1次元Ising模型の状態和の零点分布——第2近接相互作用と一般のSの場合

東北大工　桂　重俊・大南正人

（4月24日受理）

§1. 序

相転移を論ずる際に，分配函数の零点を調べるのは一つの有力な方法である。零点の軌跡及び，その分布函数の具体的な形が求まれば物理量は，それから計算出来る。[1] S＝½の強磁性相互作用を有するIsing模型に対しては，Lee－Yangの定理[1]から零点は，すべて複素fugacity面上の単位円上にある事が示されている。又Heisenberg模型に対しても強磁性的の場合には単位円にのる事がAsano[2]によって証明された。しかし，相互作用が反強磁性的の場合には，Lee–Yangのcircle theoremに相当する定理は見出されていない。Lee–Yang以後の零点の分布に関する数値実験的研究のreviewはref.3のintroductionに与えてある。なおNilsen and Hemmer[4]は，最近接相互作用が無限斥力である格子気体の零点の分布を論じており，又最近ではKunz[5]，Ruelle[6] 等の研究がある。

我々の目的はAntiferro state の零点の分布と相転移の関係を調べる事にあるが，2次元，3次元でN→∞の系について直接これを求めるのは困難である。Katsura,Abe,Yamamotoは[3]第2近接相互作用を持つ4×6の体系を調べてJ，J′の符号と大きさの組合せにより，いくつかのpattern を見出したが，特にJ＜0，J′＞0 の場合には零点は二重円になる事を示した。

本論文においては，第1近接相互作用を有するspin ½の1次元Ising模型と，最近接相互作用を持つhigher spin (spin 1, spin ⅔)の1次元Ising模型の複素磁場平面の零点の軌跡をexplicitに求めることが出来たので，これを報告する。これ等の系は，いずれも相転移は示さないが前者は4×6について得られた臨界点以上における数値実験の結果をよく説明する。

§ 2. 第２近接相互作用を有する spin ½ の１次元 Ising 模型

Next nearest neighbor interaction を持った spin ½ の１次元Ising 模型を考える（図１）。

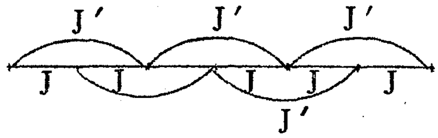

図　1

Ｊを最近接相互作用，Ｊ′を第２近接相互作用とするとこの系のHamiltonianは

$$\mathcal{H} = -2J\sum S_i S_{i+1} - 2J'\sum S_i S_{i+2} - g\mu_B H\sum S_i \tag{1}$$

と書ける。磁場のない場合のこの系の性質はH＝0 の場合Montroll[7]によって状態和が，又Stephenson らによって相関函数が論じられている。磁場のある場合の分配函数は transter matrix を用いて表現出来るが今の場合４×４のマトリックスとなる

$$\begin{pmatrix} e^{K+K'+C} & e^{-K+K'-C} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-K+K'+C} & e^{K-K'-c} \\ e^{K-K'+C} & e^{-K+K'-C} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-K-K'+C} & e^{K+K'-C} \end{pmatrix} \tag{2}$$

ここで　$K = J/_{2kT}$　，　$K' = J'/_{2kT}$　　$C = \frac{1}{2}g\mu_B/kT$ である。

このmatrixの固有方程式は

$$\lambda^4 - e^{K+K'}(e^C + e^{-C})\lambda^3 + e^{2K'}(e^{2K} - e^{-2K})\lambda^2$$

$$+ e^{(-K+K')}(e^{2K'} - e^{-2K'})(e^C + e^{-C})\lambda - (e^{2K'} - e^{-2K'})^2 = 0 \tag{3}$$

となり，物理量はこの固有方程式から得られる最大固有値から求める事が出来る。phase transition が存在するとすれば，ある磁場の所で最大固有値が入れかわる事になる。[4] １次元系では有限温度では phase transition がない事がわかっているが，磁場を complexに拡張する事によって最大固有値が

交叉する所が現われる。この場所がとりもなおさず零点が存在する場所になる。

今特別の場合として，$K' \gg 0$の時を考えよう。そうすると$e^{-K'}$の項が省略できて(3)式は

$$(\lambda - e^{K+K'+C})(\lambda - e^{K+K'-C})(\lambda - e^{-K+K'})(\lambda + e^{-K+K'}) = 0 \quad \cdots\cdots\cdots \quad (4)$$

と因数分解できる。$K > 0$の場合（Ferroの場合）$e^{2C} = z$とすると，最大固有値は$|z| = 1$で入れかわる。$K < 0$の場合（Antiferroの場合）$|z| = e^{4K}$と$|z| = e^{-4K}$で最大固有値が入れかわる。これはNext nearest neighbonr interactionを持つ1次元Ising模型において$J > 0$，$J' > 0$なら零点の軌跡は単位円になり，$J < 0$，$J' > 0$なら二重円になるという事を表わしている。このことに対する近似的証明は既にref.[3]で与えておいたが，ここではtransfer行列の立場からこれを見直したのである。もちろん(4)式が厳密に成り立つのは絶対零度の時だけで，有限温度の場合は(3)を解く必要がある。(3)の4つの固有値のうち2つが等しくなった場合のλのみたす式を求めることも出来るが，そうして得た式もλの4次方程式であり係数が複雑で，かつその4つの根の中から最大固有値と第2固有値が等しいものを選び出すということを行なわなければならないので，ここでは直接(3)を複素磁場に対して数値計算する方法によった。図2，図3は，それを表わしている。図中（　）の中の数字は左からそれぞれK，K′の値で，正の場合がferro，負の場合がantiferroに対応している。図2の上半面ではどちらもferro的相互作用をしている時で，これはLee−Yangの定理から明らかなように，軌跡は単位円になっている。右上にいくほど温度が低いという事に対応しているが，だんだんと円の口が閉じて来て軌跡の端は正の実軸に近ずくことがわかる。これは1次元Ising模型では絶対零度において磁場0の所でphase transitionがある事を示している。図2の下半面ではnearest neighbonr interactionがferro，next nearest neighbour interactionがantiferroの場合である。すぐわかるように絶対零度で$H = 0$ならばspinは$J > 2|J'|$の場合++++++++のように並び，$J < 2|J'|$の場合++−−++−−（super antiferro）のように並ぶのが安定である。この場合の零点の軌跡は単位円の一部

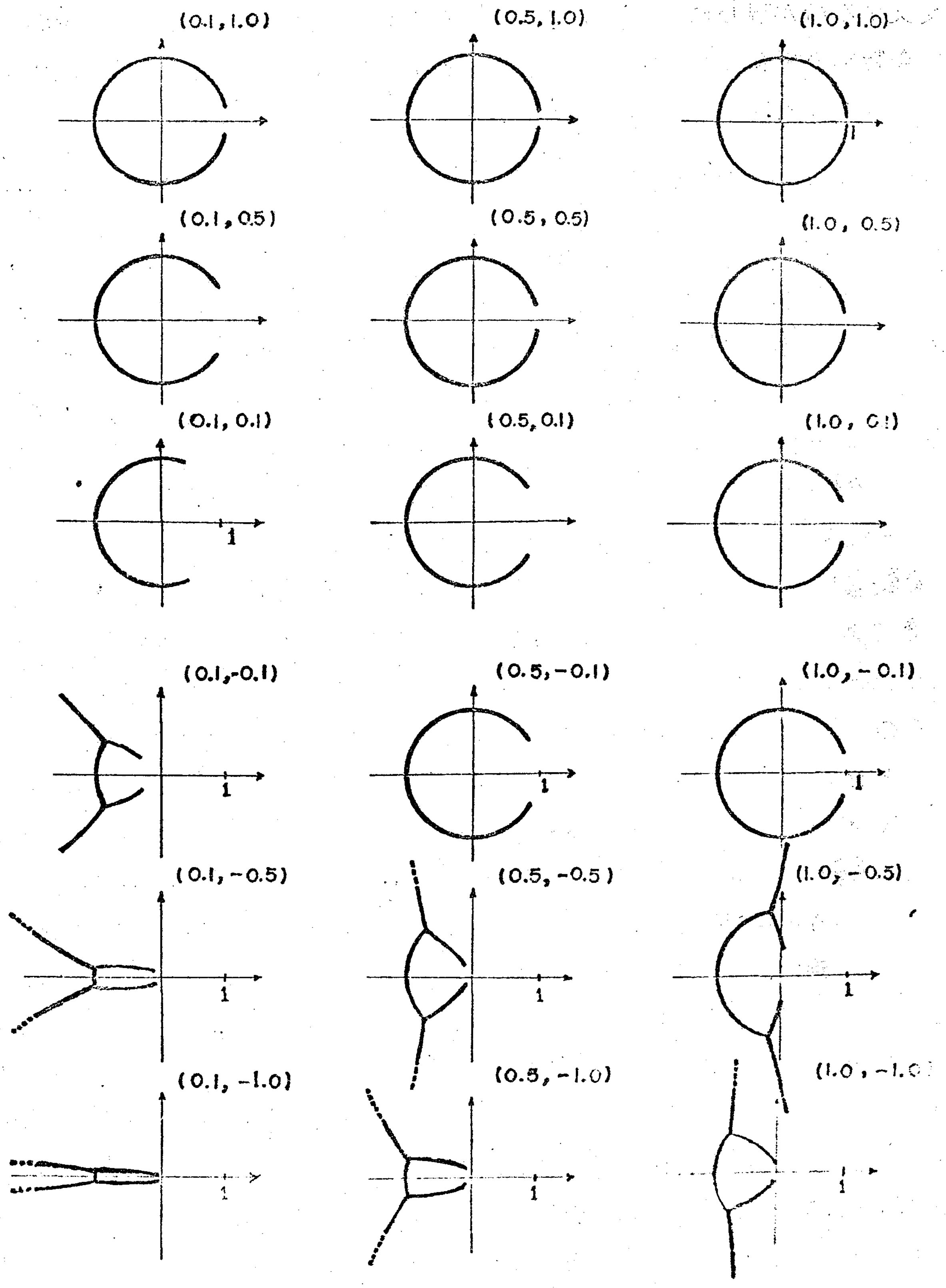
(0.1, 1.0)
(0.5, 1.0)
(1.0, 1.0)
(0.1, 0.5)
(0.5, 0.5)
(1.0, 0.5)
(0.1, 0.1)
(0.5, 0.1)
(1.0, 0.1)
(0.1, -0.1)
(0.5, -0.1)
(1.0, -0.1)
(0.1, -0.5)
(0.5, -0.5)
(1.0, -0.5)
(0.1, -1.0)
(0.5, -1.0)
(1.0, -1.0)

図 2

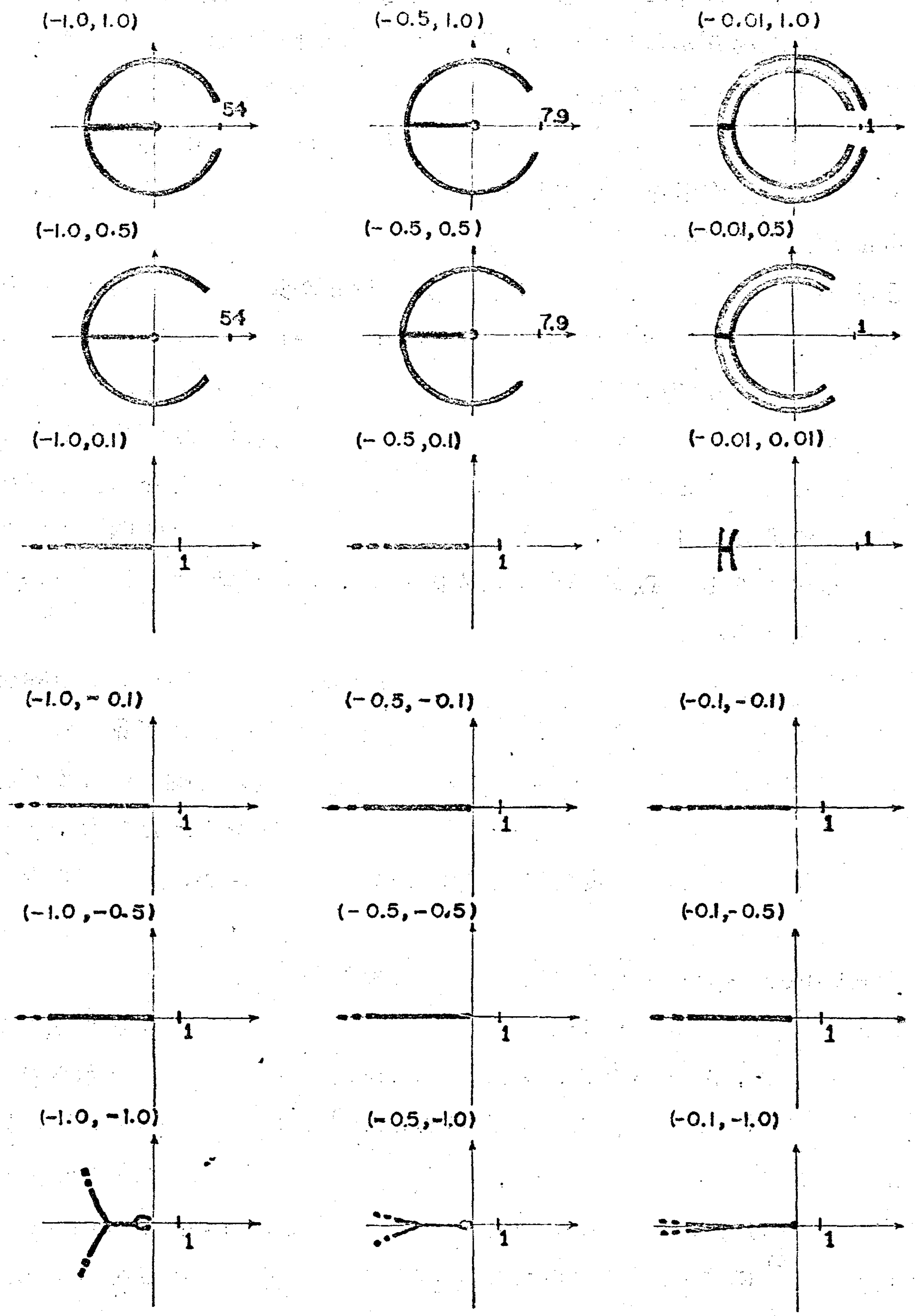
(-1.0, 1.0)
54
(-0.5, 1.0)
7.9
(-0.01, 1.0)
1
(-1.0, 0.5)
54
(-0.5, 0.5)
7.9
(-0.01, 0.5)
1
(-1.0, 0.1)
1
(-0.5, 0.1)
1
(-0.01, 0.01)
1
(-1.0, -0.1)
1
(-0.5, -0.1)
1
(-0.1, -0.1)
1
(-1.0, -0.5)
1
(-0.5, -0.5)
1
(-0.1, -0.5)
1
(-1.0, -1.0)
1
(-0.5, -1.0)
1
(-0.1, -1.0)
1

図　3

が必ず存在し，その他に枝が出ている。そしてferro(K)の相互作用を強くすると単位円の部分が増していき，枝の右端が右半面に届くようになる。更に十分温度を低くすれば枝の右端はzの正の実軸に近ずいてくる。これはferro-superantiferroのtransitionのcritical fieldに対応する。又antiferroの相互作用を強くすると，枝の部分の傾斜が水平に近ずき，枝の出はじる位置も負の実軸に近ずいく。

図3はnearest neighbour interactionが負（antiferro)の場合である。上半面はnext nearest neighbour interactionが正（ferro）の場合で，この相互作用は絶対零度でantiferroを非常に安定化する相互作用となっている。この場合零点は$K'=0$の時には負の実軸に分布しているが$K'>0$にしていくと枝が出て来て，それが近似的二重円となる。半径は前に述べたように低温ではe^{4K}, e^{-4K}である。この二重円の口は開いているが，2次元，3次元で$T<T_N$の場合，口が閉じて，正の実軸の切口がcritical fieldを与える。

図3の下半面は，どちらのinteractionも負（antiferro）の場合であるが零点は，負の実軸だけにある場合と枝分かれした場合とが見られる。上半面，下半面に共通している事は，いずれの場合にも負の実軸の部分が存在するという事である。J，J′の比を一定にして更に温度を下げた場合，枝が右半面にのびて，その端が正の実軸に近ずくと思われるが確かめるに至らなかった。

§3. Higher Spinをもつ1次元Ising模型

Higher spinをもつIsing模型の状態和の零点の分布は,,強磁性の場合単位円にのる事は，Asano[9]，Suzuki[10]，Griffiths[11]により示されている。反強磁性の場合には，Kawabata & Suzuki[12]によって有限個（4×4等)のspinについて調べられているが，曲線としての軌跡の形は明らかでない。なお1次元におけるこれらの系の熱力学的性質はKatsura Tsujiyama，Suzuki[13),14]によって与えられているので以下零点の分布を考える。

スピン1の場合　transfer matrixは

$$\begin{pmatrix} e^{K+C} & e^{C/2} & e^{-K} \\ e^{C/2} & 1 & e^{-C/2} \\ e^{-K} & e^{-C/2} & e^{K-C} \end{pmatrix} \qquad (5)$$

で与えられ[13] 固有方程式は

$$\lambda^3-\{e^K(e^C+e^{-C})+1\}\lambda^2+\{(e^K-1)(e^C+e^{-C})+(e^{2K}-e^{-2K})\}\lambda$$
$$-e^{-2K}(e^K-1)^3(e^K+1)=0 \qquad (6)$$

となる。

零点の軌跡を求めるには，$e^{\frac{g\mu H}{kT}}$をComplex とみなして，このマトリックスの最大固有値の絶対値が交叉する所をさがせばよい。絶対高温においては，状態和は

$$(e^C+1+e^{-C})^N \qquad (7)$$

と書くことが出来る。したがってspin 1では絶対高温においては，零点は単位円の$\theta=2/3\pi$，$4/3\pi$の点に収束する事がわかる。そしてferro の相互作用で温度を低くすると，そこから単位円に沿ってのび，antiferro の相互作用の時には単位円の近傍ではそれに直角にのびていく事がわかる（図4）。掲げてある数字はJ/kTの値である。

同様にしてspin 3/2の場合[14] transfer matrixは

$$\begin{pmatrix} e^{9K+3L}, & e^{3K+2L}, & e^{-3K+L}, & e^{-9K} \\ e^{3K+2L}, & e^{K+L}, & e^{-K}, & e^{-3K-L} \\ e^{-3K+L}, & e^{-K}, & e^{K-L}, & e^{3K-2L} \\ e^{-9K}, & e^{-3K-L}, & e^{3K-2L}, & e^{9K-3L} \end{pmatrix} \qquad (8)$$

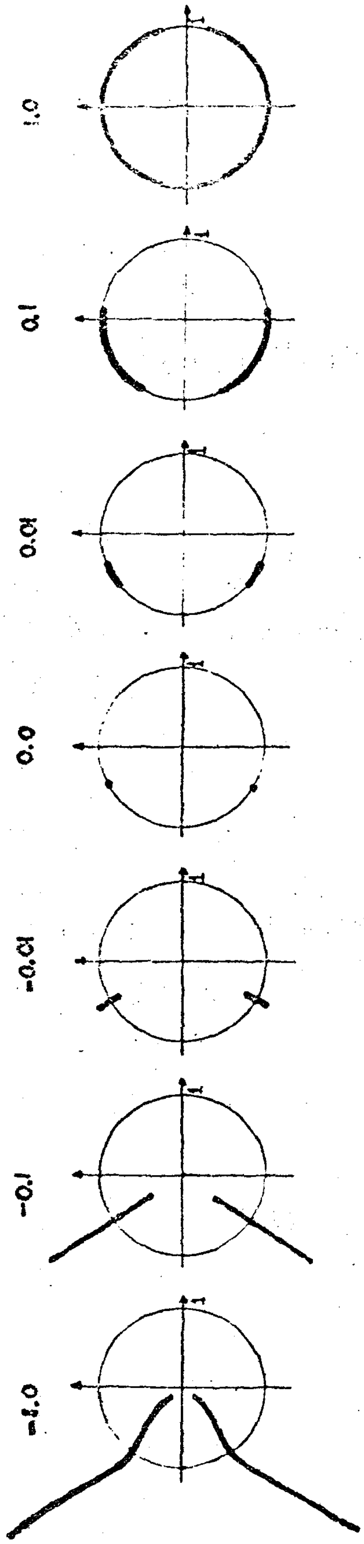

図 4

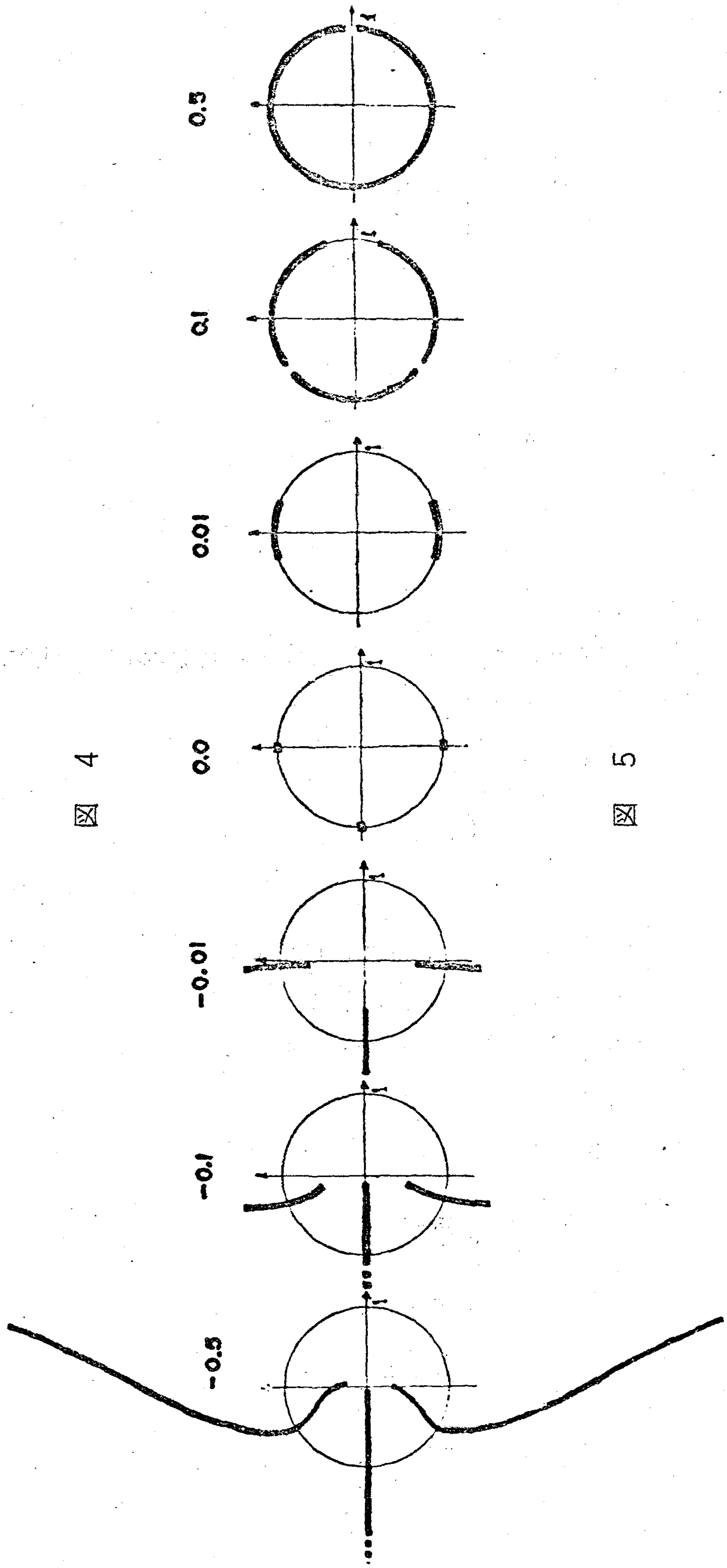

図 5

となる。ここで$L = g\mu H / 2kT$である。図5はこの系の状態和の零点である。絶対高温において零点は単位円上の$\theta = \pi/2$，π，$3\pi/2$の3つの部分に収束する。一般にspinの大きさがnであれば，絶対高温では，$z^{2n+1} = 1$で$z = 1$を除いた点に収束しferroの相互作用では単位円に沿って，antiferro の相互作用では，それに直角にのびる事が認められる。

§4. 結　　論

以上，$S = ½$で第2近接相互作用を有する場合，及びHigher spinの場合の1次元Ising模型の零点の軌跡をexplicit に求めた結果について報告した。前者においては，軌跡は$J > 0$；$J' > 0$では単位円の一部，$J < 0$，$J' > 0$ では2重円の一部とこれをつなぐ負の実軸の一部，$J > 0$，$J' < 0$では単位円の一部と両端から出る枝，$J < 0$，$J' < 0$ では負の実軸の一部と両端から出た枝から成立っている。この結果は4×6の2次元Ising模型の数値実験の結果の$T > T_c$ のpatternをよく説明する。Higher spinの系においては$T = \infty$で$\theta = \frac{2\pi}{2S+1}$，$|z| = 1$の2S個の点にあるが，Tが有限でferroの時は円周上にのび，antiferroの時は，半径方向にのびていく軌跡であることが認められた。

ここでは2×∞の系についての結果は述べなかったが，2×∞，3×∞，4×∞…等の系についての結果を外挿する事により，∞×∞の結果についての知識が得られる。これについては稿を改めて述べたい。

筆をおくにあたり，猪苗代助教授，小口武彦教授，阿部芳彦氏の討論に感謝する。

文　　献

1) C. N. Yang and T. D. Lee, Phys. Rev. 87, 402(1952).
T. D. Lee and C. N. Yang, Phys. Rev. 87, 410(1952).
2) T. Asano, Phys. Rev. Lett. 24, 1409(1970).
T. Asano, J. Phys. Soc. Japan 29, 350(1970).

これより先強磁性Heisenberg modelについて十分高温の場合についてはOle J. Heilmann and E. H. Lieb, Phys. Rev. Lett. 24, 1412 (1970). により，十分低温の場合については M. Suzuki, Prog, Theor. Phys. 41, 1438(1969). により circle theorem が成立つことが示された。

3) S. Katsura, Y. Abe and M. Yamamoto, J. Phys. Soc. Japan 30, 347(1971).

4) T. S. Nilsen and P. C. Hemmer, J. Chem. Phys. 46, 2640(1967).

5) H. Kunz, Phys. Letters 32A, 311(1970).

6) D. Ruelle, Phys. Rev. Lett. 26, 303(1971).

7) E. W. Montroll, J. Chem. Phys. 10, 42(1942).

8) J. Stephenson, J. Chem. Phys. Solids. 48, 1724(1970).

9) T. Asano, Prog. Theor. Phys. 40, 1328(1968).

10) M. Suzuki, J. Math. Phys. 9, 2064(1968).
M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. 40, 1246(1968)

11) R. B. Griffiths, J. Math. Phys. 10, 1559(1969).

12) C. Kawabata and M. Suzuki, J. Phys. Soc. Japan 27, 1105(1969).

13) S. Katsura and B. Tsujiyama, in Critical Phenomena, Ed. by M. S. Green and J. V. Sengers, National Bureau of Standards, Washington D. C. (1966).

14) M. Suzuki, B. Tsujiyama, and S. Katsura, J. Math. Phys. 8, 124(1967).