7/15

# 量子スピン系（Heisenberg model）

$$\mathcal{H} = -J\sum_{\langle i,j\rangle} \vec{S}_i\cdot\vec{S}_j - g\mu_B \vec{H}\cdot\sum_{i=1}^{N}\vec{S}_i \quad \left(\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z),\ [S_i^x, S_j^y] = i\hbar S_i^z \delta_{ij}\right)$$

交換相互作用　　Zeeman energy

隣接するスピンに対する和　　( $g$ : g因子, $\mu_B$ : ボーア磁子 )

スピン $\frac{1}{2}$

$$S_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\quad S_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\quad S_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- $J = 0$, $\vec{H} = (0, 0, H)$ の時

$$\mathcal{H} = -g\mu_B H \sum_{i=1}^{N} S_i^z$$

$$Z = \sum_{\text{all states}} e^{\beta g\mu_B H \sum_{i=1}^{N} S_i^z}$$

$$= \sum_{S_1^z=\pm\frac{1}{2}} e^{hS_1^z} \cdots \sum_{S_N^z=\pm\frac{1}{2}} e^{hS_N^z} \qquad (h = \beta g\mu_B H)$$

$$= \left(\sum_{S^z=\pm\frac{1}{2}} e^{hS^z}\right)^N = \left(2\cosh\left(\frac{h}{2}\right)\right)^N$$

スピンが一般の大きさを持っている時

$$S_z = -S, -S+1, \cdots, S$$

$$Z = \left(\sum_{S_z=-S}^{S} e^{hS_z}\right)^N = \left(\frac{e^{-Sh} - e^{(S+1)h}}{1-e^h}\right)^N = \left(\frac{\sinh\left((S+\frac{1}{2})h\right)}{\sinh\left(\frac{h}{2}\right)}\right)^N$$

$$\left\langle \sum_i S_i^z \right\rangle = \frac{\partial}{\partial h}\ln Z = N\left[(S+\tfrac{1}{2})\coth\left((S+\tfrac{1}{2})h\right) - \frac{1}{2}\coth\left(\frac{h}{2}\right)\right]$$

$$\frac{\langle S^z\rangle}{S} = \frac{2S+1}{2S}\coth\left(\frac{2S+1}{2S}hS\right) - \frac{1}{2S}\coth\left(\frac{h}{2S}S\right)$$

$$= B_S(hS) \quad \text{Brillouin 関数.}$$

- Brillouin 関数 -

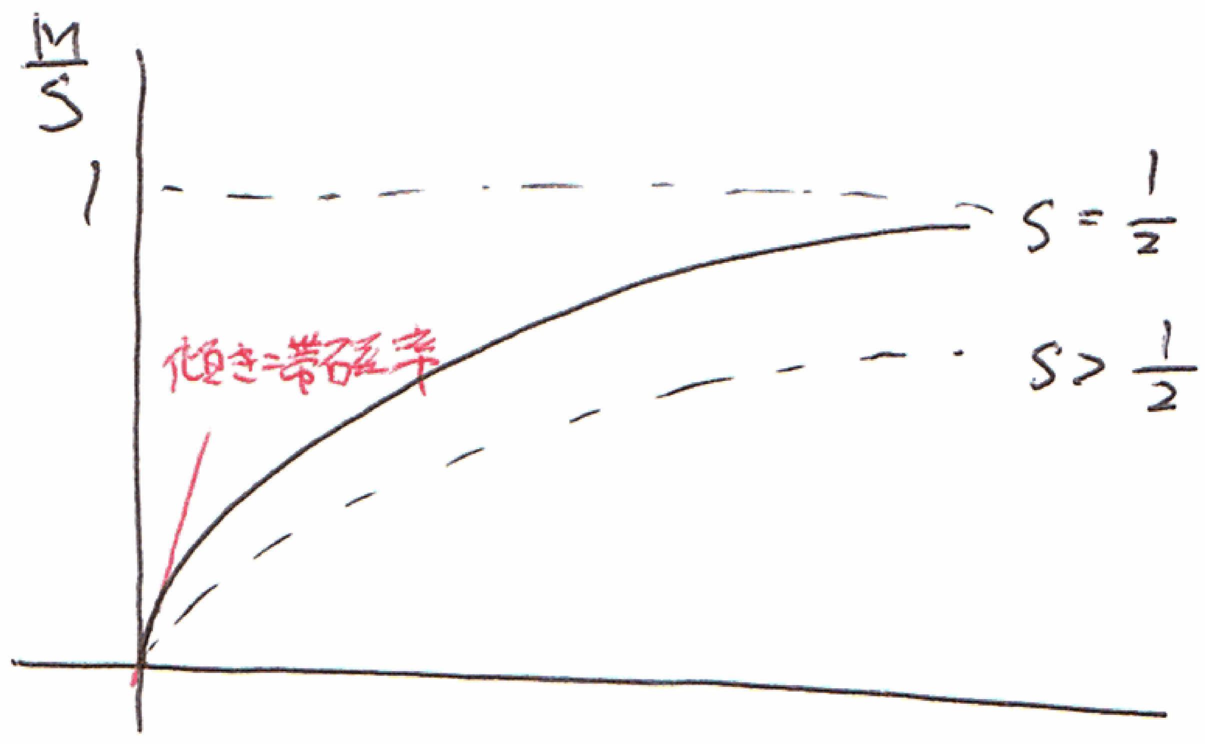
$S = \frac{1}{2}$ $\quad B_{\frac{1}{2}}(x) = \tanh x$

$S = \infty$ $\quad B_{\infty}(x) = \coth x - \frac{1}{x}$ Langevin 関数

帯磁率

磁化 $M = \sum_i \langle S_i^z \rangle$

帯磁率 $\chi = \frac{\partial M}{\partial H}\Big|_{H=0} \propto \beta$ . Curie則




$J = 0$ 常磁性体 ← 今やったmodel.

$J > 0$ 強磁性体

$J < 0$ 反強磁性体

・ J; finite　 $H = 0$

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \xrightarrow{\text{2つの原子しかない場合}} -J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

$$Z = \sum_{\text{all states}} e^{\beta J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2} = \langle ++ | e^{\beta J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2} | ++ \rangle + \cdots + \langle -- | e^{\beta J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2} | -- \rangle$$

$$= \mathrm{Tr}\, e^{\beta J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2}$$

↓
ヒルベルト空間の基底を

$|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle$ にとる

$S_1^z = \frac{1}{2}$　 $S_2^z = \frac{1}{2}$　 $S_1^z = -\frac{1}{2}$　 $S_2^z = -\frac{1}{2}$

## 固有状態

$$\mathcal{H} |\lambda\rangle = -J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle$$

合成スピン

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$$

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2}\left\{ (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 - \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_1 - \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_2 \right\}$$

$$= \frac{1}{2}\left\{ S(S+1) - \frac{3}{2} \right\}$$

$$\begin{cases} S = 1 & \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{4} & S_z = 1, 0, -1 & \text{triplet　スピン三重項} \\ & & |\uparrow\uparrow\rangle,\ \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}},\ |\downarrow\downarrow\rangle & \\ S = 0 & \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = -\frac{3}{4} & S_z = 0 & \text{singlet　スピン一重項} \\ & & \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} & \end{cases}$$

$$\mathcal{H} |S, S_z\rangle = \begin{cases} \mathcal{H} |1,1\rangle = -\frac{J}{4} |1,1\rangle \\ \mathcal{H} |1,0\rangle = -\frac{J}{4} |1,0\rangle \\ \mathcal{H} |1,-1\rangle = -\frac{J}{4} |1,-1\rangle \\ \mathcal{H} |0,0\rangle = \frac{3}{4} J |0,0\rangle \end{cases}$$

$$\rightarrow Z = 3e^{\frac{\beta}{4}J} + e^{-\frac{3}{4}\beta J}$$

$$\vec{S_1}\cdot\vec{S_2} = S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y + S_1^z S_2^z$$

$$= \left(\frac{S_1^+ + S_1^-}{2}\right)\left(\frac{S_2^+ + S_2^-}{2}\right) + \left(\frac{S_1^+ - S_1^-}{2i}\right)\left(\frac{S_2^+ - S_2^-}{2i}\right) + S_1^z S_2^z$$

$$= \frac{1}{2}\left(S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+\right) + S_1^z S_2^z$$

$$S^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},\quad S^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

基底

$|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle$

$$\langle ++|\mathcal{H}|++\rangle = \frac{1}{2}\left(\overset{0}{\langle ++|S_1^+ S_2^-|++\rangle} + \overset{0}{\langle ++|S_1^- S_2^+|++\rangle}\right) + \overset{\frac{1}{4}}{\langle ++|S_1^z S_2^z|++\rangle}$$

$$= \frac{1}{4}$$

$$\langle ++|\mathcal{H}|+-\rangle = 0$$

$$\langle +-|\mathcal{H}|-+\rangle = \frac{1}{2}\left(\overset{1}{\langle +-|S_1^+ S_2^-|-+\rangle} + \overset{0}{\langle +-|S_1^- S_2^+|-+\rangle}\right) + \overset{0}{\langle +-|S_1^z S_2^z|-+\rangle}$$

$$= \frac{1}{2}$$

$\vdots$

$\mathcal{H}$の行列要素

$$\begin{pmatrix} \langle ++|\mathcal{H}|++\rangle & \langle ++|\mathcal{H}|+-\rangle & \langle ++|\mathcal{H}|-+\rangle & \langle ++|\mathcal{H}|--\rangle \\ \langle +-|\mathcal{H}|++\rangle & & & \\ \vdots & & & \end{pmatrix}$$

$$= -J\begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix} \longrightarrow \left(-\frac{1}{4}-\lambda\right)\left(-\frac{1}{4}-\lambda\right) - \left(\frac{1}{2}\right)^2$$

$$= \lambda + \frac{\lambda}{2} - \frac{3}{16}$$

$$= \left(\lambda - \frac{1}{4}\right)\left(\lambda + \frac{3}{4}\right) = 0$$

固有値 $-\frac{J}{4}$（縮退3），$\frac{3}{4}J$

$$Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta \mathcal{H}} = \mathrm{Tr}\, \exp(\beta J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2)$$

$$= \mathrm{Tr}\, U \underbrace{\begin{pmatrix} e^{\frac{\beta J}{4}} & & & 0 \\ & e^{\frac{\beta J}{4}} & & \\ & & e^{\frac{\beta J}{4}} & \\ 0 & & & e^{-\frac{3}{4}\beta J} \end{pmatrix}}_{\equiv A_d} U^{-1}$$

$$= \mathrm{Tr}\, A_d$$

$$= 3 e^{\frac{\beta J}{4}} + e^{-\frac{3}{4}\beta J}$$