

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

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

である. このとき

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

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

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

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

である. ここで

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

は固有状態であり, それぞれの固有値は

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

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

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

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

となる.

(b)(i)

$|t_{\pm 1}\rangle$ 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

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

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

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

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

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

したがって磁化の期待値は図 2 のように振る舞う.

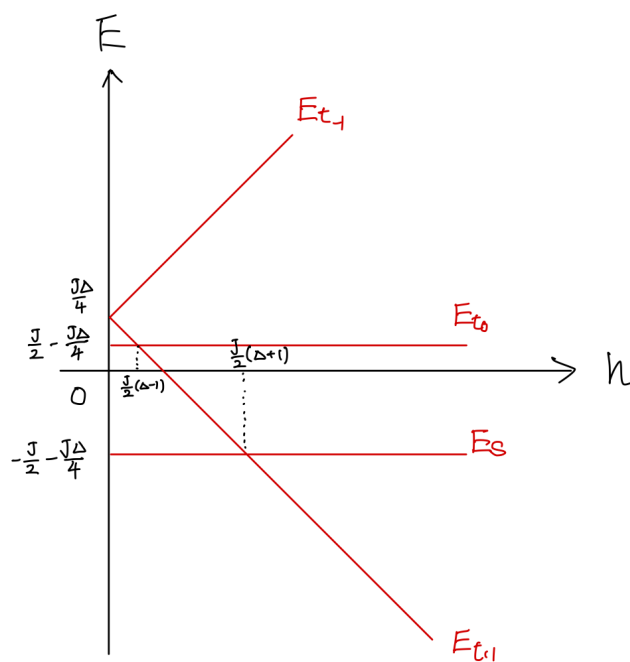


図 1 $\Delta \geq 1$ の場合のエネルギースペクトル

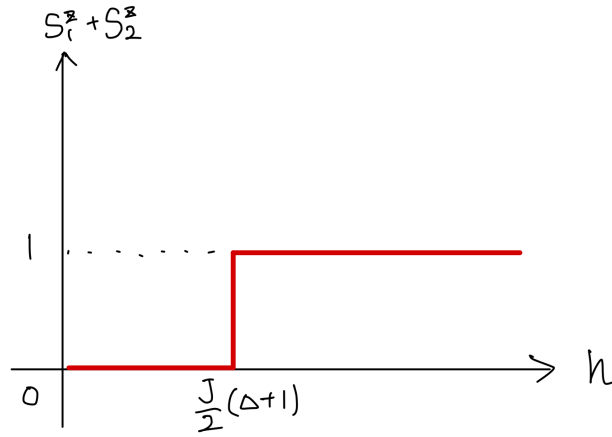


図2 $\Delta \geq 1$ の場合の磁化の期待値

(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

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

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

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.

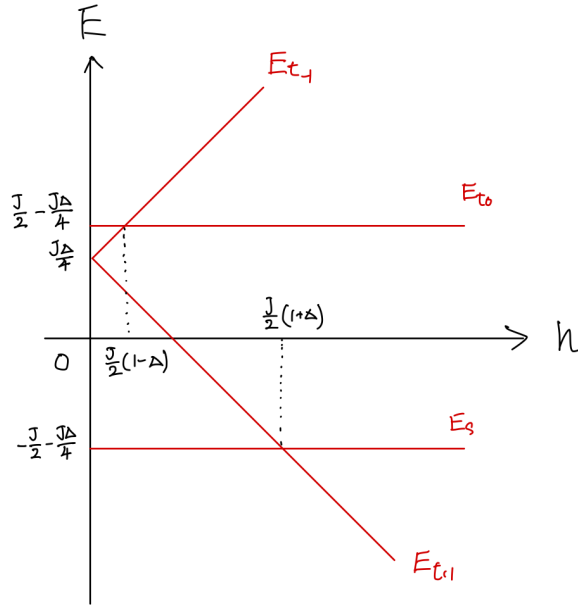


図3 $\Delta < 1$ の場合のエネルギースペクトル

(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

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

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

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

となる. これは図4 青線のような曲線になる.

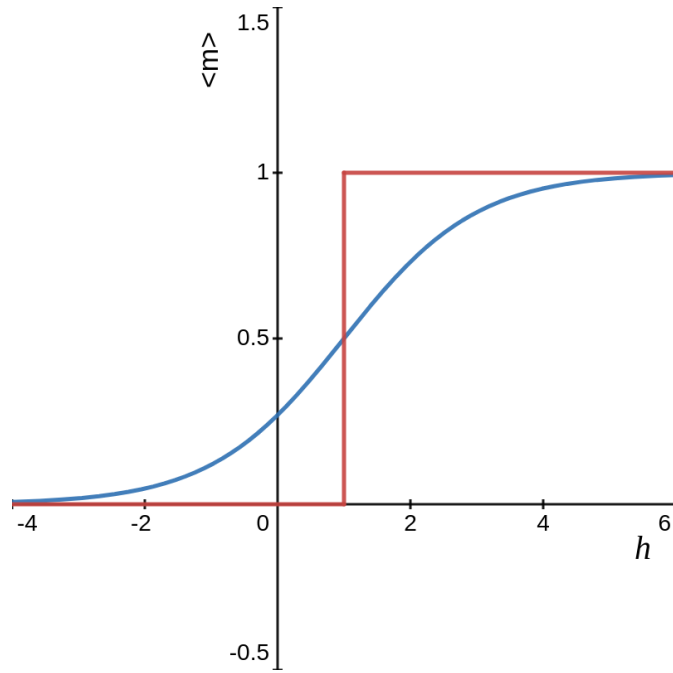


図4 青線: 正準分布を用いて計算した磁化の期待値, 赤線: 図2で示した磁化の期待値 (Desmosで描画) 共に $J = 1, \beta = 1$ とした.

(d)

4 状態すべてを考慮したとき, 分配関数は

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

となり, これは Curie-Weiss 則に従っている.

[2]

スピン-1 の 3 状態をそれぞれ

$$|+\rangle =: |1, 1\rangle, |0\rangle =: |1, 0\rangle, |-\rangle =: |1, -1\rangle \quad (26)$$

と表記する. このとき

$$\begin{aligned} S^- |+\rangle &= \sqrt{1(1+1) - 1(1-1)} |0\rangle = \sqrt{2} |0\rangle \\ S^- |0\rangle &= \sqrt{2} |-\rangle \\ S^- |-\rangle &= 0 \\ S^+ |+\rangle &= 0 \\ S^+ |0\rangle &= \sqrt{2} |+\rangle \\ S^+ |-\rangle &= \sqrt{2} |0\rangle \end{aligned} \quad (27)$$

である. これを用いて

$$\begin{aligned} H |++\rangle &= \left(\frac{J}{2} (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+) + JS_1^z S_2^z - h(S_1^z + S_2^z) \right) |++\rangle \\ &= 0 |++\rangle + J \cdot 1 \cdot 1 |++\rangle - h(1+1) |++\rangle = (J - 2h) |++\rangle \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} H |+0\rangle &= \frac{J}{2} (0 + \sqrt{2}\sqrt{2} |0+\rangle) + 0 - h(1+0) |+0\rangle \\ &= J |0+\rangle - h |+0\rangle \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} H |+-\rangle &= \frac{J}{2} (0 + 2 |00\rangle) + J(1)(-1) |+-\rangle + 0 \\ &= J |00\rangle - J |+-\rangle \end{aligned} \quad (30)$$

$$H |0+\rangle = J |+0\rangle - h |0+\rangle \quad (31)$$

$$\begin{aligned} H |00\rangle &= \frac{J}{2} (2 |+-\rangle + 2 |-+\rangle) + 0 + 0 \\ &= J(|+-\rangle + |-+\rangle) \end{aligned} \quad (32)$$

$$\begin{aligned} H |0-\rangle &= \frac{J}{2} (0 + 2 |-0\rangle) + 0 - h(0-1) |0-\rangle \\ &= J |-0\rangle + h |0-\rangle \end{aligned} \quad (33)$$

$$H |-+\rangle = J |00\rangle - J |-+\rangle \quad (34)$$

$$H| -0\rangle = J|0-\rangle + h| -0\rangle \quad (35)$$

$$H| --\rangle = (J + 2h)| --\rangle \quad (36)$$

であるため, 基底 ($|++\rangle, | +0\rangle, |+-\rangle, |0+\rangle, |00\rangle, |0-\rangle, |-+\rangle, |-0\rangle, |--\rangle$) に対して H は

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} J-2h & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -h & 0 & J & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -J & 0 & J & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & J & 0 & -h & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J & 0 & 0 & 0 & J & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h & 0 & J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & J & 0 & -J & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J & 0 & h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & J+2h \end{pmatrix} \quad (37)$$

と行列表示される. ここではこの行列に対する固有値問題を Wolfram Mathematica を用いて解いた. Listing 1 に計算に用いた Wolfram 言語コードを示す. これにより固有値, 固有状態は

$$\begin{aligned} E_1 &= -h - J & |1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0+\rangle - | +0\rangle), \\ E_2 &= h - J & |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|-0\rangle - |0-\rangle), \\ E_3 &= -2J & |3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}(|+-\rangle - |00\rangle + |-+\rangle), \\ E_4 &= -J & |4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|-+\rangle - |+-\rangle), \\ E_5 &= J & |5\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}(|+-\rangle + 2|00\rangle + |-+\rangle), \\ E_6 &= -2h + J & |6\rangle &= |++\rangle, \\ E_7 &= -h + J & |7\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+0\rangle + |0+\rangle), \\ E_8 &= h + j & |8\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0-\rangle + |-0\rangle), \\ E_9 &= 2h + J & |9\rangle &= |--\rangle \end{aligned} \quad (38)$$

と求まった. エネルギースペクトルは図 5 のようになる. 基底状態は $0 \leq h < J$ で $|3\rangle$, $J \leq h < 2J$ で $|1\rangle$, $2J \leq h$ で $|6\rangle$ である. それぞれの場合の磁化の期待値は

$$\begin{aligned} \langle 3 | S_1^z + S_2^z | 3 \rangle &= \langle 3 | (S_1^z + S_2^z) \frac{1}{\sqrt{3}}(|+-\rangle - |00\rangle + |-+\rangle) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (39)$$

$$\begin{aligned} \langle 1 | S_1^z + S_2^z | 1 \rangle &= \langle 1 | (S_1^z + S_2^z) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0+\rangle - | +0\rangle) \\ &= \langle 1 | \frac{1}{\sqrt{2}}(0 - | +0\rangle + |0+\rangle + 0) = 1 \end{aligned} \quad (40)$$

$$\begin{aligned}
 \langle 6 | S_1^z + S_2^z | 6 \rangle &= \langle 6 | (S_1^z + S_2^z) | ++ \rangle \\
 &= \langle 6 | 1 + 1 | ++ \rangle = 2
 \end{aligned}
 \tag{41}$$

したがって磁化の期待値は図 6 のようになる.

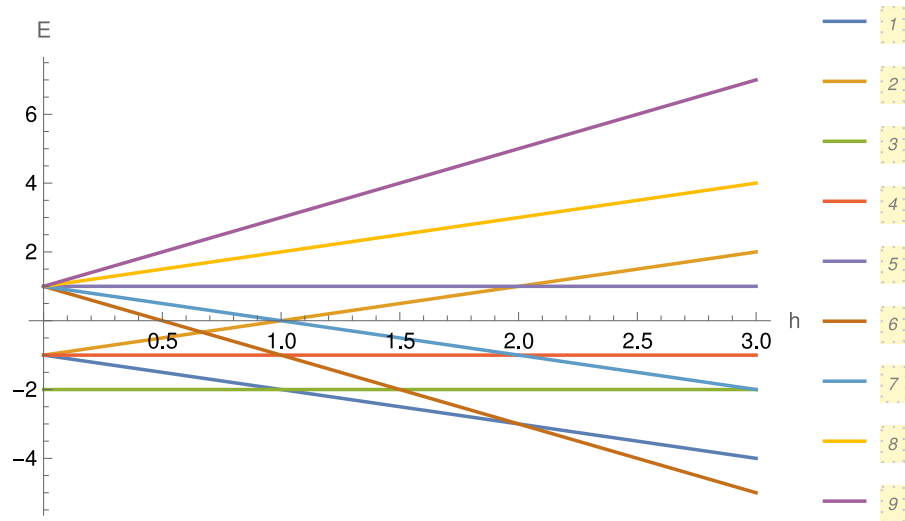


図 5 エネルギースペクトル ($J = 1$ の場合)

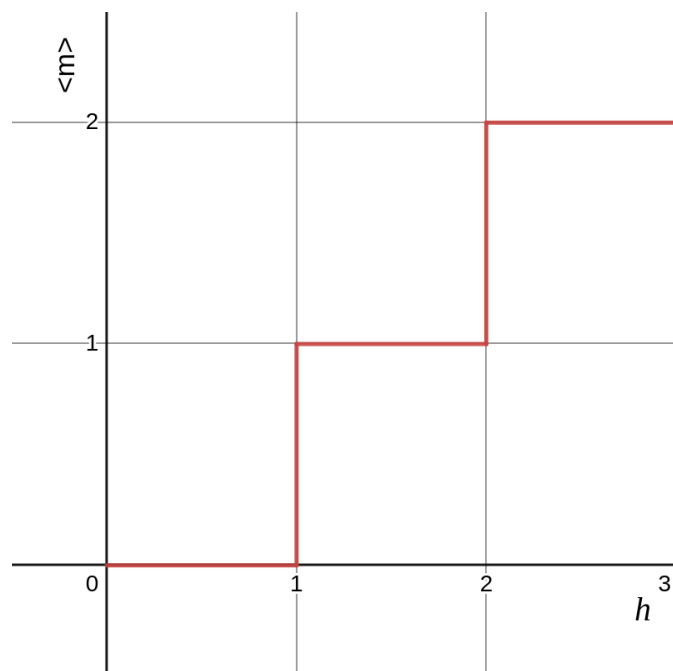


図 6 磁化の期待値 ($J = 1$ の場合)

Listing 1 Mathematica による固有値方程式の計算コード (式中の J をプログラム内では j としている)

```
(*initialize variable j, h*)
Clear[j,h];
(*define Hamiltonian*)
H={{j-2h,0,0,0,0,0,0,0,0},{0,-h,0,j,0,0,0,0,0},{0,0,-j,0,j,0,0,0,0},{0,j
    ,0,-h,0,0,0,0,0},{0,0,j,0,0,0,j,0,0},{0,0,0h,0,0,h,0,j,0},{0,0,0,0,j
    ,0,-j,0,0},{0,0,0,0,0,j,0,h,0},{0,0,0,0,0,0,0,0,j+2h}};
(*calculate eigenvalues and eigenvectors*)
e=Eigenvalues[H]
v=Eigenvectors[H]
(*put j=1 to draw an energy spectrum graph*)
j=1;
(*draw an energy spectrum graph in the range 0<h<3*)
Plot[e, {h,0,3}, PlotLegends->Automatic, AxesLabel->{"h","E"}]
```
