

格子気体のクラスターサム [II]

井 上 政 義 (阪大工)

(1月17日受理)

§ 1 Introduction

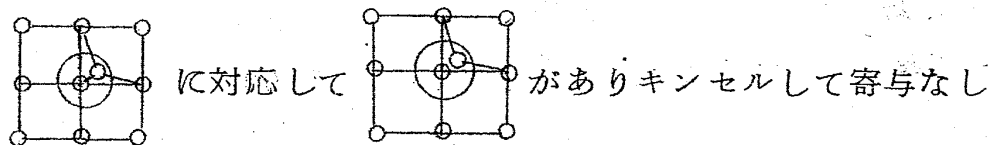
この論文 [II] では、初めに二次元正方格子のクラスターサム b_l の最高巾について述べる。S. Katsura⁽¹⁾ は Fuch の係数を用いて、 $l=1\sim 20$ まで最高巾の値を求めた。我々は、異なつた方法で最高巾の性質を見出し、新しく導入した係数 $C_{\alpha-n}$ 及び $C_{\beta-n}$ の初めの数項を求め Katsura の結果と一致した。§ 3 では、凝縮理論の基本仮定である、 $b_l > 0$ について、§ 4 では、主に寄与するグラフについて述べる。

§ 2 b_l の最高巾の係数

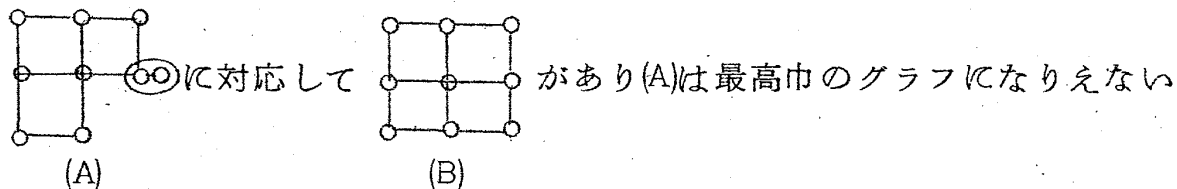
低い温度では $f(\equiv e^{-v/kT}-1)$ が大きくなり b_l の値は、 f の最高巾の項に強く依存する。二次元正方格子についてこの最高巾の係数の値を求めてみよう。

定理 I 最高巾のグラフには重なつた粒子はない。

証明(i) 重なつた粒子が、他の格子の粒子と結合している場合。



(ii) 重なつた粒子が、他の格子の粒子と結合していない場合。



注 一般の l (クラスターの粒子数) についても同様である。(Q.E.D.)

b_l の最高巾の係数を $b_{lp} \equiv C_l$ とすれば、

定理 II C_l は最高巾のグラフの数に等しい

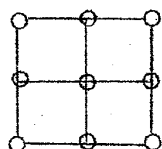
証明 定理 I により最高巾のグラフには重なった粒子がないので、1 個のグラフにつき $\ell!$ 回の粒子の入替がある。粒子の入替を考えない場合のグラフの数を C'_l とすれば、

$$C_l = \frac{1}{\ell!} \cdot \ell! \cdot C'_l = C'_l$$

(Q. E. D.)

定理 III $\ell = m^2$ (m : 自然数) の場合の最高巾のグラフは、一辺が $(m-1)$ の正方形であり $C_l = 1$ 巾数は $2m(m-1)$ である。(証明省略)

例 $\ell = 3^2 = 9$

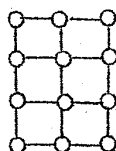
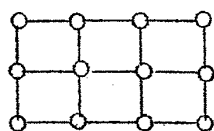


(注) $\ell = 1^2 = 1$ のとき $b_1 = 1$

定理 IV $\ell = m(m+1)$ (m : 自然数) の場合の最高巾のグラフは一辺が m , 他の辺が $(m-1)$ なる長方形であり $C_l = 2$, 巾数は $m(2m-1)$ である。

(証明省略)

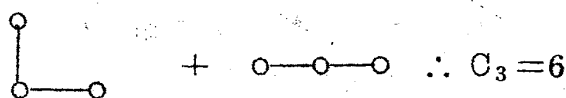
例 $\ell = 3(3+1) = 12$



定理 V $\ell = m^2 - n$ (m, n は自然数で且つ、 $m \geq n+1$) なるときの C_l は m に依存せず n だけに依存する。

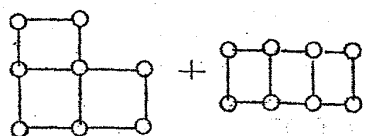
証明 $n = 1$ のとき

(i) $\ell = 2^2 - 1 = 3$



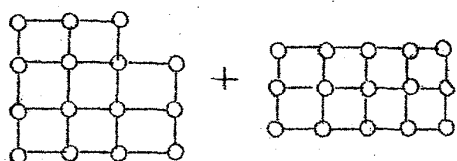
(ii) $\ell = 3^2 - 1 = 8$

井上政義



$$\therefore C_8 = 6$$

(iii) $\ell = 4^2 - 1 = 15$

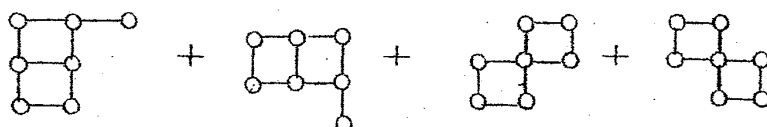


$$\therefore C_{15} = 6$$

一般に $\ell = m^2 - 1$ (且つ $m \geq 2$) なるとき $C_\ell = 6$ である。

$n = 2$ のとき

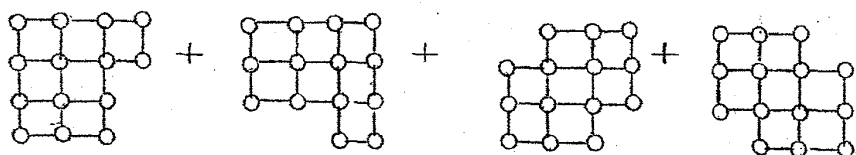
(i) $\ell = 3^2 - 2 = 7$



$$= 10 + 10 + 1 + 1 = 22$$

$$\therefore C_7 = 22$$

(ii) $\ell = 4^2 - 2 = 14$



$$= 22$$

一般に $\ell = m^2 - 2$ (但し $m \geq 3$) なるとき $C_\ell = 22$ である。

以下同様である。(Q. E. D.)

定理 VI $\ell = m(m+1) - n$ (m, n は自然数で且つ $m \geq n+1$) なる時の C_ℓ は m には依存せず n にのみ依存する。

証明は定理 V と同様である。

一般の ℓ は次の(i), (ii), (iii), (iv) の何れかに一意的に分類され、上に得た定理 III~VI を用いると次のようになる。

(i) $\ell = m^2$

例 1, 4, 9, 16, 25, 36, ……

定理 III および $b_1=1$, より

$$C_{m^2} \equiv C_\alpha = 1$$

(ii) $\ell = m(m+1)$

例 2, 6, 12, 20, 30, 42, ……

定理 IV より

$$C_{m(m+1)} \equiv C_\beta = 2$$

(iii) $\ell = m^2 - n$ (但し $m \geq n+1$)

例

$n=1$: 3, 8, 15, 24, ……

$n=2$: 7, 14, 23, 34, ……

$n=3$: 13, 22, 33, 46, ……

$n=4$: 21, 32, 45, 60, ……

⋮

⋮

定理 V より

$$C_{\alpha-1} \equiv C_3 = C_8 = C_{15} = C_{24} = \dots$$

$$C_{\alpha-2} \equiv C_7 = C_{14} = C_{23} = C_{34} = \dots$$

$$C_{\alpha-3} \equiv C_{13} = C_{22} = C_{33} = C_{46} = \dots$$

$$C_{\alpha-4} \equiv C_{21} = C_{32} = C_{45} = C_{60} = \dots$$

⋮

⋮

(iv) $\ell = m(m+1) - n$ (但し $m \geq n+1$)

例

$n=1$: 5, 11, 19, 29, 41,

$n=2$: 10, 18, 28, 40, 54,

$n=3$: 17, 27, 39, 53, 69,

井上政義

$n=4 : 26, 38, 52, 68, 86,$

$\vdots$
 $\vdots$

定理 VI より

$$C_{\beta-1} \equiv C_5 = C_{11} = C_{19} = C_{29} = \dots$$

$$C_{\beta-2} \equiv C_{10} = C_{18} = C_{28} = C_{40} = \dots$$

$$C_{\beta-3} \equiv C_{17} = C_{27} = C_{39} = C_{53} = \dots$$

$$C_{\beta-4} \equiv C_{26} = C_{38} = C_{52} = C_{68} = \dots$$

$\vdots$
 $\vdots$

以上を纏めてみると、

$$\begin{array}{cccccccccccccccccccc} \ell & : & \textcircled{1} & \textcircled{2} & 3 & \textcircled{4} & 5 & \textcircled{6} & \underbrace{7 \quad 8} & \textcircled{9} & \underbrace{10 \quad 11} & \textcircled{12} & 13 & \underbrace{14 \quad 15} & \textcircled{16} \\ \text{分類} & : & \text{i} & \text{ii} & \text{iii} & \text{i} & \text{iv} & \text{ii} & \text{iii} & \text{i} & \text{iv} & \text{ii} & & \text{iii} & & \text{i} \\ C_l & : & \alpha & \beta & \alpha-1 & \alpha & \beta-1 & \beta & \alpha-2 & \alpha-1 & \alpha & \beta-2 & \beta-1 & \beta & \alpha-3 & \alpha-2 & \alpha-1 & \alpha \end{array}$$

次に実際に C_l の数値を求めてみよう。それには、 $C_\alpha, C_{\alpha-1}, C_{\alpha-2}, C_{\alpha-3}$
 $\dots$ と $C_\beta, C_{\beta-1}, C_{\beta-2}, C_{\beta-3}, \dots$ の二つのシリーズを計算しておけば良い。

$C_{\alpha-n}$ の計算

(i) $C_\alpha = 1$: 定理 III より

(ii) $C_{\alpha-1} = 6$

証

$$C_{\alpha-1} \equiv C_3 = \begin{array}{c} \circ \\ | \\ \circ - \circ \end{array} + \circ - \circ - \circ = 6$$

(iii) $C_{\alpha-2} = 22$

証

$$C_{\alpha-2} \equiv C_7 = \begin{array}{c} \circ - \circ - \circ \\ | \quad | \quad | \\ \circ - \circ - \circ \\ | \quad | \quad | \\ \circ - \circ - \circ \end{array} + \begin{array}{c} \circ - \circ - \circ \\ | \quad | \quad | \\ \circ - \circ - \circ \\ | \quad | \quad | \\ \circ - \circ - \circ \end{array} + \begin{array}{c} \circ - \circ - \circ \\ | \quad | \quad | \\ \circ - \circ - \circ \\ | \quad | \quad | \\ \circ - \circ - \circ \end{array} + \begin{array}{c} \circ - \circ - \circ \\ | \quad | \quad | \\ \circ - \circ - \circ \\ | \quad | \quad | \\ \circ - \circ - \circ \end{array} = 22$$

(iv) $C_{\alpha-3} = 68$

(証)

$$C_{\alpha-3} \equiv C_{13} = \begin{array}{c} \text{---} \text{O} \\ \text{---} \text{O} \\ \text{---} \text{O} \\ \text{---} \text{O} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \text{O} \\ \text{---} \text{O} \\ \text{---} \text{O} \\ \text{---} \text{O} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \text{O} \\ \text{---} \text{O} \\ \text{---} \text{O} \\ \text{---} \text{O} \end{array} = 28 + 32 + 8 = 68$$

(v) $C_{m(m+1)+1} = C_{(m+1)^2-m} = C_{\alpha-n}$

この式から解るように $C_{m(m+1)+1}$ の $m = 1, 2, 3, 4, \dots$ の場合を計算すれば、それぞれ $C_{\alpha-1}, C_{\alpha-2}, C_{\alpha-3}, C_{\alpha-4}, \dots$ が得られる。これを用いて、 $C_{\alpha-n}$ のシリーズを求めるのも興味ある方法である。[前の論文 [I] で最高巾の一般項についてこの論文 [II] で述べると予告しましたが、その後、グラフを数え落していたことがわかり現在そのことについて研究中です。]

式 (v) を用いる不等式が得られる。

$n \geq 6$ の場合 (則ち、 $m \geq 6$)

$$C_{m(m+1)+1} = \begin{array}{c} m \\ \text{---} \end{array} \left\{ \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right\} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \dots$$

$$= 2(4m+2) + 2_4 C_1(4m-4) + 2_4 C_2(4m-10)$$

$$+ 2_4 C_3(4m-16) + 2 \cdot (4m-22) + \dots$$

$$= 128m - 320 + f(m) \quad f(m) > 0$$

$$\therefore C_{\alpha-n} > 128n - 320 \quad \text{但し } n \geq 6$$

$C_{\beta-n}$ の計算

$C_{\alpha-n}$ の場合と同様にして次の結果が得られる。

(i) $C_{\beta} = 2$

(ii) $C_{\beta-1} = 8$

(iii) $C_{\beta-2} = 30$

(iv) $C_{\beta-3} = 88$

(v) $C_{m^2+1} = C_{m(m+1)} - (m-1) = C_{\beta-n}$

より

$$C_{\beta-n} > 64n - 256 \quad \text{但し } n \geq 6$$

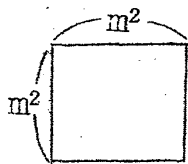
井上政義

§ 3 $b_l > 0$

Ursell展開を用いる、古典気体の凝縮理論はMayer 等によつて初めて論ぜられた。その後、多くの著者達によつてこの方法は発展させられた。例えば K. Ikeda⁽²⁾ は、体系の体積に依存しない系のクラスター積分を b_l^0 とすればすべての l に対して b_l^0 が正であること、 $l \rightarrow \infty$ のとき、 $(b_l^0)^{1/l}$ の極限值 $b_0^0 (> 0)$ が存在すること、および級数 $\sum_{l=1}^{\infty} l b_l^0 Z_S^l (=v_S^{-1})$ が収束すること〔但し $Z_S = (b_0^0)^{-1}$ 〕を仮定したうえで、厳密な凝縮理論を詳細に論じた。しかしながら、これら b_l に関する尤もらしい仮定については、未だ充分な証明はなされていない。〔最近、J. Ginibre⁽³⁾によつてバナッハ空間のテクニックを用いた、クラスターの性質に関する研究がなされた。しかし相互作用として、斥力の場合しか論じていない。〕我々は、十分に低い温度以下で、 $b_l > 0$ なることの証明を二次元正方格子気体について試みたが、以下に述べるような結果しか得られなかつた。

$l = m^2 \gg 1$ の場合

$$\begin{aligned} b_{m^2} &= f^{2m(m-1)} + \sum_{n=0}^{2m(m-1)-1} b_{m^2 n} f^n \\ &> f^{2m(m-1)} - \sum_{n=0}^{2m(m-1)-1} |b_{m^2 n}| f^n \end{aligned} \quad (1)$$



$l = m^2$ なるグラフは全てこの中に 入るから、

$$|b_{m^2 n}| < m^4 H_{m^2} = \frac{(m^4 + m^2 + 1)!}{m^2! (m^4 - 1)!}$$

$m \gg 1$ としてスターリングの公式を用いると、

$$\simeq m^{2m^2}$$

$$\therefore |b_{m^2 n}| < m^{2m^2} \quad (2)$$

(2)式を(1)式に代入すれば、

$$\begin{aligned} b_{m^2} &> f^{2m(m-1)} - \sum_{n=0}^{2m(m-1)-1} m^2 m^2 f^n \\ &= f^{2m(m-1)} - m^2 m^2 \frac{1 - f^{2m(m-1)}}{1 - f} \end{aligned} \quad (3)$$

十分に低温のとき、 $f = e^{-v/kT} - 1 \gg 1$ {但し、 k : ボルツマン定数、 v : 相互ポテンシャル、 T : 絶対温度}であるから、(3)式より

$$\begin{aligned} b_{m^2} &> f^{2m(m-1)} - m^2 m^2 \cdot f^{2m(m-1)-1} \\ &= f^{2m(m-1)-1} (f - m^2 m^2) \end{aligned} \quad (4)$$

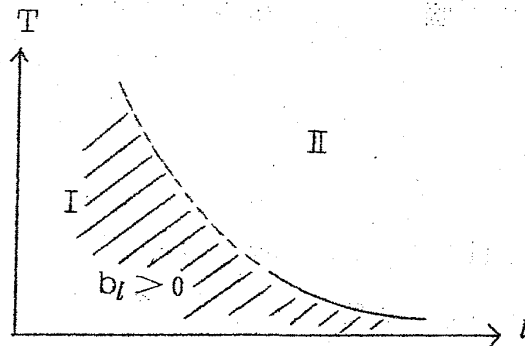
十分に低温であるから、

$$e^{-v/kT} - 1 \simeq e^{-v/kT} \quad \text{とすれば}$$

(4)式より

$$T < \frac{1}{l \ln l} \cdot \frac{(-v)}{k} \quad (\text{但し } l = m^2)$$

なるとき $b_l > 0$ である。



領域 I : 必ず $b_l > 0$

領域 II : $b_l > 0$ or $b_l \leq 0$

則ち、 $b_l = 0$ の温度を T_l^0 とすれば

$$T_l^0 > \frac{1}{l \ln l} \cdot \frac{(-v)}{k} \equiv T_l' \quad (5)$$

井上政義

T_l は、 $l \rightarrow \infty$ のとき $T_l \rightarrow 0$ となり、凝縮理論の仮定の証明としては甚だ不十分である。

(注) $l \neq m^2$ なる場合も、本質的に同様である。また、最高巾の係数は論文 [I] で導入した係数 C_s^n の一部にもなっている。

§ 4 主に寄与するグラフ

前の論文 [I] より b_{ln} は

$$b_{ln} = \sum_{s=0}^{2n} (-1)^{l-s} C_s^n s H_{l-s} \quad (1)$$

但し ${}_0H_l = \frac{1}{l}$ と約束

ここで $s H_{l-s}$ は

$$s H_{l-s} = \frac{(\ell-1)!}{s! (\ell-s)!} = \frac{1}{s!} (\ell-1) \cdot (\ell-2) (\ell-3) \cdots (\ell-s-1)$$

$s=0 \sim 2n$ であるから、(但し ${}_0H_l = \frac{1}{l}$ と約束)

$\ell \gg 2n$ の場合、 $s H_{l-s}$ のうち、 $s=2n$ の項が、他の項よりも著しく大きくなる。従つて、 $\ell \gg 2n$ なる場合は、 C_s^n のうち、 C_{2n}^n なる項の寄与が最も大きい。グラフで言えば、"大きいボンド" が n 本である基本グラスターのうち、それを構成する粒子が最大 ($2n$ 個) である基本グラスターによる寄与が最も大きいこととなる。

結び：

論文 [I] の題名、"Evaluation Method and Characters of Cluster Sums for the Lattice Gas" をこの論文 [II] では、"格子気体のクラスターサム" と変更しましたことを、お詫びします。

終りに、御指導下さつた、池田先生、有益なディスカッションをして下さつた、庄司先生や庄司研の皆様に感謝します。

References

- (1) S. Katsura, Progr. Theoret. Phys. **20**, 192 (1958)

(2) K. Ikeda, Progr. Theoret. Phys. **19**, 653 (1958)

(3) J. Ginibre, J. Math. Phys. **6**, 252 (1965)