

Title	Spin系の統計力学(統計力学の諸問題シンポジウム,基研短期研究会報告)
Author(s)	桂, 重俊
Citation	物性研究 (1967), 8(2): B60-B62
Issue Date	1967-05-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/86037
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

液体の統計力学としては、前節に述べたように $g(r)$ を求める方法が望ましいが、HNC, P-Y のいずれを選ぶにしても、 $\phi(r)$ を与えて $g(r)$ を求めるのには莫大な数値計算を必要とする。一方、最初からモデルをつくって状態和を求める方法は、計算自体はそれほど難しくないが、モデルの妥当性があやしい。またモデルの中に adjustable なパラメーターが入っていることが多い。両者の中間をとる試みが Wertheim によって試みられている。

彼は (i) 熱力学的無矛盾性, (ii) 臨界温度の存在, (iii) Helmholtz 自由エネルギーの計算が易しい, (iv) adjustable なパラメーターを含まない, という方針で新しい理論を提出した。詳細は原論文を見て頂くことにして、根本の考えはつぎの通りである。Helmholtz 自由エネルギーはエントロピーの項と内部エネルギーの項からなっている。エントロピーは "effective" な hard sphere の大きさ Ω だけでできまり、函数形としては P-Y で得られるものを使う。ただし、 Ω は温度、密度の函数であるとする。一方、内部エネルギーは、(2) 式から求めるが、 $g(r)$ の温度、密度への依存性はすべて Ω を通して起ると仮定する。このようにして出発した結果、割合実験と合う結果が得られている。

Spin 系の統計力学

桂 重 俊 (東北大工)

Heisenberg 模型を主として強磁性、最近接相互作用、 $S = \frac{1}{2}$ の場合を考える。これを tractable な形にするには、1) Pauli operator で表わす、2) Bose operator で表わす。(Oguchi 変換, Maleev 変換等)、3) 2種の Bose operator で表わす (Schwinger, Davis)、4) 2種の Fermi operator で表わす 等の方法がある。2), 3), 4) は何れも交換関係は spin operator の交換関係をみたすが、Trace をとる空間を制限しなければならない。例えば $J = 0$ の極限では、磁場一定、温度 $\rightarrow 0$ の極限では Kinematical interaction は $e^{-\frac{U}{kT}}$ となるが、温度一定、磁場 $\rightarrow 0$ の極限では無限大とな

る。 $J \neq 0$ のとき前者の極限をとったときの kinematical interaction が無視されることは Dyson により論じられているが、有限温度のことは分っていない。なおこれ等の諸表示を理用して Wick の定理を spin 系に拡張する試みが種々行なわれている。

高温低磁場展開としては 1) Kramers-Opechowski の方法, 2) Rushbrooke-Wood の方法, 3) Kubo-Obata-Ohno の方法, 4) Domb-Wood の方法等がある。何れも graph の配位の数数を数えることとその graph についての operator の平均値を求めることに帰せられるが、得られた結果は何れも等価である。方法論的には、1), 2) では multiply connected graph をも数えることを必要とするが、3) ではその必要がなく、4) では更に disconnected graph を数える必要がない。但し irreducible graph だけ数えればよいという理論はまだない。4) により $(1/T)^9$ まで (一次元の場合は $(1/T)^{20}$ までの係数が求められている。反強磁性の場合の状態和には

$$\text{Trace exp}\{(-\beta \sum s_i s_j - \beta \mathcal{K}(\sum s_{\alpha} + \sum s_{\beta}))\},$$

$$\text{Trace exp}\{-\beta \sum s_i s_j\} \exp\{-\beta \mathcal{K}(\sum s_{\alpha} - \sum s_{\beta})\}$$

$$\text{Trace exp}\{-\beta \sum s_i s_j - \beta \mathcal{K}(\sum s_{\alpha} - \sum s_{\beta})\}$$

の 3 つの Hamiltonian が今まで用いられているが、いかなる測定をしたときどの状態和に対応するかは明らかでない。

低温高磁場展開は Hamiltonian の無摂動部分により $T^{3/2}, T^{5/2}, T^{7/2}, T^{9/2} \dots$ の項が出、dynamical interaction により T^4 の項が出る。 T^4 の係数には Dyson により Born 近似によるものと full expression とがおさめられているが前者は  によるもので後者は ladder graph の総和によるものとして導くことが出来る。Morita-Tanaka は 4 次の Green 関数を扱うことによって同じ結果を与えた。

高温、低温、高磁場、低磁場の何れに対しても一応定性的にもっともらしい結果を与える理論を全局的近似という分子場理論、Tjablikov の Green 関数の decoupling による理論等がこれに属する。これ等は何れも Pauli operator が同じ場所に対して反可換であるという性質をとり入れている。

Tjablikov の理論に対しては其後 1) 一般の s に拡張すること, 2) longitudinal correlation を出すこと, 3) 高次の decoupling を行うこと, 4) $T=T_c$ の特異性を改良すること等を目指して多くの理論が限られた。

Tabir Kehli は 4 次の Green 関数を 2 次の Green 関数と correlation function の積と anomalous term の和に分けて低温, 高温を共に知られた理論と一致するように parameter をきめ, $T \approx T_c$ において $\chi \propto (T-T_c)^{-\frac{4}{3}}$, $M \propto (T_c-T)^{\frac{1}{3}}$, T_c の値は級数法によるものと 1% の一致を得ている。

Green 関数法で近似をあげたとき多くの理論では Tjablikov の場合に持たれている近似の全面的妥当性が失なわれてしまい例えば Oguchi Honma 等においては Curie 点が ∞ となっている。

1 次元については八王子で詳しくのべたから省くが, 其後 1 次元, 2 次元の Heisenberg model では自発磁化が存在しないという証明が与えられた。

多 体 問 題

阿 部 竜 蔵 (東大教養)

Frenkel によると, 理論物理の目的はある与えられた物理体系の“漫画”を書くことだそうである。つまり, 理論物理学者は体系の微に入り細にわたって記述を試みるのではなく, 体系のもっとも本質的な性質をできるだけ誇張して記述すればよいとのことです。(ちょうど漫画家が, もっとも特徴的な所をとらえ, それを強調するように) そういう立場で, 今までいわゆる多体問題とよばれてきた, いくつかの例を考察し, “漫画”をなすべき二つの線は, 集団運動と準粒子概念であろうと述べた。また, これからの問題として, その両者の相互作用が重要になるのではあるまいか, という私見について話した。もう一つ, まだ漫画を書くにはいたっていない問題の一つとして, 相転移の問題についてふれ, それに対する一つの考え方を紹介した。それは正準集合の分配関数のゼロ点を考察し, ゼロ点の分布と転移点近傍における熱力学的関数の異常性との関連を論ずることだが, 詳しいことはいずれ発表する予定なので, こ