統計物理学 No.3

82311971 佐々木良輔

[1] (a)

$h=0$ とすると m の 3 次で展開した自己無撞着方程式は

$$m = \frac{T_c}{T}m - \frac{1}{\mu_s}^2 \left(\frac{T_c}{T}\right)^3 m^3 \tag{1}$$

$T<T_c$ で $m \neq 0$ より, 両辺を m で割ると

$$\begin{aligned} && 1 &= \frac{T_c}{T} - \frac{1}{\mu_s}^2 \left(\frac{T_c}{T}\right)^3 m^2 \\ \iff && 0 &= \left(\frac{T_c}{T} - 1\right) - \frac{1}{\mu_s}^2 \left(\frac{T_c}{T}\right)^3 m^2 \\ \iff && m &= \pm \mu_s \frac{T}{T_c}\sqrt{\frac{T_c - T}{T_c}} \end{aligned} \tag{2}$$

となる.

(b)

自己無撞着方程式の両辺を h で微分すると

$$\chi = \frac{T_c}{T}\left(\chi + \frac{1}{zJ}\right) - \frac{1}{\mu_s^2}\left(\frac{T_c}{T}\right)^3 3\left(m + \frac{h}{zJ}\right)^2 \left(\chi + \frac{1}{zJ}\right) \tag{3}$$

ただし $\chi = \partial m / \partial h$ である.

$T > T_c$ のとき

$T > T_c$ では $m=0$ である. また (3) 式において $h \to 0$ とすれば

$$\begin{aligned} && \chi_0 &= \frac{T_c}{T}\left(\chi + \frac{1}{zJ}\right) \\ \iff && \chi_0 &= \frac{\frac{T_c}{T}\frac{1}{zJ}}{1 - \frac{T_c}{T}} = \frac{T_c}{zJ(T - T_c)} \end{aligned} \tag{4}$$

となる.

$T < T_c$ のとき

(3) 式より

$$\chi\left(1-\frac{T_c}{T}+\frac{3}{\mu_s^2}\left(\frac{T_c}{T}\right)^3\left(m+\frac{h}{zJ}\right)^2\right)=\frac{1}{zJ}\left(\frac{T_c}{T}-\frac{3}{\mu_s^2}\left(\frac{T_c}{T}\right)^3\left(m+\frac{h}{zJ}\right)^2\right)$$
$$\Longleftrightarrow \qquad \chi=\frac{\frac{1}{zJ}\left(\frac{T_c}{T}-\frac{3}{\mu_s^2}\left(\frac{T_c}{T}\right)^3\left(m+\frac{h}{zJ}\right)^2\right)}{1-\frac{T_c}{T}+\frac{3}{\mu_s^2}\left(\frac{T_c}{T}\right)^3\left(m+\frac{h}{zJ}\right)^2} \tag{5}$$

ここで $h\to 0$ とすると

$$\chi_0=\frac{\frac{1}{zJ}\left(\frac{T_c}{T}-\frac{3}{\mu_s^2}\left(\frac{T_c}{T}\right)^3 m^2\right)}{1-\frac{T_c}{T}+\frac{3}{\mu_s^2}\left(\frac{T_c}{T}\right)^3 m^2} \tag{6}$$

さらに $T\simeq T_c$ から m として (2) 式の結果を用いると

$$\begin{aligned}\frac{1}{\mu_s^2}\left(\frac{T_c}{T}\right)^3 m^2&=\frac{1}{\mu_s^2}\left(\frac{T_c}{T}\right)^3\mu_s^2\left(\frac{T}{T_c}\right)^3\left(\frac{T_c}{T}-1\right)\\&=\frac{T_c}{T}-1\end{aligned} \tag{7}$$

なので (6) 式は

$$\begin{aligned}\chi_0&=\frac{\frac{1}{zJ}\left(\frac{T_c}{T}-3\left(\frac{T_c}{T}-1\right)\right)}{1-\frac{T_c}{T}+3\left(\frac{T_c}{T}-1\right)}\\&=-\frac{(3T-2T_c)}{2zJ(T-T_c)}\end{aligned} \tag{8}$$

となる. 図 1 に $zJ=1$, $T_c=5$ としたときの χ_0 の片対数グラフを示す. 赤線と青線はそれぞれ $T>T_c$, $T<T_c$ の場合である. 図から $T\simeq T_c$ では挙動 $T>T_c$, $T<T_c$ が近い挙動を取ることがわかる.

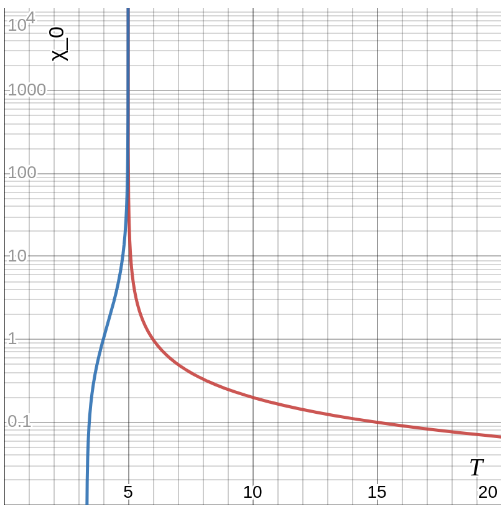

図 1　$zJ=1$, $T_c=5$ としたときの ξ_0. 赤線は $T>T_c$, 青線は $T<T_c$ の場合.

[2] (a)

S^+ の期待値は

$$\begin{aligned}\langle S^+\rangle &= \left(\cos\frac{\theta}{2}\langle\uparrow| + e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\langle\downarrow|\right)|\uparrow\rangle\langle\downarrow|\left(\cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle\right)\\ &= \left(\cos\frac{\theta}{2}\times 1 + e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\times 0\right)\left(\cos\frac{\theta}{2}\times 0 + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\times 1\right)\\ &= e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2} = \frac{e^{i\phi}}{2}\sin\theta\end{aligned}\tag{9}$$

同様にして S^- の期待値は

$$\begin{aligned}\langle S^-\rangle &= \left(\cos\frac{\theta}{2}\langle\uparrow| + e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\langle\downarrow|\right)|\downarrow\rangle\langle\uparrow|\left(\cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle\right)\\ &= \left(\cos\frac{\theta}{2}\times 0 + e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\times 1\right)\left(\cos\frac{\theta}{2}\times 1 + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\times 0\right)\\ &= k\end{aligned}\tag{10}$$

また S^z の期待値は

$$\begin{aligned}\langle S^z\rangle &= \left(\cos\frac{\theta}{2}\langle\uparrow| + e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\langle\downarrow|\right)\frac{1}{2}\left(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|\right)\left(\cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle\right)\\ &= \left(\cos\frac{\theta}{2}\langle\uparrow| + e^{-i\phi}\sin\frac{\theta}{2}\langle\downarrow|\right)\frac{1}{2}\left(\cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle - e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle\right)\\ &= \frac{1}{2}\left(\cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2}\right) = \frac{1}{2}\cos\theta\end{aligned}\tag{11}$$

である.

(b)

XXZ 鎖のハミルトニアンは S^+, S^- を用いて

$$H = \frac{J}{2}\sum_{j=1}^{N}\left(S_j^+S_{j+1}^- + S_j^-S_{j+1}^+\right) + J\Delta\sum_{j=1}^{N}S_j^zS_{j+1}^z - h\sum_{j=1}^{N}S_j^z\tag{12}$$

である. また傾けられた反強磁性状態は

$$|\Psi(\theta)\rangle = \otimes_j|\psi(\theta,\psi_j)\rangle = |\psi(\theta,0)\rangle_1\otimes|\psi(\theta,\pi)\rangle_2\otimes\cdots\otimes|\psi(\theta,\pi)\rangle_N\tag{13}$$

と表される. このときのエネルギー期待値は

$$\langle H\rangle = \langle\Psi|\frac{J}{2}\sum_{j=1}^{N}\left(S_j^+S_{j+1}^- + S_j^-S_{j+1}^+\right)|\Psi\rangle + \langle\Psi|J\Delta\sum_{j=1}^{N}S_j^zS_{j+1}^z|\Psi\rangle - \langle\Psi|h\sum_{j=1}^{N}S_j^z|\Psi\rangle\tag{14}$$

である. ここで $S_j^+ S_{j+1}^-$ の期待値は

$$
\begin{aligned}
\langle\Psi| S_j^+ S_{j+1}^- |\Psi\rangle =& {}_N\langle\psi(\theta,\pi)| \otimes\cdots\otimes {}_{j+1}\langle\psi(\theta,\phi_{j+1})| \otimes {}_j\langle\psi(\theta,\phi_j)| \otimes\cdots\otimes {}_1\langle\psi(\theta,0)| S_j^+ S_{j+1}^- \\
& |\psi(\theta,0)\rangle_1 \otimes\cdots\otimes |\psi(\theta,\phi_j)\rangle_j \otimes |\psi(\theta,\phi_{j+1})\rangle_{j+1} \otimes\cdots\otimes |\psi(\theta,\pi)\rangle_N \\
=& {}_1\langle\psi(\theta,0) \,|\, \psi(\theta,0)\rangle_1 \times\cdots\times {}_j\left\langle\psi(\theta,\phi_j) \,\middle|\, S_j^+ \,\middle|\, \psi(\theta,\phi_j)\right\rangle_j \times \\
& {}_{j+1}\left\langle\psi(\theta,\phi_{j+1}) \,\middle|\, S_{j+1}^- \,\middle|\, \psi(\theta,\phi_{j+1})\right\rangle_{j+1} \times\cdots\times {}_N\langle\psi(\theta,\pi) \,|\, \psi(\theta,\pi)\rangle_N \\
=& \frac{e^{i\phi_j}}{2}\sin\theta \times \frac{e^{-i\phi_{j+1}}}{2}\sin\theta
\end{aligned}
\tag{15}
$$

ただし ϕ_j と ϕ_{j+1} は必ずどちらかが π, もう片方が 0 になるので

$$
\langle\Psi| S_j^+ S_{j+1}^- |\Psi\rangle = -\frac{1}{4}\sin^2\theta \tag{16}
$$

同様にして $S_j^- S_{j+1}^+$ の期待値も

$$
\langle\Psi| S_j^- S_{j+1}^+ |\Psi\rangle = -\frac{1}{4}\sin^2\theta \tag{17}
$$

したがって (14) 式の右辺第 1 項は

$$
\begin{aligned}
\langle\Psi| \frac{J}{2}\sum_{j=1}^{N} \left(S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+\right) |\Psi\rangle =& \frac{J}{2}\sum_{j=1}^{N} \langle\Psi| \left(S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+\right) |\Psi\rangle \\
=& -\frac{JN}{4}\sin^2\theta
\end{aligned}
\tag{18}
$$

となる. 次に $S_j^z S_{j+1}^z$ の期待値は

$$
\begin{aligned}
\left\langle\Psi \,\middle|\, S_j^z S_{j+1}^z \,\middle|\, \Psi\right\rangle =& {}_N\langle\psi(\theta,\pi)| \otimes\cdots\otimes {}_{j+1}\langle\psi(\theta,\phi_{j+1})| \otimes {}_j\langle\psi(\theta,\phi_j)| \otimes\cdots\otimes {}_1\langle\psi(\theta,0)| S_j^z S_{j+1}^z \\
& |\psi(\theta,0)\rangle_1 \otimes\cdots\otimes |\psi(\theta,\phi_j)\rangle_j \otimes |\psi(\theta,\phi_{j+1})\rangle_{j+1} \otimes\cdots\otimes |\psi(\theta,\pi)\rangle_N \\
=& {}_1\langle\psi(\theta,0) \,|\, \psi(\theta,0)\rangle_1 \times\cdots\times {}_j\left\langle\psi(\theta,\phi_j) \,\middle|\, S_j^z \,\middle|\, \psi(\theta,\phi_j)\right\rangle_j \times \\
& {}_{j+1}\left\langle\psi(\theta,\phi_{j+1}) \,\middle|\, S_{j+1}^z \,\middle|\, \psi(\theta,\phi_{j+1})\right\rangle_{j+1} \times\cdots\times {}_N\langle\psi(\theta,\pi) \,|\, \psi(\theta,\pi)\rangle_N \\
=& \frac{1}{2}\cos\theta \times \frac{1}{2}\cos\theta = \frac{1}{4}\cos^2\theta
\end{aligned}
\tag{19}
$$

したがって (14) 式の右辺第 2 項は

$$
\langle\Psi| J\Delta\sum_{j=1}^{N} S_j^z S_{j+1}^z |\Psi\rangle = \frac{J\Delta N}{4}\cos^2\theta \tag{20}
$$

次に S_j^z の期待値は

$$\begin{aligned}\left\langle \Psi \,\middle|\, S_j^z \,\middle|\, \Psi \right\rangle =& {}_N\langle\psi(\theta,\pi)| \otimes \cdots \otimes {}_j\langle\psi(\theta,\phi_j)| \otimes \cdots \otimes {}_1\langle\psi(\theta,0)|\, S_j^z \\ & |\psi(\theta,0)\rangle_1 \otimes \cdots \otimes |\psi(\theta,\phi_j)\rangle_j \otimes \cdots \otimes |\psi(\theta,\pi)\rangle_N \\ =& {}_1\langle\psi(\theta,0)\,|\,\psi(\theta,0)\rangle_1 \times \cdots \times {}_j\left\langle\psi(\theta,\phi_j)\,\middle|\, S_j^z \,\middle|\, \psi(\theta,\phi_j)\right\rangle_j \times \cdots \times {}_N\langle\psi(\theta,\pi)\,|\,\psi(\theta,\pi)\rangle_N \\ =& \frac{1}{2}\cos\theta \end{aligned} \tag{21}$$

したがって (14) 式の右辺第 3 項は

$$\langle\Psi|\, h\sum_{j=1}^{N} S_j^z\, |\Psi\rangle = \frac{hN}{2}\cos\theta \tag{22}$$

となる. 以上から (14) 式は

$$\langle H\rangle = -\frac{JN}{4}\sin^2\theta + \frac{J\Delta N}{4}\cos^2\theta - \frac{hN}{2}\cos\theta \tag{23}$$

であり, したがって 1 スピンあたりのエネルギー期待値は

$$e(h,\theta) = \frac{\langle H\rangle}{N} = -\frac{J}{4}\sin^2\theta + \frac{J\Delta}{4}\cos^2\theta - \frac{h}{2}\cos\theta \tag{24}$$

となる.

(c)

(24) 式が極値を取るべきなので

$$\begin{aligned}\frac{\partial e}{\partial\theta} &= -\frac{J}{2}\sin\theta\cos\theta - \frac{J\Delta}{2}\sin\theta\cos\theta + \frac{h}{2}\sin\theta \\ &= \frac{1}{2}\sin\theta\,(h - J(1+\Delta)\cos\theta) = 0 \\ \therefore \qquad & \theta = 0,\ \pi,\ \arccos\left(\frac{h}{J(1+\Delta)}\right)\end{aligned} \tag{25}$$

$h > J(1+\Delta)$ のとき

このとき $\arccos(h/J(1+\Delta))$ は定義域外であり, 値を持たない. したがって極値は $\theta = 0,\ \pi$ である. それぞれでのエネルギー期待値は

$$\begin{aligned}e(h,0) &= \frac{J\Delta}{4} - \frac{h}{2} \\ e(h,\pi) &= \frac{J\Delta}{4} + \frac{h}{2}\end{aligned} \tag{26}$$

であり $h \geq 0$ から常に $e(h,0)$ が小さい. したがって $h > J(1+\Delta)$ では

$$\begin{aligned} \theta_0 &= 0 \\ e_0(h) &= \frac{J\Delta}{4} - \frac{h}{2} \end{aligned} \tag{27}$$

となる.

$h \leq J(1+\Delta)$ のとき

　このとき極値は $\theta = 0,\ \pi,\ \arccos(h/J(1+\Delta))$ である. 以下では $\theta' = \arccos(h/J(1+\Delta))$ とする. エネルギー期待値の 2 階微分は

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 e}{\partial \theta^2} &= \frac{\partial}{\partial \theta}\left(\frac{h}{2}\sin\theta - \frac{J}{4}(1+\Delta)\sin 2\theta\right) \\ &= \frac{h}{2}\cos\theta - \frac{J}{2}(1+\Delta)\cos 2\theta \\ &= \frac{h}{2}\cos\theta - \frac{J}{2}(1+\Delta)\left(2\cos^2\theta - 1\right) \end{aligned} \tag{28}$$

したがって各極値でのエネルギー期待値の 2 階微分は

$$\frac{\partial^2 e}{\partial \theta^2}(h,0) = \frac{1}{2}\left(h - J(1+\Delta)\right) < 0 \tag{29}$$

$$\frac{\partial^2 e}{\partial \theta^2}(h,\pi) = \frac{1}{2}\left(-h - J(1+\Delta)\right) < 0 \tag{30}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 e}{\partial \theta^2}(h,\theta') &= \frac{h}{2}\frac{h}{J(1+\Delta)} - \frac{J(1+\Delta)}{2}\left(2\left(\frac{h}{J(1+\Delta)}\right)^2 - 1\right) \\ &= \frac{J(1+\Delta)}{2} - \frac{1}{2}\frac{h^2}{J(1+\Delta)} \\ &= \frac{J(1+\Delta)}{2}\left(1 - \left(\frac{h}{J(1+\Delta)}\right)^2\right) \end{aligned} \tag{31}$$

$h \leq J(1+\Delta)$ より $h/J(1+\Delta) \leq 1$ なので

$$\frac{\partial^2 e}{\partial \theta^2}(h,\theta') \geq 0 \tag{32}$$

以上から $\theta = 0,\ \pi$ は極大値であり, $\theta = \theta'$ が極小値である. また $\theta = \theta'$ でのエネルギー期待値は

$$
\begin{aligned}
e(h, \theta') &= -\frac{J}{4}\sin^2\theta' + \frac{J\Delta}{4}\cos^2\theta' - \frac{h}{2}\cos\theta' \\
&= -\frac{J}{4}\left(1 - \cos^2\theta'\right) + \frac{J\Delta}{4}\cos^2\theta' - \frac{h}{2}\cos\theta' \\
&= -\frac{J}{4} + \frac{J}{4}(1+\Delta)\cos^2\theta' - \frac{h}{2}\cos\theta' \\
&= -\frac{J}{4} + \frac{J}{4}(1+\Delta)\left(\frac{h}{J(1+\Delta)}\right)^2 - \frac{h}{2}\left(\frac{h}{J(1+\Delta)}\right) \\
&= -\frac{J}{4} - \frac{1}{4}\frac{h^2}{J(1+\Delta)}
\end{aligned}
\tag{33}
$$

以上から $h \leq J(1+\Delta)$ では

$$
\begin{aligned}
\theta_0 &= \arccos\left(\frac{h}{J(1+\Delta)}\right) \\
e_0(h) &= -\frac{J}{4} - \frac{1}{4}\frac{h^2}{J(1+\Delta)}
\end{aligned}
\tag{34}
$$

となる.

また $\cos\theta_0 = 1 \iff \theta_0 = 0$ となる飽和磁場は $h_s = J(1+\Delta)$ である. ここで S_j^z の期待値は (21) 式から $(\cos\theta)/2$ であった. 与えられた磁場においてエネルギー期待値が最小となる θ すなわち θ_0 が実現されるならば, 磁場 h のもとでの磁化は

$$
\begin{aligned}
m(h) &= \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\langle S_j^z\rangle \\
&= \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2}\cos\theta_0(h) \\
&= \frac{1}{2}\cos\theta_0(h) \\
&= \begin{cases} \dfrac{h}{2J(1+\Delta)} & (h \leq J(1+\Delta)) \\ \dfrac{1}{2} & (h > J(1+\Delta)) \end{cases}
\end{aligned}
\tag{35}
$$

であり, これは図 2 のような磁化過程を示す.

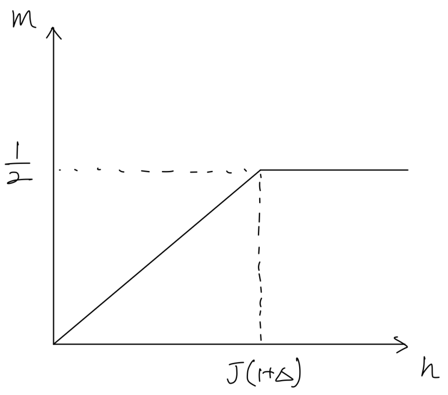

図 2　磁化過程

(d)

Néel 状態におけるエネルギー期待値を計算する．まず $S_j^+ S_{j+1^-}$ の期待値は, j が偶数のとき