

クラシカルハイゼンベルクモデルの ランダム混晶

東北大工 桂 重 俊

Classical Heisenberg model は中村, Fisher, Joyce, Stanley 等によって 1 次元の場合の比熱・帯磁率などが求められている。ここでは A・B 2 成分よりなるランダムな site (及び bond) model について 1 次元系および無限 Bethe 格子の系の比熱・帯磁率を厳密に求めることが出来たので報告する。

$s = \pm 1$ で A 原子及び B 原子を示すと configuration $\{s_i\}$ が与えられたときのハミルトニアン $H\{s_i\}$ は

$$-\frac{H\{s_i\}}{kT} = K_{i,j} \cos (\mathbb{H})_{ij} + C_i \cos \theta_i \quad (1)$$

$$K_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{1+s_i}{2} & \frac{1-s_i}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_{AA} & K_{AB} \\ K_{BA} & K_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1+s_j}{2} \\ \frac{1-s_j}{2} \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$C_i = \begin{bmatrix} \frac{1+s_i}{2} & \frac{1-s_i}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_A \\ C_B \end{bmatrix} = [C_A \ C_B] \begin{bmatrix} \frac{1+s_i}{2} \\ \frac{1-s_i}{2} \end{bmatrix} \quad (3)$$

$$K_{AA} = J_{AA}/2kT, \dots \quad C_A = \mu_A H/kT, \dots$$

θ_i は H の方向とクラシカルスピン σ_i のなす角度, $(\mathbb{H})_{ij}$ はスピン σ_i と σ_j とのなす角度である。

$$\begin{aligned} \prod_{i=1}^N \exp(C_i \cos \theta_i) &= 1 + \sum_{i=1}^N C_i \cos \theta_i + \sum_{i=1}^N \frac{C_i^2}{2} \cos^2 \theta_i \\ &+ \sum_{i>j} \sum C_i C_j \cos \theta_i \cos \theta_j + \dots \quad (4) \end{aligned}$$

$$\exp(K \cos \langle H \rangle_{ij}) = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \left(\frac{\pi}{2K}\right)^{1/2} I_{\ell+1/2}(K) \times \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\theta_j, \varphi_j) Y_{\ell m}(\theta_i, \varphi_i) \quad (5)$$

を状態和の表式の中に入れ $d\Omega_j$ の積分を端から行って行くと多重和の大部分が消えて

$$\begin{aligned} \log \frac{Z_N}{4\pi} = & \sum_{\text{bond}} \log \left(4\pi \frac{\sinh K_{ij}}{K_{ij}} \right) \\ & + \frac{1}{3} \left[\frac{1}{2} \sum_{\text{point}} C_i^2 + \sum_{\langle ij \rangle} C_i L(K_{ij}) C_j \right. \\ & + \sum_{\langle ij \rangle \langle jk \rangle} C_i L(K_{ij}) L(K_{jk}) C_k \\ & \left. + \sum_{\langle ij \rangle \langle jk \rangle \langle kl \rangle} C_i L(K_{ij}) L(K_{jk}) L(K_{kl}) C_l + \dots \right] \quad (6) \end{aligned}$$

を得る。ここに $L(x)$ は Langevin function である。 s_i の Projectivity により

$$f(K_{ij}) = \begin{bmatrix} \frac{1+s_i}{2} & \frac{1-s_i}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f(K_{AA}) f(K_{AB}) \\ f(K_{BA}) f(K_{BB}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1+s_i}{2} \\ \frac{1-s_i}{2} \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$g(C_i) = \begin{bmatrix} \frac{1+s_i}{2} & \frac{1-s_i}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g(C_A) \\ g(C_B) \end{bmatrix} = [g(C_A) g(C_B)] \begin{bmatrix} \frac{1+s_i}{2} \\ \frac{1-s_i}{2} \end{bmatrix} \quad (8)$$

の性質があるので (6) より比熱 C は

$$\begin{aligned} \frac{C}{N_B k} = & p_A^2 \left(1 - \frac{K_{AA}^2}{\sinh^2 K_{AA}} \right) + 2 p_A p_B \left(1 - \frac{K_{AB}^2}{\sinh^2 K_{AB}} \right) \\ & + p_B^2 \left(1 - \frac{K_{BB}^2}{\sinh^2 K_{BB}} \right) \quad (T > T_c) \quad (9) \end{aligned}$$

桂 重俊

を得る。

帯磁率を求めるため $\mu_{i_1} L(K_{i_1, i_2}) L(K_{i_2, i_3}) \cdots L(K_{i_{n-1}, i_n}) \mu_{i_n}$ の平均を求めよう。(2)・(3) を上式に入れて各点における掛算を行ってから $\langle s_i \rangle = 2p_A - 1$ を代入すると

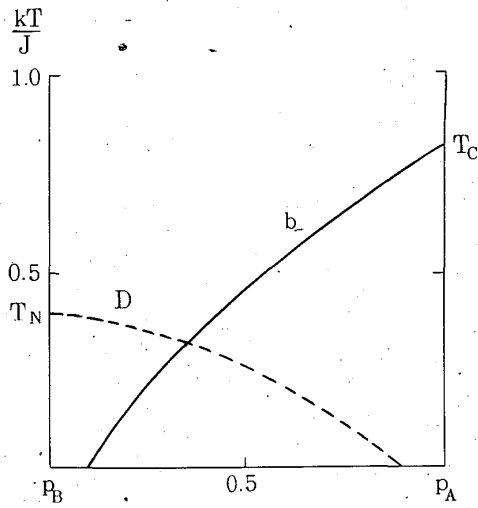
$$\begin{aligned}
 & \langle \mu_1 L(K_{12}) L(K_{23}) \cdots L(K_{n-1, n}) \mu_n \rangle \\
 &= \langle [\mu_A \ \mu_B] \begin{bmatrix} \frac{1+s_1}{2} \\ \frac{1-s_1}{2} \end{bmatrix} \prod_{i=1}^{n-1} \left\{ \begin{bmatrix} \ell_{AA} & \ell_{AB} \\ \ell_{BA} & \ell_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1+s_{i+1}}{2} \\ \frac{1-s_{i+1}}{2} \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} \mu_A \\ \mu_B \end{bmatrix} \rangle \\
 &= [\mu_A \ \mu_B] \begin{bmatrix} p_A \\ p_B \end{bmatrix} \left\{ \begin{bmatrix} \ell_{AA} & \ell_{AB} \\ \ell_{BA} & \ell_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_A \\ p_B \end{bmatrix} \right\}^{n-1} \begin{bmatrix} \mu_A \\ \mu_B \end{bmatrix} \quad (10)
 \end{aligned}$$

を得る。ここに $\ell_{AA} = L(K_{AA}) \cdots$ である (10) をすべての chain について加えると、無限 Bethe 格子の並進対称性と $\sum_{n=1} V^n = V(1-V)^{-1}$ を用いて高温帯磁率 χ が

$$\begin{aligned}
 \frac{3kT\chi}{N} &= \frac{1}{D} \{ (p_A \mu_A^2 + p_B \mu_B^2) + p_A [p_A \mu_A^2 - (z-1)p_B \mu_B^2] L(K_{AA}) \\
 &\quad + p_B [-(z-1)p_A \mu_A^2 + p_B \mu_B^2] L(K_{BB}) + 2z p_A p_B \mu_A \mu_B L(K_{AB}) \\
 &\quad - (z-1) p_A p_B (p_A \mu_A^2 + p_B \mu_B^2) [L(K_{AA}) L(K_{AB}) - L^2(K_{AB})] \} \\
 &\quad (11)
 \end{aligned}$$

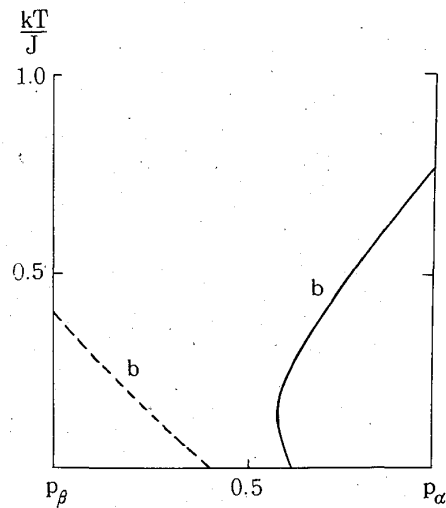
$$\begin{aligned}
 D &= [1 - (z-1) p_A L(K_{AA})] [1 - (z-1) p_B L(K_{BB})] \\
 &\quad - (z-1)^2 p_A p_B L^2(K_{AB})
 \end{aligned}$$

と得られる。これは対応する Ising model の表式において $\tanh K_{AA}$ を $L(K_{AA})$ 等でおきかえたものである。bond model も同様にして扱うことが出来る。帯磁率または staggered な帯磁率が発散する点として T_c 及び T_N を p に対して求めると A が強磁性、B が反強磁性的のとき site model では図 1 のように、bond model では図 2 のようになる。



$$J_{AA} = J \quad J_{BB} = -0.5J \\ J_{AB} = 0.5J$$

図1 siteモデル



$$J_\alpha = J \quad J_\beta = 0.5J$$

図2 bondモデル

Cayley 樹上の Heisenberg 模型

京大理 小 川 泰

一様な系とみなした Cayley 樹は Ising 模型の Bethe 近似が厳密な扱いとなる系であることを Kurata-Kikuchi-Watari¹⁾ が指摘して以来 Bethe 格子と呼ばれている。しかし最近、有限系を考えた上で熱力学極限をとると自発磁化を伴わない帯磁率発散が起ったり、Bethe 近似と一致しないことが Matsuda²⁾、Eggarter³⁾ により独立に指摘された。これは表面効果のせいであり、この系が本質的に一様でないことによっている。Cayley 樹は閉じた道がない構造という意味では一次元的であるが、表面自由度が全自由度に対して占める割合が熱力学極限においても有限であるという点では、むしろ無限次元的である。通常の次元数概念を適用するとこのように低次元性と高次元性が共存している。この系自体は非現実的かも知れないが、いかなる物理的性質にはいかなる