統計物理学 No.2

82311971 佐々木良輔

[1]

(a)

2 スピン系の XXZ 相互作用ハミルトニアンは

$$
\begin{aligned}
H &= J(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y + \Delta S_1^z S_2^z) - h(S_1^z + S_2^z) \\
&= \frac{J}{2}(S_1^+ S_2^- + S_2^+ S_1^-) + J\Delta S_1^z S_2^z - h(S_1^z + S_2^z)
\end{aligned} \tag{1}
$$

である. このとき

$$
\begin{aligned}
H\left|\uparrow\uparrow\right\rangle &= \frac{J}{2}\left(0 \otimes S_2^- \left|\uparrow\right\rangle + 0 \otimes S_1^- \left|\uparrow\right\rangle\right) + J\Delta S_1^z \left|\uparrow\right\rangle \otimes S_2^z \left|\uparrow\right\rangle - h\left(S_1^z \left|\uparrow\right\rangle \otimes \left|\uparrow\right\rangle + \left|\uparrow\right\rangle \otimes S_2^z \left|\uparrow\right\rangle\right) \\
&= 0 + J\Delta \frac{1}{2}\left|\uparrow\right\rangle \otimes \frac{1}{2}\left|\uparrow\right\rangle - h\left(\frac{1}{2}\left|\uparrow\right\rangle \otimes \left|\uparrow\right\rangle + \left|\uparrow\right\rangle \otimes \frac{1}{2}\left|\uparrow\right\rangle\right) \\
&= \left(\frac{J\Delta}{4} - h\right)\left|\uparrow\uparrow\right\rangle
\end{aligned} \tag{2}
$$

$$
\begin{aligned}
H\left|\downarrow\downarrow\right\rangle &= \frac{J}{2}\left(S_1^+ \left|\downarrow\right\rangle \otimes 0 + S_2^+ \left|\downarrow\right\rangle \otimes 0\right) + J\Delta S_1^z \left|\downarrow\right\rangle \otimes S_2^z \left|\downarrow\right\rangle - h\left(S_1^z \left|\downarrow\right\rangle \otimes \left|\downarrow\right\rangle + \left|\downarrow\right\rangle \otimes S_2^z \left|\downarrow\right\rangle\right) \\
&= 0 + J\Delta\left(-\frac{1}{2}\left|\downarrow\right\rangle\right) \otimes \left(-\frac{1}{2}\left|\downarrow\right\rangle\right) - h\left(\left(-\frac{1}{2}\left|\downarrow\right\rangle\right) \otimes \left|\downarrow\right\rangle + \left|\downarrow\right\rangle \otimes \left(-\frac{1}{2}\left|\downarrow\right\rangle\right)\right) \\
&= \left(\frac{J\Delta}{4} + h\right)\left|\downarrow\downarrow\right\rangle
\end{aligned} \tag{3}
$$

$$
\begin{aligned}
H\left|\uparrow\downarrow\right\rangle &= \frac{J}{2}\left(0 \otimes 0 + S_2^+ \left|\downarrow\right\rangle \otimes S_1^- \left|\uparrow\right\rangle\right) + J\Delta S_1^z \left|\uparrow\right\rangle \otimes S_2^z \left|\downarrow\right\rangle - h\left(S_1^z \left|\uparrow\right\rangle \otimes \left|\downarrow\right\rangle + \left|\uparrow\right\rangle \otimes S_2^z \left|\downarrow\right\rangle\right) \\
&= \frac{J}{2}\left|\downarrow\right\rangle \otimes \left|\uparrow\right\rangle + J\Delta \frac{1}{2}\left|\uparrow\right\rangle \otimes \left(-\frac{1}{2}\left|\downarrow\right\rangle\right) - h\left(\frac{1}{2}\left|\uparrow\right\rangle \otimes \left|\downarrow\right\rangle + \left|\uparrow\right\rangle \otimes \left(-\frac{1}{2}\left|\downarrow\right\rangle\right)\right) \\
&= \frac{J}{2}\left|\downarrow\uparrow\right\rangle - \frac{J\Delta}{4}\left|\uparrow\downarrow\right\rangle
\end{aligned} \tag{4}
$$

$$
\begin{aligned}
H\left|\downarrow\uparrow\right\rangle &= \frac{J}{2}\left(S_1^+\left|\downarrow\right\rangle \otimes S_2^-\left|\uparrow\right\rangle + 0\otimes 0\right) + J\Delta S_1^z\left|\downarrow\right\rangle \otimes S_2^z\left|\uparrow\right\rangle - h\left(S_1^z\left|\downarrow\right\rangle \otimes \left|\uparrow\right\rangle + \left|\downarrow\right\rangle \otimes S_2^z\left|\uparrow\right\rangle\right) \\
&= \frac{J}{2}\left|\uparrow\right\rangle \otimes \left|\downarrow\right\rangle + J\Delta\left(-\frac{1}{2}\left|\downarrow\right\rangle\right) \otimes \frac{1}{2}\left|\uparrow\right\rangle - h\left(\left(-\frac{1}{2}\left|\downarrow\right\rangle\right) \otimes \left|\uparrow\right\rangle + \left|\downarrow\right\rangle \otimes \frac{1}{2}\left|\uparrow\right\rangle\right) \\
&= \frac{J}{2}\left|\uparrow\downarrow\right\rangle - \frac{J\Delta}{4}\left|\downarrow\uparrow\right\rangle
\end{aligned} \tag{5}
$$

である. ここで

$$
\left|t_{+1}\right\rangle = \left|\uparrow\uparrow\right\rangle,\ \left|t_{-1}\right\rangle = \left|\downarrow\downarrow\right\rangle,\ \left|t_0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\uparrow\downarrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\right\rangle\right),\ \left|s\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\uparrow\downarrow\right\rangle - \left|\downarrow\uparrow\right\rangle\right) \tag{6}
$$

は固有状態であり, それぞれの固有値は

$$
H\left|t_{+1}\right\rangle = \left(\frac{J\Delta}{4} - h\right)\left|t_{+1}\right\rangle \tag{7}
$$

$$
H\left|t_{-1}\right\rangle = \left(\frac{J\Delta}{4} + h\right)\left|t_{-1}\right\rangle \tag{8}
$$

$$
\begin{aligned}
H\left|t_0\right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{J}{2}\left(\left|\uparrow\downarrow\right\rangle - \left|\downarrow\uparrow\right\rangle\right) - \frac{J\Delta}{4}\left(\left|\uparrow\downarrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\right\rangle\right)\right) \\
&= \left(\frac{J}{2} - \frac{J\Delta}{4}\right)\left|t_0\right\rangle
\end{aligned} \tag{9}
$$

$$
\begin{aligned}
H\left|s\right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{J}{2}\left(\left|\uparrow\downarrow\right\rangle - \left|\downarrow\uparrow\right\rangle\right) - \frac{J\Delta}{4}\left(\left|\uparrow\downarrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\right\rangle\right)\right) \\
&= -\left(\frac{J}{2} + \frac{J\Delta}{4}\right)\left|s\right\rangle
\end{aligned} \tag{10}
$$

となる.

(b)(i)

$\left|t_{\pm 1}\right\rangle$ のエネルギーは $h=0$ において $J\Delta/4$ である. $\Delta \geq 1$ のとき $h \geq 0$ において $E_{t_{+1}}$ は E_{t_0}, E_s とそれぞれ一回ずつ交点をもち, その値は

$$
\begin{aligned}
& \frac{J\Delta}{4} - h = \frac{J}{2} - \frac{J\Delta}{4} \\
\Longleftrightarrow \quad & h = \frac{J}{2}(\Delta - 1)
\end{aligned} \tag{11}
$$

$$
\begin{aligned}
& \frac{J\Delta}{4} - h = -\frac{J}{2} - \frac{J\Delta}{4} \\
\Longleftrightarrow \quad & h = \frac{J}{2}(\Delta + 1)
\end{aligned} \tag{12}
$$

である. したがってエネルギースペクトルは図 1 のようになる. 図 1 から $h \leq J/2(\Delta+1)$ での基底状態は $|s\rangle$, $h > J/2(\Delta+1)$ での基底状態は $|t_{+1}\rangle$ である. それぞれの状態での磁化の期待値は

$$
\begin{aligned}
\langle s \,|\, S_1^z + S_2^z \,|\, s \rangle &= \langle s|\,(S_1^z + S_2^z)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right) \\
&= \langle s|\,\frac{1}{\sqrt{2}}\left(S_1^z\,|\uparrow\downarrow\rangle - S_1^z\,|\downarrow\uparrow\rangle + S_2^z\,|\uparrow\downarrow\rangle - S_2^z\,|\downarrow\uparrow\rangle\right) \\
&= \langle s|\,\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{2}\,|\uparrow\downarrow\rangle + \frac{1}{2}\,|\downarrow\uparrow\rangle - \frac{1}{2}\,|\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{2}\,|\downarrow\uparrow\rangle\right) \\
&= 0
\end{aligned}
\tag{13}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle t_{+1} \,|\, S_1^z + S_2^z \,|\, t_{+1} \rangle &= \langle\uparrow\uparrow|\,(S_1^z + S_2^z)\,|\uparrow\uparrow\rangle \\
&= \langle\uparrow\uparrow|\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right)|\uparrow\uparrow\rangle = 1
\end{aligned}
\tag{14}
$$

したがって磁化の期待値は図 2 のように振る舞う.

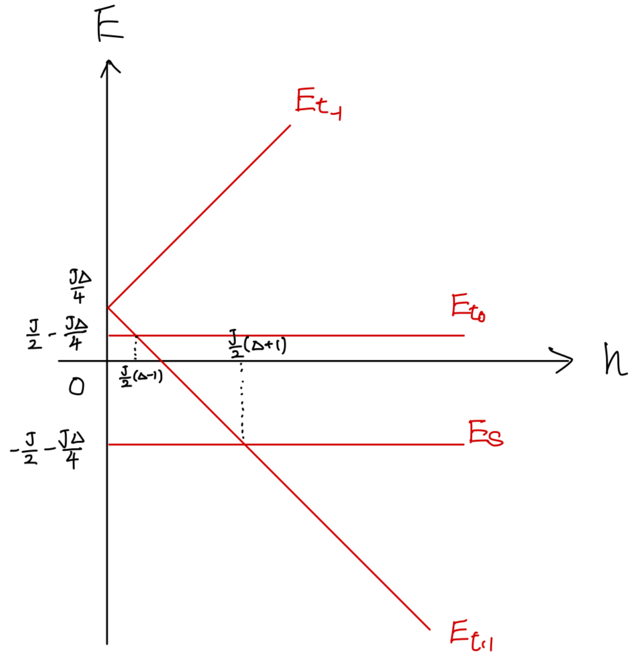

図 1　$\Delta \geq 1$ の場合のエネルギースペクトル

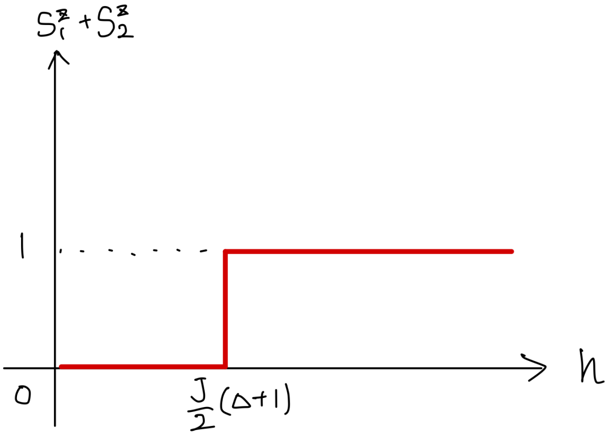

図 2　$\Delta \geq 1$ の場合の磁化の期待値

(b)(ii)

$0 < \Delta < 1$ のとき $E_{t_{-1}}$ は E_{t_0} と, $E_{t_{+1}}$ は E_s と一回ずつ交点をもち, その値は

$$\begin{aligned} & \frac{J\Delta}{4} + h = \frac{J}{2} - \frac{J\Delta}{4} \\ \Longleftrightarrow \quad & h\frac{J}{2}(1-\Delta) \end{aligned} \tag{15}$$

$$\begin{aligned} & \frac{J\Delta}{4} - h = -\frac{J}{2} - \frac{J\Delta}{4} \\ \Longleftrightarrow \quad & h\frac{J}{2}(1+\Delta) \end{aligned} \tag{16}$$

である. したがってエネルギースペクトルは図 3 のようになる. 図 3 から $h \leq J/2(\Delta+1)$ での基底状態は $|s\rangle$, $h > J/2(\Delta+1)$ での基底状態は $|t_{+1}\rangle$ である. したがって基底状態での磁化の期待値は前問で計算したものと同様であり, 磁化の期待値は図 2 のように振る舞う.

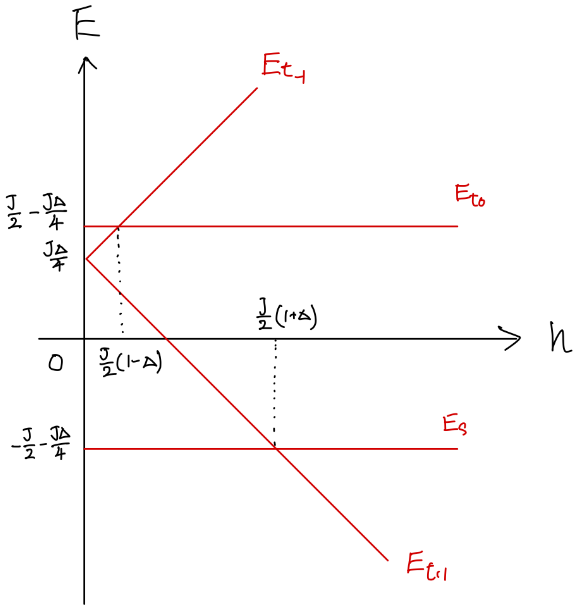

図 3　$\Delta < 1$ の場合のエネルギースペクトル

(c)

エネルギーの低い 2 状態 $|s\rangle$, $|t_{+1}\rangle$ のみを考える．$\Delta = 1$ のとき分配関数は

$$Z = \exp\beta\frac{3J}{4} + \exp\beta\left(h - \frac{J}{4}\right) \tag{17}$$

またそれぞれの状態での磁化は $\langle s\,|\,S_1^z + S_2^z\,|\,s\rangle = 0$, $\langle t_{+1}\,|\,S_1^z + S_2^z\,|\,t_{+1}\rangle = 1$ なので, アンサンブル平均は

$$\begin{aligned}
\langle S_1^z + S_2^z\rangle &= \frac{0\times\exp\beta\frac{3J}{4} + 1\times\exp\beta\left(h-\frac{J}{4}\right)}{Z}\\
&= \frac{\exp\beta\left(h-\frac{J}{4}\right)}{\exp\beta\frac{3J}{4} + \exp\beta\left(h-\frac{J}{4}\right)}\\
&= \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\frac{\exp\beta\left(h-\frac{J}{4}\right) - \exp\beta\frac{3J}{4}}{\exp\beta\left(h-\frac{J}{4}\right) + \exp\beta\frac{3J}{4}}\\
&= \frac{1}{2}\left(1 + \frac{e^{\frac{\beta}{2}(h-j)} - e^{a\frac{\beta}{2}(h-j)}}{e^{\frac{\beta}{2}(h-j)} + e^{a\frac{\beta}{2}(h-j)}}\right)\\
&= \frac{1}{2}\left(1 + \tanh\left(\frac{\beta}{2}(h-j)\right)\right)
\end{aligned} \tag{18}$$

となる．これは図 4 青線のような曲線になる．

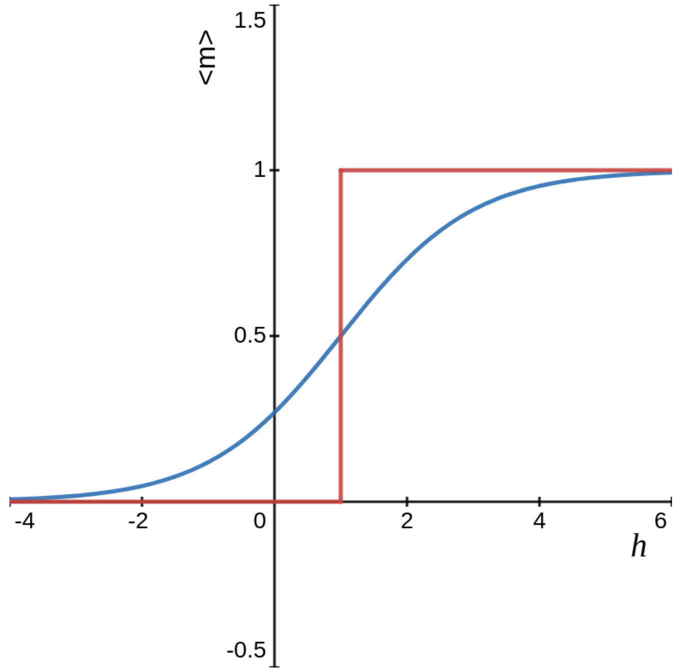

図 4　青線: 正準分布を用いて計算した磁化の期待値, 赤線: 図 2 で示した磁化の期待値, 共に $J = 1$, $\beta = 1$ とした.

(d)

4 状態すべてを考慮したとき, 分配関数は

$$Z = \exp \beta \frac{3J}{4} + \exp \beta \left(h - \frac{J}{4} \right) + \exp \left(-\beta \frac{J}{4} \right) + \exp \left(-\beta \left(h + \frac{J}{4} \right) \right) \tag{19}$$

また $|t_{-1}\rangle$, $|t_0\rangle$ での磁化の期待値は

$$\begin{aligned} \langle t_{-1} \,|\, S_1^z + S_2^z \,|\, t_{-1} \rangle &= \langle \downarrow\downarrow \,|\, S_1^z + S_2^z \,|\, \downarrow\downarrow \rangle \\ &= -1 \, \langle \downarrow\downarrow \,|\, \downarrow\downarrow \rangle = -1 \end{aligned} \tag{20}$$

$$\begin{aligned} \langle t_0 \,|\, S_1^z + S_2^z \,|\, t_0 \rangle &= \langle t_0 | \, (S_1^z + S_2^z) \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \right) \\ &= \langle t_0 | \, \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{2} |\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{2} |\downarrow\uparrow\rangle - \frac{1}{2} |\uparrow\downarrow\rangle + \frac{1}{2} |\downarrow\uparrow\rangle \right) \\ &= 0 \end{aligned} \tag{21}$$

である. したがってアンサンブル平均は

$$
\begin{aligned}
\langle S_1^z + S_2^z \rangle &= \frac{1 \times e^{\beta(h-J/4)} + (-1) \times e^{-\beta(h+J/4)}}{Z} \\
&= \frac{e^{\beta(h-J/4)} - e^{-\beta(h+J/4)}}{e^{\beta(h-J/4)} + e^{-\beta(h+J/4)} + e^{3\beta J/4} + e^{-\beta J/4}} \\
&= \frac{e^{\beta h} - e^{-\beta h}}{e^{\beta h} + e^{-\beta h} + e^{\beta J} + 1} \\
&= \frac{2\sinh\beta h}{2\cosh\beta h + e^{\beta J} + 1}
\end{aligned}
\tag{22}
$$

である. したがって磁気感受率 χ_{exp} は

$$
\begin{aligned}
\chi_{\mathrm{exp}} &= (g\mu_B)^2 \frac{\partial}{\partial h} \langle S_1^z + S_2^z \rangle \bigg|_{h \to 0} \\
&= (g\mu_B)^2 \left. \frac{2\beta\left(\left(e^{\beta J}+1\right)\cosh\beta h + 2(\cosh^2\beta h - \sinh^2\beta h)\right)}{(2\cosh\beta h + e^{\beta J}+1)^2} \right|_{h \to 0}
\end{aligned}
\tag{23}
$$

ここで $\cosh^2\beta h - \sinh^2\beta h = 1$ なので

$$
\begin{aligned}
\chi_{\mathrm{exp}} &= (g\mu_B)^2 \left. \frac{2\beta\left(\left(e^{\beta J}+1\right)\cosh\beta h + 2\right)}{(2\cosh\beta h + e^{\beta J}+1)^2} \right|_{h \to 0} \\
&= \frac{2\beta\left(e^{\beta J}+3\right)}{\left(e^{\beta J}+3\right)^2} \\
&= \frac{2\beta}{e^{\beta J}+3}
\end{aligned}
\tag{24}
$$

ここで温度が十分高く $\beta J \ll 1$ とできることから, $e^{\beta J} \simeq 1 + \beta J$ と展開すると

$$
\begin{aligned}
\chi_{\mathrm{exp}} &= \frac{2\beta}{1+\beta J+3} \\
&= \frac{2}{\frac{4}{\beta}+J} \\
&= \frac{2}{4k_BT+J} \\
&= \frac{\frac{1}{2k_B}}{T+\frac{J}{4k_B}}
\end{aligned}
\tag{25}
$$

となり, これは Curie-Weiss 則に従っている.

[2]