

Heisenberg model と二次相転位 II

鈴木 増雄 (東大理)

(6月15日受理)

§ 1. Introduction

Spin 系の二次相転位を microscopic に議論するには、もつとも realistic な Heisenberg model に立脚するのが望ましい。しかし、もとの Heisenberg model そのままの型から出発するのは、非常に難しい。そこで、著者は、前号に於いて、symmetrized pair product density matrix ρ_S が、相転位の転位点近傍で、Heisenberg model の特長を充分に残し、定量的にも、相当良い結果を与える model density matrix である事を、Ferro の Curie 点や、一次元の energy 等を実際に ρ_S を用いて計算して、例証した。¹⁾ それに勢を得て、ここでは、更に、anti-ferro の Curie 点や、anisotropic ferro や anisotropic anti-ferro の性質を、 ρ_S を用いて議論してみよう。主な結果を要約すると、anisotropic ferromagnetic model では、直観的に容易に予想されるように、横成分が大きい程、Curie 点が、一般に低くなる。又 (isotropic な) anti-ferromagnetic model では、一次元は、相転位が起らず、二次元、三次元では、相転位が起る。(但し三角格子は除く) 更に anti-ferromagnetic model で anisotropy の影響を調べてみると、横成分が大きい程、Curie 点が高くなり、anti-ferro になり易くなる。即ち、anti-ferro に対しては、横成分が重要な役割を果していることが示される。ferro と anti-ferro のそれぞれの場合に、anisotropy constant r と共に、Curie 点が、どのように変るかを、各次元の各格子型に対して、図示する。又、転位点に於ける比熱の jump に対する anisotropy の effect も、ferro と anti-ferro では逆になる。ferro では、横成分が大きくなる程、比熱の jump は小さくなり、anti-ferro では大きくなる。

鈴木増雄

§ 2 . Anti-ferromagnetic Heisenberg model と Curie 点

isotropic な場合を考えると、ferro の時と全く同様に議論出来る。我々の立場では、もとの Heisenberg model を次の symmetrized pair product density matrix で議論する。

$$\rho_S = \{ \pi_{\text{pair}} \exp(-K \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) \}_{\text{sym}} , \quad K = |J| / kT \quad (1)$$

spin $S=1/2$ の時は、次のように表わされる。

$$\rho_S = a^{N_\rho} \pi_{\text{pair}} \text{sym} (1 + x \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) \quad (2)$$

但し、 N_ρ は pair の数を表はし、

$$\begin{aligned} a &= e^K (\cosh 2K - \frac{1}{2} \sinh 2K) \\ x &= - \frac{\tanh 2K}{2 - \tanh 2K} . \end{aligned} \quad (3)$$

さて、ferro のときと同様に、Bethe 近似を用いて、anti-ferro の Curie 点を求めてみよう。分子場を H' として、 $h' = \mu_0 H' / kT$ とおき、nearest neighbor の数を z とすると、 $z+1$ 個の状態和 Z は

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \left[\left\{ \pi_{i=1}^z \exp(-K \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_i) \right\}_{\text{sym}} \cdot \pi_{i=1}^z \exp(h' S_1^Z) \right] \\ &= (ac)^z \text{Tr} \pi_{i=1}^z (1 + x \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_i) \pi_{i=1}^z (1 + y S_1^Z) \end{aligned} \quad (4)$$

但し

$$c = \cosh h' , \quad y = \tanh h' . \quad (5)$$

$$\langle\langle A \rangle\rangle = \text{Tr} A \pi (1 + x \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_1) \pi (1 + y S_1^Z) \quad (6)$$

とおくと、

$$\langle S_0^Z \rangle = \langle\langle S_0^Z \rangle\rangle \cdot (ac)^z / Z , \quad \langle S_1^Z \rangle = \langle\langle S_1^Z \rangle\rangle \cdot (ac)^z / Z .$$

そこで、anti-ferro に於ける分子場は、

$$\langle S_0^Z \rangle = - \langle S_1^Z \rangle , \quad \text{即ち} \quad \langle\langle S_0^Z \rangle\rangle = - \langle\langle S_1^Z \rangle\rangle$$

より決まる。上式が、 $y=0$ 以外に、 $y \neq 0 (H \neq 0)$ なる解を持ち始める条件から、Curie 点を定めると直ちに、

$$x_c = -\frac{1}{z-1} \quad \text{即ち} \quad \boxed{\tanh 2K_c = \frac{2}{z}} \quad (7)$$

これより一次元では、 $z=2$ より、 $T_c=0$ となり、anti-ferro にならない。二次元以上では、anti-ferro になる。(三角格子は除く) 正方格子、単純立方格子、体心立方格子の場合の Curie 点を求め、他の方法による値と比較すると次の表のようになる。

表 I ($2K_c$; anti-ferro の Curie 点)

author	一次元	二次元正方	単純立方	体心立方
Opechowshi	3.19	2.28	1.53	1.63
Kubo, Obata, Ohno ²⁾	0.784	0.496	0.369	0.303
Li ³⁾	None	None	0.500	0.314
Oguchi, Obata ⁴⁾	None	0.631	0.372	0.275
present theory	None	0.549	0.346	0.255

上の表をみると、Oguchi, Obata の結果に近い値になっている。

§ 3 . Anisotropic ferromagnetism

—— Anisotropy と T_c の変化 ——

exchange interaction が、 x, y, z 成分によつて異なる一般の場合について考えてみよう。この場合の model density matrix ρ_S は、

$$\rho_S = \left\{ \pi_{\text{pair}} \exp(\alpha_x S_1^x S_j^x + \alpha_y S_1^y S_j^y + \alpha_z S_1^z S_j^z) \right\}_{\text{sym}} \quad (8)$$

Spin $S=1/2$ のときは、次の性質により、 ρ_S はもつと簡単になる。即ち

$$[S_1^x S_j^x, S_1^y S_j^y]_- = 0, \quad [S_1^y S_j^y, S_1^z S_j^z]_- = 0, \quad [S_1^x S_j^x, S_1^z S_j^z]_- = 0$$

より

$$\rho_S = a^{N_p} \pi_{\text{pair}}^{\text{sym}} (1 + X_1 S_i^X S_j^X + X_2 S_i^Y S_j^Y + X S_i^Z S_j^Z) \quad (9)$$

但し

$$\begin{cases} a = \cosh \alpha_X \cosh \alpha_Y \cosh \alpha_Z - \sinh \alpha_X \sinh \alpha_Y \sinh \alpha_Z, \\ X_1 = (\tanh \alpha_X - \tanh \alpha_Y \tanh \alpha_Z) / (1 - \tanh \alpha_X \tanh \alpha_Y \tanh \alpha_Z), \\ X_2 = (\tanh \alpha_Y - \tanh \alpha_Z \tanh \alpha_X) / (1 - \tanh \alpha_X \tanh \alpha_Y \tanh \alpha_Z), \\ X = (\tanh \alpha_Z - \tanh \alpha_X \tanh \alpha_Y) / (1 - \tanh \alpha_X \tanh \alpha_Y \tanh \alpha_Z), \\ \alpha_X = J_X / kT, \alpha_Y = J_Y / kT, \alpha_Z = J_Z / kT. \end{cases} \quad (10)$$

さて、そこで、Bethe 近似による Curie 点は、前と全く同様にして、異方性のある場合にも

$$X_C = \frac{1}{z-1} \quad (11)$$

によつて与えられる。ここで特に

i) $\alpha_X = \alpha_Y = 0, \alpha_Z = K$ の場合。

$$X = \tanh K \quad (\text{Ising model})$$

ii) $\alpha_X = \alpha_Y = \alpha_Z = K$ の場合。

$$X = \tanh 2K / (2 + \tanh 2K) = x \quad (\text{Hesenberg model})$$

iii) $\alpha_Y = \alpha_Z = K, \alpha_X = 0$ 。

$X = \tanh K$ 。 $\therefore K_C$ は Ising のときと全く同じ。即ち、横成分一つでは、effect がない。

iv) $\alpha_X = \alpha_Y = rK, \alpha_Z = K$ 。 (r ; 異方性パラメーター)

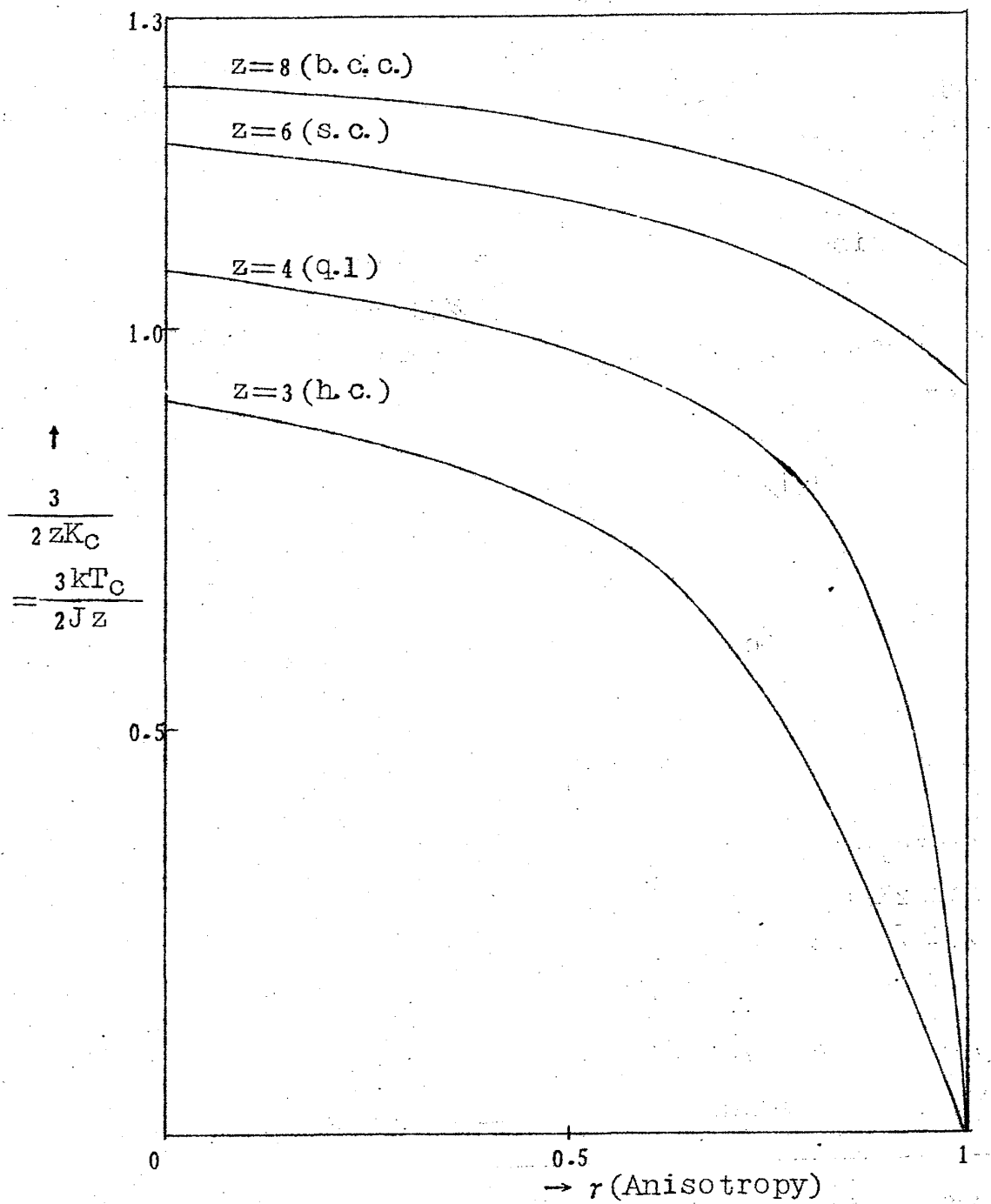
(これを普通に、anisotropic case と言う)

$$X = (\tanh K - \tanh^2 rK) / (1 - \tanh K \tanh^2 rK) \quad (12)$$

特に最後の anisotropic case について、Curie 点が anisotropy constant r と共にどう変るかを、各格子型について調べてみよう。(11)と(12)より、Curie 点と r との関係は、次式で与えられる。

$$r = \frac{1}{2K_C} \cosh^{-1} \left(\frac{z-2}{z} \cdot e^{2K_C} \right) \quad (13)$$

これを各格子型について図示すると、下図のようになる。



Curie point (Ferromagnetic case)

Fig. 1.

$$r = \frac{1}{2K_C} \cosh^{-1} \left(\frac{z-2}{z} e^{2K_C} \right)$$

鈴木増雄

容易に予想されるように、横成分が大きくなる程、Curie 点は低くなること
 がわかる。又、いつも、nearest の数が多い程、Curie 点は高く（当然！）
 anisotropy 依存性が小さくなる。即ち、 z が大きくなると共に、Ising
 model と Heisenberg model が同じ振舞いをするようになる。これは一般
 的傾向である。これは又、高温になるにつれて、二つのモデルが近づいて来る
 こと⁵⁾と対応している。

§ 4 . Anisotropic anti-ferromagnetism

—— anisotropy と T_c の変化 ——

ferro の場合と同様に、 ρ_s は(9)式で与えられるが、 $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ が次のよ
 うに変わる。

$$\alpha_x = -|J_x|/kT, \alpha_y = -|J_y|/kT, \alpha_z = -|J_z|/kT。$$

Bethe 近似を用いて、Curie 点を定めると、特に、

$$\boxed{X_c = -\frac{1}{z-1}} \quad (14)$$

i) $\alpha_x = \alpha_y = 0, \alpha_z = -K$ の場合。($K = |J_z|/kT$)

$$X = \tanh K \quad \therefore \tanh K_c = 1/(z-1) \quad (\text{Ising model})$$

ii) $\alpha_x = \alpha_y = \alpha_z = -K$ の場合。

$$\tanh 2K_c = 2/z \quad (\text{isotropic Heisenberg model})$$

iii) $\alpha_y = \alpha_z = -K, \alpha_x = 0$.

$$X = -\tanh K. \quad \therefore K_c \text{ は Ising の時と同じ。}$$

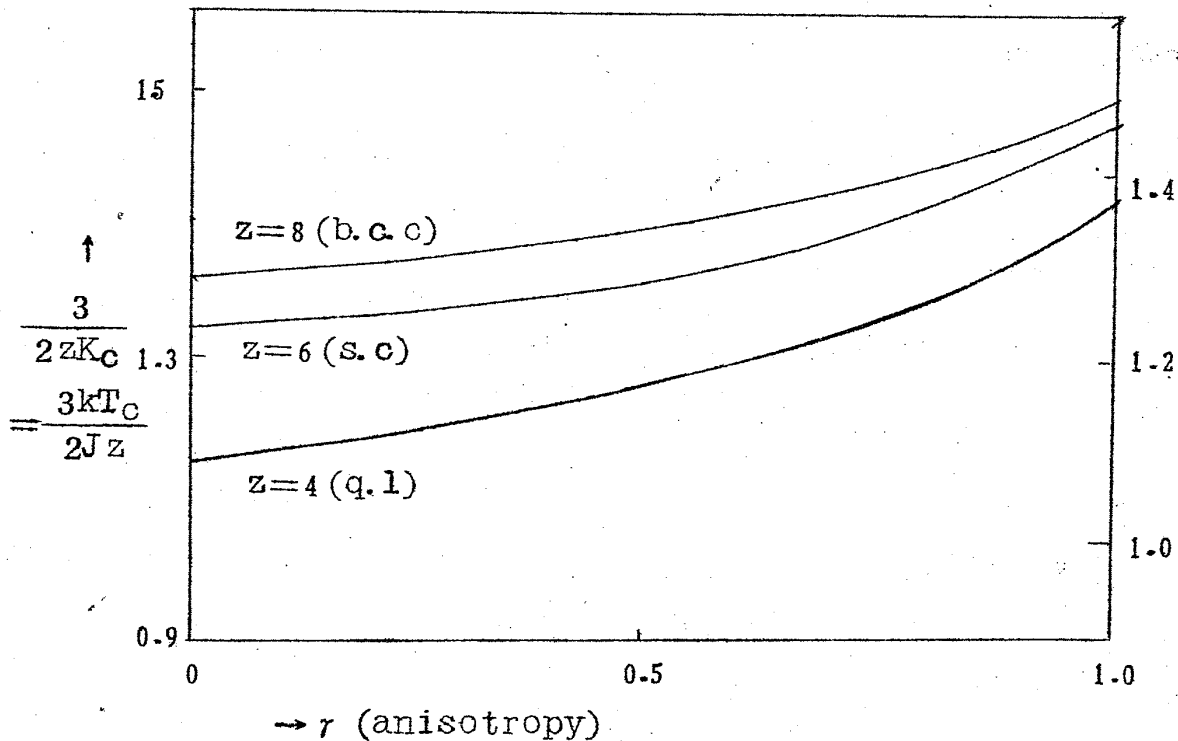
iv) $\alpha_z = -K, \alpha_x = \alpha_y = -rK$.

$$X = -(\tanh K + \tanh^2 rK)/(1 + \tanh K \cdot \tanh^2 rK) \quad (15)$$

特に最後の anisotropic case について、Curie 点と anisotropy con-
 stant r との関係を調べてみると、(14)と(15)より

$$\boxed{r = \frac{1}{2K_c} \operatorname{sech}^{-1} \left(\frac{z-2}{z} e^{2K_c} \right)} \quad (16)$$

これより K_C は r の単調増加関数になっていることがわかる。即ち横成分が大きくなる程、Curie 点も高くなる。これを各格子型に対して図示すると、Fig. 2 のようになる。



Curie point (Anti-ferromagnetic case)

Fig. 2.

これより、anti-ferro では、ferro の場合とは違つて、横成分が重要な役割を果たしていることがわかる。又、 z の値が大きくなる程、Curie 点は高くなり、 r -依存度は小さくなる。これは、ferro でも、anti-ferro でも同じである。

§ 5 . Anisotropic ferro の自発磁化と比熱の jump.

Bethe 近似を用いて、Curie 点近傍の自発的磁化 M_S と転移点に於ける比熱の jump を求めてみよう。

- i) 自発磁化。 $\langle S_0^Z \rangle$, $\langle S_1^Z \rangle$ を y の三次まで求めると、isotropic case $\langle\langle S_0^Z \rangle\rangle = (zXy + zC_3 X^3 y^3) \text{Tr} \mathbf{1}$,

鈴木増雄

$$\langle\langle S_1^Z \rangle\rangle = (y + (z-1)X^2y + z^{-1}C_2X^2y^3 + z^{-1}C_3X^4y^3) \text{Tr} I.$$

$$\langle\langle S_0^Z \rangle\rangle = \langle\langle S_1^Z \rangle\rangle \text{ の条件より,}$$

$$y^2 = \frac{3(z-1)^3}{z(z-2)} (X - X_C) \quad (17)$$

自発磁化 M_S は

$$M_S = N\mu_0 \langle S_0^Z \rangle = N\mu_0 z X_C y + 0(y^3)$$

$$\therefore M_S^2 = (N\mu_0)^2 \times 3 \times \frac{(z-1)^2}{z-2} \left(\frac{dX}{dK} \right)_C \times (K - K_C) \quad (18)$$

特に、 $\alpha_X = \alpha_Y = rK$, $\alpha_Z = K$ の場合は、(12)より、

$$\left(\frac{dX}{dK} \right)_C = \frac{z}{(z-1)^2} \left[(z-2) - \frac{(z-1) \tanh K_C}{1 + \tanh K_C} \times (2r \tanh r K_C) \right] \quad (19)$$

これは、異方性定数 r が小さくなると共に大きくなる。これは、自発磁化の立ち上りを示し、 r が小さくなると共に、Curie 点が下ることに対応して、立ち上りが急になることを表わしている。

$$\text{i-a) } r=1. \dots \left(\frac{dX}{dK} \right)_C = \frac{z(z-4)}{(z-1)^2} \text{ (丸い case, 前出)}$$

$$\text{i-b) } r=0. \dots \left(\frac{dX}{dK} \right)_C = \frac{z(z-2)}{(z-1)^2} \text{ (Ising model).}$$

ii) 比熱の jump。まず、magnetic energy E は、

$$E = \frac{z}{2} (-J_X \langle S_0^X S_1^X \rangle - J_Y \langle S_0^Y S_1^Y \rangle - J_Z \langle S_0^Z S_1^Z \rangle) \quad (20)$$

比熱 C は、 $K_X = J_X/kT$, etc. として、

$$\frac{C}{k} = \frac{z}{2} \left[K_X^2 \frac{d}{dK_X} \langle S_0^X S_1^X \rangle + K_Y^2 \frac{d}{dK_Y} \langle S_0^Y S_1^Y \rangle + K_Z^2 \frac{d}{dK_Z} \langle S_0^Z S_1^Z \rangle \right] \quad (21)$$

次に、correlation は前と同様にして、

$$\langle\langle S_0^Z S_1^Z \rangle\rangle = [X + Xy^2(z-1)(1 + \frac{z-2}{2} X^2)] \text{Tr} I + 0(y^4),$$

$$\langle\langle S_0^x S_1^x \rangle\rangle = [X_1 + y^2 X_1 X^2 \cdot \frac{(z-1)(z-2)}{2} - y^2 (z-1) X_2 X] T_R I \quad (21')$$

$$\langle\langle S_0^y S_1^y \rangle\rangle = [X_2 + y^2 X_2 X^2 \cdot \frac{(z-1)(z-2)}{2} - y^2 (z-1) X_1 X] T_R I。$$

$$\langle\langle 1 \rangle\rangle = [1 + \frac{z(z-1)}{2} X^2 y^2] T_R, \quad \langle A \rangle = \frac{\langle\langle A \rangle\rangle}{\langle\langle 1 \rangle\rangle}。$$

さて、Curie 点より上では $y=0$ だから、転移点に於ける比熱の jump ΔC は $K_X=K_Y=rK$, $K_Z=K$ として、

$$\begin{aligned} \frac{\Delta C}{k} &= \frac{C_-}{k} - \frac{C_+}{k} = \frac{zK_C^2}{2} \cdot (z-1) K_C \{ 1 - 2rX_1^C - X_C(X_C + 2rX_1^C) \} \left(\frac{dy^2}{dK} \right)_C \\ &= \frac{3K_C^2}{2} \cdot \frac{z(z-1)}{z-2} \left\{ (z-2) - 2r \cdot \frac{((z-1) - \tanh K_C) \tanh rK_C}{1 + \tanh K_C} \right\} \left(\frac{dX}{dK} \right)_C \end{aligned}$$

$\therefore$

$$\boxed{\frac{\Delta C}{k} = \frac{3K_C^2}{2} \cdot \frac{z^2}{(z-1)(z-2)} \left\{ (z-2) - \frac{(z-1) - \tanh K_C}{1 + \tanh K_C} \times (2r \tanh rK_C) \right\}^2}$$

(22)

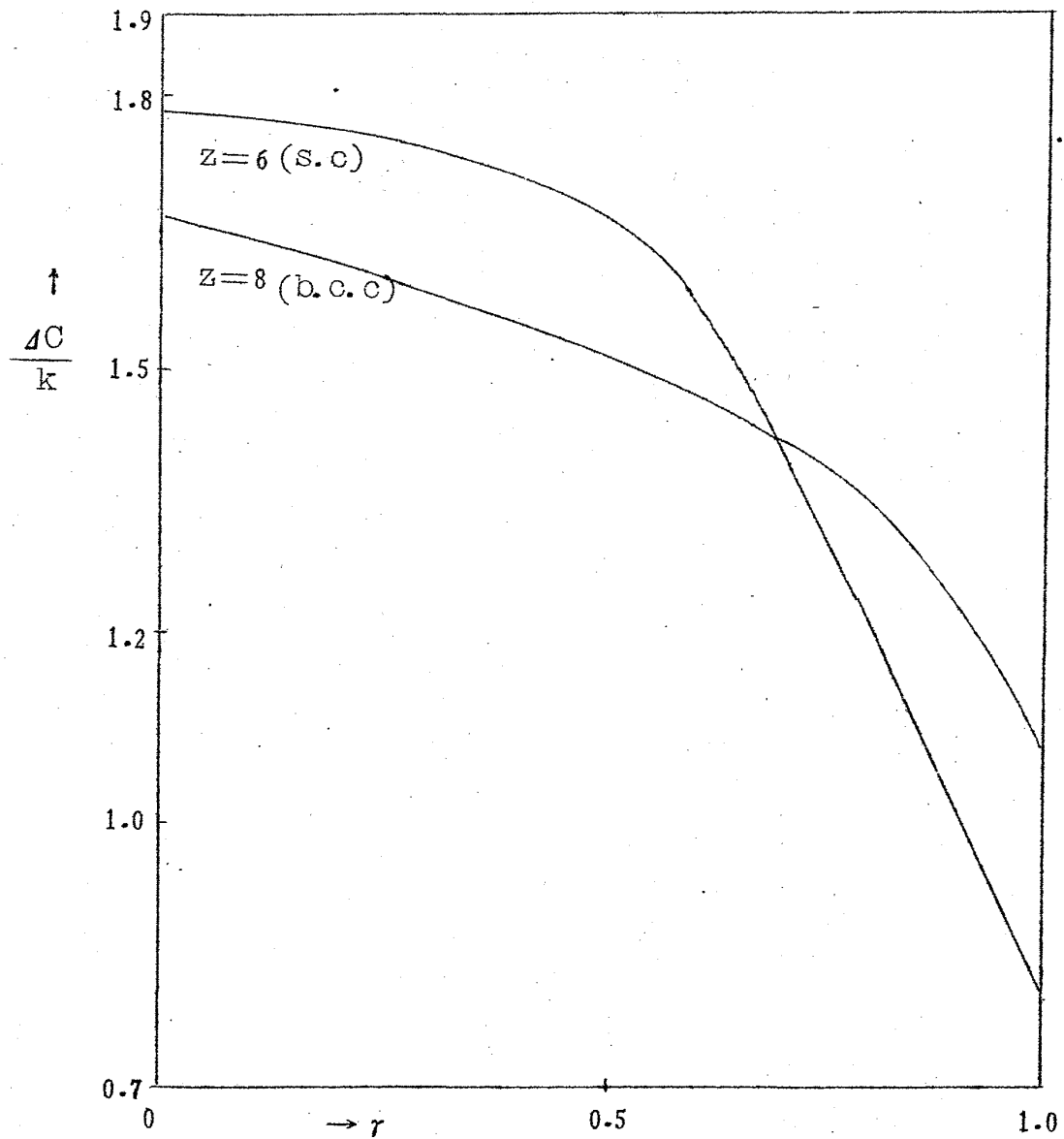
ii-a) 単純立方格子 ($z=6$) では、

$$\frac{\Delta C}{k} = \begin{cases} 1.78 & \cdots r=0 (\text{Ising}) \\ 0.813 & \cdots r=1 (\text{Heisenberg}) \end{cases}$$

ii-b) 体心立方格子 ($z=8$) では、

$$\frac{\Delta C}{k} = \begin{cases} 1.67 & \cdots r=0 \\ 1.06 & \cdots r=1 \end{cases}$$

これより、Ising model の方が、比熱の jump が大きいことがわかる。異方性と共に、比熱の jump がどのように変るかを、はつきり見るために、(22) 式を各格子型に対して、 r の関数として、図示すると、Fig.3 のようになる。又、 z が大きくなると共に、変化は弱くなる。



比熱の jump (Ferremagnetic case)

Fig. 3.

§ 6 . Anisotropic anti-ferro の自発磁化 (sublattice の M_S) と比熱の jump 。

i) ferro の場合と全く同様にして、Bethe 近似を用いて、model density ρ_S を使つて、 $\langle S_0^Z \rangle = -\langle S_1^Z \rangle$ の条件より、転移点近傍の sublattice の自発磁化を求めると、

$$y^2 = \frac{3(z-1)^3}{z(z-2)} (X_C - X) \quad (23)$$

$$\left(\frac{dX}{dK}\right)_C = -\frac{(z-2)}{(z-1)^2} \left[z + \frac{(z-1) - \tanh K_C}{1 - \tanh K_C} \times (2r \tanh r K_C) \right] \quad (24)$$

より、 M_S は、 N を sublattice の spin の数として、

$$M_S^2 = (N\mu_0)^2 \times \frac{3(z-1)^2}{z-2} \left(\frac{dX}{dK}\right)_C \times (K_C - K) \quad (25)$$

これより、ferro の場合とは逆に、異方性定数 r が小さくなると共に、自発磁化の立ち上りが急になることがわかる。これは、 r が小さくなると共に、anti-ferro の Curie 点が下がることに対応している。特に

i-a) $r=1$ では、 $\left(\frac{dX}{dK}\right)_C = -\frac{z^2-4}{(z-1)^2}$ より、

$$M_S = N\mu_0 \times \sqrt{3(z+2)} \sqrt{K - K_C} \quad (26)$$

i-b) $r=0$ では、 $\left(\frac{dX}{dK}\right)_C = -\frac{z(z-2)}{(z-1)^2}$ より、

$$M_S = N\mu_0 \times \sqrt{3z(K - K_C)} \quad (27)$$

ii) 比熱の jump

$$\frac{\Delta C}{k} = \frac{3K_C^2}{2} \cdot \frac{z-2}{z-1} \left[z + \frac{(z-1) - \tanh K_C}{1 - \tanh K_C} \times (2r \tanh r K_C) \right]^2 \quad (28)$$

特に

ii-a) $r=0$ (Ising) では、

$$\frac{\Delta C}{k} = \frac{3K_C^2}{2} \times \frac{z^2(z-2)}{z-1}$$

ii-b) $r=1$ では、

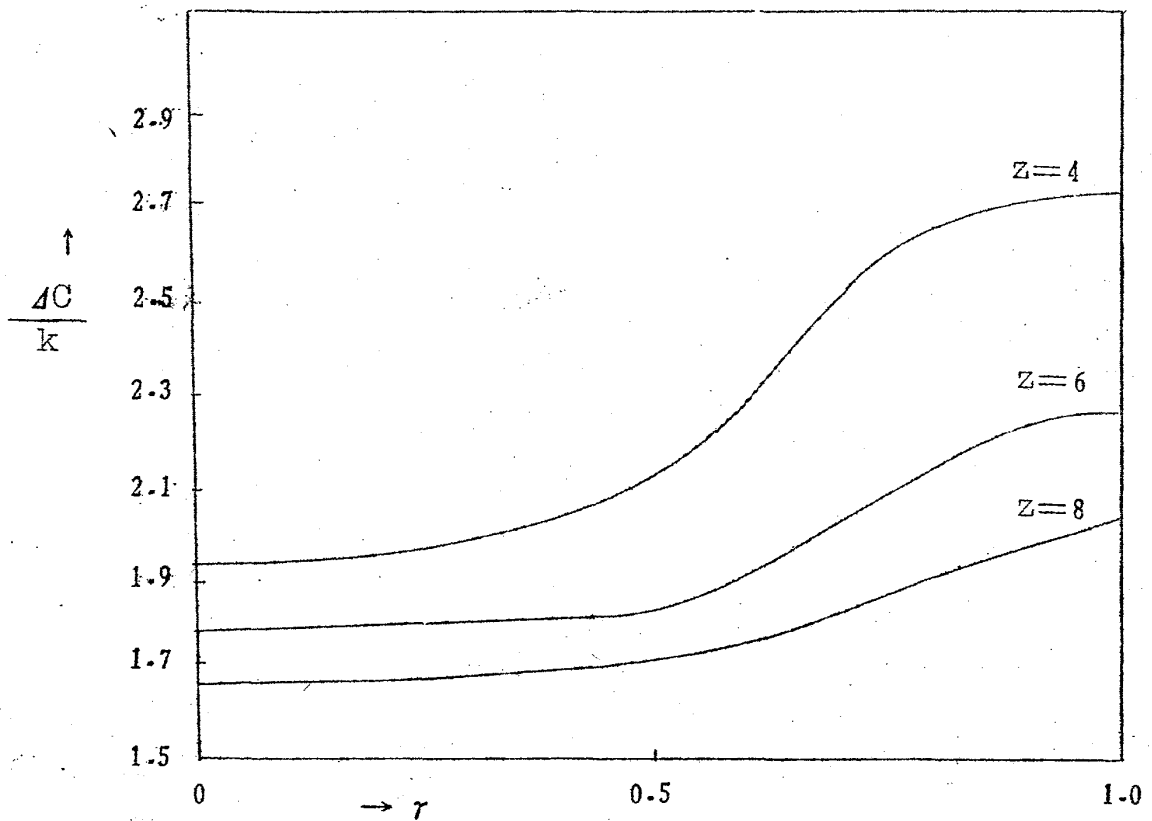
$$\boxed{\frac{\Delta C}{k} = \frac{3K_C^2}{2} \times \frac{(z-2)(z+2)^2}{z-1}} \quad (29)$$

鈴木増雄

各格子型について、 $r=0$ と $r=1$ のcaseを調べてみると、下の表のようになる。

表2 ($\Delta C/k$ の表、anti-ferro)

	二次元正方	単純立方	体心立方
$r=0$	1.93	1.78	1.67
$r=1$	2.73	2.28	2.08



比熱のjump (Anti-ferromagnetic case)

Fig. 4.

又 (28)式を r の関数としてplotすると、Fig.4のようになる。

一般に、ferroでもanti-ferroでも、 z を大きくした極限では、次のようになる。

$$\frac{\Delta C}{k} \rightarrow \frac{3}{2} \quad (z \rightarrow \infty) \quad \text{即ち} \quad \Delta C = \frac{3}{2} R / \text{mol} \quad (30)$$

§ 7. Anisotropic linear chain の一般解

今まで (pair product) model density matrix ρ_S を, Bethe 近似を用いて取り扱つて来たのであるが, 前のペーパー [1] の § 5 で議論したように, 場合によつては, $\text{Tr} \rho_S$ が厳密に compact に求まることがある。ペーパー [1] の § 5 の場合は, 一次元でしかも, i) $J_X=J_Y=J$, $J_Z=0$, ii) $J_X=J_Y=J_Z=J$ の二つの特殊な case であつた。実は, 前の計算よりも, もつと簡単に一次元モデルでは一般の anisotropic case で厳密に $\text{Tr} \rho_S$ を求めることが出来る。即ち, (spin $S=\frac{1}{2}$ とする) (10) の $a, X_1, X_2, X_3 (\equiv X)$ を用いて状態和 Z は,

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \rho_S = \text{Tr} \pi_{\text{sym}} \exp(\alpha_X S_1^X S_{1+1}^X + \alpha_Y S_1^Y S_{1+1}^Y + \alpha_Z S_1^Z S_{1+1}^Z) \\ &= a^N \cdot \text{Tr} \pi_{\text{sym}} (1 + X_1 S_1^X S_{1+1}^X + X_2 S_1^Y S_{1+1}^Y + X_3 S_1^Z S_{1+1}^Z) \end{aligned}$$

容易にわかるように, sym は省略することが出来て,

$$Z_N = a^N \cdot \text{Tr}_{i=1}^N \pi (1 + X_1 S_i^X S_{i+1}^X + X_2 S_i^Y S_{i+1}^Y + X_3 S_i^Z S_{i+1}^Z) \quad (31)$$

但し, $S_{N+1}^{x,y,z} \equiv S_1^{x,y,z}$ 。ここで更に, x, y, z 成分の mixed graph は Trace をとると零になるから,

$$\boxed{Z_N = (2a)^N (1 + X_1^N + X_2^N + X_3^N)} \quad (32)$$

更に, $N \rightarrow \infty$ の limit を考えると, 一般に, ferromagnetic でも anti-ferromagnetic でも, $|X_1| < 1, |X_2| < 1, |X_3| < 1$ が示せるから,

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} Z_N^{\frac{1}{N}} = 2a$$

∴

$$\boxed{Z = 2(\cosh \alpha_X \cosh \alpha_Y \cosh \alpha_Z - \sinh \alpha_X \sinh \alpha_Y \sinh \alpha_Z)} \quad (33)$$

特に,

i) $\alpha_X = \alpha_Y = \alpha_Z = K$ (isotropic case)

$$Z = 2(\cosh^3 K - \sinh^3 K) = e^{-K} (2 \cosh 2K + \sinh 2K)$$

鈴木増雄

$$\text{ii) } \alpha_x = \alpha_y = K, \alpha_z = 0$$

$$Z = 2 \cosh^2 K$$

(33)より、Free energy F は、spin 一個当り、

$$F = -kT \log Z$$

energy E は、

$$\begin{aligned} E &= kT^2 \frac{d}{dT} \log Z(\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z) \\ &= - \sum_x J_x \frac{\partial}{\partial \alpha_x} \log Z(\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z) \\ &= - (J_x X_1 + J_y X_2 + J_z X_3) \end{aligned} \quad (34)$$

これは、又、 $\langle S_i^x S_{i+1}^x \rangle = X_1$ etc. から得られる。比熱 C は、

$$C = \frac{dE}{dT} = \frac{1}{kT^2} \sum_{\substack{x,y,z \\ \text{cyclic}}} J_x^2 \times \frac{(1 - \tanh^2 \alpha_x)(1 - \tanh^2 \alpha_y \tanh^2 \alpha_z)}{(1 - \tanh \alpha_x \tanh \alpha_y \tanh \alpha_z)^2} \quad (35)$$

ここですぐ気がつくように、前に求めた一次元の Bethe 近似による解は、上の ρ_s に対する厳密解と完全に一致している。(式(21')をみよ) これは physical に容易に予想されることである。又、(34), (35)からわかるように、一次元ではどんなに異方性を持つていても、熱力学的量は、 $T \neq 0$ では、singularity を示さない。即ち、相転移が起らない。

§ 8. Higher spin の model density matrix

(i) Fe, Ni のような具体的な強磁性体を取り上げて、その実験と比較しようと思うと、higher spin の問題を解かなければならない。もとの Heisenberg model で higher spin の場合には、一次元でも ($J_x = J_y = 0, J_z \neq 0$) なる Ising model を除いて、異方性のある場合でも) 厳密には解けていない。そこで、pair product density matrix ρ_s を用いて議論することは、大いに有意義であると思う。しかし、この model でも、higher spin になると、少し、複雑になる。取り扱いの上で、二つの場合で異なる重要な点を列挙すると、次のようになる。

i) spin $S=\frac{1}{2}$ のときは (規格化が前と異なる!)

$$S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 = 14 \text{ (diagonal)}$$

$$S_x S_y = -S_y S_x \text{ (anti commute)}$$

$$S_x S_y = \frac{i}{2} S_z$$

ii) spin $S \geq \frac{1}{2}$ では、一般に、

$$S_x S_y \neq -S_y S_x, \quad S_x S_y \neq \frac{i}{2} S_z$$

$$S_x^2 \neq \text{diagonal}$$

iii) 共通な性質は

$$\mathbf{S} \times \mathbf{S} = i\mathbf{S} \quad (36)$$

さて、model density matrix ρ_S を取り扱い易くする為には、 $\exp(K \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)$ を reduce しなければならない。その一つの方法は

$$A_{ij} \equiv (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) \quad (37)$$

の eigen value と eigen state への projection operator とを求めることである。A の eigen value は容易に、

$$A_{ij} = \frac{1}{2} \{ (\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_j)^2 - \mathbf{S}_i^2 - \mathbf{S}_j^2 \}$$

より

$$\lambda_i = \frac{1}{2} \{ (2S+1-i)(2S+2-i) - 2S(S+1) \}$$

$$\therefore \lambda_i = \frac{1}{2} \{ i^2 - i(4S+3) + 2(S+1)^2 \} \quad (38)$$

と求まる。但し、 i は $1, 2, \dots, 2S+1$ まで。即ち、eigen value は $\lambda_1, \lambda_2 \dots \lambda_{2S+1}$ までの $(2S+1)$ 個ある。勿論縮退しているものまで数えれば、 $(2S+1)^2$ 個ある。例えば、

鈴木増雄

a) $\text{spin } S = \frac{1}{2}$ では、 $\lambda_1 = \frac{1}{4}$, $\lambda_2 = -\frac{3}{4}$

b) $S = 1$ では、 $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = -1$, $\lambda_3 = -2$

c) $S = \frac{3}{2}$ では、 $\lambda_1 = \frac{9}{4}$, $\lambda_2 = \frac{1}{4}$, $\lambda_3 = -\frac{7}{4}$, $\lambda_4 = -\frac{15}{4}$

さて、一般に、Hermite operator の最小多項式は "simple" (多重根を持たないこと!) であるから、一般の spin S の最小多項式 $\varphi(A)$ は、

$$\varphi(A) \equiv \prod_{i=1}^{2S+1} (A - \lambda_i); \quad A \equiv (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) \quad (39)$$

さて、 $\varphi(A) = 0$

より、 $A^{2S+1} = \sum_{i=0}^{2S} a_i A^i$ (40)

と書ける。但し

$$\begin{aligned} a_0 &= (-1)^{2S} \prod_{j=1}^{2S+1} \lambda_j, \quad a_1 = (-1)^{2S+1} \sum_{j=1}^{2S+1} \prod_{l \neq j} \lambda_l, \\ a_i &= (-1)^{2S+1} \sum_{k_1 \neq k_2 \neq \dots \neq k_i} \prod_{j \neq k_1, k_2, \dots, k_i} \lambda_j \end{aligned} \quad (41)$$

$$a_{2S} = \sum_{j=1}^{2S+1} \lambda_j = \frac{S(S+1)(2S+1)}{3}$$

そこで、 A の任意の関数 $f(A)$ は

$$f(A) = \sum_{i=0}^{2S} f_i A^i \quad (42)$$

と表わされる。(A の $2S$ 次の多項式!) f_i をうまく求めるには、(40) の a_i の式を直接使わずに、eigen value λ_j に対応する eigen state への projection operator P_j を用いるとよい。即ち、

$$A = \sum_{j=1}^{2S+1} \lambda_j P_j, \quad P_j^2 = P_j \quad (42)$$

$$\therefore f(A) = \sum_{j=1}^{2S+1} f(\lambda_j) P_j \quad (43)$$

P_j を explicit に求めるには、次のようにすればよい。

$\varphi(A) = 0$ の時、 $\varphi(A) = \prod_i (A - \lambda_i)$ として、

$\frac{1}{\varphi(z)} = \frac{1}{\prod_i (z - \lambda_i)} = \sum_i \frac{A_i}{z - \lambda_i}$ となる A_i を用いて

$$P_j = A_j \prod_{i \neq j} (A - \lambda_i) \quad (44)$$

(ii) spin $S=1$ の case。特に spin $S=1$ の場合を explicit に求めてみよう。 $A = \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ の eigen value は 1, -1, -2 であるから、最小多項式は、

$$\varphi(A) = (A^2 - 1)(A + 2) = A^3 + 2A^2 - A - 2$$

$$\therefore \underline{A^3 = 2 + A - 2A^2} \quad (45)$$

(i)の方法で projection operator P_j を求めると、

$$\lambda_1 = 1 \rightarrow P_1 = \frac{1}{6} (A+1)(A+2)$$

$$\lambda_2 = -1 \rightarrow P_2 = -\frac{1}{2} (A-1)(A+2)$$

$$\lambda_3 = -2 \rightarrow P_3 = \frac{1}{3} (A-1)(A+1)$$

依つて、

$$e^{KA} = e^{KP_1} + e^{-KP_2} + e^{-2KP_3}$$

$$\therefore \underline{e^{KA} = a + bA + cA^2} \quad (46)$$

但し

$$a = \frac{1}{3} (e^K + 3e^{-K} - e^{-2K})$$

$$b = \sinh K \quad (47)$$

鈴木増雄

$$c = \frac{1}{6} (e^K - 3e^{-K} + 2e^{-2K})$$

依つて、pair product density matrix ρ_S は、

$$\rho_S = a^{N_p} \pi_{\text{pair sym}} (1 + x_1 A_{ij} + x_2 A_{ij}^2) \quad (48)$$

但し、 $x_1 = b/a$, $x_2 = c/a$

この ρ_S を使つて、spin $S=1/2$ のときと同様にして、いろいろな議論が出来る。例えば、Bethe 近似を用いて、Curie 点を求めることも出来る。詳細は次の機会に譲ることにしよう。

§ 9 . discussion

model density matrix ρ_S を広くいろいろな場合に適用して、今まで
の方法より、ずつと簡単な方法で、同じ程度の結果を得ることが出来た。した
がつて、この ρ_S を Bethe 近似でなしに、もつと高い近似で、或いは、転移点
近傍では厳密に、取り扱い得る可能性がある。これは今後の問題である。本論
の anti-ferro の場合に、横成分が大きくなると共に Curie 点が上るのは
注目に値する。これは、pair density matrix を reduce して、(9)の型に
した時、 $S_i^z S_j^z$ 成分の X が、 r と共に、anti-ferro では大きくなるからで
ある。因みに、ferro では、 r と共に z 成分が小さくなり、Curie 点が下る。

最後に、絶えず、親切な御指導を下さつた久保先生に深く感謝致します。又
有意義な discussion をして下さつた横田紀男先生、小幡さん、金子さんや
久保研の皆様に感謝致します。

(reference)

- 1) M.Suzuki, Bussei Kenkyu 4 (1965)
- 2) R.Kubo, Y.Obata, A.Ohno, Busseiron Kenkyu 47 (1952), 35.
- 3) Y.Y.Li, Phys. Rev. 84 (1951), 721.
- 4) T.Oguchi, Y.Obata, Prog. Theor. Phys. 9 (1953), 359.
- 5) T.Nagamiya, K.Yoshida, R.Kubo, Adv. Phys. 4 (1955), 88.