ダイマー模型による 2 次元 Ising 模型の厳密解

政岡凜太郎

2 次元 Ising 模型の厳密解については Onsager による解の他に Majorana フェルミオンを用いる方法やダイマー模型を用いる方法が知られている。このノートではダイマー模型による解法について解説する。

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

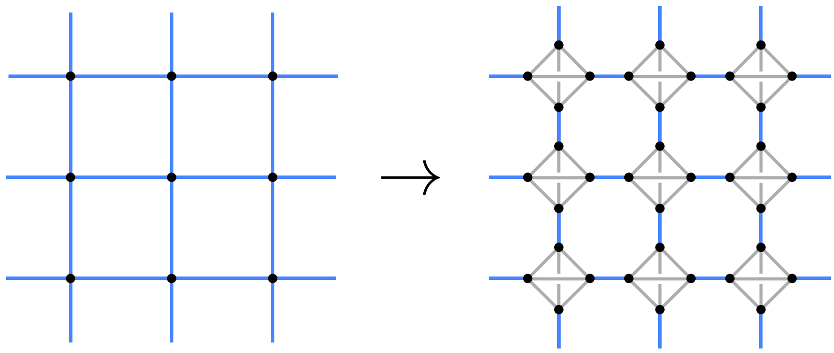
$$-\beta f = -2\ln q + \frac{1}{L^2} \ln \left(\sum_{\text{closed curve}} q^{(\text{length})} \right) \tag{5}$$

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

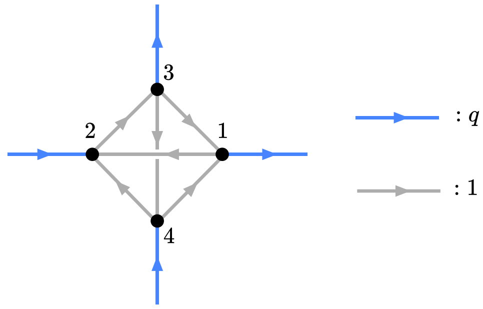
ダイマー (二量体) とは、2 つの頂点の組のことである。グラフ理論の文脈でマッチングと呼ばれることも多い。ダイマーモデルの分配関数は、グラフの頂点を 2 つずつに分けるような方法について、重み付きで足し上げることで得られる。

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

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

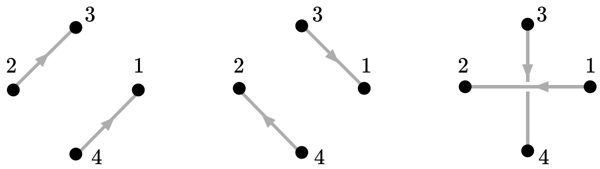
とする。ここで、$\mathrm{sign}(\sigma)$ はダイマーを不変に保つ置換に対して重みが不変になるように導入した符号因子である。($\mathrm{sign}(\sigma)$ は $w_{ij} \leftrightarrow w_{ji}$ に対して符号を変え、$w_{ij}w_{kl} \leftrightarrow w_{kl}w_{ij}$ に対して符号を保つ。) ダイマーモデルの分配関数は

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

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。以降の議論は自分で考えたものだが、煩雑になってしまった感がある。すっきりとした議論を知っている方がいれば、ぜひ教えていただきたい。

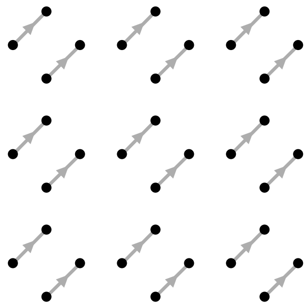
基本となるのは、以下のようなダイマーの変形である。

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

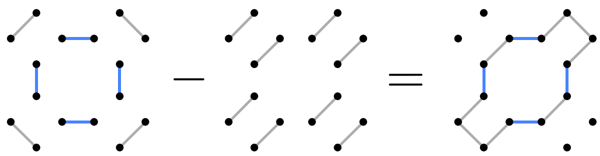
ただし、符号を考えたいのでダイマーの向きも考慮している。これはダイマーを指定する置換 σ に対して巡回置換

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

を作用させることに等しい。これは奇置換だから、sign(σ) 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 つのダイマー配位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。

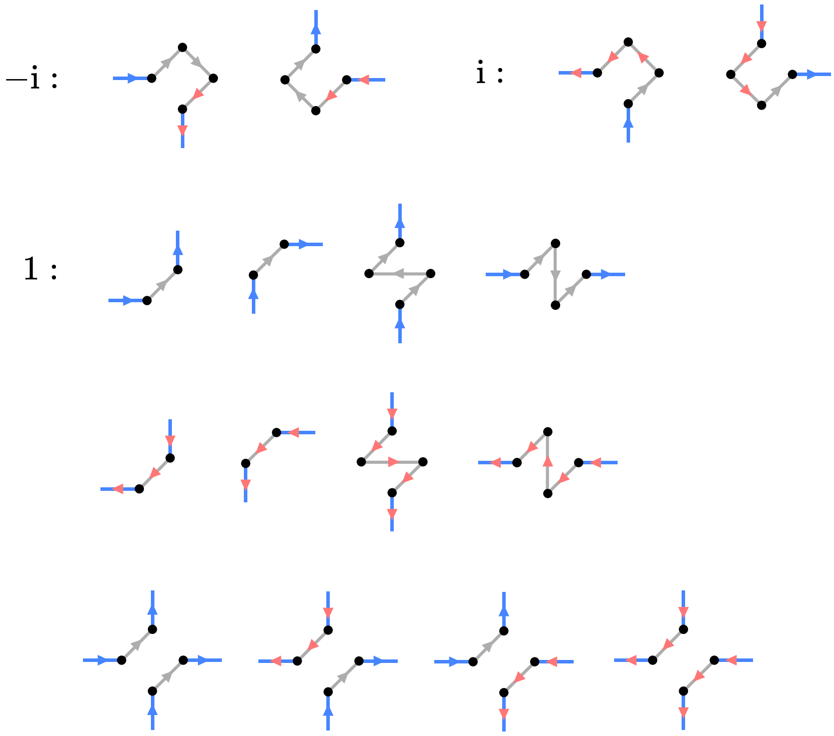
- 基準となるダイマーから出発する。
- 目的とするダイマーと基準となるダイマーとの差をとってサイクルを得る。
- このサイクルに沿って時計回りになるように、辺の向きを取り直す。
- サイクルに沿った巡回置換を使って、目的とするダイマーを構成する。
- 向きを標準の向きに直す。

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。他に符号を出すのは

- 元のダイマーを標準の向きから時計回りに直す過程
- 変形後のダイマーを時計回りから標準の向きに直す過程

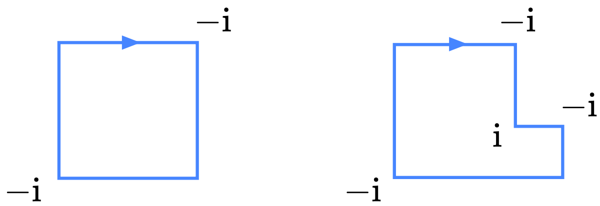
である。これらを合わせれば、サイクル上の全ての辺を標準の向きから時計回りに変えたときの符号の積が -1 であれば良い。ここでサイクルの構成要素を列挙して矢印を反転する際の符号を調べると、以下のようになる。

[*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。



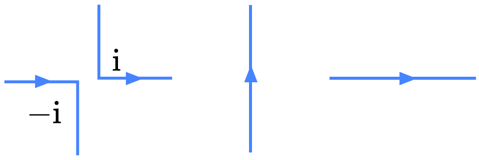
以上により、正方格子上のサイクルの数え上げ母関数が、ダイマーモデルの分配関数と等しいことが示された。すなわち、

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

となる。

周期境界条件にまつわる微妙な点

前節では実はいくつかの点を誤魔化している。周期境界条件が課されている場合、空間のトーラスに巻き付くような以下のサイクルが存在する。

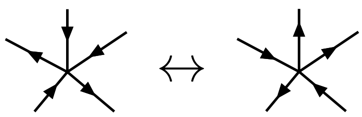


これらのサイクルは周期境界条件の Ising 模型の方に対応物がないという問題がある。また図示されている通り、これらの符号は $+1$ であるから、巡回置換の導入の際の -1 と合わせて、-1 が出てくる。したがって、我々が計算していたダイマー模型の分配関数は、

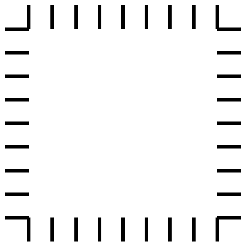
$$Z_{++}^{\mathrm{Dimer}} = Z_{\mathrm{PP}}^{\mathrm{Ising}} - Z_{\mathrm{AP}}^{\mathrm{Ising}} - Z_{\mathrm{PA}}^{\mathrm{Ising}} - Z_{\mathrm{AA}}^{\mathrm{Ising}} \tag{13}$$

となる。ここで記号の意味を説明しよう。まず左辺はダイマー模型の分配関数、具体的には重み $\mathcal{W}$ の Pfaffian である。$++$ の添字はまだ気にしなくてよい。次に右辺について、P, A はそれぞれ周期境界条件、反周期境界条件を表す。反周期境界条件とは、空間を 1 周したときに、$\uparrow$ と $\downarrow$ が反転する境界条件を課す。具体的には、トーラスを構成するときに空間の継ぎ目でだけ Ising 相互作用の結合定数を -1 倍すればよい。トーラスの継ぎ目は横方向、縦方向の 2 つがあるので、対応して $(\mathrm{P},\mathrm{P}), (\mathrm{A},\mathrm{P}), (\mathrm{P},\mathrm{A}), (\mathrm{A},\mathrm{A})$ の境界条件が作られる。我々は求めたいのは周期境界条件における分配関数 $Z_{\mathrm{PP}}^{\mathrm{Ising}}$ なのだが、どうすればよいだろうか。

ここで、我々は辺の標準の向きというのを決めていたが、この自由度を用いることにする。以降は任意のグラフで適用できるように議論を展開する。まずダイマー模型について、以下のような辺の標準の向き付けの変更を考えよう。



これによって任意のダイマー配位に対する符号は必ず反転する。ダイマー配位は必ずある頂点に接する辺を必ず 1 つ含むからだ。したがって、配位ごとの相対的な符号は不変であり、辺の向き付けを変更しても全体の符号を除いて同じ分配関数が得られる。この操作をある領域の内部の全ての頂点で行うと、領域内部の辺の向き付けは 2 回反転されて元に戻るため、以下のような境界の辺について全て向きを反転することになる。



ただし図示は正方格子の場合。このような図形をコサイクルと呼ぶ。領域の境界として得られるコサイクル以外にも、空間に巻き付くようなコサイクルが可能である。ただしこのようなコサイクルに沿って標準の向きを変えた場合は分配関数は等しくならない (相対的符号の変化をもたらす)。最初の標準の向き付けを $(+,+)$ と書くとき、トーラスにおける非自明なコサイクルによる変形によって他の向き付け $(-,+),(+,-),(-,-)$ を構成することができる。それぞれに対するダイマー模型の分配関数は以下のように Z^{Ising} で表示できる。

$$Z^{\mathrm{Dimer}}_{-+} = \pm(Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{PP}} + Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{AP}} - Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{PA}} + Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{AA}}) \tag{14}$$

$$Z^{\mathrm{Dimer}}_{+-} = \pm(Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{PP}} - Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{AP}} + Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{PA}} + Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{AA}}) \tag{15}$$

$$Z^{\mathrm{Dimer}}_{--} = \pm(Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{PP}} + Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{AP}} + Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{PA}} - Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{AA}}) \tag{16}$$

全体の符号は具体的なコサイクルの取り方によっているが、ここでは全てが $+$ になるようなコサイクルを取ってこよう。すると

$$\begin{pmatrix} Z^{\mathrm{Dimer}}_{++} \\ Z^{\mathrm{Dimer}}_{-+} \\ Z^{\mathrm{Dimer}}_{+-} \\ Z^{\mathrm{Dimer}}_{--} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +1 & -1 & -1 & -1 \\ +1 & +1 & -1 & +1 \\ +1 & -1 & +1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{PP}} \\ Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{AP}} \\ Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{PA}} \\ Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{AA}} \end{pmatrix} \tag{17}$$

を逆に解いて、(係数行列が直交行列の 2 倍であることに注意して、)

$$\begin{pmatrix} Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{PP}} \\ Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{AP}} \\ Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{PA}} \\ Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{AA}} \end{pmatrix} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} +1 & +1 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 & +1 \\ -1 & -1 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & +1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Z^{\mathrm{Dimer}}_{++} \\ Z^{\mathrm{Dimer}}_{-+} \\ Z^{\mathrm{Dimer}}_{+-} \\ Z^{\mathrm{Dimer}}_{--} \end{pmatrix} \tag{18}$$

を得る。特に $Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{PP}}$ は以下のように計算できる。

$$Z^{\mathrm{Ising}}_{\mathrm{PP}} = \frac{1}{4}(Z^{\mathrm{Dimer}}_{++} + Z^{\mathrm{Dimer}}_{-+} + Z^{\mathrm{Dimer}}_{+-} + Z^{\mathrm{Dimer}}_{--}) \tag{19}$$

ただし、色々議論してきたものの、境界条件の違いは熱力学極限では寄与しないため、次節では無視する。

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、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 $\mathcal{W}$ をブロック対角化できる。波数 (k_1, k_2) を指定して、x, y, α を添え字とするベクトル

$$\Psi^{\alpha}(x, y) = \psi^{\alpha} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_1 x + k_2 y)}, \qquad (x, y \in \mathbb{Z},\ \alpha \in \{1, 2, 3, 4\}) \tag{20}$$

(x, y は正方格子の添字、α は K_4 の添字) で張られる空間を考える。この部分空間に対する $\mathcal{W}$ のブロック行列を $W(\boldsymbol{k})$ と書くと、

$$\begin{aligned}
\frac{1}{L^2} \ln \left(\sum_{\text{closed curve}} q^{(\text{length})} \right) &= \frac{1}{2L^2} \ln \det \mathcal{W} \\
&= \frac{1}{2L^2} \sum_{\boldsymbol{k}} \ln \det W(\boldsymbol{k}) \\
&\to \frac{1}{2} \int \frac{\mathrm{d}^2 \boldsymbol{k}}{(2\pi)^2} \ln \det W(\boldsymbol{k})
\end{aligned} \tag{21}$$

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

$$W(\boldsymbol{k}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 + q\zeta_1 & -1 & -1 \\ -1 - q/\zeta_1 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 + q\zeta_2 \\ 1 & 1 & -1 - q/\zeta_2 & 0 \end{pmatrix} \tag{22}$$

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、

$$\begin{aligned}
&q^4 + \left(\zeta_1 + \frac{1}{\zeta_1} + \zeta_2 + \frac{1}{\zeta_1} \right)^3 + 2q^2 - \left(\zeta_1 + \frac{1}{\zeta_1} + \zeta_2 + \frac{1}{\zeta_1} \right) q + 1 \\
&= (q^2 + 1)^2 + 2q(q^2 - 1)(\cos k_1 + \cos k_2)
\end{aligned} \tag{23}$$

となる。したがって、

$$\ln \det W = 2 \ln(q^2 + 1) + \ln \left[1 + \frac{2q(q^2 - 1)}{(q^2 + 1)^2} (\cos k_1 + \cos k_2) \right]. \tag{24}$$

$q = \mathrm{e}^{-2\beta J}$ を代入すると、

$$\ln \det W = 2 \ln[2q \cosh(2\beta J)] + \ln \left[1 - \frac{\sinh(2\beta J)}{\cosh^2(2\beta J)} (\cos k_1 + \cos k_2) \right]. \tag{25}$$

ここで、

$$t := \frac{2\sinh(2\beta J)}{\cosh^2(2\beta J)} \tag{26}$$

とおけば、(5)、(21) から 2 次元 Ising モデルの自由エネルギーの厳密な式

$$\begin{aligned}
-\beta f &= -2\ln q + \frac{1}{2}\int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{k}}{(2\pi)^2} \ln\det W(\boldsymbol{k}) \\
&= 2\ln[2\cosh(2\beta J)] + \frac{1}{2}\int \frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{k}}{(2\pi)^2} \ln\left[1 - \frac{t}{2}(\cos k_1 + \cos k_2)\right]
\end{aligned} \tag{27}$$

を得る。