

代数方程式に関する若干の新定理とその応用

— Lee-Yang 定理とその破れ方について —

東京大学・大型計算機センター 唐木 幸比古

(3月18日受理)

- I はしがき
- II 代数方程式に関する若干の新定理
 - §1 発端となった一つの定理
 - §2 いくつかの拡張定理
- III 反強磁性相互作用を含む Ising 系への応用
 - §3 非 Lee-Yang 系への別れ道
 - §4 最も簡単な系
 - §5 二格子橋渡し型の系
 - §6 副格子型の系
 - §7 異方型の系
 - §8 不純物スピンを含む系
 - §9 ディスカッション

I はしがき

強磁性格子スピン系では、状態和の Fugacity 零点が単位円周上に分布し、相転移は高々1回しか起きないことが証明されている。(Lee-Yang 定理¹⁾、および Asano²⁾、Griffiths³⁾、Suzuki⁴⁾ らによる拡張定理)

一方、反強磁性スピン系における状態和の Fugacity 零点分布については、一次元 Ising 系、Weiss 模型など若干の簡単な系、および有限系についてのいくつかの数値実験例が報告されているに過ぎない。⁵⁻¹⁰⁾

ここでは、代数方程式の根の特性に関して最近発見され新しく証明された若干の定理

の紹介と、それを反強磁性相互作用を含む Ising 系に応用して解明された、Lee - Yang 定理とその破れ方に関するいくつかの結果について報告する。

II 代数方程式に関する若干の新定理

§ 1. 発端となった一つの定理

命題 1 実係数代数方程式

$$f^{(2n)}(x) = a_0 x^{2n} + a_1 x^{2n-1} + a_2 x^{2n-2} + \dots + a_{2n-1} x + a_{2n} = 0$$

(n は正整数) (1.1)

において、その係数 a_i ($i=0, 1, 2, \dots, 2n$) が以下の 2 つの条件

条件 1 $a_{2n-i} = a_i$ ($0 \leq i \leq n$) (1.2)

条件 2 $a_i = (1 + \delta) i + 1$ ($0 \leq i \leq n$) (δ は実数) (1.3)

を充たすとき、根は次のような特性をもつ。

1. $0 \geq \delta \geq -\frac{(n+1)^2}{n^2}$ のとき、全ての根は (複素平面の) 単位円周上にある。
2. $\delta > 0$ のとき、全ての根は、単位円周上以外にある。
3. $\delta \leq -\frac{(n+1)^2}{n^2}$ のとき、 $2n-2$ 個の根は単位円周上にあり、残りの 2 個の根

は正の実軸上にある。

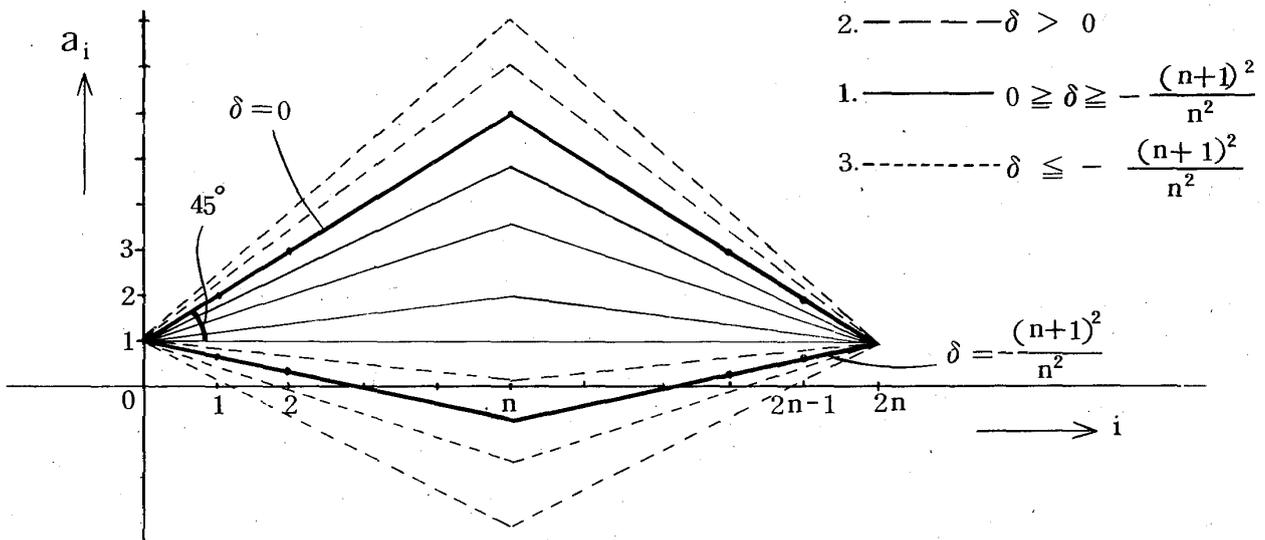
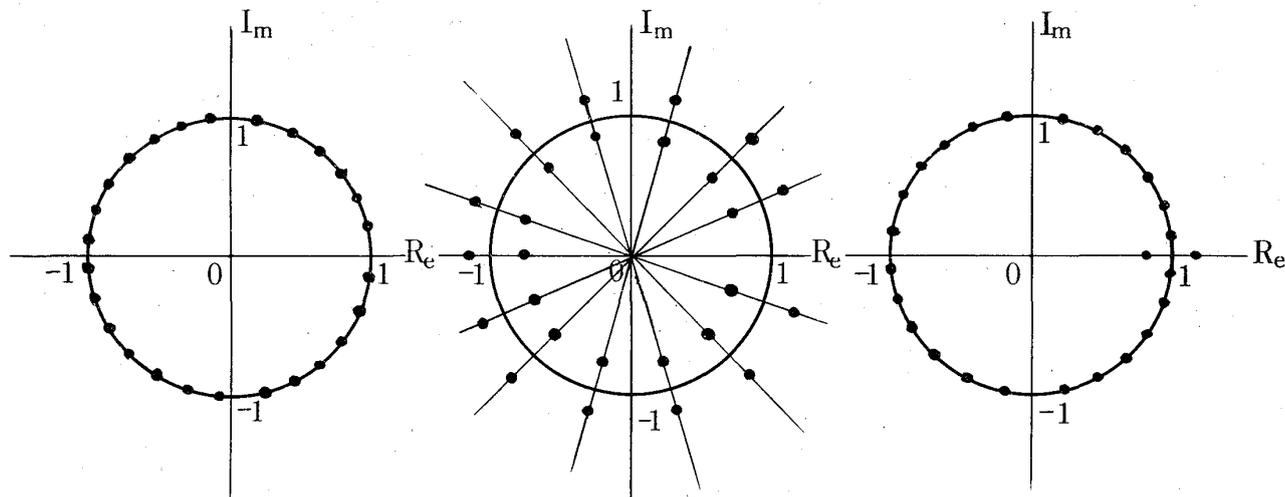


図 1-1 係数の型の図



1. $0 \geq \delta \geq -\frac{(n+1)^2}{n^2}$

2. $\delta > 0$

3. $\delta \leq -\frac{(n+1)^2}{n^2}$

図 1-2 根の特性の図

証明

(補助定理) 複素係数 2 次方程式

$$f^{(2)}(x) = x^2 + \alpha x + 1 = 0 \quad (\alpha \text{ は複素数}) \quad (1.4)$$

は、次のような根の特性をもつ。

1. α が実数かつ $|\alpha| \leq 2$ のとき、全ての根は (複素平面の) 単位円周上にある。
2. それ以外するとき、全ての根は単位円周上以外にある。

(補助定理の証明)

a) α が実数の場合

根と係数の関係から、 $f^{(2)}(x) = 0$ の根は

$$x_{\pm} = \frac{-\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2} \quad (1.5)$$

と表わされる。

$$|\alpha| \leq 2 \text{ のとき, } x_{\pm} = \frac{-\alpha \pm \sqrt{4 - \alpha^2} i}{2} .$$

従って $|x_{\pm}| = 1$, 即ち 2 根は複素平面の単位円周上にある。

$$|\alpha| > 2 \text{ のとき, } x_{\pm} = \frac{-\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 - 4}}{2} \quad (2 \text{ つの実根})$$

従って $|x_{\pm}| \neq 1$, 即ち 2 根は単位円周上以外にある。

b) α が複素数の場合 ($\text{Im } \alpha \neq 0$)

(1.4) 式は相反方程式であるから, x_0 が根ならば明らかに x_0^{-1} も根となる。

$$x^{-1} f^{(2)}(x) = x + \frac{1}{x} + \alpha = 0 \quad (1.6)$$

α は複素数より, 実根はない。そこで, 根は一般に $x_0 = r e^{i\theta}$, $x_0^{-1} = r^{-1} e^{-i\theta}$ と表わすことができる。 ($\theta \neq 0, \pi$) ($r > 0$)

(1.6) から

$$\left(r - \frac{1}{r}\right) \sin \theta = -\text{Im } \alpha \neq 0 \quad (1.7)$$

従って

$$r - \frac{1}{r} \neq 0 \quad (1.8)$$

$$\therefore r \neq 1$$

即ち 2 根は単位円周上以外にある。(Q. E. D.)

次に本題の証明に入ろう。

(1.1) ~ (1.3) から

$$\begin{aligned} f^{(2n)}(x, \delta) &= x^{2n} + (2+\delta)x^{2n-1} + (3+2\delta)x^{2n-2} + \dots \\ &\quad \dots + ((n+1)+n\delta)x^n + \dots + (2+\delta)x + 1 \\ &= (x^{2n} + 2x^{2n-1} + 3x^{2n-2} + \dots + (n+1)x^n + nx^{n-1} + \dots + 2x + 1) \\ &\quad + \delta x (x^{2n-2} + 2x^{2n-3} + 3x^{2n-4} + \dots + nx^{n-1} + (n-1)x^{n-2} + \dots + 2x + 1) \\ &= (x^n + x^{n-1} + x^{n-2} + \dots + x + 1)^2 \\ &\quad + \delta x (x^{n-1} + x^{n-2} + \dots + x + 1)^2 \end{aligned} \quad (1.9)$$

ここで

唐木幸比古

$$g^{(n)}(x) = x^n + x^{n-1} + x^{n-2} + \dots + x + 1$$

と置けば,

$$f^{(2n)}(x, \delta) = (g^{(n)}(x))^2 + \delta x (g^{(n-1)}(x))^2 \quad (1.10)$$

一方,

$$g^{(n)}(x) = \frac{x^{n+1} - 1}{x - 1} \quad (1.11)$$

より,

$$g^{(n)}(x) = 0 \text{ の根は } x_m = e^{i \frac{2\pi}{n+1} m} \quad m = 1, 2, \dots, n \quad (1.12)$$

同様に,

$$g^{(n-1)}(x) = 0 \text{ の根は } x'_m = e^{i \frac{2\pi}{n} m} \quad m = 1, 2, \dots, n-1 \quad (1.13)$$

a) $n = 2n'$ (偶数) のとき

$$\begin{aligned} g^{(n)}(x) &= \prod_{m=1}^{2n'} (x - e^{i \frac{2\pi}{n+1} m}) \\ &= \prod_{m=1}^{n'} [(x - e^{i \frac{2\pi}{n+1} m})(x - e^{-i \frac{2\pi}{n+1} m})] \\ &= \prod_{m=1}^{n'} (x^2 + 1 - 2x \cos \frac{2\pi}{n+1} m) \\ &= x^{n'} \prod_{m=1}^{n'} (x + \frac{1}{x} - \alpha_m) \end{aligned} \quad (1.14)$$

$$\text{但し } \alpha_m = 2 \cos \frac{2\pi}{n+1} m$$

$$g^{(n-1)}(x) = \prod_{m=1}^{2n'-1} (x - e^{i \frac{2\pi}{n} m})$$

$$\begin{aligned}
 &= (x+1) \prod_{m=1}^{n'-1} \left[x - e^{i \frac{2\pi}{n} m} \right] \left(x - e^{-i \frac{2\pi}{n} m} \right) \\
 &= x^{n'-1} (x+1) \prod_{m=1}^{n'-1} \left(x + \frac{1}{x} - \beta_m \right) \tag{1.15}
 \end{aligned}$$

$$\text{但し } \beta_m = 2 \cos \frac{2\pi}{n} m$$

(1.10) (1.14) (1.15) から

$$f^{(2n)}(x, \delta) = x^n \prod_{m=1}^{n'} \left(x + \frac{1}{x} - \alpha_m \right)^2 + \delta x^n \left(x + \frac{1}{x} + 2 \right) \prod_{m=1}^{n'-1} \left(x + \frac{1}{x} - \beta_m \right)^2 \tag{1.16}$$

今, $x + \frac{1}{x} = y$ と置き

$$x^{-n} f^{(2n)}(x, \delta) = \bar{f}^{(2n')}(y, \delta) \tag{1.17}$$

とすると,

$$\bar{f}^{(2n')}(y, \delta) = \prod_{m=1}^{n'} (y - \alpha_m)^2 + \delta (y + 2) \prod_{m=1}^{n'-1} (y - \beta_m)^2 \tag{1.18}$$

他方,

$$0 < \frac{2\pi}{n+1} m < \frac{2\pi}{n} m < \frac{2\pi}{n+1} (m+1) < \pi \text{ for } 0 < \forall m < n' (< n)$$

から,

$$2 > 2 \cos \frac{2\pi}{n+1} m > 2 \cos \frac{2\pi}{n} m > 2 \cos \frac{2\pi}{n+1} (m+1) > -2 \text{ for } 0 < \forall m < n'$$

即ち

$$2 > \alpha_m > \beta_m > \alpha_{m+1} > -2 \text{ for } 0 < \forall m < n'$$

従って,

$$2 > \alpha_1 > \beta_1 > \alpha_2 > \beta_2 > \alpha_3 > \dots > \alpha_{n'-1} > \beta_{n'-1} > \alpha_{n'} > -2 \tag{1.19}$$

また, $0 < V_m < n'$ に対し

$$\bar{f}^{(2n')}(\alpha_m, \delta) \cdot \bar{f}^{(2n')}(\beta_m, \delta) = \delta (\alpha_m + 2) \prod_{m'=1}^{n'-1} (\alpha_m - \beta_{m'})^2 \prod_{m'=1}^{n'} (\beta_m - \alpha_{m'})^2 \quad (1.20a)$$

$$\bar{f}^{(2n')}(\beta_m, \delta) \cdot \bar{f}^{(2n')}(\alpha_{m+1}, \delta) = \delta (\alpha_{m+1} + 2) \prod_{m'=1}^{n'-1} (\alpha_{m+1} - \beta_{m'})^2 \prod_{m'=1}^{n'} (\beta_m - \alpha_{m'})^2 \quad (1.20b)$$

$$\bar{f}^{(2n')}(\alpha_{n'}, \delta) \cdot \bar{f}^{(2n')}(-2, \delta) = \delta (\alpha_{n'} + 2) \prod_{m'=1}^{n'-1} (\alpha_{n'} - \beta_{m'})^2 \prod_{m'=1}^{n'} (-2 - \alpha_{m'})^2 \quad (1.20c)$$

$$\begin{aligned} \bar{f}^{(2n')}(2, \delta) \cdot \bar{f}^{(2n')}(\alpha_1, \delta) &= \left[x^{-n} f^{(2n)}(x, \delta) \right]_{x=1} \times \delta (\alpha_1 + 2) \prod_{m'=1}^{n'-1} (\alpha_1 - \beta_{m'})^2 \\ &= \left[(n+1)^2 + \delta n^2 \right] \delta (\alpha_1 + 2) \prod_{m'=1}^{n'-1} (\alpha_1 - \beta_{m'})^2 \end{aligned} \quad (1.20d)$$

i) $\delta < 0$ のとき

$$\bar{f}^{(2n')}(\alpha_m, \delta) \cdot \bar{f}^{(2n')}(\beta_m, \delta) < 0 \quad (1.21a)$$

$$\bar{f}^{(2n')}(\beta_m, \delta) \cdot \bar{f}^{(2n')}(\alpha_{m+1}, \delta) < 0 \quad (1.21b)$$

$$\bar{f}^{(2n')}(\alpha_{n'}, \delta) \cdot \bar{f}^{(2n')}(-2, \delta) < 0 \quad (1.21c)$$

イ) $(n+1)^2 + \delta n^2 \geq 0$ のとき

$$\bar{f}^{(2n')}(2, \delta) \cdot \bar{f}^{(2n')}(\alpha_1, \delta) \leq 0 \quad (1.22)$$

$\bar{f}^{(2n')}(y, \delta)$ は y に関する $2n'$ 次の (実) 多項式であるから, 代数学基本定理¹¹⁾ から $\bar{f}^{(2n')}(y, \delta) = 0$ の根は $2n'$ 個あり, その根を r_m ($m=1, 2, \dots, 2n'$) とすば, (1.21a ~ c) (1.22) から

$$\begin{aligned}
 2 \geq r_1 > \alpha_1 > r_2 > \beta_1 > r_3 > \alpha_2 > r_4 > \beta_2 > \dots \\
 \dots > r_{2n'-2} > \beta_{n'-1} > r_{2n'-1} > \alpha_{n'} > r_{2n'} > -2
 \end{aligned}
 \tag{1.23}$$

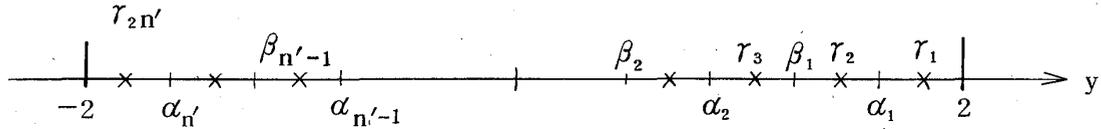


図1-3 $\bar{f}^{(2n')}(y, \delta) = 0$ の $2n'$ 個の根

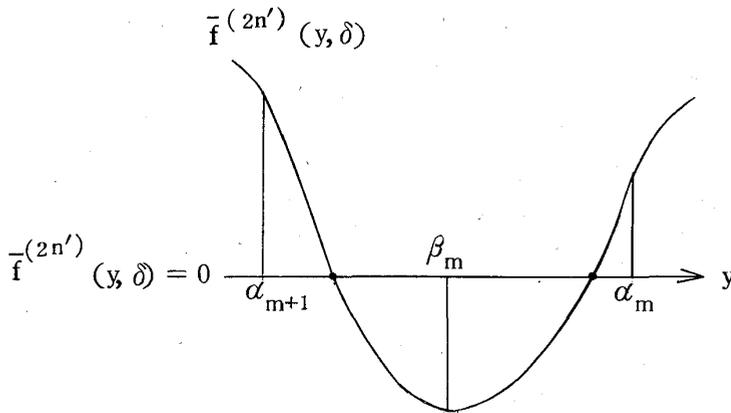


図1-4 根の現われ方

であることがわかる。

$y = x + \frac{1}{x}$ であるから、補助定理から $f^{(2n)}(x, \delta) = 0$ の根は全て複素平面の単位円周上にあることがわかる。

□) $(n+1)^2 + \delta n^2 < 0$ のとき

$$\bar{f}^{(2n')}(\alpha_1, \delta) < 0 \tag{1.24a}$$

$$\bar{f}^{(2n')}(2, \delta) < 0 \tag{1.24b}$$

唐木幸比古

$$\lim_{y \rightarrow +\infty} \bar{f}^{(2n')} (y, \delta) > 0 \quad (1.24c)$$

(1.21a~c)(1.24a~c) から $\bar{f}^{(2n')} (y, \delta) = 0$ の根 ($r_m, m=1, 2, \dots, 2n'$) は,

$$\begin{aligned} +\infty > r_1 > 2 > \alpha_1 > r_2 > \beta_1 > r_3 > \alpha_2 > \dots \\ \dots > r_{2n'-2} > \beta_{n'-1} > r_{2n'-1} > \alpha_{n'} > r_{2n'} > -2 \end{aligned} \quad (1.25)$$

を充たす。

補助定理を使えば, $f^{(2n)} (x, \delta) = 0$ の根のうち $2n-2$ 個は単位円周上, 残りの 2 個は正の実軸上にあることがわかる。

ii) $\delta = 0$ のとき

$$\bar{f}^{(2n')} (y, 0) = \prod_{m=1}^{n'} (y - \alpha_m)^2 \quad (1.26)$$

従って, $f^{(2n)} (x, 0) = 0$ の根は $g^{(n)} (x) = 0$ の根と一致し, しかも各根は 2 重根になっている。

iii) $\delta > 0$ のとき

(1.18) から明らかに

$$\bar{f}^{(2n')} (y, \delta) > 0 \quad \text{for } 2 \geq y \geq -2 \quad (1.27)$$

即ち,

$$\bar{f}^{(2n')} (y, \delta) = 0$$

の根は $2 \geq y \geq -2$ の間にはない。従って, 補助定理から直ちに

$$f^{(2n)} (x, \delta) = 0$$

の根は単位円周上にはないことがわかる。

なお, 代数方程式の根は, 係数の連続関数であるという定理¹¹⁾ を使えば, $\bar{f}^{(2n')} (y, \delta)$

$= 0$ の根は δ が小さいとき, $\delta = 0$ の場合の根の近傍にあることがわかる。即ち α_m ($m = 1, 2, \dots, n'$) の近傍にあり, y の実軸上にはない, つまり, y の複素根である。このことから, $f^{(2n)}(x, \delta) = 0$ の根は, 図 1-2 の $2 \cdot \delta > 0$ のようになることが知られる。

b) $n = 2n' + 1$ (奇数) のとき

$$g^{(n)}(x) = x^{n'}(x+1) \prod_{m=1}^{n'} \left(x + \frac{1}{x} - \alpha_m\right) \quad \alpha_m = 2 \cos \frac{2\pi}{n+1} m$$

$$g^{(n-1)}(x) = x^{n'} \prod_{m=1}^{n'} \left(x + \frac{1}{x} - \beta_m\right) \quad \beta_m = 2 \cos \frac{2\pi}{n} m$$

となり, a) の場合と同様な扱いができる。(以下省略) (Q.E.D.)

§ 2. いくつかの拡張定理

§ 1 で扱った命題の中で条件((1.3)式) は実はきつ過ぎるものとなっていることがその証明を通じてわかる。代数方程式の根の特性が命題 1 のようになるために本質的なことは, 関数が (1.10) 式のように表わされることである。このことから, 命題 1 が拡張されて, 次のようないくつかの一般的な命題が得られる。なお, 以下の命題では, n 次多項式 $g^{(n)}(x)$ の最大次の係数を 1 とする。 ($h^{(m)}(x)$ も同様)

命題 2 全ての根が単位円周上にあり, しかも互いに隔離するような 2 つの実多項式, $g^{(n)}(x)$, $h^{(n-1)}(x)$ があるとき, 次のような関数は以下のような根の特性をもつ。

$$f^{(2n)}(x, \delta) = (g^{(n)}(x))^2 + \delta x (h^{(n-1)}(x))^2 \quad (\delta \text{ は実数})$$

$$\text{但し } g^{(n)}(1) \neq 0 \quad (2.1)$$

根の特性

1. $0 \geq \delta \geq -\left(\frac{g^{(n)}(1)}{h^{(n-1)}(1)}\right)^2$ のとき, 全ての根は (複素平面の) 単位円周上に
ある。

2. $\delta \leq -\left(\frac{g^{(n)}(1)}{h^{(n-1)}(1)}\right)^2$ のとき, $2n-2$ 個の根は単位円周上にあり, 残りの

唐木幸比古

2 根は正の実軸上にある。

3. $\delta > 0$ のとき、全ての根は単位円周上以外にある。

証明 (略)

(注意) 根の特性の分類の中で、 $h^{(n-1)}(1) \neq 0$ を特にことわらなかつたが、 $h^{(n-1)}(1) = 0$ のときは $0 \geq \delta \geq -\infty$ 即ち $0 \geq \delta$ に対し特性 1 が成立つ。

命題 3 全ての根が単位円周上にあるような実多項式 $g^{(n)}(x)$ があるとき、次のような関数は、以下のような根の特性をもつ。

$$f^{(2n)}(x, \delta) = (g^{(n)}(x))^2 + \delta (g_d^{(n)}(x))^2 \quad (2.2)$$

$$\text{但し} \quad g_d^{(n)}(x) = \left(x \frac{d}{dx} - \frac{n}{2}\right) g^{(n)}(x)$$

$$g^{(n)}(1) \neq 0$$

根の特性

1. $\delta \geq 0$ のとき、全ての根は単位円周上にある。

2. $\delta < 0$ のとき、単位円周からはずれる根が必ず存在する。もし $g^{(n)}(x)$ の全ての根が単根ならば、根は全て単位円周上以外にある。

(注意) $g^{(n)}(x)$ のかわりに $\tilde{g}^{(n)}(x) = x^{-\frac{n}{2}} g^{(n)}(x)$ 型の関数をとれば、命題 3 は次のような関数に対して成立つ。

$$\tilde{f}^{(2n)}(x, \delta) = (\tilde{g}^{(n)}(x))^2 + \delta \left(x \frac{d}{dx} \tilde{g}^{(n)}(x)\right)^2 \quad (2.2a)$$

証明

全ての根が単位円周上にあるような実多項式 $g^{(n)}(x)$ ($g^{(n)}(1) \neq 0$) は次のように書くことができる。

$$g^{(n)}(x) = x^{\frac{n}{2}} \bar{g}^{(n)}(y) \quad , \quad y = x^{\frac{1}{2}} + x^{-\frac{1}{2}} \quad (2.3)$$

$$\bar{g}^{(n)}(y) = \prod_{i=1}^n (y - \alpha_i) \quad |\alpha_i| \leq 2 \quad (2.3a)$$

$$\bar{g}^{(n)}(-y)^2 = \bar{g}^{(n)}(y)^2 \quad (2.3b)$$

なぜならば、単位円周上にある根は

$$x = \pm 1 \quad \text{あるいは} \quad x = e^{i\alpha} \quad (\alpha: \text{実数})$$

に限られるが、 $g^{(n)}(1) \neq 0$ より $x=1$ は除かれる。

$x=-1$ なる根をもてば $g^{(n)}(x)$ は、 $(x+1) = x^{\frac{1}{2}}y$ なる因子 ($\alpha_i=0$) をもつ。

$x=e^{i\alpha}$ なる根をもてば、実係数代数方程式に関する代数学の定理¹¹⁾からその共役複素数も根になる。従って $g^{(n)}(x)$ は $(x-e^{i\alpha})(x-e^{-i\alpha}) = (x^2 + 1 - 2\cos\alpha x)$
 $= x(x + \frac{1}{x} - 2\cos\alpha) = x(y - \sqrt{2+2\cos\alpha})(y + \sqrt{2+2\cos\alpha})$ なる因子をもつ。

($|1 \pm \sqrt{2+2\cos\alpha}| \leq 2$ は明らか)

以上から、(2.3a) および (2.3b) が直ちにわかる。

そこで、

$$g_d^{(n)}(x) = \frac{1}{2} x^{\frac{n}{2}} \left(x^{\frac{1}{2}} - x^{-\frac{1}{2}} \right) \frac{d \bar{g}^{(n)}(y)}{d y} \quad (2.4)$$

となり、(2.2) の関数は

$$f^{(2n)}(x, \delta) = x^n (\bar{g}^{(n)}(y))^2 + \frac{\delta}{4} x^n (y-2)(y+2) \left(\frac{d \bar{g}^{(n)}(y)}{d y} \right)^2 \quad (2.5)$$

と変形できる。いま

$$x^{-n} f^{(2n)}(x, \delta) = \bar{f}^{(2n)}(y, \delta) \quad (2.6)$$

とすれば、

$$\bar{f}^{(2n)}(y, \delta) = (\bar{g}^{(n)}(y))^2 + \frac{\delta}{4} (y-2)(y+2) \left(\frac{d \bar{g}^{(n)}(y)}{d y} \right)^2$$

$$(\bar{f}^{(2n)}(-y, \delta) = \bar{f}^{(2n)}(y, \delta)) \quad (2.7)$$

となる。次に

$$\frac{d \bar{g}^{(n)}(y)}{dy} = 0 \tag{2.8}$$

の根は、明らかに $\bar{g}^{(n)}(y) = 0$ の根を分離し、両関数の根は命題2の条件を充たすから、命題1~2と同様の考察により、根の特性が判別される。(以下略) (Q.E.D.)

命題4 全ての根が単位円周上の単根で、しかも上(または下)半面で互に隔離するような2つの実多項式 $g^{(n)}(x)$ および $h^{(n-2)}(x)$ があるとき、次のような関数は以下のような根の特性をもつ。

$$f^{(n)}(x, \delta) = g^{(n)}(x) + \delta x h^{(n-2)}(x) \tag{2.9}$$

$$\text{但し } g^{(n)}(1) \cdot h^{(n-2)}(1) \neq 0$$

根の特性

$$1. \frac{g^{(n)}(-1)}{h^{(n-2)}(-1)} \geq \delta \geq -\frac{g^{(n)}(1)}{h^{(n-2)}(1)} \text{ のとき, 全ての根は単位円周上にある。}$$

2. それ以外るとき、 $n-2$ 個の根は単位円周上にあり、残りの2個は、 ± 1 以外の実根となる。

証明 n が奇数のとき、 $g^{(n)}(x)$ および $h^{(n-2)}(x)$ は必ず実根をもつ。条件を充たすような実根は -1 の他にないから、2つの関数はいずれも $(x+1) \times$ (偶数次の多項式) と表わされる。そこで以下では n が偶数の場合について考察すれば充分である。

($n=2n'$ とする。 n' は正整数)

条件を充たすような $g^{(n)}(x)$, $h^{(n-2)}(x)$ は次のように書くことができる。

$$g^{(n)}(x) = x^{n'} \prod_{m=1}^{n'} \left(x + \frac{1}{x} - \alpha_m \right) \tag{2.10a}$$

$$h^{(n-2)}(x) = x^{n'-1} \prod_{m=1}^{n'-1} \left(x + \frac{1}{x} - \beta_m \right) \tag{2.10b}$$

$$2 > \alpha \geq \beta \geq \alpha \geq \beta \geq \dots \geq \alpha_{n'-1} \geq \beta_{n'-1} \geq \alpha_{n'} \geq -2 \tag{2.10c}$$

いま $y = x + \frac{1}{x}$ と置き

$$\bar{f}^{(n')} (y, \delta) = x^{-n'} f^{(n)} (x, \delta) \quad (2.11)$$

とすれば

$$\bar{f}^{(n')} (y, \delta) = \prod_{m=1}^{n'} (y - \alpha_m) + \delta \prod_{m=1}^{n'} (y - \beta_m) \quad (2.12)$$

(2.12) から

$$\bar{f}^{(n')} (2, \delta) = g^{(n)} (1) + \delta h^{(n-2)} (1)$$

$$\bar{f}^{(n')} (\alpha_1, \delta) = \delta \prod_{m=1}^{n'-1} (\alpha_1 - \beta_m) = \delta \times (+)^{n'-1}$$

$$\bar{f}^{(n')} (\beta_1, \delta) = \prod_{m=1}^{n'} (\beta_1 - \alpha_m) = (-)^1 \times (+)^{n'-1} \leq 0$$

$$\bar{f}^{(n')} (\alpha_2, \delta) = \delta \prod_{m=1}^{n'-1} (\alpha_2 - \beta_m) = \delta \times (-)^1 \times (+)^{n'-2}$$

$$\bar{f}^{(n')} (\beta_2, \delta) = \prod_{m=1}^{n'} (\beta_2 - \alpha_m) = (-)^2 \times (+)^{n'-2} \geq 0$$

⋮

$$\bar{f}^{(n')} (\beta_{n'-1}, \delta) = \prod_{m=1}^{n'} (\beta_{n'-1} - \alpha_m) = (-)^{n'-1} \times (+)^1$$

$$\bar{f}^{(n')} (\alpha_{n'}, \delta) = \delta \prod_{m=1}^{n'-1} (\alpha_{n'} - \beta_m) = \delta \times (-)^{n'-1}$$

$$\bar{f}^{(n')} (-2, \delta) = (g^{(n)} (-1) - \delta h^{(n-2)} (-1)) \times (-)^{n'}$$

図 2-1 または図 2-2 で知られるように、 $n'-1$ 個の根は $|y| < 2$ の範囲内で確定する。残りの 1 根は、 $\bar{f}^{(n')} (2, \delta)$ または $\bar{f}^{(n')} (-2, \delta)$ の正負によって $|y| \leq 2$ の範囲内か範囲外かが決まる。

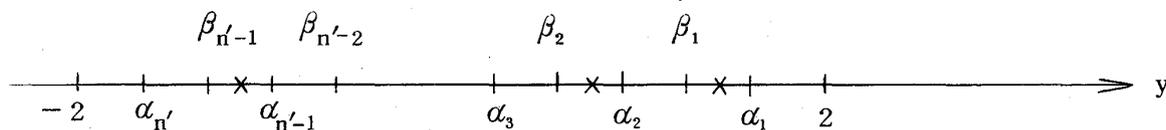


図 2-1 根の現われ方 ($\delta > 0$ のとき)

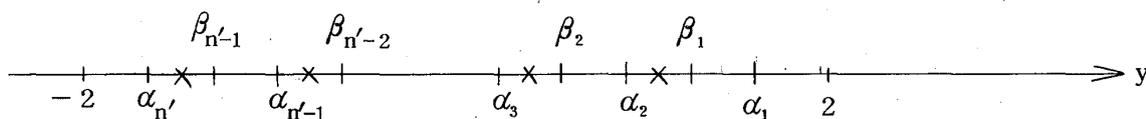


図 2-2 根の現われ方 ($\delta < 0$ のとき)

$\delta > 0$ のとき,

$$\frac{-}{f}^{(n')}(-\infty, \delta) = (-)^{n'}$$

より,

$g^{(n)}(-1) - \delta h^{(n-2)}(-1) \geq 0$ のとき, $\alpha_{n'} > y \geq -2$ の間に 1 根存在し,

$g^{(n)}(-1) - \delta h^{(n-2)}(-1) < 0$ のとき, $y < -2$ に 1 根存在する。

$$(h^{(n-2)}(-1) = (-)^{2(n'-1)} \geq 0)$$

$\delta \leq 0$ のとき

$$\frac{-}{f}^{(n')}(\infty, \delta) > 0$$

より,

$g^{(n)}(1) + \delta h^{(n-2)}(1) \geq 0$ のとき, $2 \geq y > \alpha_1$ の間に 1 根存在し,

$g^{(n)}(1) + \delta h^{(n-2)}(1) < 0$ のとき, $y > 2$ に 1 根存在する。

($h^{(n-2)}(1) > 0$)

そこで, 以上の結果を命題 1 の補助定理に適用すれば, $f^{(n)}(x, \delta) = 0$ の根の特性が判明する。 (Q.E.D.)

III 反強磁性相互作用を含む Ising 系への応用

§ 3. 非 Lee-Yang 系への別れ道

相転移の性質を知るために, 状態和の零点分布は重要な役割をする。よく知られるように, 強磁性相互作用のみを含む格子スピン系 (任意スピンの Ising 系, Heisenberg 系など) では, 状態和の Fugacity 零点は全て複素平面の単位円周上にあり, 相転移は高々一回しか起らない。これが, 反強磁性相互作用を含む系ではどうなるかということは充分解明されてはおらず, 現在なお, 興味のある問題である。

この論文では, 状態和の Fugacity 零点が単位円周上に存在している系 (これを以後, Lee-Yang 系と呼ぶことにする) が, 反強磁性相互作用を含んだために, どのようにそれからずれていくか (Fugacity 零点が, 必ずしも全て単位円周上に乗らないような系を非 Lee-Yang 系と呼ぶことにする) という問題, つまり Lee-Yang 系と非 Lee-Yang 系の別れ道がどうなっているかということ Ising 系について解明してみたい。

§ 4. 最も簡単な系

a) 相互作用ボンドを 1 つ含む系

独立なスピンの中に, 1 組だけ相互作用をしているスピンがあるような Ising 系のハミルトニアンは次のように表わされる。

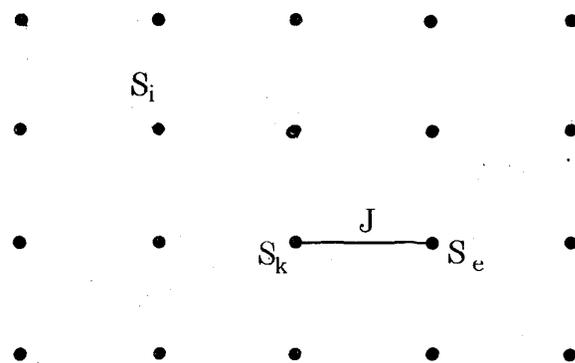


図 4-1 相互作用ボンドを 1 つ含む系

$$\mathcal{H} = -mH \sum_i S_i - \frac{J}{2} S_k S_l \quad (4.1)$$

($S_i = \pm 1$ とする)

m : 磁気モーメント

H : 外部磁場

J : スピン間相互作用の強さ

状態和は,

$$Z = T_r e^{-\beta \mathcal{H}} \quad \beta = \frac{1}{kT} \quad (4.2)$$

$$= T_r e^{\beta mH \sum_i S_i} e^{\frac{\beta J}{2} S_k S_l}$$

$$= T_r e^{\beta mH \sum_i' S_i} e^{\beta mH(S_k + S_l) + \frac{\beta J}{2} S_k S_l}$$

(\sum_i' は k と l を除く総和)

$$= (z + z^{-1})^{n-2} \left(e^{\frac{\beta J}{2}} z^2 + 2e^{-\frac{\beta J}{2}} + e^{\frac{\beta J}{2}} z^{-2} \right)$$

但し $z = e^{\beta mH}$ (z^2 を Fugacity と呼ぶ)

n はスピンの総数

即ち,

$$Z = e^{\frac{\beta J}{2}} (z + z^{-1})^{n-2} (z^2 + z^{-2} + 2e^{-\beta J}) \quad (4.4)$$

となる。

$$Z(z, \beta J) = 0 \quad (4.5)$$

の解は, §1 の補助定理から次のようになる。

$\beta J \geq 0$ のとき, 全ての z 零点 (または z^2 零点) は単位円周上に存在する。

$\beta J > 0$ のとき, $2n-4$ 個の z 零点が単位円周上 ($z = \pm i$ で各々 $n-2$ 重根) にあり, 残りの 4 根が単位円からはずれる。

つまり,

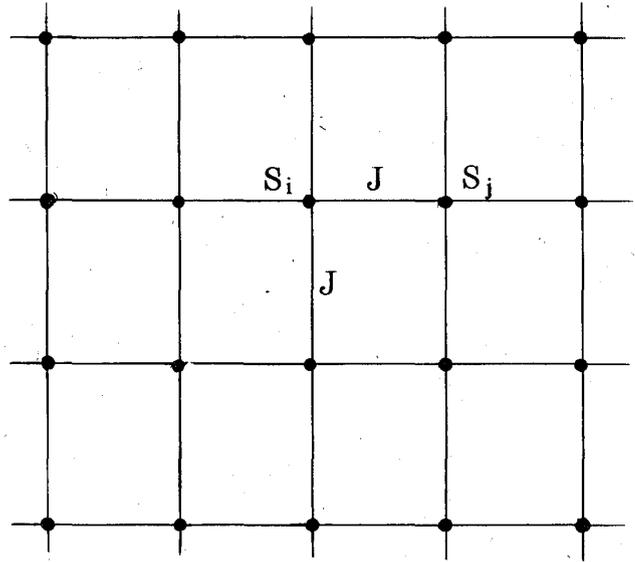
$J \geq 0$ のとき, Lee-Yang 系

$J < 0$ のとき, 非Lee-Yang 系

となる。(境界は $J = 0$)

b) 弱い最隣接相互作用を含む系

弱い最隣接相互作用を含む Ising 系のハミルトニアンと状態和は次のように表わされる。



$$\mathcal{H} = -mH \sum_i S_i - \frac{J}{2} \sum_{(ij)} S_i S_j \quad (4.6)$$

図 4-2 弱い最隣接相互作用を含む系

$$Z = T_r e^{\beta m H \sum S_i} e^{\frac{\beta J}{2} \sum_{(ij)} S_i S_j} \quad (4.7)$$

$$= \left(\cosh \frac{\beta J}{2} \right)^{\frac{qn}{2}} T_r \left[e^{\beta m H \sum_i S_i} \prod_{(ij)} (1 + S_i S_j \tanh \frac{\beta J}{2}) \right]$$

q は最隣接スピンの数

n はスピンの総数

$|\beta J| \ll 1$ として $(\tanh \frac{\beta J}{2})^1$ までとると,

$$Z = \left(\cosh \frac{\beta J}{2} \right)^{\frac{qn}{2}} T_r \left[e^{\beta m H \sum_i S_i} \left(1 + \tanh \frac{\beta J}{2} \sum_{(ij)} S_i S_j \right) \right]$$

$$= \left(\cosh \frac{\beta J}{2} \right)^{\frac{qn}{2}} Z_0 \left[1 + \tanh \frac{\beta J}{2} \left\langle \sum_{(ij)} S_i S_j \right\rangle_0 \right] \quad (4.8)$$

但し $Z_0 = T_r e^{\beta m H \sum S_i}$

$$\left\langle \sum_{(ij)} S_i S_j \right\rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \left(\sum_{(ij)} S_i S_j e^{\beta m H \sum S_i} \right)$$

唐木幸比古

$$\begin{aligned} \langle \sum_{(ij)} S_i S_j \rangle_0 &= \sum_{(ij)} \langle S_i S_j \rangle_0 \\ &= \frac{qn}{2} \langle S_i \rangle_0^2 \end{aligned}$$

$$\langle S_i \rangle_0 = \frac{\text{Tr} S_i e^{\beta m H S_i}}{\text{Tr} e^{\beta m H S_i}} = \frac{z - z^{-1}}{z + z^{-1}} \quad z = e^{\beta m H}$$

そこで,

$$\begin{aligned} Z(z, \beta J) &= \left(\cosh \frac{\beta J}{2} \right)^{\frac{qn}{2}} (z + z^{-1})^n \left[1 + \frac{qn}{2} \tanh \frac{\beta J}{2} \left(\frac{z - z^{-1}}{z + z^{-1}} \right)^2 \right] \\ &= \left(\cosh \frac{\beta J}{2} \right)^{\frac{qn}{2}} (z + z^{-1})^{n-2} \left[(z + z^{-1})^2 + \frac{qn}{2} \tanh \frac{\beta J}{2} (z - z^{-1})^2 \right] \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$f(z, \beta J) \equiv (z + z^{-1})^2 + \frac{qn}{2} \tanh \frac{\beta J}{2} (z - z^{-1})^2$$

とすれば,

$$\begin{aligned} f(z, \beta J) &= \bar{f}(y, \beta J) \\ &= (y+2) + \frac{qn}{2} \tanh \frac{\beta J}{2} (y-2) \quad (y = z^2 + z^{-2}) \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\beta J \geq 0 \text{ のとき } \quad \bar{f}(2, \beta J) \cdot \bar{f}(-2, \beta J) \leq 0 \quad (4.11a)$$

$$\beta J < 0 \text{ のとき } \quad \bar{f}(y, \beta J) > 0 \quad \text{for } |y| \leq 2 \quad (4.11b)$$

§1の補助定理と, (4.9~11) から

$J \geq 0$ のとき, Lee-Yang 系

$J < 0$ のとき, 非 Lee-Yang 系

になることがわかる。(境界は $J=0$)

§ 5. 二格子橋渡し型の系

2つの強磁性 Ising 格子が1つのボンドでつながっている仮想的な系を考える。この系のハミルトニアンは次のように表わされる。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_{AB} \quad (5.1)$$

但し

$$\mathcal{H}_A = -\frac{J}{2} \sum_{(ij)}^A S_i S_j - mH \sum_i^A S_i \quad (5.1a)$$

$$\mathcal{H}_B = -\frac{J}{2} \sum_{(kl)}^B S_k S_l - mH \sum_k^B S_k \quad (5.1b)$$

$$\mathcal{H}_{AB} = -\frac{J'}{2} S_A S_B \quad (5.1c)$$

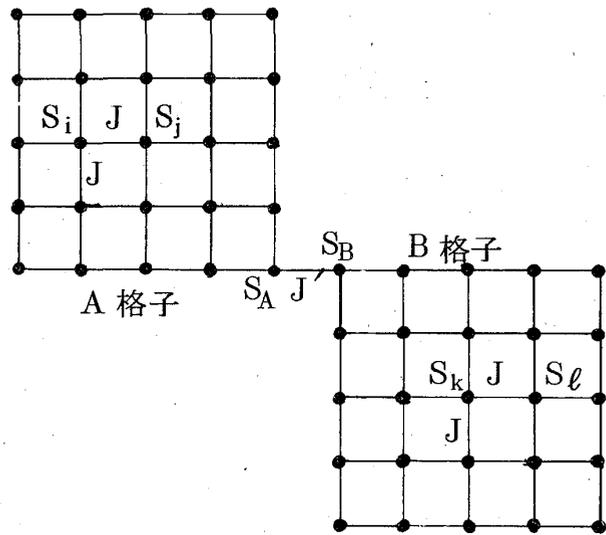


図5-1 二格子橋渡し型の系

ここで、 $\sum_{(ij)}^A$ は格子Aにおけるスピン対についての総和、 \sum_i^A は格子Aのスピンについての総和。格子Bについても同様。 S_A, S_B はそれぞれ、格子A, Bに属し、両者の橋渡しになっているスピんで、その相互作用の大きさが J' になっている。各スピンは ± 1 の値をとるとする。さらに、この系は格子Aと格子Bの交換に関して不変、つまり2つの格子は同じ構造を持っているとする。

このとき、状態和は以下の通りである。

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}} \\ &= \text{Tr} e^{-\beta (\mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B)} e^{-\beta \mathcal{H}_{AB}} \end{aligned}$$

唐木幸比古

$$= T_r \left[e^{-\beta (\mathcal{K}_A + \mathcal{K}_B)} \cosh \frac{\beta J'}{2} (1 + S_A S_B \tanh \frac{\beta J'}{2}) \right] \quad (5.2)$$

いま

$$Z_0 = T_r e^{-\beta (\mathcal{K}_A + \mathcal{K}_B)} \quad (5.3)$$

とすれば,

$$Z = \cosh \frac{\beta J'}{2} Z_0 \left[1 + \langle S_A S_B \rangle_0 \tanh \frac{\beta J'}{2} \right] \quad (5.4)$$

但し

$$\langle S_A S_B \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} T_r \left[S_A S_B e^{-\beta (\mathcal{K}_A + \mathcal{K}_B)} \right]$$

格子 A と B が同じ構造をしていることから, 明らかに

$$Z_0 = Z_A^2 \quad (5.5)$$

$$\text{但し } Z_A = T_r e^{-\beta \mathcal{K}_A}$$

$$\langle S_A S_B \rangle_0 = \langle S_A \rangle_0 \langle S_B \rangle_0$$

$$= \langle S_A \rangle_0^2$$

$$= \langle S_A \rangle_A^2 \quad (5.6)$$

但し

$$\langle S_A \rangle_A = \frac{1}{Z_A} T_r S_A e^{-\beta \mathcal{K}_A}$$

となる。(5.1a) から明らかに

$$\langle S_A \rangle_A = \frac{1}{n_A} \left\langle \sum_i^A S_i \right\rangle_A \quad (n_A \text{ は } A \text{ 格子のスピンの総数})$$

$$= \frac{1}{n_A} \frac{\partial}{\partial (\beta m H)} \ell n Z_A$$

$$= \frac{z}{n_A} \frac{1}{Z_A} \frac{\partial Z_A}{\partial z} \quad (z = e^{\beta mH}) \quad (5.7)$$

(5.4~7) から

$$Z = \cosh \frac{\beta J'}{2} \left[Z_A^2 + \frac{1}{n_A^2} \tanh \frac{\beta J'}{2} \left(z \frac{\partial Z_A}{\partial z} \right)^2 \right] \quad (5.8)$$

A 格子が強磁性系 ($J \geq 0$) のとき、Lee-Yang 定理によって、その状態和の z 零点は単位円周上に分布する。そのことから、 $Z_A(z)$ は全ての根が単位円周上にあるような実多項式 (しかも $Z_A(z=1) \neq 0$ は明らか) であることがわかる。そこで、代数方程式

$$Z(z, \beta J') = 0 \quad (5.9)$$

に § 2 の命題 3 を適用すれば、次の結果が得られる。 $J \geq 0$ ならば、

$J' \geq 0$ のとき、 Lee-Yang 系

$J' < 0$ のとき、 非 Lee-Yang 系

となる。(境界は $J' = 0$)

§ 6. 副格子型の系

いくつかの同等な副格子の間に弱い相互作用があるような Ising 系について考える。これは第 2 隣接相互作用まで考慮した Ising 系の特殊な場合に概当する。

a) 二副格子系

2つの同等な副格子からなる系、例えば正方格子系、立方格子系などのような場合について考える。

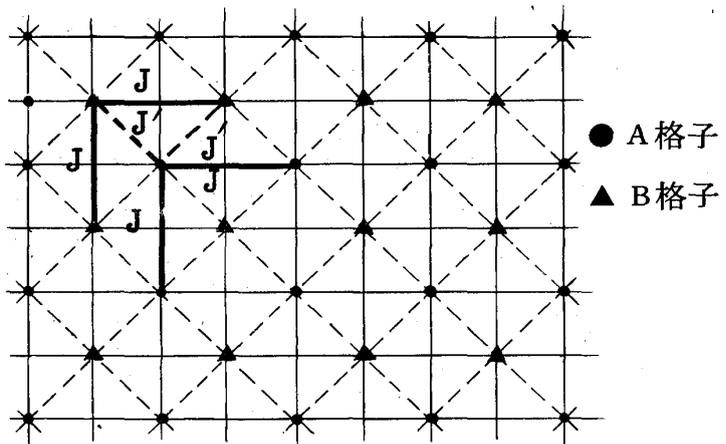


図 6-1 二副格子系

ハミルトニアンは次のように表わされる。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_{AB} \quad (6.1)$$

$$\mathcal{H}_A = -\frac{J}{2} \sum_{(ij)}^A S_i S_j - m H \sum_i^A S_i \quad (6.1a)$$

$$\mathcal{H}_B = -\frac{J}{2} \sum_{(kl)}^B S_k S_l - m H \sum_k^B S_k \quad (6.1b)$$

$$\mathcal{H}_{AB} = -\frac{J'}{2} \sum_{(ik)}^{AB} S_i S_k \quad (6.1c)$$

$\sum_{(ij)}^A$ は A 格子でのスピン対についての総和, \sum_i^A は A 格子のスピンについての総和。
B 格子についても同様。 $\sum_{(ik)}^{AB}$ は A 格子と B 格子の各スピンからなるスピン対についての
の総和で, 最隣接のものに限る。

状態和は次のようになる。

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} e^{-\beta(\mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_{AB})} \\ &= \text{Tr} e^{-\beta(\mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B)} e^{\frac{\beta J'}{2} \sum_{(ik)}^{AB} S_i S_k} \\ &= \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^{\frac{qn}{2}} \text{Tr} \left[e^{-\beta(\mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B)} \prod_{(ik)}^{AB} \left(1 + S_i S_k \tanh \frac{\beta J'}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (6.2)$$

(q は最隣接スピンの数
n はスピン総数 ($n = n_A + n_B = 2n_A$))

いま $|\beta J'| \ll 1$ とし, $(\tanh \frac{\beta J'}{2})^1$ までの近似で考えると, 状態和は

$$Z = \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^{\frac{qn}{2}} \text{Tr} \left[e^{-\beta(\mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B)} \left(1 + \sum_{(ik)}^{AB} S_i S_k \tanh \frac{\beta J'}{2} \right) \right] \quad (6.3)$$

となる。A 格子と B 格子が同等であることから、簡単な変形により次のようになる。

$$Z = \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^{\frac{qn}{2}} \left[Z_A^2 + \frac{q}{n_A} \tanh \frac{\beta J'}{2} \left(z \frac{\partial Z_A}{\partial z} \right)^2 \right] \quad (6.4)$$

$$Z_A = T_r e^{-\beta \mathcal{H}_A} \quad (z = e^{\beta mH})$$

そこで、副格子が強磁性系 ($J \geq 0$) ならば §5 と同様にして、次の結果を得る。

$J' \geq 0$ のとき, Lee-Yang 系

$J' < 0$ のとき, 非 Lee-Yang 系

となる。(境界は $J' = 0$)

もし、 $Z_A(z) = 0$ の全ての根が単根ならば、 $J' < 0$ のとき $Z(z) = 0$ の根は、単位円の外部と内部の2つの閉曲線上にのる。

b) 三副格子系

3つの同等な副格子からなる系、例えば三角格子系のような場合について考える。

ハミルトニアンは以下の様に表わされる。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_C + \mathcal{H}_{ABC} \quad (6.5)$$

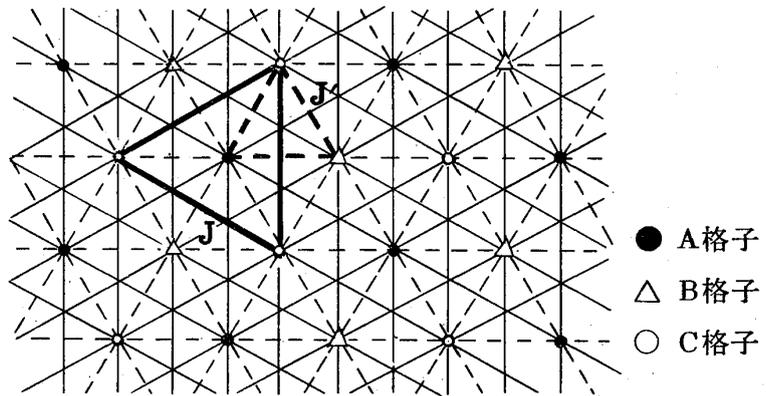


図 6-2 三副格子系

$$\mathcal{H}_A = -\frac{J}{2} \sum_{(ij)}^A S_i S_j - mH \sum_i^A S_i$$

$$\mathcal{H}_B = -\frac{J}{2} \sum_{(i'j')}^B S_{i'} S_{j'} - mH \sum_{i'}^B S_{i'}$$

$$\mathcal{H}_C = -\frac{J}{2} \sum_{(i''j'')}^C S_{i''} S_{j''} - mH \sum_{i''}^C S_{i''}$$

$$\mathcal{H}_{ABC} = -\frac{J'}{2} \left(\sum_{(ii')}^{AB} S_i S_{i'} + \sum_{(i'i'')}^{BC} S_{i'} S_{i''} + \sum_{(i''i)}^{CA} S_{i''} S_i \right)$$

$\sum_{(ij)}^A$, \sum_i^A , $\sum_{(ii')}^{AB}$ 等は, a) の場合と同様。

状態和は,

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} e^{-\beta(\mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_C + \mathcal{H}_{ABC})} \\ &= \text{Tr} e^{-\beta(\mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_C)} e^{\frac{\beta J'}{2} \left(\sum_{(ii')}^{AB} S_i S_{i'} + \sum_{(i'i'')}^{BC} S_{i'} S_{i''} + \sum_{(i''i)}^{CA} S_{i''} S_i \right)} \\ &= \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^{\frac{qn}{2}} \text{Tr} \left[e^{-\beta \mathcal{H}_0} \prod_{(ik)}^{AB, BC, CA} \left(1 + S_i S_k \tanh \frac{\beta J'}{2} \right) \right] \quad (6.6) \end{aligned}$$

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_C$$

$$n = n_A + n_B + n_C = 3n_A \quad (n_A = n_B = n_C)$$

(n はスピン総数。 q は最隣接スピンの数)

$|\beta J'| \ll 1$ として $(\tanh \frac{\beta J'}{2})^1$ までとると,

$$Z = \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^{\frac{qn}{2}} \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_0} \left(1 + \sum_{(ik)}^{AB, BC, CA} S_i S_k \tanh \frac{\beta J'}{2} \right) \quad (6.7)$$

A, B, C の三格子が同等であることから, 簡単な変形により次のようになる。

$$Z = \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^{\frac{qn}{2}} Z_A \left[Z_A^2 + \frac{3q}{2n_A} \tanh \frac{\beta J'}{2} \left(z \frac{\partial Z_A}{\partial z} \right)^2 \right] \quad (6.8)$$

そこで、副格子が強磁性 ($J \geq 0$) ならば §5 と同様にして、次の結果を得る。

$J' \geq 0$ のとき, Lee-Yang 系

$J' < 0$ のとき, 非 Lee-Yang 系

となる。(境界は $J' = 0$)

$J' < 0$ のとき, 状態和の零点は, 単位円および, 単位円の外部と内部の3つの閉曲線上にのる。

§7. 異方型の系

方向によってスピン間相互作用の大きさが異なるような Ising 系について考える。

a) 一次元増加型

いくつかの同等な一次元格子間に弱い相互作用が働いて二次元格子になるような系, あるいはいくつかの同等な二次元格子間に弱い相互作用が働いて三次元格子になるような, 次元が一つ増加するような系について考える。

ハミルトニアンは次のように表わされる。

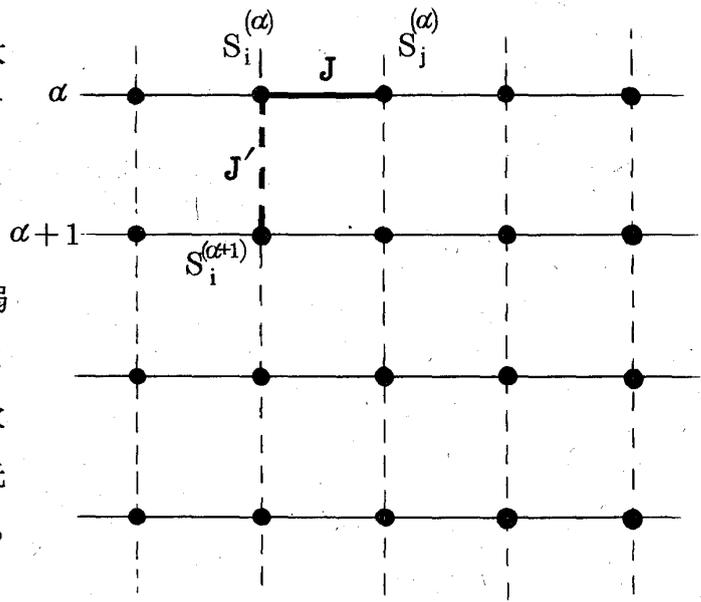


図7-1 異方型(一次元増加型)

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha} \mathcal{H}_{\alpha} + \sum_{\alpha} \mathcal{H}_{\alpha, \alpha+1} \quad (7.1)$$

$$\mathcal{H}_{\alpha} = -\frac{J}{2} \sum_{(ij)} S_i^{(\alpha)} S_j^{(\alpha)} - mH \sum_i S_i^{(\alpha)} \quad (7.1a)$$

$$\mathcal{H}_{\alpha, \alpha+1} = -\frac{J'}{2} \sum_i S_i^{(\alpha)} S_i^{(\alpha+1)} \quad (7.1b)$$

\mathcal{H}_{α} は第 α 番目の格子のハミルトニアン (格子内相互作用を含む), $\mathcal{H}_{\alpha, \alpha+1}$

は第 α 番目と第 $\alpha+1$ 番目の格子間相互作用ハミルトニアン, $S_i^{(\alpha)}$ は α -格子に属するスピン ($S_i^{(\alpha)} = \pm 1$)。系は周期的境界条件を充たすとする。

このとき, 状態和は,

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} e^{-\beta \sum_{\alpha} \mathcal{H}_{\alpha}} e^{-\beta \sum_{\alpha} \mathcal{H}_{\alpha, \alpha+1}} \\ &= \text{Tr} \prod_{\alpha} e^{-\beta \mathcal{H}_{\alpha}} \prod_{\alpha} e^{\frac{\beta J'}{2} \sum_i S_i^{(\alpha)} S_i^{(\alpha+1)}} \\ &= \text{Tr} \left[\left(\prod_{\alpha} e^{-\beta \mathcal{H}_{\alpha}} \right) \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^{n_{\alpha} \times \ell} \prod_{\alpha} \prod_i \left(1 + S_i^{(\alpha)} S_i^{(\alpha+1)} \tanh \frac{\beta J'}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (7.2)$$

n_{α} は α 格子のスピン の 総数

ℓ は 同等な格子の数

$|\beta J'| \ll 1$ として $\left(\tanh \frac{\beta J'}{2} \right)^{\ell}$ までとれば,

$$Z = \text{Tr} \left(\prod_{\alpha} e^{-\beta \mathcal{H}_{\alpha}} \right) \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^{n_{\alpha} \times \ell} \left[1 + \sum_{\alpha} \sum_i S_i^{(\alpha)} S_i^{(\alpha+1)} \tanh \frac{\beta J'}{2} \right] \quad (7.3)$$

ℓ 個の格子が同等であることから, (7.3) は次のように変形できる。

$$\begin{aligned} Z &= \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^{n_{\alpha} \times \ell} Z_{\alpha}^{\ell} \left[1 + \ell n_{\alpha} \tanh \frac{\beta J'}{2} \langle S_i^{(\alpha)} \rangle_{\alpha}^2 \right] \\ Z_{\alpha} &= \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_{\alpha}} \\ \langle S_i^{(\alpha)} \rangle_{\alpha} &= \frac{1}{Z_{\alpha}} \text{Tr} S_i^{(\alpha)} e^{-\beta \mathcal{H}_{\alpha}} \\ &= \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^{n_{\alpha} \times \ell} Z_{\alpha}^{\ell-2} \left[Z_{\alpha}^2 + \frac{\ell}{n_{\alpha}} \tanh \frac{\beta J'}{2} \left(z \frac{\partial Z_{\alpha}}{\partial z} \right)^2 \right] \quad (7.4) \\ &\quad (z = e^{\beta mH}) \end{aligned}$$

そこで §5 と同様にして、次のような結果を得る。 $J \geq 0$ ならば、

$J' \geq 0$ のとき、 Lee-Yang 系

$J' > 0$ のとき、 非 Lee-Yang 系

となる。(境界は $J' = 0$)

l/n_α を有限に保ちながら $l \rightarrow \infty$,
 $n_\alpha \rightarrow \infty$ にした場合、上の結果は保存される。

b) 二次元増加型

いくつかの同等な一次元格子間に異方的な弱い相互作用が働いて三次元格子になるような、次元が二つ増加するような系について考える。

ハミルトニアンは次のように表わされる。

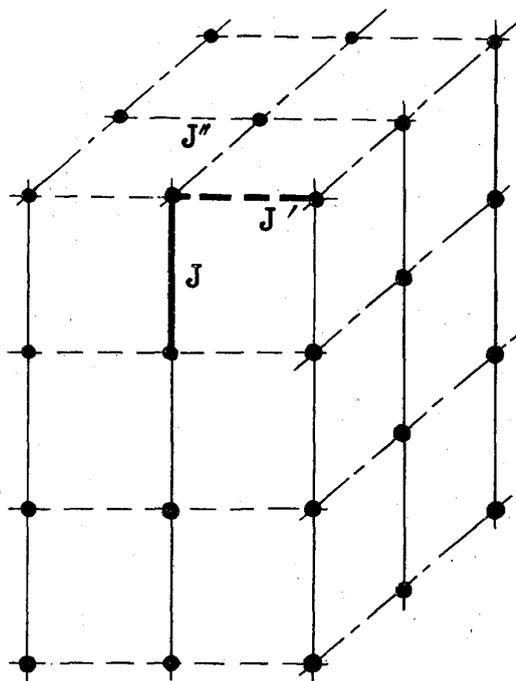


図 7-2 異方型 (二次元増加型)

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha} \mathcal{H}_{\alpha} + \sum_{(\alpha, \beta, \gamma)} \mathcal{H}_{\alpha\beta\gamma} \quad (7.5)$$

$$\mathcal{H}_{\alpha} = -\frac{J}{2} \sum_i S_i^{(\alpha)} S_{i+1}^{(\alpha)} - m H \sum_i S_i^{(\alpha)} \quad (7.5a)$$

$$\mathcal{H}_{\alpha, \beta, \gamma} = -\frac{J'}{2} \sum_i S_i^{(\alpha)} S_i^{(\beta)} - \frac{J''}{2} \sum_i S_i^{(\alpha)} S_i^{(\gamma)} \quad (7.5b)$$

\mathcal{H}_{α} は第 α 番目の格子のハミルトニアン。 $\mathcal{H}_{\alpha, \beta, \gamma}$ は格子間相互作用ハミルトニアン。 J' と J'' は格子間の弱いスピン間相互作用の強さで、方向によって異なる。

状態和を $\tanh \frac{\beta J'}{2}$ および $\tanh \frac{\beta J''}{2}$ の一次までとる近似では、次のようになる。

$$\begin{aligned}
 Z &= \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^{n_\alpha \ell m} \left(\cosh \frac{\beta J''}{2} \right)^{n_\alpha \ell m} \\
 &\times \text{Tr} \left[\prod_{\alpha} e^{-\beta \mathcal{H}_{\alpha}} \left[1 + \tanh \frac{\beta J'}{2} \sum_{(\alpha, \beta)} \sum_i S_i^{(\alpha)} S_i^{(\beta)} \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \tanh \frac{\beta J''}{2} \sum_{(\alpha, r)} \sum_i S_i^{(\alpha)} S_i^{(r)} \right] \right] \quad (7.6)
 \end{aligned}$$

n_α は α 格子のスピンの総数

ℓm は同等な格子の数 (J' の方向に ℓ 個, J'' の方向に m 個の格子がある)。

$$\begin{aligned}
 &= \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^{n_\alpha \ell m} \left(\cosh \frac{\beta J''}{2} \right)^{n_\alpha \ell m} Z_{\alpha}^{\ell m} \left[1 \right. \\
 &\quad + \tanh \frac{\beta J'}{2} \sum_{(\alpha, \beta)} \sum_i \langle S_i^{(\alpha)} \rangle_{\alpha} \langle S_i^{(\beta)} \rangle_{\beta} \\
 &\quad \left. + \tanh \frac{\beta J''}{2} \sum_{(\alpha, r)} \sum_i \langle S_i^{(\alpha)} \rangle_{\alpha} \langle S_i^{(r)} \rangle_r \right] \quad (7.7)
 \end{aligned}$$

但し,

$$Z_{\alpha} = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_{\alpha}}$$

$$\langle S_i^{(\alpha)} \rangle_{\alpha} = \frac{1}{Z_{\alpha}} \text{Tr} S_i^{(\alpha)} e^{-\beta \mathcal{H}_{\alpha}}$$

$$\begin{aligned}
 Z &= \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \cosh \frac{\beta J''}{2} \right)^{n_\alpha \ell m} Z_{\alpha}^{\ell m - 2} \left[Z_{\alpha}^2 \right. \\
 &\quad \left. + \left(\frac{\ell}{n_\alpha} \tanh \frac{\beta J'}{2} + \frac{m}{n_\alpha} \tanh \frac{\beta J''}{2} \right) \left(z \frac{\partial Z_{\alpha}}{\partial z} \right)^2 \right] \quad (7.8)
 \end{aligned}$$

§ 5 と同様にして, 次の結果を得る。

$J > 0$ ならば,

$$\frac{\ell}{n_\alpha} \tanh \frac{\beta J'}{2} + \frac{m}{n_\alpha} \tanh \frac{\beta J''}{2} \geq 0 \quad \text{のとき, Lee-Yang 系,}$$

$$\frac{\ell}{n_\alpha} \tanh \frac{\beta J'}{2} + \frac{m}{n_\alpha} \tanh \frac{\beta J''}{2} < 0 \quad \text{のとき, 非Lee-Yang 系}$$

となる。

$m = \ell$ の場合 ($J > 0$)

$J', J'' \geq 0$ のとき, Lee-Yang 系

$J' > 0 > J''$ のとき,

$|J'| \geq |J''|$ ならば Lee-Yang 系

$|J'| < |J''|$ ならば 非 Lee-Yang 系

$J', J'' < 0$ のとき, 非 Lee-Yang 系

となる。

$J'' = -J'$ ($J' \geq 0$) のとき, ($J > 0$)

$\ell \geq m$ ならば, Lee-Yang 系

$\ell < m$ ならば, 非 Lee-Yang 系

となる。

§ 8. 不純物スピンを含む系

a) 1 個の不純物スピンを含む系

強磁性 Ising 格子中に、異質のスピンが 1 個含まれているような系について考える。

ハミルトニアンは、

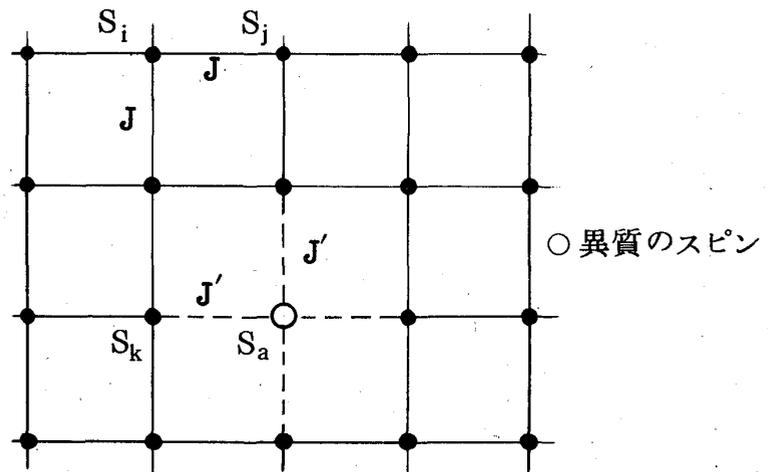


図 8-1 1 個の不純物スピンを含む系

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \sum'_{(ij)} S_i S_j - mH \sum_i S_i - \frac{J'}{2} S_a \sum_k^a S_k \quad (8.1)$$

$\sum'_{(ij)}$ は異質なスピンを含むスピン対を除いた対総和

\sum_k^a は，異質なスピンに最隣接するスピンについての和，

S_a は異質なスピんで，値は ± 1 をとるとする。

状態和は，

$$\begin{aligned} Z &= T_r e^{-\beta \mathcal{H}} \\ &= \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^q T_r \left[e^{-\beta (\mathcal{H}_0 - mH S_a)} \prod_k^a \left(1 + S_a S_k \tanh \frac{\beta J'}{2} \right) \right] \\ \mathcal{H}_0 &= -\frac{J}{2} \sum'_{(ij)} S_i S_j - mH \sum_i S_i \end{aligned} \quad (8.2)$$

\sum_i は，異質なスピンを除いた総和

q は，最隣接スピンの数

$\left(\tanh \frac{\beta J'}{2} \right)^1$ までの近似では

$$\begin{aligned} Z &= \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^q T_r \left[e^{-\beta (\mathcal{H}_0 - mH S_a)} \left[1 + \tanh \frac{\beta J'}{2} S_a \sum_k^a S_k \right] \right] \\ &= \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^q Z_0 Z_a \left[1 + q \tanh \frac{\beta J'}{2} \langle S_a \rangle_a \langle S_k \rangle_0 \right] \end{aligned} \quad (8.3)$$

$$Z_0 = T_r e^{-\beta \mathcal{H}_0}$$

$$Z_a = T_r e^{\beta mH S_a}$$

$$\langle S_k \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} T_r S_k e^{-\beta \mathcal{H}_0} = \frac{z}{n} \frac{1}{Z_0} \frac{\partial Z_0}{\partial z}$$

$$\langle S_a \rangle_a = \frac{1}{Z_a} T_r S_a e^{\beta mH S_a} = \frac{z}{Z_a} \frac{\partial Z_a}{\partial z} \quad (z = e^{\beta mH})$$

$$Z = \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^q \left[Z_0 Z_a + \frac{q}{n} \tanh \frac{\beta J'}{2} \left(z \frac{\partial Z_0}{\partial z} \right) \left(z \frac{\partial Z_a}{\partial z} \right) \right] \quad (8.4)$$

$J \geq 0$ のとき, Lee-Yang 定理から

$$Z_0 = \prod_{i=1}^n (y - \alpha_i) \quad -2 \leq \alpha_i < 2 \quad \left(y = z + \frac{1}{z} \right) \quad (8.5)$$

と表わされる。

また, 明らかに

$$Z_a = y \quad (8.6)$$

他方,

$$z \frac{\partial Z_0}{\partial z} = \frac{z^2 - 1}{z} \frac{\partial Z_0}{\partial y} \quad (8.7)$$

$$z \frac{\partial Z_a}{\partial z} = \frac{z^2 - 1}{z} \frac{\partial Z_a}{\partial y} = \frac{z^2 - 1}{z} \quad (8.8)$$

従って (8.4 ~ 8) から

$$Z = \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^q \left[y \prod_{i=1}^n (y - \alpha_i) + \frac{q}{n} \tanh \frac{\beta J'}{2} (y-2)(y+2) \frac{\partial}{\partial y} \prod_{i=1}^n (y - \alpha_i) \right] \quad (8.9)$$

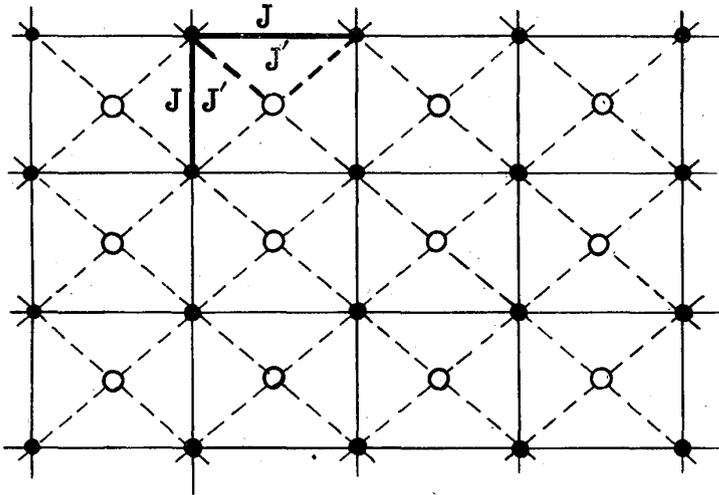
(8.9) から明らかに, J' の符号の如何にかかわらず, 状態和 Z の z 零点は, 単位円周上にあることがわかる。(§ 2 の補助定理より)

即ち, 系は, $J > 0$ ならば, J' の符号の如何にかかわらず Lee-Yang 系に属する。

(但し, $\left(\tanh \frac{\beta J'}{2} \right)^2$ 以下が省略できる範囲内で)

b) 副格子型不純物スピン系

正方格子や立方格子のような二副格子型の系の, 一方の副格子が強磁性格子, 他方の副格子が不純物スピんで構成されるような系を考える。



○ 異質のスピン

図 8-2 副格子型不純物スピン系

ハミルトニアンは次のような形をしている。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B + \mathcal{H}_{AB} \quad (8.10)$$

$$\mathcal{H}_A = -\frac{J}{2} \sum_{(ij)}^A S_i S_j - mH \sum_i^A S_i \quad (8.10a)$$

$$\mathcal{H}_B = -mH \sum_k^B S_k \quad (8.10b)$$

$$\mathcal{H}_{AB} = -\frac{J'}{2} \sum_{(ik)}^{AB} S_i S_k \quad (8.10c)$$

ここで、B 格子上には異質なスピンがあり、異質なスピン同志の相互作用はないとする。 $\sum_{(ij)}^A, \sum_i^A$ 等は前と同様。

状態和は次のようになる。

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta(\mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B)} e^{\frac{\beta J'}{2} \sum_{(ik)}^{AB} S_i S_k}$$

$$= \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^{q n_B} T_r \left[e^{-\beta (\mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B)} \prod_{(ik)}^{AB} \left(1 + S_i S_k \tanh \frac{\beta J'}{2} \right) \right] \quad (8.11)$$

n_B は、異質なスピンの総数

q は、最隣接スピンの数

$\left(\tanh \frac{\beta J'}{2} \right)^1$ までの近似では、

$$\begin{aligned} Z &= \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^{q n_B} T_r e^{-\beta (\mathcal{H}_A + \mathcal{H}_B)} \left(1 + \sum_{(ik)}^{AB} S_i S_k \tanh \frac{\beta J'}{2} \right) \\ &= \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^{q n_B} Z_A Z_B \left[1 + q n_B \tanh \frac{\beta J'}{2} \langle S_i \rangle_A \langle S_k \rangle_B \right] \end{aligned} \quad (8.12)$$

$$Z_A = T_r e^{-\beta \mathcal{H}_A}$$

$$Z_B = T_r e^{-\beta \mathcal{H}_B}$$

$$\langle S_i \rangle_A = \frac{z}{n_A} \frac{\partial}{\partial z} \ell_n Z_A$$

$$\langle S_k \rangle_B = \frac{z}{n_B} \frac{\partial}{\partial z} \ell_n Z_B$$

結局

$$Z = \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^{q n_B} \left[Z_A Z_B + \frac{q}{n_A} \tanh \frac{\beta J'}{2} \left(z \frac{\partial Z_A}{\partial z} \right) \left(z \frac{\partial Z_B}{\partial z} \right) \right] \quad (8.13)$$

$J > 0$ のとき、Lee-Yang 定理から、

$$Z_A = \prod_{i=1}^{n_A} (y - \alpha_i) \quad -2 \leq \alpha_i < 2, \quad y = z + \frac{1}{z}$$

と表わされる。また、

$$Z_B = y^{n_B}$$

そこで,

$$Z = \left(\cosh \frac{\beta J'}{2} \right)^{q n_B} \left[y^{n_B} \prod_{i=1}^{n_A} (y - \alpha_i) + \frac{q^{n_B}}{n_A} \tanh \frac{\beta J'}{2} (y+2)(y-2)y^{n_B-1} \right. \\ \left. \times \frac{\partial}{\partial y} \prod_{i=1}^{n_A} (y - \alpha_i) \right] \quad (8.14)$$

(8.14) から明らかに, J' の符号の如何にかかわらず状態和の零点は単位円周上にある。

即ち, $J > 0$ ならば,

$$J' \geq 0 \text{ に対して, Lee-Yang 系}$$

となる。

$n_B \simeq n_A$ のとき, $n_A \rightarrow \infty$ の極限においてもこの性質は保存される。

なお (8.10b) のかわりに

$$\mathcal{X}_B = - \frac{J''}{2} \sum_{(kl)}^B S_k S_l - m H \sum_k^B S_k \quad (8.15)$$

としても (8.13) は成立つ。そこで, $J'' = 0$ でなくても, $J'' > 0$ ($J'' \neq J$) ならば, 上のことは成立つ。

$J'' = J$ の場合は副格子型となり, §6 のような結論になる。

§9. ディスカッション

これまでに検討を加えてきたいくつかの系に関する考察から, 次のことが知られる。

1. 反強磁性相互作用を含む Ising 系は多くの場合非 Lee-Yang 系に移行するが直ちに非 Lee-Yang 系に移行するとは限らない場合もある。

2. 副格子型の系の考察からわかるように, 反強磁性相互作用の導入によって, 相転移が2回以上起る可能性があらわれる。特に, 三つ以上の同等な副格子を含むような系では3回以上の相転移の起る可能性が示される。

3. 強磁性スピン系の中に, 孤立的な反強磁性スピンが含まれる場合には, Lee-Yang 系が保たれる。(一定の近似内で)

なお、われわれの考察の範囲は、反強磁性相互作用を含むスピン系について全面的にカバーしたものとはなっていない。特に、根の分布関数については、強磁性系の場合と同様、今後の課題である。

最後に代数方程式に関して若干のコメントを加えてみたい。

よく知られる Abel の定理によって、5 次以上の代数方程式は、一般には、代数的解法によって解くことはできない。即ち一般には、全ての根を個々に、係数の関数として具体的に公式化することはできない。しかし、根と係数の間には定まった関係があり、根は係数の連続関数になることが知られている。

Lee-Yang-Asano の定理や、この論文などで知られるように、代数方程式の個々の根については解けなくても、根の集団としての何らかの性質、つまり根の特性というものが、係数との一定の対応関係のもとに把握されることがある。このことは、もう少し一般的な形で定式化され得るのではないだろうか。

例えば、最も簡単な代数方程式の 1 つである 2 次方程式の根の特性は、しばしば実根か虚根かという形で判別される。しかしながら、§2 の命題 1 からわれわれは、その把握方が 2 次方程式固有のものに過ぎないことを知る。つまり、命題 1 のような場合に、実根か虚根かということは二次的な意味しかもたない。こういった問題は、もう少し一般的に定式化され得るのではなからうかというのがわれわれの感想である。

謝 辞

この論文を書くにあたり、小野周先生より多くの励ましと親切な助言をいただきましたことを深く感謝いたします。

また、問題の発端となった法則の発見に際して、東京大学大型計算機センターの高速電子計算機 HITAC8800/8700 を使用したことを申し添えます。

参 考 文 献

- 1) T. D. Lee and C. N. Yang : Phys. Rev. 87 (1952) 410.
- 2) T. Asano : J. Phys. Soc. Japan 29 (1970) 350 ; J. Phys. Soc. Japan 25 (1968) 1220.
- 3) P. B. Griffiths : J. math. Phys. 10 (1969) 1559.

唐木幸比古

- 4) M. Suzuki : Progr. theor. Phys. 41 (1969) 1438; J. math. Phys. 9 (1968) 2064.
- 5) C. N. Yang : Special Problems of Statistical Mechanics, Lecture Note, University of Washington (1952) p. 170.
- 6) M. Suzuki, C. Kawabata, S. Ono and Y. Karaki : J. Phys. Soc. Japan 29 (1970) 837.
- 7) Y. Karaki : Rep. Compt. Centre, Univ. Tokyo 4 (1971-72) 27.
- 8) S. Katsura, Y. Abe and M. Yamamoto : J. Phys. Soc. Japan 30 (1971) 347.
- 9) M. Ohminami, Y. Abe and S. Katsura : J. Phys. A : Gen. Phys. 5 (1972) 1669.
- 10) S. Katsura and M. Ohminami : J. Phys. A : Gen. Phys. 5 (1972) 95.
- 11) 高木貞治 : 代数学講義 (改訂新版) (共立出版)