

現代应用数学丛书

结晶统计与代数

〔日〕伏見康治 庄司一郎 著

上海科学技术出版社

54.9
232

現代应用数学丛书

结晶统计与代数

〔日〕 伏見康治 著
庄司一郎

孙 澤 瀛 譯
張 宗 燧 校

上海科学技术出版社

內 容 提 要

本书是日本岩波书店出版的现代应用数学丛书之一的中譯本,介紹將代数学应用到晶体的秩序化現象上去的一些理論。全书共分三章,前二章叙述一些基本概念及有关表里变换、Y- Δ 变换的理論,第三章介紹代数的解法。可供高等学校数学系、物理系师生及科研工作者作参考。

现代应用数学丛书

結 晶 统 計 与 代 数

原 书 名 結晶統計と代数

原 著 者 (日) 伏見 康治
庄 司 一 郎

原出版者 岩波书店 1957

譯 者 孙 澤 瀛

校 者 張 宗 懋

*

上海科学技术出版社出版

(上海瑞金二路450号)

上海市书刊出版业营业许可证出 093 号

新华书店上海发行所发行 各地新华书店經售

商务印书館上海厂印刷

*

开本 850 $\times$ 1168 1/32 印张 1 28/32 字数 42,000

1962年12月第1版 1962年12月第1次印刷

印数 1-3,600

統一书号: 13119 · 488

定 价: (十四) 0.34 元

出版說明

这一套书是根据日本岩波书店出版的“現代应用数学讲座”翻譯而成。日文原书共 15 卷 60 册,分成 A、B 兩組,各編有序号。現在把原来同一題目分成兩册或三册的加以合并,整理成 42 种,不另分組編号,陸續翻譯出版。

这套书涉及的面很广,其內容都和現代科学技术密切有关,有一定参考价值。每一本书收集的資料都比較丰富,而叙述扼要,篇幅不多,有利于讀者以較短時間掌握有关学科的主要內容。虽然,这套书的某些观点不尽适合于我国的情况,但其方法可供参考。因此,翻譯出版这一套书,对我国学术界是有所助益的。

由于日文原书是 1957 年起以讲座形式陸續出版的,写作時間和篇幅的限制不可避免地会影响原作者对內容的处理,为了尽可能地减少这种影响,我們在每一譯本中,特請譯者或校閱者撰写序或后記,以介紹有关学科的最近发展状况,并对全书內容作一些評价,提出一些看法,結合我国情况补充一些資料文献,在文內过于簡略或不足的地方添加了必要的注釋和改正原书中存在的一些錯誤。希望这些工作能对讀者有所帮助。

承担翻譯和校閱的同志,为提高书籍的质量付出了巨大劳动,在此特致以誠摯的謝意。

欢迎讀者对本书提出批評和意見。

上海科学技术出版社

目 录

出版說明

第1章 緒 論	1
§ 1 Boltzmann 因子, 状态和, 热力学的平均值	1
§ 2 Ising 模型, 矩陣方法, 一維結晶	6
第2章 表里变换, $Y-\Delta$ 变换	13
§ 3 表里变换	13
§ 4 $Y-\Delta$ 变换	17
§ 5 籠眼格子	19
第3章 代数的解法	25
§ 6 二維四角格子之矩陣	25
§ 7 抽象代数的說法	27
§ 8 表里变换	28
§ 9 2^n 維的代数, 自旋表現	31
§ 10 由 p, q 所成的 V 之表現	34
§ 11 各种代数量	35
§ 12 各种代数关系	38
§ 13 特征值問題之解法	42
§ 14 状态和及热力学的各种量	50
参考文献	53
校后記	55

第1章 緒 論

§1 Boltzmann 因子, 状态和, 热力学的平均值

与保持绝对温度 $T^{\circ}\text{K}$ 的恒温槽作热接触的平衡体系, 其呈现能量 E 的‘状态’概率是与

$$\exp(-E/kT) \quad (1.1)$$

成比例的。这里的 k 是 Boltzmann 常数, 其数值是 1.38×10^{-16} (erg/度)。(1.1) 称为 Boltzmann 因子。如果这个状态处于简并(degeneration)的情况, 那就是说, 有好些个状态共有同一能量值 E 的情况, 这时, 对于这些状态的全体, 在(1.1)之前不能不用状态总数 g 去乘。 g 称为这时的统计权重(statistical weight)。

作为概率而言, Boltzmann 因子还不是归一化的, 真正的概率应该是就所有的状态归并而得的

$$Z(T) \equiv \sum_i \exp(-E_i/kT) \quad (1.2)$$

去除(1.1)。由(1.2)规定的 Z 叫做状态和, 我们知道体系的热力学性质可归结到 Z 的函数形式中去考虑。其最显明的例证从求体系的能量平均值就可看出:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{\sum_i E_i \exp(-E_i/kT)}{Z(T)} \\ &= - \frac{\partial}{\partial(1/kT)} [\log Z(T)]. \end{aligned} \quad (1.3)$$

这就是说, 能量平均值是由状态和关于温度的倒数作对数微分而得到的。从此, 我们还知道体系之热容量 C 是由下式给定的:

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{k}{T^2} \frac{\partial^2}{\partial(1/kT)^2} [\log Z(T)]. \quad (1.4)$$

如果考虑的体系规定为力学系, 那就不能不指定若干个参数

值。例如在气体的情况下，容纳气体的容器之体积 V 就成为问题了（就力学来讲，这个容器之详细描述，例如说，是正六面体，其三棱之长是 a, b, c 等，是必要的；就讨论热平衡的统计力学来讲，只有积 $V = abc$ 才是起着作用的）。设有一个参数是 x ，限定它缓慢地、准静地 (quasi-static) 而且绝热地 (adiabatic) 只变化 dx 时，外部对于这个体系所作的功写作 Xdx ，那么， X 可以看成是沿参数 x 之增长方向所加的“力”。根据统计力学所教示的，力 X (其平均值) 可从状态和的知识利用

$$X = -kT \frac{\partial}{\partial x} [\log Z(T)] \quad (1.5)$$

而求得。参数 x 包含在規定状态和的各个能量值 E_i 之中。试就特殊情况来考虑，例如说，容纳气体的容器之体积 V 增加了 dV (即膨胀)，这时对于气体所作的功 (将上述一般定义中的符号改换一下) 写成 $-PdV$ ，这里的系数 P 特别称做压力，这压力可由公式

$$P = +kT \frac{\partial}{\partial V} [\log Z(T)] \quad (1.6)$$

求出。再例如磁性体。设磁矩为 M ，使其产生这样的磁化所必需的外部磁场之强度为 $\mathfrak{H}$ ， $-Md\mathfrak{H}$ 是磁场增强情况下所出现的能量。这时相当于 (1.5) 我们有形式

$$M = +kT \frac{\partial}{\partial \mathfrak{H}} [\log Z(T)] \quad (1.7)$$

由于从 (1.3) 与 (1.5) 两式可以推导出体系的全部热力学性质，所以讨论统计力学归结为计算状态和 Z 。要求状态和，首先对所考虑的物质体系制订出适当的力学模型是必要的，由此，确定能量的特征值 E_i 。前一阶段的事属于整个物理学的问题，从决定了力学结构 (亦即决定体系的 Hamilton 函数) 因而确定能量特征值 E_i ，这件事属于力学，特别是量子力学的课题。因此，我们可以这样讲，统计力学所从事的是利用数学来处理状态和的总和。

在計算状态和时, 有二項規則, 利用了它們, 有时可使問題簡單化。这二項規則

(i) 如果一个体系的状态經分类后, 可以分成二部分, 則体系全体之状态和可以用各个部分的状态和加在一起所成的和来表示:

$$Z(T) = Z'(T) + Z''(T). \quad (1.8)$$

(ii) 如果一个体系实际上是由二个体系合成的, 部分体系間的相互作用可以忽視的話, 則可由各个部分系之状态和所成乘积得到合成系的状态和:

$$Z(T) = Z_1(T) \cdot Z_2(T). \quad (1.9)$$

从以上二个規則看来, 状态和恰好具有概率同样的性质。特別就合成体系而論, 虽說部分体系間有能量的授受关系, 事实上, 部分体系的状态間是相关的, 在概率上它們并不是独立的, 但对状态和而言, 恰如独立事件的概率一样地去处理就成了。

合成系的能量 E 是部分系的能量 $E^{(1)}, E^{(2)}$ 之和, 如注意到指数函数的相乘: $\exp(-E/kT) = \exp(-E^{(1)}/kT) \exp(-E^{(2)}/kT)$, 則(1.9)馬上就可推导出来。

在处理所謂理想气体以及其他理想体系时, 規則(1.9)肯定地是一项有力的武器。理想气体是分子的集合, 它是这样一种体系: 对于分子本身具有的能量而論, 可以忽視分子間相互作用的能量。这时如果多次地使用規則(1.9), 則含有 N 个分子的气体, 其全体之状态和 $Z^{(N)}$ 就是一个分子的状态和 $Z^{(1)}$ 的 N 乘方:

$$Z^{(N)}(T) = [Z^{(1)}(T)]^N. \quad (1.10)$$

这里, 即使分子总数 N 是 Avogadro 数 6.02×10^{23} 这样程度的大数, 求状态和时, 也并不費很大的事。

即使体系各分子間的相互作用是显著的, 由于改变一下看法, 有时可以把原体系当作一种理想体系来考虑。例如, 研究晶体格

子的热运动时,虽说分子間的相互作用很显著,不能忽视,但根据微小振动理論,仅限于靠近晶体格子平衡点的运动而論,它可以看成标准振动形态的重合,因此,不妨当做独立振动系的合成去处理。

但是还有这样的体系,无论怎样改变看法,总不能看成理想体系或其近似的体系。单糾纏在这种体系的处理方法,因为没有好办法,就說搞不好是不对的,事实上这体系在本质上是和理想体系有差异的。到底所謂本质上的差异从何处体现出来?首先出现在热容量的异常現象。

根据公式(1.4),热容量 C 是状态和的对数經二回微分得出的。如果体系是理想体系,状态和采取(1.10)的形式,应看成 ∞ 的大数 N 使得全体成为这样的大数,这时提出 C 的函数形式成为沒有意义,因此,只有在有限的 $Z^{(1)}(T)$ 时 C 的函数形式才可确定。由于 $Z^{(1)}(T)$ 单是指数函数的和(即使是无穷項的和,但通常是收斂的),而指数函数的解析性质是已知的,它的变化是平稳的。

但是实际的物质体系,其热容量作为温度的函数而論,出現奇异点的情况并不算少。

有关这种奇异点所熟知的例子,有随伴着融解或蒸发(所謂相轉移)的潜热現象。在进行融解或蒸发时,由于加热而体系的温度不变,所以可倒过来讲,体系的内部能量 E 作为温度的函数看待是阶段上升的,由 E 經微分而得的热容量 C 呈現出 δ -函数^①的奇异点。

較近发现的热容量之奇异性和上述 δ -函数的变化比較起来是略为平稳的,有时在某一温度热容量曲綫的变化是急遽上升,过

① δ -函数 $\delta(x)$ 按照函数的正規意义讲来,并不是真正的函数,它是为了应用上的便利,作为使用的一种工具而已。首先是由 Dirac 使用的,形式上,它当做不連續函数 $\varepsilon(x)$ 的导函数而規定的,这里的 $\varepsilon(x)$ 滿足 $\varepsilon(x)=0$ ($x<0$), $\varepsilon(x)=1$ ($x\geq 0$)。可以考虑到 $\delta(x)$ 在 $x=0$ 时是 ∞ ,在其他各处取0值。——譯者注

此以后, 突然地降落下来, 这种现象主要从固体的观测中得到。最明显的例子是强磁性体靠近 Curie 点^①的热容量之异常性。就铁 Fe 来讲, 其 Curie 点在 1043°K ($=770^{\circ}\text{C}$), 超过这温度铁的强磁性质就失去, 同时在这一温度上, 比热的异常现象就出现如上述的情况。另一个典型的例子是出现在黄铜的比热之异常现象。铜 Cu 与锌 Zn 以一原子对一原子的比例所合成的 β -黄铜^②, 其热容量作为温度的函数看待时, 在 730°K 处发生上述意义的异常现象。根据 X-射线的绕射研究知道这种异常现象是由于在合金的品格上出现铜原子与锌原子交互排列的有秩序状态与无秩序状态的交替而引起的。

这种热容量曲线的异常现象, 其形象有如希腊字母 λ , 总称之为 λ -现象。这种曲线的异常性就数学而论到底是怎样一回事? 其突起之处是否无穷尽地延伸出去? 或者是虽有突起之处, 但是有限的, 只不过存在着有限的出入? 这些问题根据实验还不能明白地解答。无论怎样一种情况, 对于象蒸发那样有关潜热的第一种相变化, 我们称这种有关热容量异常性的相变化为第二种相变化。

第一种相变化也好, 第二种相变化也好, 反正具有象热容量之奇异点的那些体系不是理想体系。那是由于某种分子间的强相互作用所引起的, 不能从近似于理想体系的出发点去进行讨论。这时的现象应该说是相互作用成为主要的因素, 一个分子的状态变化时, 通过相互作用引起其他分子的状态变化, 由于这种变化的传递, 最后引起物质全体的显著的变化, 随着这样的变化可以想象到有許多能量被吸收了。这种现象总称之为协调现象 (cooperative phenomena)。

① 所谓 Curie 点即磁性变点。——译者注

② 呈现变点性质的一种黄铜。——译者注

說明協調現象的理論，完全不能使用有关状态和之乘积定理，因此，在数学上是一桩困难的事。但是在十几年前，久保亮五，Kramers-Wannier 等人为了处理結晶的統計力学，創立了‘矩陣方法’与‘特征值問題的方法’，总算有了解决問題的数学工具，L. Onsager 在这基础上，成功地求得了象平面四角晶格的 Ising 模型这类特殊問題的严密解。原作者（指伏見康治，庄司一郎）以及 Houtapfel, Temperley 等人对于不同的晶体格子型处理了类似的問題。还有 Kac 与 Ward 对于四角格子的問題在采用的方法上和上述諸人完全不同，利用組合論的方法求解，达到了同样的結果。

以上是在不考虑外部磁場的情况下求解的，对于外部磁場的强度 $\mathfrak{S}$ 是有限的，問題就变得非常复杂，还不能求解。然而对于强磁性物质的特性，自发磁性，亦即把外部磁場的强度当做 0 时所殘留下来的磁矩

$$I = \lim_{\mathfrak{S} \rightarrow 0} kT \frac{\partial \log Z(T)}{\partial \mathfrak{S}},$$

利用摄动論的方法，O. N. Yang（譯者按：即楊振宁）把它求出来了。其論述是非常复杂的，本书內无法提到，但結果是非常简单的。注意到这种简单性，Potts 从对称性的考虑出发，把这项結果扩充到三角格子，納（譯者注：日本人名）更扩充到蜂巢格子（按即六角格子）以及如籠眼型的平面晶格，获得了圓滿的結果。

§2 Ising 模型，矩陣方法，一維結晶

以下的討論完全是关于强磁性体的 Ising 模型，首先，对它进行說明。

为了說明物质的强磁性，有 Heisenberg 的学說，就简单情况加以叙述，則先假定晶格各格子点上的原子分别具有自旋（spin）。

自旋可用 2 行 2 列的矩陣向量 $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 来表示;

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1, \quad \sigma_x \sigma_y = i \sigma_z, \quad \sigma_y \sigma_z = i \sigma_x, \quad \sigma_z \sigma_x = i \sigma_y,$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

作为晶格全体的自旋系所具有的能量, 可考虑形式

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \cdot \sigma_j. \quad (2.2)$$

σ_i 是第 i 个格子点原子的自旋量, J_{ij} 被称为作用于 i 原子和 j 原子間的交換能量。由于在多数情况下, 只有直接相邻的原子間才有 J_{ij} , 所以上述的 H 式內的总和是对于一切相邻的原子对进行的。此外, 对于从外部以磁場 $\mathfrak{H}$ 沿 z 方向作用于物体的情况, 則上述的 Hamilton 函数可扩充为形式

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \cdot \sigma_j - \nu \mathfrak{H} \sum_i \sigma_{zi}. \quad (2.3)$$

無論是那一种 Hamilton 函数, 要严密地求其特征值, 是非常困难的。在有 N 个原子存在的情况下, 必須把 2 行 2 列的矩陣代数改变成 N 个直积所成的复杂代数去处理。

虽说上述的 Heisenberg 学說已經把問題简单化了, 而且构成一个模型, 但 Ising 模型把問題更簡化了。它是这样的: 把量子力学的变量 σ (即矩陣量) 用古典的变数 μ 去代換。不过这时要假定 σ 之 z 支量 σ_z 的特征值相当于 ± 1 , μ 是只有二个数值 $+1$ 与 -1 的变数。这时, 为了說明自旋間相互作用的項, 讓我們只取出一对自旋来考虑。

$\sigma_1 \cdot \sigma_2$ 之特征值是 1 与 -3 , 前者是三重簡并, 后者是一重簡并。如用通俗的話来讲, 前者相当于二个自旋处于平行的情况, 后者相当于自旋处于逆平行、整个自旋成为 0 的情况。使用古典的自旋变数 μ_1 与 μ_2 , 相互作用的項以 $-J\mu_1\mu_2$ 表示, 这就是 Ising 模型, 这个 $\mu_1\mu_2$ 之“特征值”是 $+1$ 和 -1 , 其統計权重同为 $2(\mu_1$

$=\mu_2=1$ 或 $\mu_1=\mu_2=-1$ 时, $\mu_1\mu_2=+1$; $\mu_1=-\mu_2=1$ 或 $\mu_1=-\mu_2=-1$ 时, $\mu_1\mu_2=-1$). 因此, 就特征值的全体而論, 其个数以及特征值的先驗 (a priori) 平均值在 Heisenberg 学說与 Ising 学說看来是相同的, 但就个别的特征值而論, 两种說法間有相当的差別。如果同时考虑一对以上的交互作用, 則由于大体上不是交換的原故, 討論是非常繁难的, 不能对两学說进行简单的比較。

假設我們容許如上述那样和“真实”的理論略有一点差距的說法, 則在 Ising 模型里假定强磁性体的能量采取形式

$$E(\cdots\mu_i\cdots) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mu_i \mu_j - \nu \sum_i \mu_i. \quad (2.4)$$

第一总和是就所有的相邻原子而言, 所有的 μ_i 是任意独立地取 ± 1 这两个数值。因此, 在 Ising 模型里, Hamilton 函数的特征值問題是解决了, 剩下的問題是关于如何实际进行統計力学状态和的总和

$$Z(T) = \sum_{\{\mu=\pm 1\}} \exp(-E\{\mu\}/kT). \quad (2.5)$$

其次試討論所謂的一維物质。这是通过某一单位胞反复运行构成一維联系的东西。表示一个单位力学系之状态的变数 (不一定考虑 Ising 模型) 記作 x 。因此, 这单位系的能量自然可看成 x 的函数而写为 $E(x)$ 。相邻的单位系間引起的相互作用写成 $F(x_1, x_2)$, 是二个变数的函数。分离的单位系間假定不发生作用。在这样的假定下, 单位系由某处到某处串联而成的鎖状体系全体的能量应取如下的形式:

$$E = \cdots + E(x_1) + F(x_1, x_2) + E(x_2) + F(x_2, x_3) + \cdots. \quad (2.6)$$

把它写在指数函数的右肩上, 对各 x 进行总和就求得了状态和。

这时如果 x 是 x_2 , 就关于 x_2 进行求和, 我們注意到含有 x_2 的項数明显地很少。因此如令

$$M(x_2, x_3) = \exp \left\{ -\frac{E(x_2) + F(x_2, x_3)}{kT} \right\}, \quad (2.7)$$

則所求的狀態和有形式

$$Z = \sum_{x_1, x_2, \dots} \dots M(x_1, x_2) M(x_2, x_3) M(x_3, x_4) \dots \quad (2.8)$$

這就是說, 如果把 $M(x', x'')$ 看成是 x' 和 x'' 所構成的矩陣元素, 那麼, 狀態和之總和與矩陣乘法里出現的總和是同樣性質的。為了在表面上看出計算處理的技巧而並不影響到本質, 我們把一維物質的頭和尾連串起來組成環狀形態來處理。

這樣進行的話, 上式最後的因子是 $M(x_n, x_1)$, 而 Z 可寫成

$$Z = \text{Trace}(M^n). \quad (2.9)$$

這裡的 M 是以 $M(x_1, x_2)$ 等作為元素的矩陣, M^n 是在矩陣乘法的意義上所構成的 n 乘方, 還有符號 Trace 表示迹, 那就是矩陣的對角元素之和。

採取了如上的形式, 那麼, 無論 n 有多大, Z 之計算不會是困難的。具體地講, 如把 M 化為對角矩陣

$$S^{-1}MS = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix},$$

根據迹的對稱性, 有

$$\begin{aligned} Z &= \text{Trace}((S^{-1}MS)^n) = \text{Trace} \begin{pmatrix} \lambda_1^n & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \lambda_2^n & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \lambda_3^n & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \\ &= \lambda_1^n + \lambda_2^n + \lambda_3^n + \dots \end{aligned} \quad (2.10)$$

如把 M 的特徵值中最大的記作 λ_1 , 在 $n \rightarrow \infty$ 時, Z 可估計為

$$Z \simeq \lambda_1^n. \quad (2.11)$$

因此, 問題歸結為求 M 的最大特徵值。

上面所寫的 M 並不是對稱矩陣, 但使它對稱化也很簡單; 把

$$\exp \left[- \left\{ \frac{1}{2} E(x_1) + F(x_1, x_2) + \frac{1}{2} E(x_2) \right\} / kT \right] \quad (2.12)$$

考慮成 $M(x_1, x_2)$ 這樣的矩陣元素就可以了。因此， M 的特徵值問題一定是可解決的。

現在我們試以這種‘矩陣方法’適用於原子排成一列、各原子的自旋變數是 μ 的情況。對於 $\mu_1, \mu_2 = \pm 1$ ，考慮以

$$M(\mu_1, \mu_2) = \exp(h\mu_1 + H\mu_1\mu_2), \text{ 這裏的 } h = \frac{\nu\mathfrak{S}}{kT}, H = \frac{J}{kT}$$

作為元素的矩陣。詳細寫出的話，那就是

$$\begin{aligned} M &= \begin{pmatrix} M(+1, +1) & M(+1, -1) \\ M(-1, +1) & M(-1, -1) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{h+H} & e^{h-H} \\ e^{-h-H} & e^{-h+H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^h & 0 \\ 0 & e^{-h} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^H & e^{-H} \\ e^{-H} & e^H \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

特徵方程是

$$\begin{vmatrix} e^{h+H} - \lambda & e^{h-H} \\ e^{-h-H} & e^{-h+H} - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

其較大的特徵根是

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= e^H \cdot \cosh(h) + \sqrt{e^{2H} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2H)} \\ &= e^H \cosh(h) + \sqrt{e^{2H} \sinh^2(h) - e^{-2H}}. \end{aligned}$$

這式的 n 乘方就是狀態和 Z 。因此，這種一維磁性體的能源與磁距是可以計算的：

$$E = -n \frac{\partial \log \lambda_1}{\partial (1/kT)} = -nJ \frac{\partial \log \lambda_1}{\partial H} - n\nu\mathfrak{S} \frac{\partial \log \lambda_1}{\partial h}, \quad (2.14)$$

$$\begin{aligned} M &= +nkT \frac{\partial \log \lambda_1}{\partial \mathfrak{S}} = n\nu \frac{\partial \log \lambda_1}{\partial h} \\ &= n\nu \frac{\sinh(h)}{\sqrt{\sinh^2(h) + e^{-4H}}}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

為了以後處理更複雜情況的方便起見，我們引進兩個作用於 μ 之函數的運算子：

$$(Cf)(\mu) = f(-\mu), \quad (sf)(\mu) = \mu f(\mu). \quad (2.16)$$

这些运算符如用矩陣表示的話, 則可写成

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

由于有

$$C^2 = 1, \quad s^2 = 1, \quad Cs = -sC \quad (2.18)$$

的原故, 所以 $1, s, C, isC$ 构成和 Hamilton 四元数或 Pauli 之自旋矩陣 $1, \sigma_z, \sigma_x, \sigma_y$ 完全同构的代数之基底。使用了这样两个矩陣, 則前面出現过的矩陣可写成如下的形式:

$$\begin{pmatrix} e^h & 0 \\ 0 & e^{-h} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cosh(h) + \sinh(h) & 0 \\ 0 & \cosh(h) - \sinh(h) \end{pmatrix} \\ = 1 \cdot \cosh(h) + s \cdot \sinh(h) = \exp(hs), \quad (2.19)$$

$$\begin{pmatrix} e^H & e^{-H} \\ e^{-H} & e^H \end{pmatrix} = 1 \cdot e^H + C \cdot e^{-H} \\ = \{2 \sinh(2H)\}^{1/2} \cdot [\cosh(H^*) + C \sinh(H^*)] \\ = \{2 \sinh(2H)\}^{1/2} \exp(H^*C), \quad (2.20)$$

但

$$\sinh(2H) \cdot \sinh(2H^*) = 1, \quad e^{-2H} = \tanh(H^*), \\ e^{-2H^*} = \tanh(H). \quad (2.21)$$

因此, 在我們所考慮的特征值問題里出現的矩陣 M 可写为

$$M = (2 \sinh(2H))^{1/2} \exp(hs) \cdot \exp(H^*C) \\ = (2 \sinh(2H))^{1/2} \cdot M'.$$

这里的 M' 可以表示成一个指数函数的形式。事实上,

$$M' = (\cosh(h) + \sinh(h)s)(\cosh(H^*) + \sinh(H^*)C) \\ = \cosh(h)\cosh(H^*) + \sinh(h)\cosh(H^*)s \\ + \cosh(h)\sinh(H^*)C + \sinh(h)\sinh(H^*)sC \\ = \cosh(\Gamma) + \sinh(\Gamma) \cdot [\alpha s + \beta C + i\gamma sC],$$

但这里

$$\cosh \Gamma = \cosh h \cdot \cosh H^*, \\ \sinh \Gamma \cdot \alpha = \sinh h \cdot \cosh H^*,$$

$$\begin{aligned}\sinh \Gamma \cdot \beta &= \cosh h \cdot \sinh H^*, \\ i \sinh \Gamma \cdot \gamma &= \sinh h \cdot \sinh \bar{H}^*.\end{aligned}$$

我們知道 Hamilton 的四元数是为了表現剛体的旋轉而引进的, 如果把 s, C, isC 考虑成三維空間的直交軸, 那么, 上面的式子就表示了如下的事实: 圍繞 s 軸旋轉一个虛角 $2hi$, 再圍繞 C 軸轉虛角 $2H^*i$, 其結果和圍繞 $\alpha s + \beta C + \gamma(isC)$ 所成的方向轉一个虛角 $2i\Gamma$ 是一样的。

由于 $(\alpha s + \beta C + i\gamma sC)^2 = 1$, M' 之特征值是 $\exp(\pm \Gamma)$, 所求的最大特征值 λ_1 是

$$\lambda_1 = (2 \sinh(2H))^{1/2} \exp \Gamma.$$

容易驗證出, 这个結果和以前求得的結果是一致的。

特別当外部磁場是 0, $h=0$ 的情况下,

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= (2 \sinh(2H))^{1/2} e^{H^*} = 2 \cosh(H), \\ \log\left(\frac{\lambda_1}{2}\right) &= \log \cosh(H) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \log [\cosh 2H - \sinh 2H \cos \omega] d\omega, \quad (2.22)\end{aligned}$$

这个結果和以后要提到的 2 維晶格的情况相比較是值得注意的。

無論怎样讲, 当原子如鎖状地排成一列时, 其 Ising 模型中, Z 表現成解析函数 λ_1 的 n 乘方形式, 和 §1 提到的理想体系是相同的, 因而热容量以及其他热力学的量不能只望其具有不連續性, 協調現象也不見得会发生。可以預想到, 設一維物质內某一原子的左方有某种使向上的自旋起作用的措施, 只有通过該原子本身才可以把那效果影响及于右方, 右方的情况为一个原子的搖摆不定性所支配着, 因此, 自旋序列无法向右方进行傳播。与此相反, 在二維(或高維)晶格的情况下, 一个原子的搖摆性为同列的其他原子的自旋影响所抑压, 左方的自旋影响向右方傳播不会受到原子不定性的阻碍, 因而, 可以想象到这时会发生協調現象。