

では $p_c \approx 0.21$, fcc では $p_c \approx 0.17$ という結果がえられる。なおここでの方法は Heisenberg スピンにも拡張できるが相転移と関連のある問題は考えていないので省略した。

Heisenberg Model のスピン系 小 口 武 彦 (東京教育大)

強磁性分子場の一体の Hamiltonian は

$$H_{(1)}(i) = -2Jz \bar{S} S_i^z \quad (1)$$

スピンは $1/2$ とし, 外場は簡単に入れられるから省略し, 他は通常用いられる記号である。スピンの平均値は

$$\langle S^z \rangle = \text{Tr} S_i^z e^{-\beta H_{(1)}} / \text{Tr} e^{-\beta H_{(1)}} = (1/2) \tanh \beta z J \bar{S} \quad (\beta = 1/kT) \quad (2)$$

一方全系の状態和を最大にする $\langle S^z \rangle$ の解は (2) で $\bar{S}$ を $\langle S^z \rangle$ で置きかえたものになるから $\bar{S} = \langle S^z \rangle$ は self-consistent である。

これを拡張した著者の二体スピン Hamiltonian は

$$H_{(2)}(i, j) = -2J(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - 2J(z-1) \bar{S} (S_i^z + S_j^z) \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \langle S^z \rangle &= \frac{1}{2} \frac{\text{Tr} (S_i^z + S_j^z) e^{-\beta H_{(2)}}}{\text{Tr} e^{-\beta H_{(2)}}} \\ &= \frac{1}{2} \frac{\cosh \beta 2J(z-1) \bar{S}}{\cosh \beta 2J(z-1) \bar{S} + e^{-\beta J} \cosh \beta J} \end{aligned} \quad (4)$$

然し (4) は全系の状態和を最大にする解と一致しない。一方 Kasteleijn-Kranendonk の constant coupling 近似では

$$H_{(2)}(i, j) = -2J(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - a(S_i^z + S_j^z) \quad (5)$$

と a を parameter に残し, 全系の状態和を最大にするように a を求めて

$$a = (z-1/2 \beta) \log[(1+2\langle S^z \rangle)/(1-2\langle S^z \rangle)] \quad (6)$$

著者が滞米中 H. B. Callen や W. Marshall にきいた所によると (2) から S を求めて⁽³⁾, (4) に代入すると (6) が求まる。

この理由を考えてみる。全系のエネルギーは

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \text{Tr} \frac{1}{z} \sum_{\langle i, j \rangle} (-2J) \{ \sum_k (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_k) + \sum_{k'} (\vec{S}_j \cdot \vec{S}_{k'}) - (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) \} \rho_N \\ &= (N/2) \langle -2J (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - 2J(z-1) \bar{S} (S_i^z + S_j^z) \rangle \quad (7) \end{aligned}$$

i, j は nearest neighbor (n.n.) の格子点, $\sum_k, \sum_{k'}$ は夫々 i, j の n.n. の和である。一方また

$$\langle H \rangle = \text{Tr} (-2J) \sum_{\langle i, k \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_k) \rho_N = (N/2) \langle -2Jz \bar{S} S_i^z \rangle \quad (8)$$

但し ρ_N は全系の密度行列, (7), (8) の $\bar{S}$ は夫々 $\text{Tr}'_{(ij)} S_k \rho_N, \text{Tr}'_{(i)} S_k \rho_N$ の多少の違いはある。ここに $\text{Tr}'_{(ij)}$ 及び $\text{Tr}'_{(i)}$ は夫々 i, j 及び i を除いたすべてのスピンの Trace である。(7), (8) は勿論 (3), (1) と一致している。これから結局

$$\text{Tr}'_{(i)} H_2(i, j) \rho_N = \langle H_{(1)}(i) + \text{const.} \rangle \quad (9)$$

つまり密度行列を知らなくても $H_{(1)}(i)$ [(1) 式] を知れば, $H_{(2)}(i, j)$ [(3) 式] が推定出来る。そこで (3) を拡張して

$$H_{(2)}'(i, j) = -2J (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) - (a - b\bar{S}) (S_i^z + S_j^z) - b S_i^z S_j^z \quad (10)$$

とおき constant coupling 近似に

$$\sigma \equiv \text{Tr} S_i^z S_j^z e^{-\beta H_{(2)}'} / \text{Tr} e^{-\beta H_{(2)}'} \quad (11)$$

を追加して議論を進めることが出来る。然し (9) の考えを拡張して

$$\text{Tr}'_{(i, j)} H_3(i, j, k) \rho_N = \langle H_{(2)}'(i, j) + \text{const.} \rangle \quad (12)$$

になるように $H_{(3)}$ をきめると (i, j, k は一列に並んだスピン),

$$\begin{aligned} H_{(3)}(i, j, k) = & -2J[(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) + (\vec{S}_j \cdot \vec{S}_k)] - b[S_i^z S_j^z + S_j^z S_k^z] \\ & - c S_i^z S_k^z - [2J(z-1)\bar{S} - b\bar{S} - c\bar{S}](S_i^z + S_k^z) \\ & - [2J(z-2)\bar{S} - 2b\bar{S}]S_j^z \end{aligned} \quad (13)$$

変数 $\bar{S}$, b , c , $\langle S^z \rangle$ は次の四式から求まる。

$$\begin{aligned} \langle S^z \rangle = & \text{Tr } \rho_{(1)} S_i^z = \text{Tr } \rho_{(2)}' (1/2) (S_i^z + S_j^z) \\ = & \text{Tr } \rho_{(3)} (1/2) (S_i^z + S_k^z) = \text{Tr } \rho_{(3)} S_j^z \end{aligned} \quad (14)$$

但し $\rho_{(1)}$, $\rho_{(2)}'$, $\rho_{(3)}$ は夫々 (1), (10), (13) より作った規格化された密度行列である。

一次元の Heisenberg 模型

桂 重俊, 猪苗代盛 (東北大)

anisotropic な Heisenberg Model の Hamiltonian

$$H = -\frac{1}{2} \sum J_{\perp} (r_e^x \sigma_{e+1}^x + r_e^y \sigma_{e+1}^y) + J_{11} r_e^z r_{e+1}^z - m \sum r_e^z$$

を考える, $-J_{11} = J_{\perp} < 0$ の場合の $N=6$ ground state wave が $J_{11} = 0$ の場合のそれにきわめて近い性質を示すので, J_{11} に比例する項を相互作用として 3 次の order まで, 分配函数, Ground State の Energy, 帯磁率等を求めた。摂動項は発生消滅演算子の 2 次の項と 4 次の項を含むが, 前者の現われる過程は常に対応する後者の過程と一緒にして考えることにより modified linked cluster expansion の定式化が得られた。

Ground State Energy は 2 次までの近似で