◆はじめに◆

この文書は転送行列法について統計物理学ハンドブックの 97–99 ページから抜粋したものです．著作権的に危ないです．

◆ 1 次元の可解古典模型◆

古典イジングハミルトニアンは次のようである．

$$\mathcal{H} = -\mu H \sum_{i=1}^{N} S_i - J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \tag{1}$$

定数 J はスピン間の実効的な結合であり，この相互作用の範囲は $\langle i,j \rangle$ の i と j の距離で与えられる．このとき分配関数は次のようになり

$$Z = \sum_{S_i=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \exp\left(\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \beta \mu H \sum_i S_i \right) \tag{2}$$

2^N 個の項を含む．各項は N 個のスピンの可能な配位のひとつひとつに対応する．ここでトレースは 2^N の可能なスピン配位についての和をとることである．全磁化の平均値を形式的に次のように表せる．

$$\begin{aligned}
\mathcal{M} &= \mu \left\langle \sum_i S_i \right\rangle \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \left(\sum_i S_i \right) \exp\left(\beta J \sum_i S_i S_{i+1} + \beta \mu H \sum_i S_i \right) \\
&= \frac{1}{\beta} \left. \frac{\partial \ln Z}{\partial H} \right|_{\beta}
\end{aligned} \tag{3}$$

ここで分配関数が母関数としての役割を果たしていることがわかる．

古典近似による簡略化にもかかわらず，ハミルトニアン（1）の分配関数 Z は 1 次元の場合と 2 次元で $H = 0$ の場合であるという非常に特別な場合にしか厳密に計算できない．1 次元の場合に分配関数（2）を周期的境界条件を使って評価しよう．この境界条件の下で，これから説明する転送行列法を使えば分配関数は厳密に評価できる．

まず式（2）を次の形に書こう．

$$\begin{aligned}
Z &= \sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \prod_{i=1}^{N} \exp\left(K S_i S_{i+1} + \frac{h}{2}(S_i + S_{i+1}) \right) \\
&= \sum_{S_1=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \prod_{i=1}^{N} T(S_i, S_{i+1})
\end{aligned} \tag{4}$$

ここで

$$T(S_i, S_j) = \exp\left(K S_i S_j + \frac{h}{2}(S_i + S_j) \right)$$

そして

$$K = \beta J \quad h = \beta \mu H$$

である．$T(S_i, S_j)$ は，二つの変数 S_i と S_j の四つの可能な組み合わせで決まる四つの値をとる量である．したがって，2×2 行列の要素と考えられる．この行列 $\mathcal{T}_{S_i,S_j} = T(S_i, S_j)$ は「転送行列」とよばれ次式で定義される．

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} T(+1,+1) & T(+1,-1) \\ T(-1,+1) & T(-1,-1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{(K+h)} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{(K-h)} \end{pmatrix}$$

この形式の長所は，次式のように行列積の規則が成り立つことである．

$$\sum_{S_j=\pm 1} T(S_i, S_j) T(S_j, S_k) = (\mathcal{T}^2)_{S_i S_k}$$

その結果，分配関数の厳密な式を容易に得る．

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{S_1=\pm 1} \left[\sum_{S_2=\pm 1} T(S_1, S_2) \sum_{S_3=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} T(S_{N-1}, S_N) T(S_N, S_1) \right] \\ &= \sum_{S_1=\pm 1} \left(\mathcal{T}^N\right)_{S_1 S_1} \\ &= \mathrm{Tr}\left(\mathcal{T}^N\right) = \lambda_+^N + \lambda_-^N \end{aligned} \tag{5}$$

転送行列の固有値を表すために λ_+ と λ_-（$\lambda_+ > \lambda_-$）を用いた．

$$\lambda_\pm = e^K \left[\cosh h \pm \sqrt{\sinh^2 h + e^{-4K}} \right]$$

$N \gg 1$ の極限をとると

$$Z = \lambda_+^N$$

が得られる．実際は Z に対するこの第 2 の表現を使う．いったん分配関数がわかれば，興味のある物理量に対する表現を見いだせる．$J = 0$ のとき式（3）が，常磁性物質の磁化についての式を与えることが確かめられる．自由エネルギー

$$F = -\frac{N}{\beta} \ln \lambda_+ \tag{6}$$

も評価でき，示量性であることが示せる．$H = 0$ となる簡単な場合には，自由エネルギーは，次のように表せる．

$$F_0(T, N) = -NkT \ln \left(2 \cosh \frac{J}{kT} \right)$$

参考文献

[1] M. ル・ベラ 他，『統計物理学ハンドブック —熱平衡から非平衡まで—』, 朝倉書店, 2007 年.