-1}$ 、 $H_0 x_2 H_0^{-1}$ 、 $H_0 x_{2N} H_0^{-1}$ のように、少しずつ小分けにして計算して行こう。

$$\begin{aligned} H_0 x_1 H_0^{-1} &= \exp(\beta' x_{2N} x_1) \exp(\alpha' x_1 x_2) x_1 \exp(-\alpha' x_1 x_2) \exp(-\beta' x_{2N} x_1) \\ &= \exp(\beta' x_{2N} x_1) (x_1 \cos 2\alpha' - x_2 \sin 2\alpha') \exp(-\beta' x_{2N} x_1) \\ &= \cos 2\alpha' (x_{2N} \sin 2\beta' + x_1 \cos 2\beta') - x_2 \sin 2\alpha' \\ &= x_{2N} \cos 2\alpha' \sin 2\beta' + x_1 \cos 2\alpha' \cos 2\beta - x_2 \sin 2\alpha' \end{aligned} \quad (188)$$

$$\begin{aligned} H_0 x_2 H_0^{-1} &= \exp(\beta' x_{2N} x_1) \exp(\alpha' x_1 x_2) x_2 \exp(-\alpha' x_1 x_2) \exp(-\beta' x_{2N} x_1) \\ &= \exp(\beta' x_{2N} x_1) (x_1 \sin 2\alpha' + x_2 \cos 2\alpha') \exp(-\beta' x_{2N} x_1) \\ &= \sin 2\alpha' (x_{2N} \sin 2\beta' + x_1 \cos 2\beta') + x_2 \cos 2\alpha' \\ &= x_{2N} \sin 2\alpha' \sin 2\beta' + x_1 \sin 2\alpha' \cos 2\beta + x_2 \cos 2\alpha' \end{aligned} \quad (189)$$

$$\begin{aligned} H_0 x_{2N} H_0^{-1} &= \exp(\beta' x_{2N} x_1) \exp(\alpha' x_1 x_2) x_{2N} \exp(-\alpha' x_1 x_2) \exp(-\beta' x_{2N} x_1) \\ &= \exp(\beta' x_{2N} x_1) x_{2N} \exp(-\beta' x_{2N} x_1) \\ &= x_{2N} \cos 2\beta' - x_1 \sin 2\beta' \end{aligned} \quad (190)$$

¹²これを行列表現 \mathcal{D} で考えれば、

$$Ax A^{-1} = \mathcal{D}(A) x = x'$$

と表される。相似変換して x' になるときは、

$$\mathcal{D}(A) x = x'$$

であり、 x が固有ベクトルなら

$$\mathcal{D}(A) x = \lambda x$$

となる。

であるから,

$$\begin{aligned}
& H_0 x H_0^{-1} \\
&= H_0 \left[\sum_{n=2}^{N-1} \lambda^{n-1} (ax_{2n-1} + bx_{2n}) + ax_1 + bx_2 + cx_{2N} + \lambda^{N-1} ax_{2N-1} \right] H_0^{-1} \\
&= \sum_{n=2}^{N-1} \lambda^{n-1} (ax_{2n-1} + bx_{2n}) + H_0 [ax_1 + bx_2 + cx_{2N}] H_0^{-1} + \lambda^{N-1} ax_{2N-1} \\
&= \sum_{n=2}^{N-1} \lambda^{n-1} (ax_{2n-1} + bx_{2n}) + \lambda^{N-1} ax_{2N-1} \\
&+ a \{x_{2N} \cos 2\alpha' \sin 2\beta' + x_1 \cos 2\alpha' \cos 2\beta - x_2 \sin 2\alpha'\} \\
&+ b \{x_{2N} \sin 2\alpha' \sin 2\beta' + x_1 \sin 2\alpha' \cos 2\beta + x_2 \cos 2\alpha'\} \\
&+ c \{x_{2N} \cos 2\beta' - x_1 \sin 2\beta'\}
\end{aligned} \tag{191}$$

となるので, 式 (187) の左辺は,

$$\begin{aligned}
& P^{-1} (H_0 x H_0^{-1}) P \\
&= \sum_{n=2}^{N-1} \lambda^{n-1} (ax_{2n-3} + bx_{2n-2}) + \lambda^{N-1} ax_{2N-3} \\
&+ a \{x_{2N-2} \cos 2\alpha' \sin 2\beta' + x_{2N-1} \cos 2\alpha' \cos 2\beta - x_{2N} \sin 2\alpha'\} \\
&+ b \{x_{2N-2} \sin 2\alpha' \sin 2\beta' + x_{2N-1} \sin 2\alpha' \cos 2\beta + x_{2N} \cos 2\alpha'\} \\
&+ c \{x_{2N-2} \cos 2\beta' - x_{2N-1} \sin 2\beta'\} \\
&= \sum_{n=1}^{N-2} \lambda^n (ax_{2n-1} + bx_{2n}) + \lambda^{N-1} ax_{2N-3} \\
&+ a \{x_{2N-2} \cos 2\alpha' \sin 2\beta' + x_{2N-1} \cos 2\alpha' \cos 2\beta - x_{2N} \sin 2\alpha'\} \\
&+ b \{x_{2N-2} \sin 2\alpha' \sin 2\beta' + x_{2N-1} \sin 2\alpha' \cos 2\beta + x_{2N} \cos 2\alpha'\} \\
&+ c \{x_{2N-2} \cos 2\beta' - x_{2N-1} \sin 2\beta'\} \\
&= \sum_{n=1}^{N-1} \lambda^n (ax_{2n-1} + bx_{2n}) - \lambda^{N-1} bx_{2N-2} \\
&+ a \{x_{2N-2} \cos 2\alpha' \sin 2\beta' + x_{2N-1} \cos 2\alpha' \cos 2\beta - x_{2N} \sin 2\alpha'\} \\
&+ b \{x_{2N-2} \sin 2\alpha' \sin 2\beta' + x_{2N-1} \sin 2\alpha' \cos 2\beta + x_{2N} \cos 2\alpha'\} \\
&+ c \{x_{2N-2} \cos 2\beta' - x_{2N-1} \sin 2\beta'\}
\end{aligned} \tag{192}$$

となる. 一方, 式 (187) の右辺は,

$$\lambda x = \sum_{n=1}^{N-1} \lambda^n (ax_{2n-1} + bx_{2n}) + \lambda cx_{2N} + \lambda^N ax_{2N-1} \tag{193}$$

である. もともと, 式 (192) と式 (193) は等しく, これが一般に成り立つのは, 両辺の a , b , c の係数が等しい場合である. したがって, それぞれの係数を等しく置くと,

$$\begin{aligned}
x_{2N-2} \cos 2\alpha' \sin 2\beta' + x_{2N-1} \cos 2\alpha' \cos 2\beta - x_{2N} \sin 2\alpha' &= \lambda^N x_{2N-1} \\
x_{2N-2} \sin 2\alpha' \sin 2\beta' + x_{2N-1} \sin 2\alpha' \cos 2\beta + x_{2N} \cos 2\alpha' - \lambda^{N-1} x_{2N-2} &= 0 \\
x_{2N-2} \cos 2\beta' - x_{2N-1} \sin 2\beta' &= \lambda x_{2N}
\end{aligned}$$

となる。これを, $x_{2N-2} = x$, $x_{2N-1} = y$, $x_{2N} = z$ とおいて整理すると,

$$\cos 2\alpha' \sin 2\beta' x + \cos 2\alpha' \cos 2\beta' y - \sin 2\alpha' z = \lambda^N y \quad (194)$$

$$\sin 2\alpha' \sin 2\beta' x + \sin 2\alpha' \cos 2\beta' y + \cos 2\alpha' z = \lambda^{N-1} x \quad (195)$$

$$\cos 2\beta' x - \sin 2\beta' y = \lambda z \quad (196)$$

となる。式(194)と式(195)から式(196)を用いて z を消去して整理すると,

$$\begin{aligned} (\cos 2\alpha' \sin 2\beta' - \lambda^{-1} \sin 2\alpha' \cos 2\beta') + (\cos 2\alpha' \cos 2\beta' - \lambda^{-1} \sin 2\alpha' \sin 2\beta' - \lambda^N) y &= 0 \\ (\sin 2\alpha' \sin 2\beta' + \lambda^{-1} \cos 2\alpha' \cos 2\beta' - \lambda^{N-1}) x + (\sin 2\alpha' \cos 2\beta' - \lambda^{-1} \cos 2\alpha' \sin 2\beta') y &= 0 \end{aligned} \quad (197)$$

x , y が有意な解を持つためには係数の行列式が0でなければならないので,

$$\begin{aligned} (\cos 2\alpha' \sin 2\beta' - \lambda^{-1} \sin 2\alpha' \cos 2\beta')(\sin 2\alpha' \cos 2\beta' - \lambda^{-1} \cos 2\alpha' \sin 2\beta') \\ - (\cos 2\alpha' \cos 2\beta' - \lambda^{-1} \sin 2\alpha' \sin 2\beta' - \lambda^N)(\sin 2\alpha' \sin 2\beta' + \lambda^{-1} \cos 2\alpha' \cos 2\beta' - \lambda^{N-1}) &= 0 \end{aligned} \quad (198)$$

となる。展開して整理すると,

$$\begin{aligned} &(\sin 2\alpha' \cos 2\alpha' \sin 2\beta' \cos 2\beta' - \sin 2\alpha' \cos 2\alpha' \sin 2\beta' \cos 2\beta') \\ &-\lambda^{-1}(\cos^2 2\alpha' \sin^2 2\beta' + \sin^2 2\alpha' \cos^2 2\beta' + \sin^2 2\alpha' \sin^2 2\beta' + \cos^2 2\alpha' \cos^2 2\beta') \\ &+\lambda^{-2}(\sin 2\alpha' \cos 2\alpha' \sin 2\beta' \cos 2\beta' - \sin 2\alpha' \cos 2\alpha' \sin 2\beta' \cos 2\beta') \\ &-\lambda^{2N-1} + \lambda^N \sin 2\alpha' \sin^2 2\beta' + 2\lambda^{N-1} \cos 2\alpha' \cos 2\beta' + \lambda^{N-2} \sin 2\alpha' \sin 2\beta' &= 0 \end{aligned} \quad (199)$$

となる。 λ^0 と λ^{-2} の係数は0となり, λ^{-1} の係数は -1 となるから, 結局,

$$\lambda^{2N-1} - \lambda^N \sin 2\alpha' \sin 2\beta' - 2\lambda^{N-1} \cos 2\alpha' \cos 2\beta' - \lambda^{N-2} \sin 2\alpha' \sin 2\beta' + \lambda^{-1} = 0 \quad (200)$$

となり, 両辺を λ^{N-1} で割って,

$$\lambda^N - \sin 2\alpha' \sin 2\beta'(\lambda + \lambda^{-1}) - 2 \cos 2\alpha' \cos 2\beta' + \lambda^{-N} = 0 \quad (201)$$

となる。 $\alpha' = i\alpha$, $\beta' = i\beta$ と戻すと,

$$\lambda^N + \lambda^{-N} + \sinh 2\alpha \sinh 2\beta'(\lambda + \lambda^{-1}) - 2 \cosh 2\alpha' \cosh 2\beta' = 0 \quad (\text{O-45}')$$

が得られる。計算の途中で随分違う所が多いのに, 最後に同じ式が得られる所が不思議である。南部は結果が分かっていたので, 途中の計算はしておらず, 論文を書くために途中の式を当てはめていったかのようである。

式(126)の場合と同じように, A の固有値 λ は 2次元正方行列の $e^{\pm\gamma_n}$ に対応させて, $\lambda = \exp(2\gamma)$ とおくことができる。これを上の式に代入すると,

$$\cosh 2N\gamma = \cosh 2\alpha' \cosh 2\beta' - \sinh 2\alpha \sinh 2\beta' \cosh 2\gamma \quad (\text{O-46})$$

となる。 H の固有値 e^γ はこの方程式の γ を解くことにより得られる。そのため,

$$2\gamma = 2\gamma_0 + i\omega \quad (202)$$

とおく。これを式(O-46)に代入して実数部分と虚数部分のそれぞれを等しいとおけば,

$$\begin{aligned} \cosh 2N\gamma_0 \cos N\omega &= \cosh 2\alpha' \cosh 2\beta' - \sinh 2\alpha \sinh 2\beta' \cosh 2\gamma_0 \cos \omega \\ \sinh 2N\gamma_0 \sin N\omega &= -\sinh 2\alpha \sinh 2\beta' \sinh 2\gamma_0 \sin \omega \end{aligned} \quad (\text{O-48})$$

となる。この後は論文に書いてある通りであるが、 $\omega = k\pi/N$ ($k = 1, 2, \dots, 2N$) とおく。なぜ、このように置けるのか、その必然性は何も挙げていないところが不満であるが、そうすることにより、 $\sin N\omega = 0$ 、 $\cos N\omega = (-1)^k$ となる。分配関数は $\exp(\sum \gamma_n)$ であるから、 $N\gamma$ は有限である。したがって、 N は十分大きいから、 $N \rightarrow \infty$ のとき、 $N\gamma_0 \rightarrow \Gamma$ とすることができる。これから、 $N \rightarrow \infty$ のとき、 $\gamma_0 \rightarrow 0$ である。そうすると、この ω の定義で

$$\pm \cosh 2\Gamma = \cosh 2\alpha \cosh 2\beta - \sinh 2\alpha \sinh 2\beta \cos \omega \quad (\text{O-49})$$

とすることができて、式 (O-48) が満たす範囲にある。一方、この式の左辺の負の符号は不可能な場合が存在するので、そうならない ω の条件は、

$$\omega = \frac{2k\pi}{N}, \quad k = 1, 2, \dots, N \quad (\text{O-49}')$$

となる。ということで、結果は Onsager の問題の解と一致する。

* * * * *

5 Additional Remarks

この論文における固有値問題解法の特徴は、 2^N 次元の固有値問題を $2N$ 次元におけるより簡単な問題に置き換えることができたということである。南部はこれを trick と書いているが、ただの偶然ではないことを示すため、この節で理論的な一般化を試みている。

固有値問題を、南部は、普通の $H\psi = E\psi$ のような形式ではなく、

$$[H, X]_- = \lambda X \quad (\text{O-50})$$

という形式を考えて、 X を固有演算子とするような固有値問題を提起している。これが、前節までの固有値問題とどのように関係してくるのかということを示す前に、 X の働きについて説明がある。

H の固有値と固有ベクトルを、 E_m, E_n 、および Ψ_m, Ψ_n とし、 $E_n - E_m = \lambda$ すると、式 (O-50) で示される関係から、 X は Ψ_m から Ψ_n に変換する演算子であるという。実際、このことを見てみよう。式 (O-50) から、

$$\begin{aligned} HX\Psi_m - XH\Psi_m &= \lambda X\Psi_m \\ HX\Psi_m - E_m X\Psi_m &= \lambda X\Psi_m \\ HX\Psi_m &= (\lambda + E_m)X\Psi_m \\ H(X\Psi_m) &= E_n(X\Psi_m) \end{aligned}$$

となり、 $X\Psi_m = \Psi_n$ となる。

次に、 $X = X_1 X_2$ の場合、 $X_2\Psi_m = \Psi_n$ 、 $X_1\Psi_n = \Psi_l$ として、

$$\begin{aligned} HX_1 X_2 \Psi_m - X_1 X_2 H \Psi_m &= \lambda X_1 X_2 \Psi_m \\ HX_1 \Psi_n - E_m X_1 X_2 \Psi_m &= \lambda X_1 \Psi_n \\ H\Psi_l - E_m X_1 \Psi_n &= \lambda \Psi_l \\ E_l \Psi_l - E_m \Psi_l &= \lambda \Psi_l \\ (E_l - E_m) \Psi_l &= \lambda \Psi_l \end{aligned}$$

となることがわかる。 X が複数の同種の演算子の積の場合でも同様に成り立つことがわかる。

次に、この関係が固有値問題と関係してくるところを示そう。

\tilde{X} を一般的なハイゼンベルク表示と考え、

$$\overline{\tilde{X}(s)} = e^{sH} X e^{-sH} \quad (203)$$

とする。式 (O-50) の X もハイゼンベルク表示であることを示すために、

$$[H, \tilde{X}] = \lambda \tilde{X} \quad (204)$$

と書くことにする。

$\partial X / \partial s = 0$ として、ハイゼンベルクの運動方程式と同じように、

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \tilde{X} &= \frac{d}{ds} e^{sH} X e^{-sH} = H(e^{sH} X e^{-sH}) + e^{sH} \frac{\partial X}{\partial s} e^{-sH} - (e^{sH} X e^{-sH}) H \\ &= H \tilde{X} - \tilde{X} H = [H, \tilde{X}] \end{aligned} \quad (205)$$

となる。右辺に式 (204) を代入すると、

$$\frac{d}{ds} \tilde{X} = \lambda \tilde{X} \quad (206)$$

となる。これを積分すると、 C を s に依存しない定数または演算子として、

$$\tilde{X}(s) = e^{\lambda s} C \quad (207)$$

であるが、 $s = 0$ を代入すると、 $C = \tilde{X}(0) = X$ であるから、式 (203) と合わせると、

$$e^{sH} X e^{-sH} = e^{\lambda s} X \quad (208)$$

となる。この式で、 $s = 1$ とおくと、

$$e^H X e^{-H} = e^\lambda X \quad (209)$$

という式 (O-51) が得られる¹³。この式が論文で出てきた固有値問題の式である。これを行列で表現すれば、普通の固有値問題になるので行列代数で解くことができる。その固有値は e^λ である。一方、 λ は H の 2 つの固有値の差である。前節の場合は、2次元正方行列の直積になっていて、 H の固有値は対称的な $\pm\gamma$ であったので、 $\lambda = 2\gamma$ という関係から求める固有値が得られた。論文では、 E_m が対称的に分布していて、0 を中心に対称的な場合は、 E_m の最大値を E_{\max} とすれば、対応する λ_{\max} とは $2E_{\max} = \lambda_{\max}$ という関係になると述べている。まさに、上で述べた例はこの場合に対応する。

X が 2 つの演算子 X_1 と X_2 の積である場合は、

$$e^H X e^{-H} = e^H X_1 X_2 e^{-H} = (e^H X_1 e^{-H})(e^H X_2 e^{-H}) = e^{\lambda_1} X_1 e^{\lambda_2} X_2 = e^{\lambda_1 + \lambda_2} X_1 X_2 \quad (210)$$

となる。2 個以上の積の場合もこれを繰り返すことにより成り立つことを示すことができる。

* * * * *

参考文献

- [1] Lars Onsager, “Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition”, Phys. Rev. **65**, 117-149 (1944). この論文は下記 Colorado 大学からダウンロードできる。
http://www.colorado.edu/physics/phys7230/phys7230_sp08/Onsager1944.pdf
 または、[4] の参考文献に記載の URL からダウンロードできる。

¹³式 (O-51) ではまだ s が残っている。

- [2] 西村肇, 「最初の論文がすでにノーベル賞クラスだった南部陽一郎 南部陽一郎の独創性の秘密をさぐる (2)」 http://jimnishimura.jp/tech_soc/chem_todaynambu/chem_today0903/09_03.html
- [3] Yoichiro Nambu, “A Note on the Eigenvalue Problem in Crystal Statistics”, *Prog. Theor. Phys.* **5**, 1 (1950).
下記からダウンロードできる。(現在, *Progress of Theoretical Physics* の論文は無料でダウンロードできる.)
<https://academic.oup.com/ptp/article-pdf/5/1/1/5253488/5-1-1.pdf>
あるいは下記からダウンロードできる. <http://www.totoha.net/archiv/3675.pdf>
- [4] 「Onsager の 2次元イジングモデル厳密解の論文を読む その1」(2017/8/7のエントリー).
http://totoha.web.fc2.com/Onsager_paper1.pdf
- [5] K. Husimi and I. Syozi, “The statistics of honeycomb and triangular lattice I.”, *Prog. Theor. Phys.* **5**, 177 (1950).
<http://www.totoha.net/archiv/3637.pdf>
- [6] H. A. Kramers and G. H. Wannier, “Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition”, *Phys. Rev.* **60**, 252-262 (1941).
http://www.colorado.edu/physics/phys7230/phys7230_sp08/Onsager1944.pdf
あるいは [4] の参考文献に記載の URL からダウンロードできる.
- [7] 「Kramers-Wannier 論文について 1」(2016/12/31のエントリー).
http://totoha.web.fc2.com/Kramers_Wannier_1.pdf