

(1) 角運動量を持つ電荷は磁気モーメントを持ち、お互いに、あるいは磁場と相互作用する。磁場  $H_0$  中で相互作用する二つのスピン( $S=1/2$ )の比熱と磁化の温度依存性と磁場依存性を求めよう。まず、以下のハミルトニアンを対角化し、固有エネルギーと固有状態を求めよ。 $J$ は相互作用の強さの定数、 $m$ はスピン角運動量の磁気モーメントの大きさの定数。

$$H = -J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - (S_{1z} + S_{2z})mH_0$$

ヒント 基底の波動関数を  $\{|1\rangle \equiv |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle, |2\rangle \equiv |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle, |3\rangle \equiv |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle, |4\rangle \equiv |\downarrow\rangle|\downarrow\rangle\}$  と取り、 $H$  を行列表示  $\langle i|H|j\rangle$  すると確かに対角化されていないことがわかるので、対角化されるように基底を取りなおせば良い。(ヒント： $\langle 2|+\langle 3|$ などを新しい基底としてみるということ)。

(2) 次に、統計力学で習った手法を応用してエネルギーと磁化を求めてみよう。

$$M = \frac{\sum_i \langle i|(S_{1z} + S_{2z})m e^{-bH}|i\rangle}{\sum_i \langle i|e^{-bH}|i\rangle}, \quad E = \frac{\sum_i \langle i|H e^{-bH}|i\rangle}{\sum_i \langle i|e^{-bH}|i\rangle}$$

ここで、 $\langle i|$ は前問で求めた新しい基底の固有状態( $i=1\sim 4$ )である。

(3) 前問で得た磁化の温度・磁場依存性を、パーソナルコンピュータでグラフにしてみよう。グラフの各パラメタに対する振舞いを見て、以下の問いに答えよ。

- (イ) 温度が高い極限で磁化にキュリー則( $M \propto 1/T$ )が見られるだろうか。
- (ロ) 低温での振る舞いは、 $J$ と $H_0$ の大小関係でどう変わるだろうか。
- (ハ) 磁場を上げていくと磁化の大きさが劇的に変化する。何が起きているのか。

ヒント パラメタの典型的な値としては、まず温度依存性については $mH_0=1$ 及び、 $-J=0, 1, 2, 4$  ( $J < 0$ である)として温度範囲  $T=0\sim 10$  などとせよ。磁場依存性については $J=4$ 及び  $T=0.1, 0.5, 1, 4$  として、磁場範囲  $mH_0=0\sim 10$  などとする。これ以外についても試そう。

(4) 最後に比熱  $C = \partial E / \partial T$  の磁場・温度依存性をプロットしてみよう。比熱はエネルギーの表式を温度で微分すれば得られるが、大変煩雑なので、差分  $C = (E(T + \Delta T) - E(T)) / \Delta T$  で求めた方が良いかもしれない( $\Delta T \approx 0.01$ 程度にとるとよい)。

- (二) 単一スピンの場合は磁場ゼロでは比熱は生じなかったがこの場合はどうか。