

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⁾ $S = \frac{1}{2}$ 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 Asano²⁾ 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 Hemmer⁴⁾ 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 Kunz⁵⁾, Ruelle⁶⁾ 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 $N \rightarrow \infty$ 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 $\text{spin } \frac{1}{2}$ の1次元 Ising 模型と、最近接相互作用を持つ higher spin ($\text{spin } 1, \text{spin } \frac{3}{2}$) 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)。

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

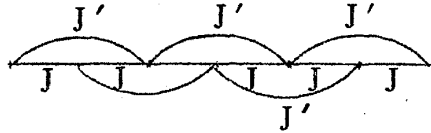


図 1

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

と書ける。磁場のない場合のこの系の性質は $H=0$ の場合 Montroll⁷⁾ 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 transfer 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

$$\begin{pmatrix} e^{K+K'+C} & e^{-K+K'-C} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-K+K'+C} & e^{K-K'-C} \\ e^{K-K'+C} & e^{-K+K'-C} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-K-K'+C} & e^{K+K'-C} \end{pmatrix} \quad (2)$$

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

$$\lambda^4 - e^{K+K'}(e^C + e^{-C})\lambda^3 + e^{2K'}(e^{2K} - e^{-2K})\lambda^2 + e^{(-K+K')}(e^{2K'} - e^{-2K'})(e^C + e^{-C})\lambda - (e^{2K'} - e^{-2K'})^2 = 0 \quad (3)$$

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、 $K' \geq 0$ 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

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

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 neighbor 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づくことがわかる。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 neighbor 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

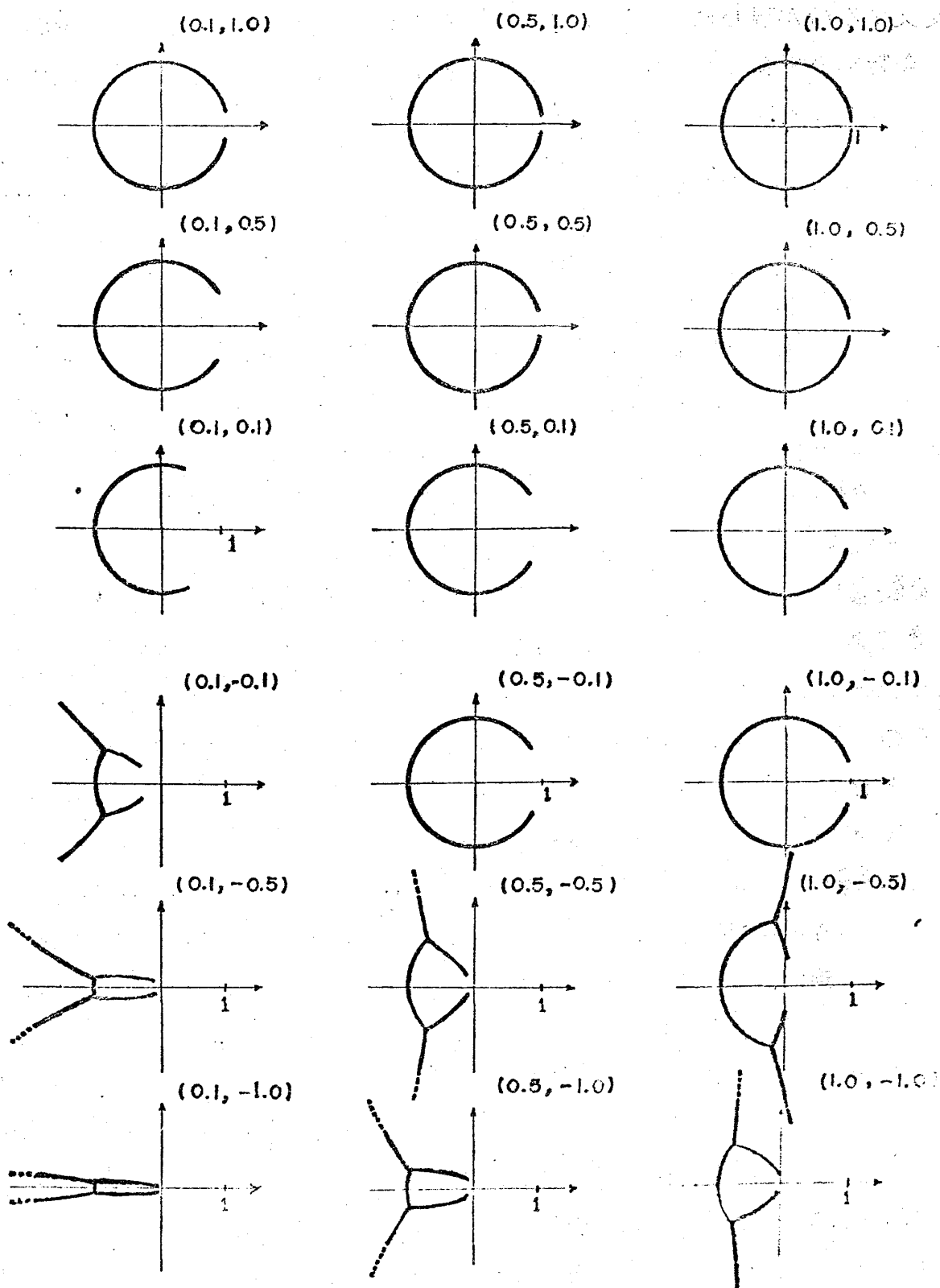


図 2

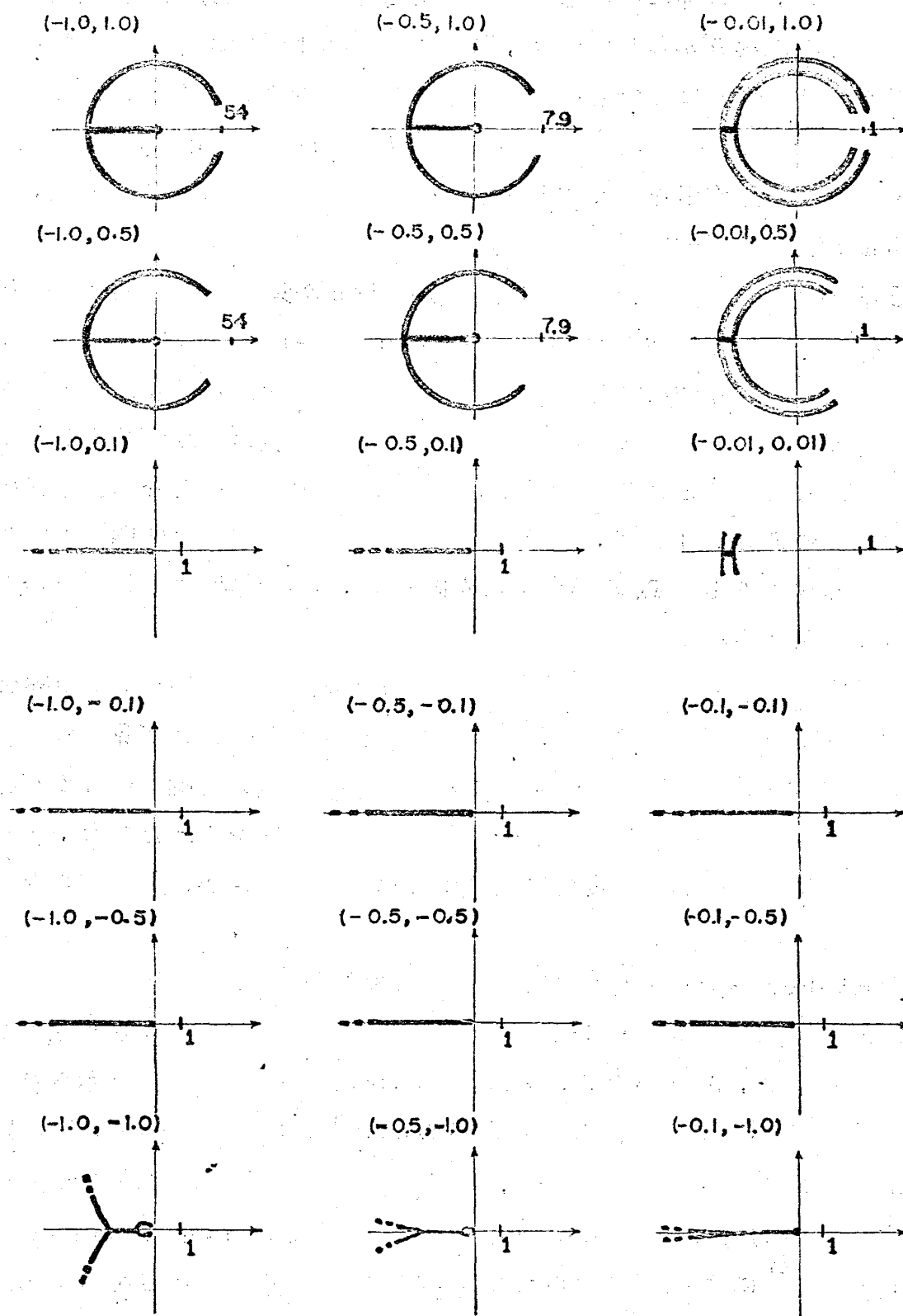


図 3

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，枝の出はじめ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づ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，Asano⁹⁾，Suzuki¹⁰⁾，Griffiths¹¹⁾ により示されている。反強磁性の場合には，Kawabata & Suzuki¹²⁾ 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

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

で与えられ¹³⁾ 固有方程式は

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

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

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

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 $\theta = \frac{1}{3}\pi$, $\frac{2}{3}\pi$ 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 spin $\frac{1}{2}$ の場合¹⁴⁾ transfer matrix は

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

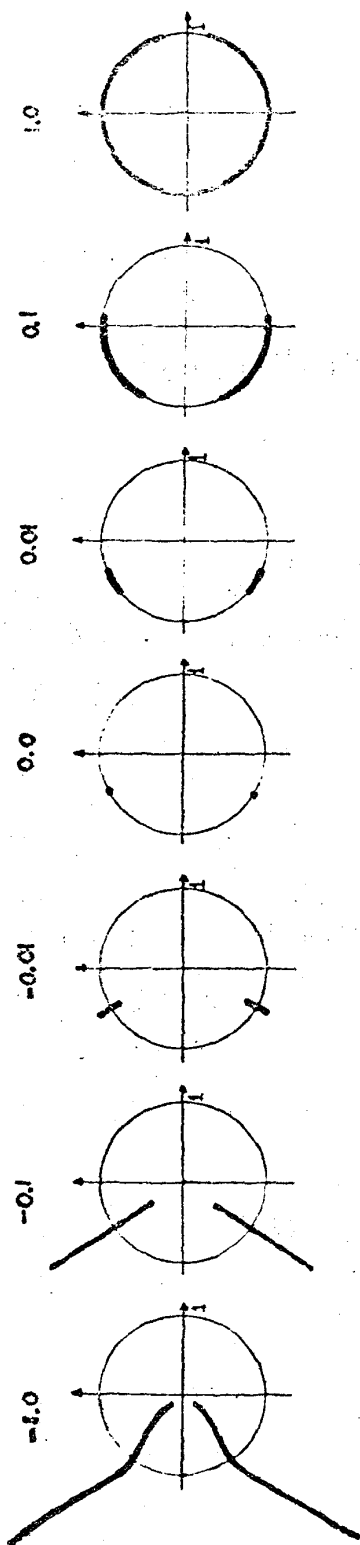


図 4

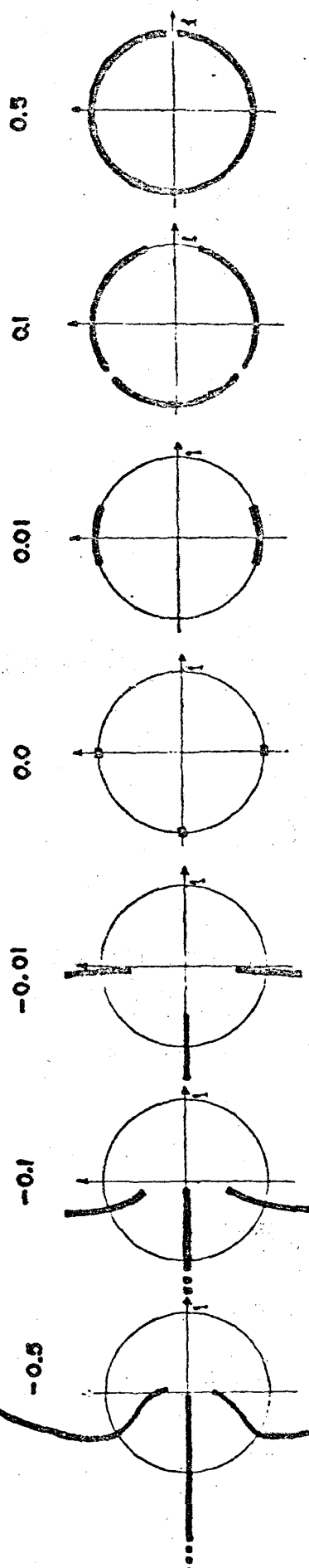


図 5

となる。ここで $L = g^{\mu_B H} / 2kT$ 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 $\theta = \pi/2, \pi, 3\pi/2$ 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、 $S = 1/2$ 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 $2 \times \infty$ の系についての結果は述べなかったが、 $2 \times \infty, 3 \times \infty, 4 \times \infty \dots$ 等の系についての結果を外挿する事により、 $\infty \times \infty$ 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).