
修士論文 (1992年度)

スピン $1/2$ ハイゼンベルグ鎖の 磁場中での自由エネルギー

東京大学 物性研究所 高橋 (實) 研究室
中村浩章

(1993年2月10日受理)

1 序論

スピン $1/2$ のハイゼンベルグ鎖の熱力学的性質は, Bethe 仮説を使い積分方程式で与えられることが高橋達 [3][5] によって 1970 年代に示された。しかし最近これとは別の方法が、考えられた。それは鈴木-Trotter 変換を使い、一次元形の量子スピン系に虚時間 (温度) を加え二次元にマップする方法である。このマップされた二次元の系はあたかも "チェッカーボード" のようになる。この系に対して、量子モンテカルロ法をつかうと低温での振る舞いがもとまる。別役 [12] はこの系の転送行列を定義し、これを使い熱力学的諸量を数値計算した。しかしこの方法は精度を上げるため Trotter 数を増やすにつれ行列次元が指数関数的に増えると言う問題がある。

またこの量子転送行列を Bethe 仮説よって対角化することも高麗 [13] によって考えられた。(Thermal Bethe 仮説法) XXZ 模型 [(1) 式参照] は 6 バーテックス模型の対角方向での転送行列に等しい。この問題を Bethe 仮説で扱うことは Bariev 達 [11] によってすでに行なわれていた。高麗は実際に等方的ハイゼンベルグ模型の場合に Trotter 数無限大に数値外挿することにより、自由エネルギー密度及び帯磁率を計算した。これは、山田-高橋 [1] の積分方程式に寄る計算と同じ結果を得た。まだ山田 [2] は第二固有値も数値計算し、それにより相関距離も計算出来ることを示した。

XXZ 模型を一般化した XYZ 模型 [(2) 式参照] の量子転送行列は、8 バーテックス模型を対角方向で解くことに帰着する。さらにこれは不均一な

8 バーテックス模型 [9] の特別な場合であることが鈴木 - 阿久津 - 和達 [15] によって示された。

しかしながらまだトロッター数は有限のままで理論に含まれていた。

トロッター数はいわば理論構築の足場であり物理量ではない。従ってより完全な理論にするにはこれを取り外す必要がある。

これを高橋 [6][7] は実現し、第一固有値及び第二固有値を求めるために無限数列に対する方程式がえられた。

これにより数値計算が簡単にできるようになった。

この方程式でえらる自由エネルギーの値は熱力学積分方程式で求められるもの [1] と数値的に同じになっている。

本論文では、高橋の方法を使い磁場中での強磁性ハイゼンベルグ鎖の自由エネルギーを数値計算した。これによりの自由エネルギーの温度依存性は、 $T^{0.5}$ の冪で展開できた。そしてその係数に磁化依存性が、磁化の小さい時は m^2 の冪ではいってくる。今回の計算でその二次のオーダー ($(m^2)^2$) まで求まった。

第 2 章では高橋の方法を説明し、第 3 章で数値計算の方法、第 4 章で計算の結果をまとめる。さらに第 5 章で今後の研究課題を示したい。

XXZ 鎖模型

$$\mathcal{H} = -J \sum_{j=1}^N (S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + \Delta S_j^z S_{j+1}^z) - 2h_z \sum_{j=1}^N S_j^z \quad (1)$$

$(J > 0, \infty > \Delta > -\infty)$

XYZ 鎖模型

$$\mathcal{H} = - \sum_{j=1}^N (J_x S_j^x S_{j+1}^x + J_y S_j^y S_{j+1}^y + J_z S_j^z S_{j+1}^z), \quad (2)$$

$J_z \geq J_y \geq |J_x|$

2 $S=\frac{1}{2}$ XXZ 鎖の基本方程式

2.1 量子転送行列

(1) 式の XXZ 模型の分配関数 Z は、(3) 式で表せる。

$$\begin{aligned}
 Z &= \lim_{M \rightarrow \infty} Z_M, \\
 Z_M &= \text{Tr} \{ \exp[-\mathcal{H}_1/(MT)] \exp[-\mathcal{H}_2/(MT)] \}^M, \\
 \mathcal{H}_1 &\equiv - \sum_{j=\text{odd}} \{ J(S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + \Delta S_j^z S_{j+1}^z) + h_z(S_j^z + S_{j+1}^z) \}, \\
 \mathcal{H}_2 &\equiv - \sum_{j=\text{even}} \{ J(S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + \Delta S_j^z S_{j+1}^z) + h_z(S_j^z + S_{j+1}^z) \}. \quad (3)
 \end{aligned}$$

自由エネルギーを調べるため図 (1 (b)) のような実方向への転送行列を考える。(図 (1 (a))) はトロッター方向への転送行列で基底エネルギーを求める際に使う。[14] 参照) この XXZ 模型の転送行列は $2M \times N$ ボンドの 6 バーテックス模型になる。そのためにまず分配関数 Z を 6 バーテックス模型を意識した形に書き換えてみる。

$$\begin{aligned}
 Z_M &= \sum_{\{\sigma\}} \prod_{j=1}^N \prod_{i=1}^M B(\sigma_{2i+j,j} \sigma_{2i+j+1,j}; \sigma_{2i+j,j+1} \sigma_{2i+j+1,j+1}), \quad (4) \\
 &\sigma_{i,j} = \pm 1; (i = 1, 2, \dots, 2M, j = 1, 2, \dots, N) \\
 &\sigma_{2M+1,j} = \sigma_{1,j}, \& \sigma_{i,N+1} = \sigma_{i,1} \\
 B(\sigma_1 \sigma_2; \sigma'_1 \sigma'_2) &= \begin{bmatrix} b & 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & a & 0 \\ 0 & a & 0 & 0 \\ c & 0 & 0 & b' \end{bmatrix}, \\
 a &= \exp(-J\Delta/4MT) \sinh(J/2MT), \\
 b &= \exp[(J\Delta + 4h_z)/4MT], \\
 b' &= \exp[(J\Delta - 4h_z)/4MT], \\
 c &= \exp(-J\Delta/4MT) \cosh(J/2MT). \quad (5)
 \end{aligned}$$

この形では、トロッター方向には下向きスピン数 (k) が保存するが実空間方向には k が保存しない。ここで実空間方向に k を保存するように変形し、 k をつかって状態を表す。そのため $\sigma_{l,m}$ を $(-1)^{l+m+1} \sigma_{l,m}$ に変換する。すると分配関数 Z は (6) 式のようにになる。

$$Z_M = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{j=1}^N \prod_{i=1}^M A(\sigma_{2i+j,j} \sigma_{2i+j+1,j}; \sigma_{2i+j,j+1} \sigma_{2i+j+1,j+1}), \quad (6)$$

$$A(\sigma_1\sigma_2; \sigma'_1\sigma'_2) = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & b' & 0 \\ 0 & b & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a \end{bmatrix},$$

さらに 6 バーテックス模型の $2^{2M} \times 2^{2M}$ の実空間方向の diagonal-to-diagonal(DTD) 転送行列が具体的に次のように表せる。
(図 (1 (c)) 参照。)

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_j &\equiv \prod_{i=1}^M A(\sigma_{2i+j,j}\sigma_{2i+j+1,j}), \\ &= \begin{cases} \mathbf{T}_1 & j = \text{odd} \\ \mathbf{T}_2 & j = \text{even} \end{cases} \end{aligned} \quad (7)$$

ここでは Trotter 方向の周期的境界条件をつかった。さらにシフト演算子 $\mathbf{R}$ を定義する。

$$\mathbf{R} \equiv \delta_{\sigma_1, \sigma'_2} \delta_{\sigma_2, \sigma'_3} \cdots \delta_{\sigma_{2M}, \sigma'_1} \quad (8)$$

この $\mathbf{R}$ は (8) 式と周期的境界条件より次の性質をみたす。

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^{2M} &= 1 \text{ (Identity Operator)} \\ \mathbf{R}\mathbf{T}_1 &= \mathbf{T}_2\mathbf{R} \\ [\mathbf{T}_1\mathbf{R}, \mathbf{R}^{-2}] &= 0 \end{aligned} \quad (9)$$

転送行列とシフト演算子 $\mathbf{R}$ をつかって分配関数 Z をあらわすと (6) 式、(7) 式、(8) 式より

$$\begin{aligned} Z_M &= \text{Tr}(\mathbf{T}_1\mathbf{T}_2)^{N/2} \\ &= \text{Tr}(\mathbf{T}_1\mathbf{R}\mathbf{T}_1\mathbf{R}^{-1})^{N/2} \\ &= \text{Tr}(\mathbf{T}_1\mathbf{R})^N (\mathbf{R}^{-2})^{N/2} \end{aligned} \quad (10)$$

$\mathbf{T}_1\mathbf{R}$ と $\mathbf{R}^{-2}$ は可換なので同時固有ベクトルを持つ。 $\mathbf{R}^{2M} = 1$ と、この固有ベクトルをつかうと $\mathbf{R}$ の固有値は $\exp\{i(2\pi \times \text{integer})/2M\}$ とあらわせる。以下では簡単のため $N = 2M \times \text{integer}$ として考える。そしてあらたに転送行列 $\mathbf{T} \equiv \mathbf{T}_1\mathbf{R}$ と定義すると、

$$\begin{aligned} Z_M &= \text{Tr}(\mathbf{T}_1\mathbf{R})^N, \quad \text{for } N = 2M \times \text{integer} \\ &= \text{Tr}\mathbf{T}^N \\ &\quad \mathbf{T}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{2M}; \sigma'_1, \sigma'_2, \dots, \sigma'_{2M}) \\ &\quad \equiv A(\sigma_1\sigma_2; \sigma'_{2M}\sigma'_1)A(\sigma_3\sigma_4; \sigma'_2\sigma'_3) \cdots A(\sigma_{2M-1}\sigma_{2M}; \sigma'_{2M-2}\sigma'_{2M-1}). \end{aligned} \quad (11)$$

となる。これは図 (1 (c)) を図 (1 (d)) のように変形し、DTD 転送行列を slanted-D-to-D (SDTD) 転送行列であらわしたことに等しい。

さらに図 (1 (d)) を変形することにより図 (1 (e)) になる。これは不均一な 6 バーテックス模型であり、Baxter によって row-to-row (RTR) 転送行列の固有値問題として解かれている。トロッター数 M の時の転送行列 T の最大固有値を Λ_M^0 とすると、 $N \rightarrow \infty$ の場合の単位格子あたりの自由エネルギー f は次のように与えられる。

$$f = -T \ln \lim_{M \rightarrow \infty} \Lambda_M^0 \quad (12)$$

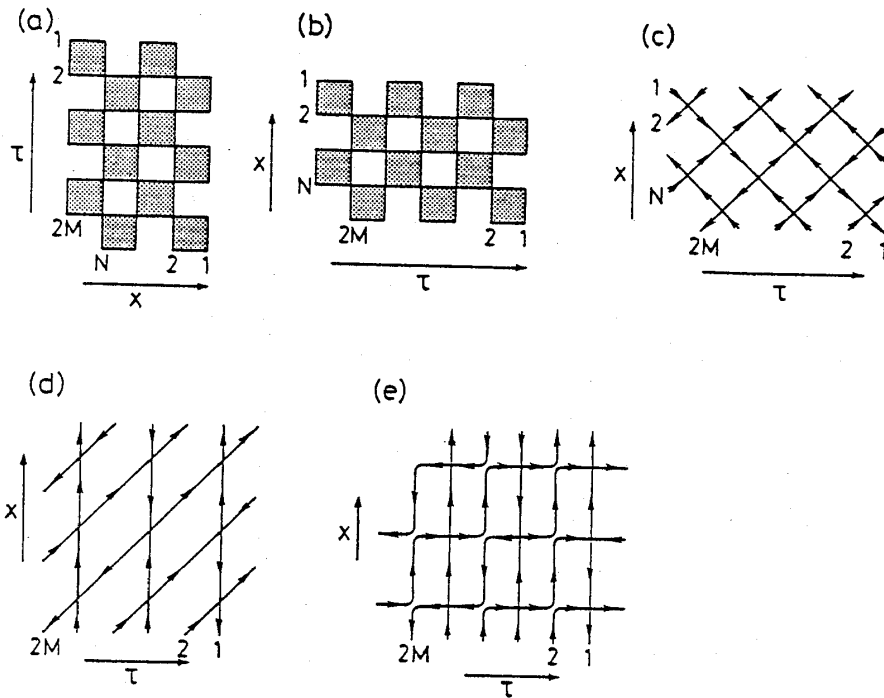


図 1: 2次元の模型

2.2 不均一な 6-vertex 模型

平方格子上の不均一な 6 バーテックス模型の RTR 転送行列 T は (13) 式であらわせる。

$$T = \text{Tr}[U_1(\sigma_1, \sigma'_1) U_2(\sigma_2, \sigma'_2) \cdots U_{2M}(\sigma_{2M}, \sigma'_{2M})], \quad (13)$$

$$\begin{aligned} U_l(++) &= \begin{bmatrix} a_l & 0 \\ 0 & b'_l \end{bmatrix}, U_l(+-) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c_l & 0 \end{bmatrix}, \\ U_l(-+) &= \begin{bmatrix} 0 & c_l \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, U_l(--) = \begin{bmatrix} b_l & 0 \\ 0 & a_l \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (14)$$

Baxter [8] によると、平方格子上的の不均一な 6 バーテックス模型は l 番目の行のボルツマンの重み (a_l, b_l, b'_l, c_l) が (15) 式のようにあらわせるとすると可解になる。

$$\begin{aligned} a_l &= \rho_l h(-v + v_l + \eta), \quad b_l = t \rho_l h(-v + v_l - \eta), \\ b'_l &= t^{-1} \rho_l h(-v + v_l - \eta), \quad c_l = \rho_l h(2\eta). \end{aligned} \quad (15)$$

この場合、RTR 転送行列 $\mathbf{T}$ の固有値問題はベーテ仮説を用いて解ける。その固有値を $\Lambda(v)$ ，固有ベクトルを f とすると、固有方程式は

$$\mathbf{T}(v)f = \Lambda(v)f \quad (16)$$

(16) 式の固有ベクトルは、

$$\begin{aligned} f(y_1, y_2, \dots, y_k) &= \sum_{\mathbf{P}} A(\mathbf{P}) \prod_{j=1}^k \phi(w_{\mathbf{P}_j}, y_j), \\ \phi(w, y) &= t^y \prod_{l=2}^y \frac{h(w - v_{l-1} + \eta)}{h(w - v_l - \eta)}, \\ A(\mathbf{P}) &= \epsilon(\mathbf{P}) \prod_{1 \leq j < m \leq k} h(w_{\mathbf{P}_j} - w_{\mathbf{P}_m} + 2\eta), \\ \epsilon(\mathbf{P}) &\equiv \begin{cases} +1 & \text{for } \mathbf{P} \text{ が偶置換} \\ -1 & \text{for } \mathbf{P} \text{ が奇置換} \end{cases} \end{aligned} \quad (17)$$

とあらわせる。ここで y_i は i 番目のスピンのいる場所で、下向きスピンの総数が k である。この下向きスピンの "粒子" として振る舞い、 k は保存される。(なおこの k が M に等しいときに固有値は最大になることがわかっている。)

さて、変数 $w_1, w_2, \dots, w_k$ は次の条件を満たさねばならない。

$$\prod_{l=1}^{2M} \frac{h(w_m - v_l + \eta)}{h(w_m - v_l - \eta)} = (-1)^{2M} \prod_{j=1}^{2M} \frac{h(w_m - w_j + 2\eta)}{h(w_m - w_j - 2\eta)}, \quad m = 1, 2, \dots, k. \quad (18)$$

この条件が満たされるとき、固有値は

$$\Lambda(v) = \left[\prod_{l=1}^{2M} a_l \right] t^k \prod_{j=1}^k \frac{h(v - w_j + 2\eta)}{h(v - w_l)}$$

$$+ \left[\prod_{l=1}^{2M} b'_l \right] t^k \prod_{j=1}^k \frac{h(v - w_j - 2\eta)}{h(v - w_l)}. \quad (19)$$

となる。

2.3 超越方程式 (トロッター数が有限)

XXZ 模型の場合、6 パーテックスに置き換えた際のボルツマン係数は

$$\begin{aligned} a_{2l} &= c_{2l} = 1, b_{2l} = b'_{2l} = 0, \\ a_{2l-1} &= a, b_{2l-1} = b, b'_{2l-1} = b', c_{2l-1} = c. \end{aligned} \quad (20)$$

である。この場合スペクトラル変数を次のように選ぶことが出来る。そして転送行列 T の固有方程式 (16) 式は 2.2 章でみたとおり解ける。

$$\begin{aligned} v &= 0, v_{2l} = \eta, \rho_{2l} = 1/h(2\eta), \\ v_{2l-1} &= v_1, t = \exp \left[\frac{h_z}{MT} \right], \\ \frac{h(v_1 + \eta)}{h(2\eta)} &= \frac{a}{c}, \cos 2\eta = \tilde{\Delta}, \\ \tilde{\Delta} &\equiv \frac{a^2 + bb' - c^2}{2a\sqrt{bb'}} = \frac{\sinh(J\Delta/2MT)}{\sinh(J/2MT)}. \end{aligned} \quad (21)$$

ここで、 $h(x) = \sin x$ としてスペクトラル変数の具体的形を見してみる。ただし、 Δ の値により (21) 式をみたすスペクトラル変数の形が変わる。

$\Delta > 1$ の場合

$$\begin{aligned} 2\eta &= i \cosh^{-1} \tilde{\Delta}, \quad \rho_{2l-1} = \frac{c}{i(\tilde{\Delta}^2 - 1)^{1/2}}, \\ v_1 + \eta &= \pi - 2\alpha, \quad 2\alpha = i \sinh^{-1} \left[a((\tilde{\Delta}^2 - 1)^{1/2})/c \right]. \end{aligned} \quad (22)$$

$\Delta < -1$ の場合

$$\begin{aligned} 2\eta &= \pi - i \cosh^{-1}(-\tilde{\Delta}), \quad \rho_{2l-1} = \frac{c}{i(\tilde{\Delta}^2 - 1)^{1/2}}, \\ v_1 + \eta &= 2\alpha, \quad 2\alpha = i \sinh^{-1} \left[a((\tilde{\Delta}^2 - 1)^{1/2})/c \right]. \end{aligned} \quad (23)$$

$1 > \Delta > -1$ の場合

$$\begin{aligned} 2\eta &= \cos^{-1} \tilde{\Delta}, \quad \rho_{2l-1} = \frac{c}{(1 - \tilde{\Delta}^2)^{1/2}}, \\ v_1 + \eta &= \pi - 2\alpha, \quad 2\alpha = i \sin^{-1} \left[a((1 - \tilde{\Delta}^2)^{1/2})/c \right]. \end{aligned} \quad (24)$$

そして、変数 $w_1, w_2, \dots, w_k$ の条件式 (18) は

$$\left[\frac{h(w_m)h(w_m - v_1 + \eta)}{h(w_m - 2\eta)h(w_m - v_1 - \eta)} \right]^M = t^{2M} \prod_{j=1}^k \frac{h(w_m - w_j + 2\eta)}{h(w_m - w_j - 2\eta)}. \quad (25)$$

となり、固有値の (19) 式は

$$\Lambda = a^M t^k \prod_{j=1}^k \frac{h(w_j - 2\eta)}{h(w_l)}. \quad (26)$$

となる。さらに $\mathbf{R}^2$ の固有値 λ_l は

$$\lambda_l = t^{2k} \prod_{m=1}^k \frac{h(w_m)h(w_m - v_1 + \eta)}{h(w_m - 2\eta)h(w_m - v_1 - \eta)} \quad (27)$$

となる。

(22),(23),(24) 式により、 $1 > \Delta > -1$ の場合では、 η は実数それ以外では虚数になる。そこで $1 > \Delta > -1$ の場合でも η を虚数にするため $h(x) = \sinh(x)$, $w_m \rightarrow iw_m$, $\alpha \rightarrow i\alpha$, $\eta \rightarrow i\eta$. とする。また、 $\Delta = 1$ のときは特殊で、 $h(x) = \sin x$ と選ぶと、スペクトル変数が不定になる。そのため $\Delta \rightarrow 1+$ として求める。すると、(22) 式より $\alpha \rightarrow 0$, $\eta \rightarrow 0$ となる。さらに、 $w_l \rightarrow 0$ (for $\forall l$) となる。ゆえに、 $h(x) = x$ と選び、スペクトル変数を -2η で割り η でスケールしてやる。また $\Delta = -1$ の場合も同様にする。

以上より、(25) 式、(26) 式、(27) 式で $w_m = x_m - \alpha$ とすると次の結果が得られる。

$$\Lambda \lambda_l^{-1/2} = \left\{ \exp \left[\frac{J\Delta}{4T} \right] \right\} \left[\frac{h(2\alpha)}{h(2\alpha + 2\eta)} \right]^M \left[\prod_{l=1}^k \frac{h(x_l + \alpha + 2\eta)h(x_l - \alpha - 2\eta)}{h(x_l - \alpha)h(x_l + \alpha)} \right]^{1/2} \quad (28)$$

$$\left[\frac{h(x_l - \alpha)h(x_l + \alpha + 2\eta)}{h(x_l + \alpha)h(x_l - \alpha - 2\eta)} \right]^M = - \left\{ \exp \left[\frac{2h_z}{T} \right] \right\} \prod_{j=1}^k \frac{h(x_l - x_j + 2\eta)}{h(x_l - x_j - 2\eta)}, \quad (29)$$

$l = 1, 2, \dots, k.$

ただし、

(i) $|\tilde{\Delta}| > 1$ の場合。

$$\begin{aligned} h(x) &= \sin x, \\ \eta &= \frac{i}{2} \operatorname{sgn}(\Delta) \cosh^{-1}(|\tilde{\Delta}|), \\ \alpha &= \frac{i}{2} \sinh^{-1} \left[a(\tilde{\Delta}^2 - 1)^{1/2} / c \right]. \end{aligned} \quad (30)$$

(ii) $\tilde{\Delta} = \pm 1$ の場合。

$$\begin{aligned} h(x) &= x, \\ \eta &= \frac{i}{2} \operatorname{sgn}(\Delta), \\ \alpha &= \frac{i}{2} \tanh \frac{J}{2MT}. \end{aligned} \quad (31)$$

(iii) $|\tilde{\Delta}| < 1$ の場合。

$$\begin{aligned} h(x) &= \sinh x, \\ \eta &= \frac{i}{2} \cos^{-1}(\tilde{\Delta}), \\ \alpha &= \frac{i}{2} \sin^{-1} \left[a(1 - \tilde{\Delta}^2)^{1/2}/c \right]. \end{aligned} \quad (32)$$

$k = M$ の時、(29) 式は、次のように書くことができる。

$$\begin{aligned} M \ln \left[\frac{h(x_l - \alpha)h(x_l + \alpha + 2\eta)h(x_l - 2\eta)}{h(x_l + \alpha)h(x_l - \alpha - 2\eta)h(x_l + 2\eta)} \right] \\ = -2 \left[l - \frac{1}{2} \right] + \frac{2h_z}{T} + \sum_{j=1}^M \ln \left[\frac{h(x_l - x_j + 2\eta)h(x_l - 2\eta)}{h(x_l - x_j - 2\eta)h(x_l + 2\eta)} \right]. \end{aligned} \quad (33)$$

特に、最大固有値 Λ_M^0 をとる場合は変数 x_l はつぎのようになる。

$$\operatorname{Re} x_1 > \operatorname{Re} x_2 > \cdots > \operatorname{Re} x_M, \quad (x_l = -\bar{x}_{M+1-l}; l = 1, 2, \dots, M). \quad (34)$$

この (34) 式をみたす変数 x_l の組をみつけ、それを (28) 式に代入すると最大固有値 Λ_M^0 がもとめられる。

2.4 超越方程式 (トロッター数の無限の極限)

2.3 章ではトロッター数 M が有限の場合の固有値等がもとまった。この章では M を無限にした場合の議論をし、解析的な式が導出できることを示す。

スペクトラル変数 α は、 J/MT のオーダーなので、 M を無限にした極限では、(33) 式は次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{2J_s}{T} g(x_l) &= 2\pi \left[l - \frac{1}{2} \right] + \frac{2h_z i}{T} + \frac{1}{i} \sum_{j=1}^{\infty} \ln [f(x_l, x_j) f(x_l, -\bar{x}_j)], \\ &\text{for } l = 1, 2, \dots. \end{aligned} \quad (35)$$

ただし

$$J_s = \begin{cases} \frac{J}{4}(\Delta^2 - 1)^{1/2} & \text{for } |\Delta| > 1 \\ \frac{J}{4} & \text{for } |\Delta| = 1 \\ \frac{J}{4}(1 - \Delta^2)^{1/2} & \text{for } |\Delta| < 1 \end{cases}, \quad (36)$$

$$\begin{aligned} g(x) &\equiv \frac{h'(x)}{h(x)} - \frac{1}{2} \frac{h'(x+2\eta)}{h(x+2\eta)} - \frac{1}{2} \frac{h'(x-2\eta)}{h(x-2\eta)} \\ &= \begin{cases} \cot x - \frac{\sin 2x}{\cosh 2\theta - \cos 2x} & \text{for } |\Delta| > 1 \\ \frac{1}{x} - \frac{x}{x^2+1} & \text{for } |\Delta| = 1 \\ \coth x - \frac{\sinh 2x}{\cosh 2x - \cos 2\theta} & \text{for } |\Delta| < 1 \end{cases}, \end{aligned} \quad (37)$$

$$f(x, y) \equiv \frac{h(x-y-2\eta)h(x+2\eta)}{h(x-y+2\eta)h(x-2\eta)}. \quad (38)$$

$$\tilde{\Delta} \rightarrow \Delta, \quad \text{as } M \rightarrow \infty$$

$$2\eta = i\theta, \theta = \begin{cases} \cosh^{-1} \Delta & \text{for } \Delta > 1 \\ \cos^{-1} \Delta & \text{for } |\Delta| < 1 \\ -\cosh^{-1}(-\Delta) & \text{for } \Delta < -1 \\ \text{sgn}(\Delta) & \text{for } \Delta = \pm 1 \end{cases}. \quad (39)$$

さらに、固有値を求める (28) 式も、 M を無限にした場合に扱いやすいように次の形に変形する。

$$\Lambda_M^0 = CD^+ \left[\prod_{l=1}^M \frac{h(x_l - \alpha - 2\eta)h(x_l + \alpha + 2\eta)}{h(x_l - \alpha)h(x_l + \alpha) \{h'(-2\eta) + h(-2\eta)/(\delta_l^+ - \alpha)\}^2} \right]^{1/2}, \quad (40)$$

, ただし

$$\begin{aligned} C &\equiv e^{J\Delta/4T} \left[\frac{h(2\alpha) \{h(2\eta) + 2\alpha h'(2\eta)\}}{2\alpha h(2\eta + 2\alpha)} \right], \\ D^+ &\equiv \left[1 + \left\{ \frac{h(2\eta)}{h(2\eta) + 2\alpha h'(2\eta)} \right\}^M \right]. \end{aligned} \quad (41)$$

なお、(28) 式から (40) 式への変形には次の関係式を用いた。

$$\prod_{l=1}^M \left[h'(-2\eta) + \frac{h(-2\eta)}{\delta_l^+ - \alpha} \right] = \left[\frac{h(2\eta) + 2\alpha h'(2\eta)}{2\alpha} \right]^M + \left[\frac{h(2\eta)}{2\alpha} \right]^M \quad (42)$$

$$\delta_l^+ \equiv -i\alpha \cot \left[\frac{\pi l}{M} \right] \quad (43)$$

(40) 式において、(34) 式より

$$\Lambda_{M \rightarrow \infty}^0 = 2 \cosh(J\Delta/4T) \prod_{l=1}^{\infty} \frac{|h(2\eta - x_l)h(2\eta + x_l)|J_s}{h(x_l)h(\bar{x}_l)|h^2(2\eta)| \left[\left\{ T\pi(l - \frac{1}{2}) \right\}^2 + (J\Delta/4)^2 \right]},$$

$$= 2 \prod_{l=1}^{\infty} \left| \frac{h(2\eta - x_l)h(2\eta + \bar{x}_l)}{h^2(x_l)h^2(2\eta)} \right| \left[\frac{J_s}{T\pi(l - \frac{1}{2})} \right]^2, \quad (44)$$

ここで新たな変数 p_l を定義する。

$$p_l \equiv \begin{cases} -i \frac{\tan(2\eta)}{\tan x_l} & \text{for } |\Delta| > 1 \\ \pm \frac{1}{x_l} & \text{for } |\Delta| = 1 \\ -i \frac{\tanh(2\eta)}{\tanh x_l} & \text{for } |\Delta| < 1 \end{cases}, \quad (45)$$

これを使うと

$$\frac{J\Delta}{2T} G(p_l) = \frac{2h_z i}{T} + 2\pi \left(l - \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{i} \sum_{j=1}^{\infty} \ln [L(p_l, p_j) L(p_l, -\bar{p}_j)], \quad (46)$$

ただし

$$\begin{aligned} G(x) &\equiv x - \frac{x}{\Delta^2(x^2 + 1)}, \\ L(x, y) &\equiv \frac{iy + \left[1 - \frac{1}{\Delta^2(1-ix)} \right]}{-iy + \left[1 - \frac{1}{\Delta^2(1+ix)} \right]}, \end{aligned} \quad (47)$$

これをつかって

$$\Lambda_{\infty}^0 = 2 \prod_{l=1}^{\infty} \left[\frac{J\Delta}{4\pi T(l - \frac{1}{2})} \right]^2 \left[(p_l^2 + 1)(\bar{p}_l + 1) \right]^{1/2}. \quad (48)$$

3 数値計算

3.1 自由エネルギーの計算

(46) 式において、対数を取ったものの和を取ると計算時間が多くかかる。そこで実際の計算では先に掛け合わせ、その後に対数を取る。また無限数列 p_l は複素数なので対数が多価の関数になる。計算においては対数を取ったものの虚数部が、 $[\pi, -\pi]$ になるように "branch cut" を入れる。さらに無限数列 p_l を求めるのに、逐次代入法を使いやすいよう式をつぎのように変形する。(今回の計算では $\Delta = 1$ を扱う。)

$$\begin{aligned} p_l &= \frac{4T}{J} \left[\frac{h_z i}{T} + \pi \left(l - \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2i} \ln X_l \right], \\ X_l &= \exp \left[\frac{J p_l i}{2T(p_l^2 + 1)} \right] \prod_{j=1}^{\infty} L(p_l, p_j) L(p_l, -\bar{p}_j). \end{aligned} \quad (49)$$

l が大きくなると、 $\ln X$ の寄与がなくなり、

$$\exists L; \text{integer}, l \geq L, p_l = \frac{4T\pi}{J}(l - \frac{1}{2}) + i\text{Im}(p_l) \quad (50)$$

と振る舞う。実際の計算で複素数列 p_l を無限個とることができないので $l \geq L$ の l では (50) 式を使い近似的に無限個までの p_l の寄与を操り込む。

3.2 磁化の計算

磁化 (m) を求めるには (48) を外場; h_z で偏微分し、次の式を使う。

$$\begin{aligned} m &= -\frac{\partial f}{\partial h_z} \\ &= T \frac{\partial}{\partial h_z} \log \Lambda_\infty^0 \\ &= 2T \sum_{l=1}^{\infty} \text{Re} \frac{p_l q_l}{p_l^2 + 1} \end{aligned} \quad (51)$$

ここで、

$$q_l \equiv \frac{\partial p_l}{\partial h_z}, \bar{q}_l \equiv \frac{\partial \bar{p}_l}{\partial h_z} \quad (52)$$

である。この無限複素数列 q_l は、(42) 式を h_z で偏微分した次の式より求める。

$$\begin{aligned} q_l &= \frac{4T}{J} \left[\frac{i}{T} + \frac{J(1-p_l^2)}{4T(p_l^2+1)^2} + \frac{1}{2} Y_l \right], \\ Y_l &= \sum_{j=1}^{\infty} [m(p_l, p_j) q_j - n(p_l, p_j) q_l - m(p_l, -\bar{p}_j) \bar{q}_j - n(p_l, -\bar{p}_j) \bar{q}_l] \end{aligned} \quad (53)$$

, ただし

$$\begin{aligned} m(x, y) &= \frac{1}{iy + (1 - \frac{1}{1-ix})} + \frac{1}{-iy + (1 - \frac{1}{1+ix})}, \\ n(x, y) &= \frac{\frac{1}{(1-ix)^2}}{iy + (1 - \frac{1}{1-ix})} + \frac{\frac{1}{(1+ix)^2}}{-iy + (1 - \frac{1}{1+ix})} \end{aligned}$$

さらに 3.1 章で述べたように数列 p_l は l が大きくなると、(50) 式のように漸近的な形が与えられる。これにより数列 q_l も

$$q_l = q_L, \quad \text{for } l \geq L \quad (54)$$

となる。

4 結果と考察

今回の計算においては (1) 式で次のような値をつかった。

$$J = 1, \Delta = 1 \quad \text{i.e. 強磁性ハイゼンベルグ鎖} \quad (55)$$

そして z 方向の磁場； h_z を与えてその時の自由エネルギー； $f(T, h_z)$ をもとめた。さらに、自由エネルギーの磁化依存性を調べるために、次のように Legendre 変換した。

$$g(T, m) \equiv f(T, h_z) + m h_z \quad (56)$$

この $g(T, m)$ の値は表 (1)a のように各温度に対して求めることができた。

この値を使い $g(T, m)$ の、温度及び磁化依存性を調べた。

$g(T, m)$ は $T^{\frac{1}{2}}$ で展開でき、かつ、その各係数は磁化が小さいとき m^2 で展開できることがわかった。(図 (2) 参照)

$$g(T, m) = a_0(m^2)T^{1.5} + a_1(m^2)T^2 + a_2(m^2)T^{2.5} + a_3(m^2)T^3 + O(T^{3.5}), \quad (57)$$

ここで、

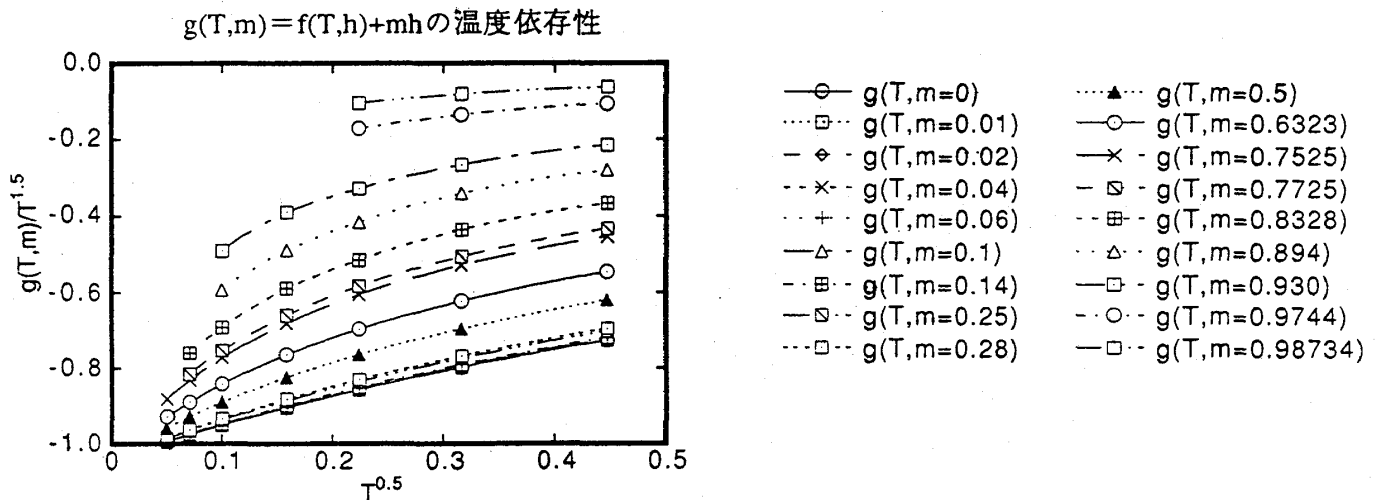
$$a_0(m^2) = -1.04218$$

$$a_1(m^2) = 1.0 + 3m^2 + 1.69m^4 + O(m^6)$$

$$a_2(m^2) = -0.94 - 9.5m^2 - 10m^4 + O(m^6)$$

$$a_3(m^2) = 0.9 + 16m^2 + 20m^4 + O(m^6)$$

となった。[図 (3) 参照]



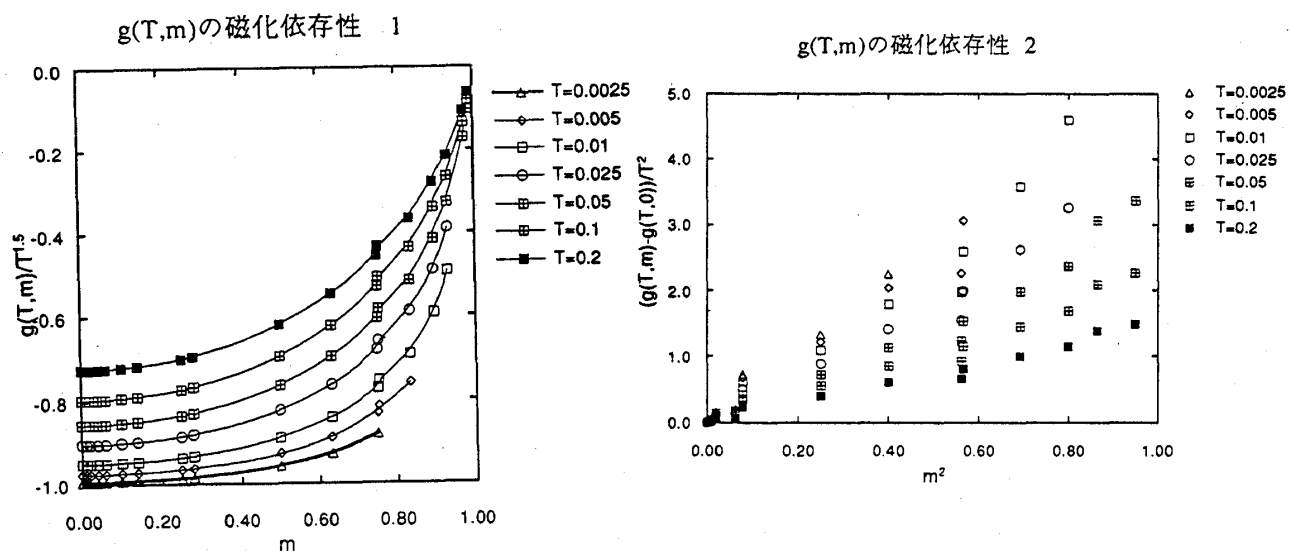


図 2: $g(T, m)$ の温度および磁化の依存性

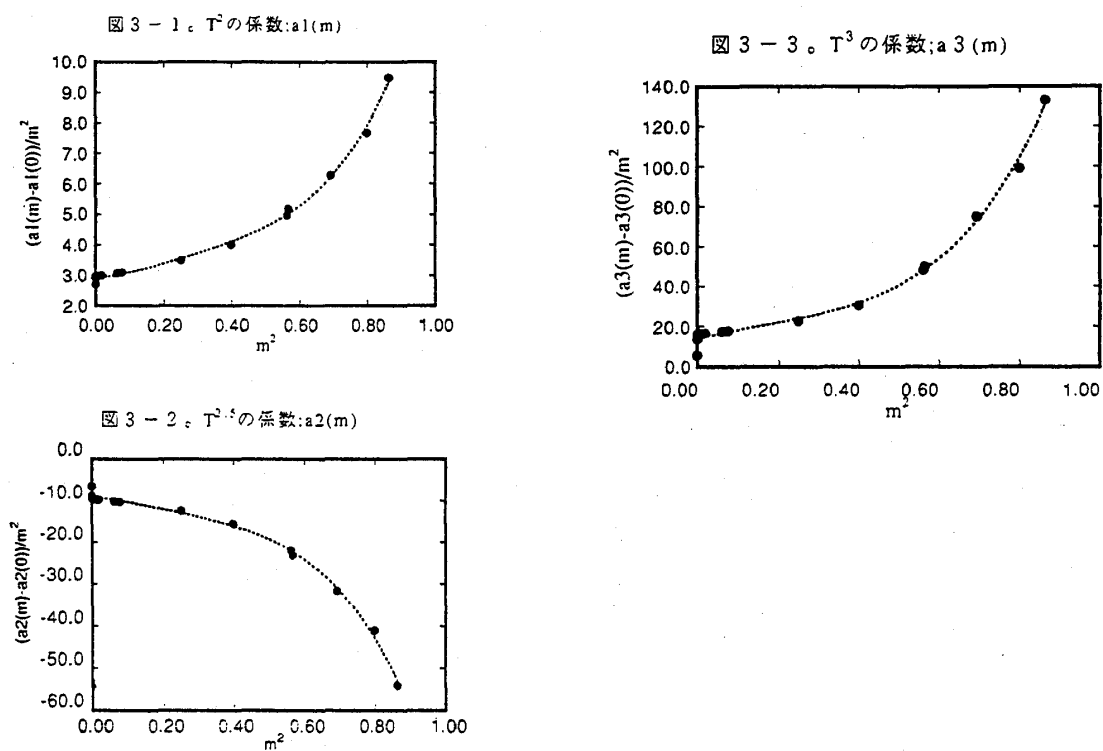


図 3: $g(T, m)$ の温度展開係数の磁化依存性

さらに磁化と磁場の関係も求まった。[表 (2)、図 (4) 参照]

$g(T, m)/T^{1.5}$		Temperature						
		0.0025	0.005	0.01	0.025	0.05	0.1	0.2
mag	0.00	-0.9944522	-0.9759174	-0.9508285	-0.9045789	-0.8573808	-0.7980917	-0.7262380
	0.01	-0.9944396	-0.9759007	-0.9508070	-0.9045503	-0.8573471	-0.7980541	-0.7261985
	0.02	-0.9944016	-0.9758505	-0.9507422	-0.9044643	-0.8572459	-0.7979412	-0.7260802
	0.04	-0.9942496	-0.9756495	-0.9504831	-0.9041202	-0.8568408	-0.7974895	-0.7256069
	0.06	-0.9939958	-0.9753140	-0.9500506	-0.9035461	-0.8561648	-0.7967358	-0.7248173
	0.10	-0.9931802	-0.9742361	-0.9486615	-0.9017025	-0.8539951	-0.7943176	-0.7222847
	0.14	-0.9919470	-0.9726068	-0.9465628	-0.8989192	-0.8507217	-0.7906718	-0.7184687
	0.25	-0.9862837	-0.9651340	-0.9369520	-0.8862069	-0.8358049	-0.7740967	-0.7011579
	0.28	-0.9841174	-0.9622797	-0.9332880	-0.8813755	-0.8301508	-0.7678312	-0.6946309
	0.75	-0.8817275	-0.8316494	-0.7719217	-0.6804473	-0.6052375	-0.5287018	-0.4540930

表 1: 自由エネルギー $g(T, m)/T^{1.5}$ の値

$h_z(T, m)$		Temperature						
		0.0025	0.005	0.01	0.025	0.05	0.1	0.2
mag	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
	0.01	0.3164817E-6	0.1183418E-5	0.4315146E-5	0.2265149E-4	0.7544047E-4	0.2379521E-3	0.7052625E-3
	0.02	0.6331566E-6	0.2367491E-5	0.8632583E-5	0.451381E-4	0.1509133E-3	0.4759945E-3	0.1410759E-2
	0.04	0.1267806E-5	0.4740344E-5	0.1728359E-4	0.9071429E-4	0.3020861E-3	0.9527119E-3	0.2823395E-2
	0.06	0.1905479E-5	0.7123956E-5	0.2597155E-4	0.1362888E-3	0.4537800E-3	0.1430880E-2	0.4239796E-2
	0.10	0.3196084E-5	0.1194570E-4	0.4353457E-4	0.2283178E-3	0.7597990E-3	0.2394537E-2	0.7091573E-2
	0.14	0.4517990E-5	0.1687927E-4	0.6148073E-4	0.3221441E-3	0.1071183E-2	0.3373088E-2	0.9981892E-2
	0.25	0.8440842E-5	0.3146953E-4	0.1143209E-3	0.5964014E-3	0.1975615E-2	0.6196834E-2	0.1827172E-1
	0.28	0.9621922E-5	0.3584239E-4	0.1300663E-3	0.6773497E-3	0.2240363E-2	0.7016421E-2	0.2065896E-1

表 2: 磁場 $h_z(T, m)$ の値

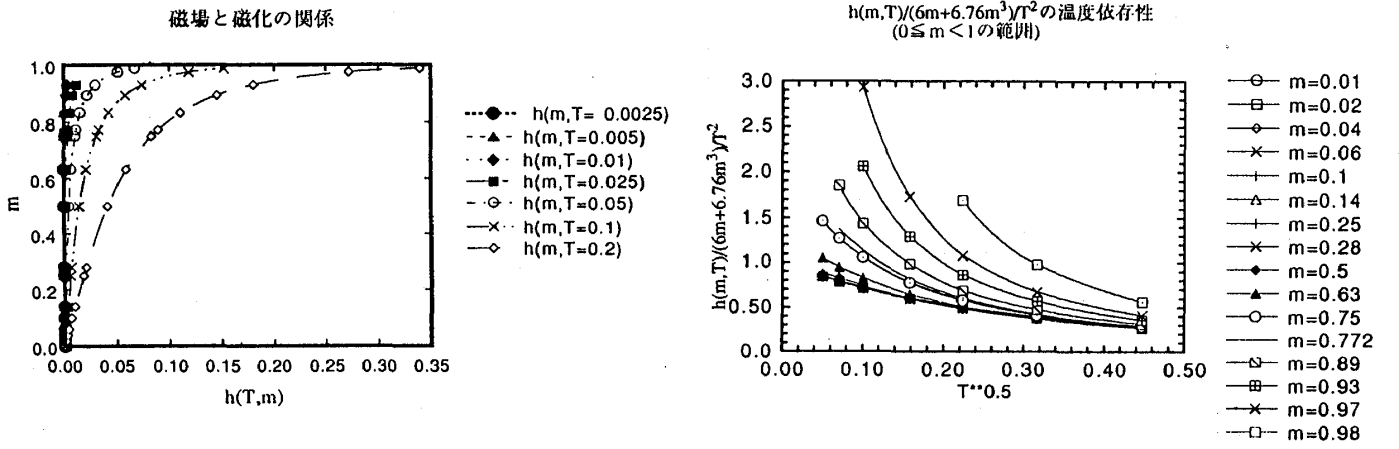


図 4: 磁化と磁場の関係

磁化と磁場を温度の低いところで考える。自由エネルギーと磁場の関係と (57) 式より温度の低くかつ m が 0 の近く (領域 A) では

$$\begin{aligned}
 h_z &= \frac{\partial g(T, m)}{\partial m} \\
 &= \frac{\partial a_1(m^2)}{\partial m} T^2 + \frac{\partial a_2(m^2)}{\partial m} T^{2.5} + O(T^3) \\
 &= \{6m + 6.76m^3 + O(m^5)\} T^2 + \frac{\partial a_2(m^2)}{\partial m} T^{2.5} + O(T^3)
 \end{aligned} \quad (58)$$

となる。今回の数値計算では磁場を与えたときの磁化が求まっている。図 (4) では $\frac{h_z}{(6m+6.76m^3)T^2}$ を縦軸とし、横軸を $T^{0.5}$ としてプロットしてみた。

この図では m の小さいところ ($m \leq 0.5$) では温度が下がるに連れ、1 に向かう様子がわかる。これより領域 A では (58) 式で表せることが確認できる。

さらに温度の低くかつ m が 1 の近く (領域 B) での自由エネルギー、磁化の振る舞いを見てみる。(図 (5), 図 (6) 参照)。

ここでの自由エネルギーの振る舞いは高橋達 [3] [16] が解析的に求めている。それによると

$$g(T, m)^T (T, m \in B) = \frac{T}{2} (1 - m) \left\{ \log(1 - m) - 1 - \frac{1}{2} \log \frac{2T}{\pi J} \right\} + O\{(1 - m)^2\} \quad (59)$$

$$h_z(T, m)^T (T, m \in B) = -\frac{T}{2} \left\{ \log(1 - m) - \frac{1}{2} \log \frac{2T}{\pi J} \right\} - O\{(1 - m)\} \quad (60)$$

今回での数値計算で領域 B での自由エネルギーの振る舞いは

図 (5) のようになる。横軸に $\log(1 - m)$ 縦軸に $\frac{g(T, m)}{T(1 - m)}$ をプロットした。こ

の図において、 $\log(1-m)$ が小さくなるに連れ、傾きが一定になり、その傾きは温度が下がるに連れ 1 に近づくように見える。

また磁化に対する領域 B での振る舞いは図 (6) のようになる。

横軸に $\log(1-m)$ 縦軸に $\frac{h_z(T,m)}{T}$ をとる。この図においては、 $\log(1-m)$ が小さくなるに連れ、傾きが一定になり、その傾きは温度が下がるに連れ $-\frac{1}{2}$ に近づくように見える。

これらから自由エネルギー、磁場の領域 B での振る舞いが (59)(60) 式のようになることが確認できた。

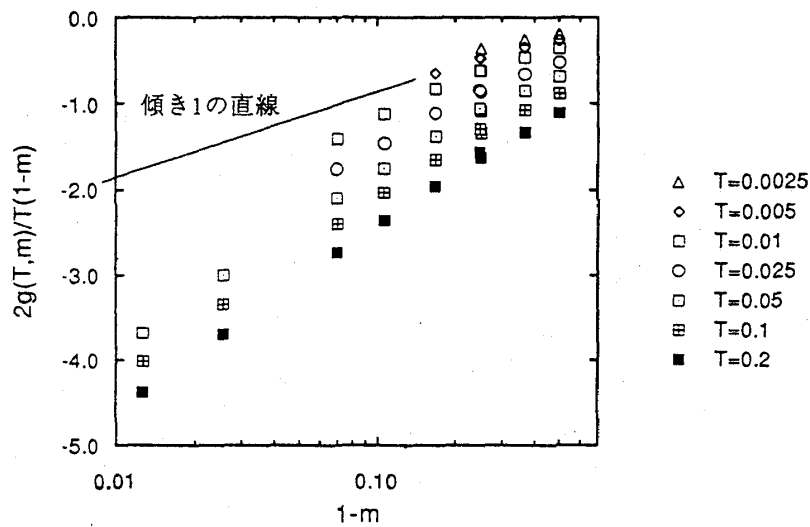


図 5: $g(T,m)$ の m が 1 の近傍での振る舞い

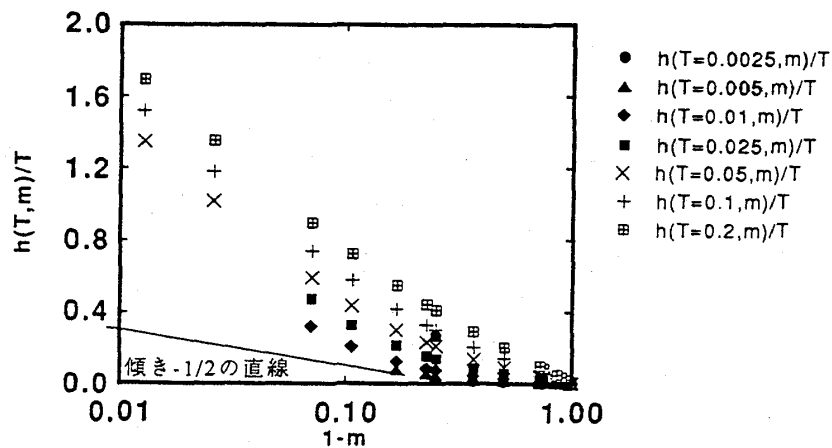


図 6: $h(T,m)$ の m が 1 の近傍での振る舞い

5 まとめ

今回の計算で自由エネルギーの温度及び磁化依存性が、 $T^{1/2}$ と m^2 の冪で展開できる事がわかった。更に温度依存性は $T^{1.5}$ から始まりその係数は 1.042 となり、磁化に依存しない。これは高橋により修正されたスピン波の理論 [4] で説明されたことに一致する。

さらに、自由エネルギーの T^2 の係数が磁場依存性が m^2 の冪で表せ m^4 のオーダーまで求まった。また m の 1 に近いところでの振る舞いが、 z に寄る展開で求められたもののようになることが確認できた。しかし m が小さいところで m^2 の冪展開になる事と関係付けることは今後の課題である。

この関係付けにおいても m の 1 近傍での特異性を調べる必要があろう。しかしながら数値計算において m が 1 に近づくと連れ収束しにくくなる。このため低温でのデータがとれなかった。今後この領域を調べるためにプログラムの改良が必要である。

量子効果に寄る寄与を古典系と比べることにより調べていきたい。また、今回計算では無限数列の方程式の方法 [7] をつかった。この方法と積分方程式による方法 [1] とでは数値的にはおなじになることがわかっている。しかし、数学的な同等性はまだ明らかにされていない。これも今後の課題である。

謝辞

計算に当たり高橋實先生には、細かくご指導していただき有難うございました。計算費は文部省科研費重点領域研究「計算物理学」の援助を受けました。

参考文献

- [1] M.Takahashi and M.Yamada, J.phys.Soc.Jpn. **54** ,2808(1985).
- [2] M.Yamada, J.phys.Soc.Jpn. **59** ,848(1990); k.Nomura and M.Yamada, ISSP technical report No.2329(1990).
- [3] M.Takahashi , Prog.Theor.Phys. **B 46**,401(1971).
- [4] M.Takahashi , Prog.Theor.Phys.Suppl.No.87,233(1986); Phys.Rev.Lett. **58**,168(1987); Jpn.Jrn.Apl.Phys.Suppl.**26-3**,869(1987).
- [5] M.Takahashi and M.Suzuki , Prog.Theor.Phys. **B 48**,2187(1972).
- [6] M.Takahashi , Phys.Rev. **B 43**,5788(1991).
- [7] M.Takahashi , Phys.Rev. **B 44**,12382(1991).
- [8] R.Baxter , Stud.Appl.Math. **50**,51(1971).
- [9] R.Baxter , Ann.Phys.(N.Y.) **70**,193(1972).
- [10] H.A.Bethe , Z.Physik. **71**,205(1931).
- [11] R.Z.Bariev , Theor.Math.Phys. **49**,1021(1982); T.T.Truong and K.D.Schotte, Nucl.Phys. **B220**,77(1983)
- [12] .Betsuyaku , Prog.Theor.Phys. **B 73**,319(1985).
- [13] T.Koma , Prog.Theor.Phys. **78**,1213(1987);**81**,783(1989).
- [14] M.Inoue , thesis, University of Tokyo,1988; R.Blankenbecler and R.L.Sugar, Phys.Rev. **D 27**,1304(1983).
- [15] J.Suzuki,Akutsu and Wadati , J.Phys.Soc.Jpn. **59**,2667(1990).
- [16] S.Katsura, Ann. of Phys. **31**,325(1965).