ダイマー模型による Ising 模型の厳密解

政岡凜太郎

最終更新: 2024 年 12 月 10 日

問題設定

Ising モデルの Hamiltonian は

$$H\{\sigma\} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \tag{1}$$

と書かれる。σ_i は 2 次元正方格子の頂点上で定義されるスピン変数であり、± 1 の値を取る。$\langle i,j \rangle$ は最近接格子点を表す。また分配関数は、

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle i,j \rangle} \mathrm{e}^{\beta J \sigma_i \sigma_j} \tag{2}$$

2 次元正方格子の頂点の総数を L^2 とおく。このとき辺の総数は $2L^2$ となる。サイトあたりの自由エネルギー f は

$$-\beta f = \lim_{L \to \infty} \frac{1}{L^2} \ln Z \tag{3}$$

によって計算される。$L \to \infty$ の極限をとるため、格子の境界条件についてはあまり気にしないことにする。

以下では 2 次元 Ising モデルの厳密解として、Ising モデルを対応するダイマーモデルに変換して、その数え上げを Pfaffian によって計算するという方法を紹介する。

双対格子における分配関数

Ising モデルを双対格子で考えてみよう。すなわち、正方格子の各面にスピン変数 $\sigma = \pm 1$ を割り当てる。スピンが揃った強磁性状態のエネルギー $E = -2JL^2$ を基準に取ると、スピンが揃った領域の中ではエネルギーは 0 で、領域の境界に $2J \times$ (境界の長さ) だけエネルギーが発生する。

閉曲線を与えると、それを境界にもつスピン配位が存在する。ただし、スピンを全て反転しても同じ境界が得られるから、境界から 2 通りのスピン配位が得られる。ここから、分配関数を正方格子上の閉曲線についての和として表すことができる。[*1] $q := \mathrm{e}^{-2\beta J}$ とおくと、

$$Z = 2q^{-2L^2} \sum_{\text{closed curve}} q^{(\text{length})} \tag{4}$$

と書ける。ただし、(length) は閉曲線の長さを表す。サイトあたりの自由エネルギーは

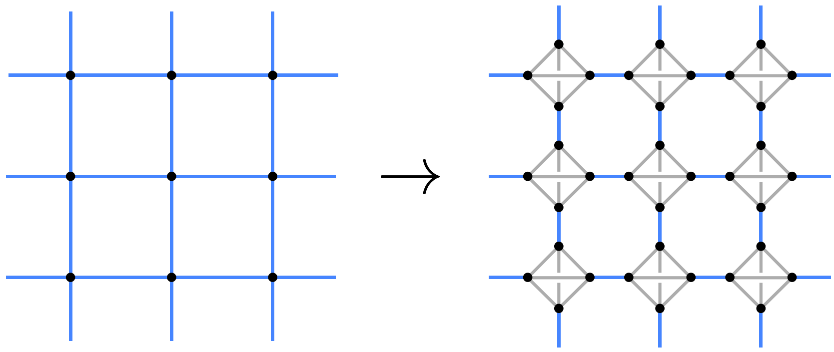
$$-\beta f = -2\ln q + \frac{1}{L^2}\ln\left(\sum_{\text{closed curve}} q^{(\text{length})}\right) \tag{5}$$

となる。ここで $\ln 2/L^2$ は熱力学極限で無視できるので省いた。

ダイマーモデルへの変換

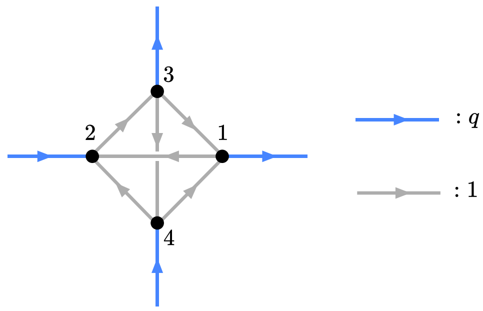
ダイマー (二量体) とは、2 つの頂点の組のことである。グラフ理論の文脈でマッチングと呼ばれることも多い。ダイマーモデルの分配関数は、グラフの頂点を 2 つずつに分けるような方法について、重み付きで足し上げることで得られる。

Ising モデルは以下のようにダイマーモデルに変換できる。まず、正方格子の全ての頂点を、4 点からなる完全グラフ K_4 に置き換える。元の正方格子に含まれる辺は external な辺と呼び、完全グラフに含まれる辺を internal な辺と呼ぶことにする。



この格子の辺に標準となる向きをつけ、以下のような重みを設定する。

[*1] 周期境界条件を課す場合にドメインウォールとしては得られない閉曲線があり得るが、そのような場合の寄与は熱力学極限では無視できる。



頂点 i から頂点 j への矢印が重み w_{ij} を表すとする。また $w_{ji} = -w_{ij}$ とする。external な矢印の重みは q とし、internal な矢印の重みは 1 とする。

頂点の置換 $\sigma \in S_{4N}$ を与えると、ダイマーへの分割は

$$\{\{\sigma(1), \sigma(2)\}, \dots, \{\sigma(4N-1), \sigma(4N)\}\} \tag{6}$$

と表される。ただし $\{\cdots\}$ は集合を表す括弧であり、要素の順序は問わない。したがって S_{4N} の元がそれぞれ異なるダイマーを与えるわけではない。このダイマー配位に対する重みは

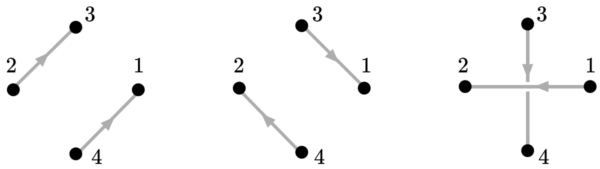
$$\mathrm{sign}(\sigma) w_{\sigma(1)\sigma(2)} \cdots w_{\sigma(4N-1)\sigma(4N)} \tag{7}$$

とする。ここで、$\mathrm{sign}(\sigma)$ はダイマーを不変に保つ置換に対して重みが不変になるように導入した符号因子である。($\mathrm{sign}(\sigma)$ は $w_{ij} \leftrightarrow w_{ji}$ に対して符号を変え、$w_{ij}w_{kl} \leftrightarrow w_{kl}w_{ij}$ に対して符号を保つ。) ダイマーモデルの分配関数は

$$\begin{aligned} Z_{\mathrm{Dimer}} &= \sum_{\text{dimer covering}} \mathrm{sign}(\sigma) w_{\sigma(1)\sigma(2)} \cdots w_{\sigma(4N-1)\sigma(4N)} \\ &=: \mathrm{Pf}\,\mathcal{W} = \sqrt{\det \mathcal{W}} \end{aligned} \tag{8}$$

で与えられる。ここで $\mathcal{W}$ は w_{ij} を成分とする行列である。また $(\mathrm{Pf}\,\mathcal{W})^2 = \det \mathcal{W}$ の証明については省略する。

修正された格子上でのダイマーが与えられると、external な辺のみを取り出すことで正方格子上の閉曲線が得られる。逆に正方格子上の閉曲線を external な矢印に移し、ペアのいない余っている頂点を internal な矢印で結ぶことで、修正された格子上でのダイマーが得られる。ただし矢印は全て標準の向きを向いているとする。頂点に external な辺が 4 つ接するとき、または 2 つ接するとき、internal な辺の足し方は一意に定まる。しかし、頂点に external な辺が接しない場合、internal な辺の足し方が以下の 3 通り存在することが問題になる。



実は、この点については気にする必要がない。なぜならば、2 個目と 3 個目は符号が反対のため常に相殺するからである。実際、2 個目と 3 個目の重みの比をとると、

$$\frac{\mathrm{sign}(4231)\cdot 1\cdot 1}{\mathrm{sign}(1234)\cdot 1\cdot 1} = -1 \tag{9}$$

となる。

符号の追跡

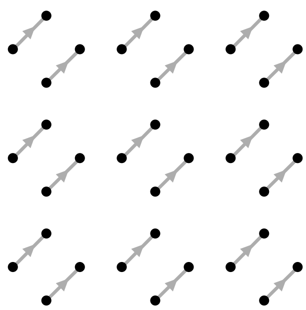
前節では閉曲線とダイマーの対応関係を導入した。ダイマーモデルにおける重みの絶対値は、external な辺の数 = (length) によって、$q^{(\mathrm{length})}$ と書けるので、この関係は分配関数のレベルで成り立つように思える。しかし、完全な対応関係を示すためには異なるダイマーに対して置換の符号が整合するかを確認する必要がある。基本となるのは、以下のようなダイマーの変形である。

$$\begin{aligned}&\{(i_1,i_2),(i_3,i_4),\ldots,(i_{2l-1},i_{2l})\}\\&\mapsto \{(i_{2l},i_1),(i_2,i_3),\ldots,(i_{2l-2},i_{2l-1})\}\end{aligned} \tag{10}$$

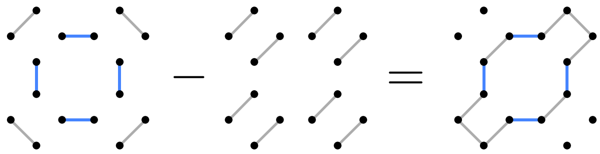
ただし、符号を考えたいので向きも含めて考えている。これはダイマーを指定する置換 σ に対して巡回置換

$$\begin{pmatrix} i_1 & i_2 & i_3 & \cdots & i_{2l} \\ i_{2l} & i_1 & j_2 & \cdots & i_{2l-1}\end{pmatrix} \tag{11}$$

を作用させることに等しい。これは奇置換だから、$\mathrm{sign}(\sigma)$ は -1 倍される。1 つのダイマーから出発して、巡回置換の導入と矢印の反転によって任意のダイマーを得ることができる。そこで、以下のダイマーを基準に取ることにしよう。



ここから出発して任意のダイマーへ変形しようとするとき、それらの差分[*2] は偶数本の辺からなるいくつかのサイクルになる。例えば以下のようなものである。

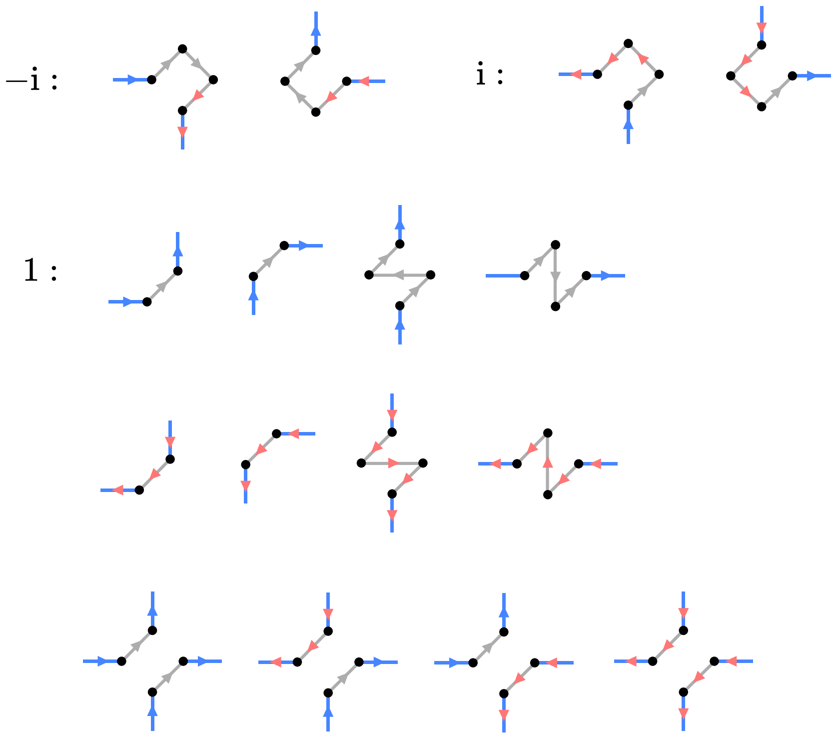


サイクルができることは、ダイマーを 2 つ重ねると必ずある頂点が 2 つの頂点につながることから分かる。また 2 つのダイマーからの辺が交互につながるので、サイクルは偶数本の辺を含む。したがって、任意のダイマーは以下のように構成される。

- 基準となるダイマーから出発する。
- 目的とするダイマーと基準となるダイマーとの差をとってサイクルを得る。
- このサイクルに沿って時計回りになるように、辺の向きを取り直す。
- サイクルに沿った巡回置換を使って、目的とするダイマーを構成する。
- 向きを標準の向きに直す。

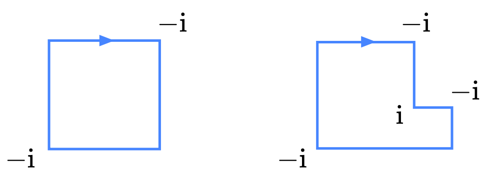
これらのステップを通じた置換の符号が $+1$ であれば良い。巡回置換は必ず偶数のサイクルに対して行われるので、符号は -1 である。したがって、標準の向きからサイクルに沿う向きに矢印を反転したときの符号が -1 であれば良い。ここでサイクルの構成要素を列挙して矢印を反転する際の符号を調べると、以下のようになる。

[*2] ダイマーを $\mathbb{Z}_2$ 係数ベクトルとみなして差をとる。



ただし、標準の向きから反転した辺を赤色で示した。また、external な辺は各パーツに半分ずつ含まれるので、反転するときに i を吐くとした。

非自明な符号が付くのは右上および左下を向いた角だけである。これに注意すると、任意のダイマーの符号は 1 となることが分かる。なぜならば、まず長方形のサイクルに対しては −i が 2 つでてきて、サイクルの導入によるマイナス符号と合わせると +1 になる。またこの長方形を変形することで任意のサイクルが得られるが、変形の際には必ず ±i がセットで出てくるため、符号は変わらない。



以上により、正方格子上のサイクルの数え上げ母関数が、ダイマーモデルの分配関数と等しいことが示された。すなわち、

$$\sum_{\text{closed curve}} q^{(\text{length})} = Z_{\text{Dimer}} = \sqrt{\det \mathcal{W}} \tag{12}$$

となる。

分配関数の計算

ここまでで、Ising モデルの分配関数を、巨大な行列 $\mathcal{W}=\{w_{ij}\}$ の行列式に帰着できた。この行列式を定義どおり計算しようとすると大変だが、$\mathcal{W}$ と可換な行列に注目するとうまくいく。今の場合明らかにサイト単位の並進対称性があるので、並進行列の固有値によってブロック対角化ができる。つまり、波数 (k_1,k_2) を指定して、ベクトル

$$\Psi^\alpha(x,y)=\psi^\alpha \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_1x+k_2y)}, \qquad (x,y\in\mathbb{Z},\ \alpha\in\{1,2,3,4\}) \tag{13}$$

$(x,y$ は正方格子の添字、α は K_4 の添字$)$ を考えると、$\mathcal{W}\Psi$ も同じ波数をもつ。したがって、$\mathcal{W}$ の波数 $\boldsymbol{k}=(k_1,k_2)$ の部分空間に対するブロック行列を $W(\boldsymbol{k})$ と書くと、

$$\begin{aligned}\frac{1}{L^2}\ln\left(\sum_{\text{closed curve}} q^{(\text{length})}\right) &= \frac{1}{2L^2}\ln\det\mathcal{W} \\ &= \frac{1}{2L^2}\sum_{\boldsymbol{k}}\ln\det W(\boldsymbol{k}) \\ &\to \frac{1}{2}\int\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{k}}{(2\pi)^2}\ln\det W(\boldsymbol{k})\end{aligned} \tag{14}$$

と書ける。$W(\boldsymbol{k})$ は具体的には以下の 4×4 行列である。

$$W(\boldsymbol{k})=\begin{pmatrix} 0 & 1+q\zeta_1 & -1 & -1 \\ -1-q/\zeta_1 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1+q\zeta_2 \\ 1 & 1 & -1-q/\zeta_2 & 0 \end{pmatrix} \tag{15}$$

ただし、$\zeta_j=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_j}$ とした。ζ_j の因子は、external な辺が異なるサイトの頂点をつなぐことから現れる。この行列式を計算すると、

$$\begin{aligned} &q^4+\left(\zeta_1+\frac{1}{\zeta_1}+\zeta_2+\frac{1}{\zeta_1}\right)^3+2q^2-\left(\zeta_1+\frac{1}{\zeta_1}+\zeta_2+\frac{1}{\zeta_1}\right)q+1 \\ &=(q^2+1)^2+2q(q^2-1)(\cos k_1+\cos k_2)\end{aligned} \tag{16}$$

となる。したがって、

$$\ln\det W=2\ln(q^2+1)+\ln\left[1+\frac{2q(q^2-1)}{(q^2+1)^2}(\cos k_1+\cos k_2)\right] \tag{17}$$

となる。$q=\mathrm{e}^{-2\beta J}$ を代入すると、

$$\ln\det W=2\ln[2q\cosh(2\beta J)]+\ln\left[1-\frac{\sinh(2\beta J)}{\cosh^2(2\beta J)}(\cos k_1+\cos k_2)\right] \tag{18}$$

となる。

$$t := \frac{2\sinh(2\beta J)}{\cosh^2(2\beta J)} \tag{19}$$

とおけば、(5)、(14) から 2 次元 Ising モデルの自由エネルギーの厳密な式

$$\begin{aligned} -\beta f &= -2\ln q + \frac{1}{2}\int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{k}}{(2\pi)^2} \ln\det W(\boldsymbol{k}) \\ &= 2\ln[2\cosh(2\beta J)] + \frac{1}{2}\int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{k}}{(2\pi)^2} \ln\left[1 - \frac{t}{2}(\cos k_1 + \cos k_2)\right] \end{aligned} \tag{20}$$

を得る。