氏名・（本籍）	阿部芳彦（あべ よしひこ）
学位の種類	理学博士
学位記番号	理博第416号
学位授与年月日	昭和50年3月25日
学位授与の要件	学位規則第5条第1項該当
研究科専門課程	東北大学大学院理学研究科 （博士課程）物理学専攻修了
学位論文題目	状態和の零点分布と相転移
論文審査委員	（主査） 教授 桂　重俊　　教授 森田　章 教授 糟谷　忠雄

論文目次

論 文 内 容 要 旨

Yang－Leeは状態和の複素fugacity平面の零点分布と相転移について論じ，更にこの理論の具体的な例としてspin 1／2のIsing強磁性体については複素fugacity平面で全ての零点が単位円上に分布する事を示した。その後強磁性的な相互作用の場合に全ての零点が単位円上に分布する事が数値実験的にも解析的にも示され，更に単位円上の零点の密度と物質量の転移点近傍における特異性について議論がなされている。ところで反強磁性的な相互作用の系について本研究前に得られたOno，Karaki 等の有限系の結果や他の多くの研究の結果を見る限り，殆んどの零点は負の実軸上に分布し，少数の複素根が見出されるだけであり，状態和の零点の分布と相転移の関係は明らかでない。そこで本論文ではこれらの問題点を明らかにするため，状態和の零点分布と相転移の関係を，特に反強磁性的な相互作用の系について調べた。なお，これに関連して，二次元Ising modelの複素温度平面の零点分布，誘電体のSlater modelの複素fugacity平面，複素温度平面の零点分布及びhard core lattice gasの複素fugacity平面における零点分布についても調べた。

本研究では反強磁性的な最近接相互作用の他に強磁性的な第二近接相互作用を加える事により反強磁性的なspin配列の出現をより容易にし，反強磁性状態の特徴をより顕著にする事ができるのではないかと考えて，第二近接相互作用をもつIsing modelについて状態和の零点分布を調べた。

最初に有限系（最大6×6格子）の状態和を厳密に求めた。4×6格子までは全ての状態の数を数え上げたがその方法では6×6格子の場合，4×6格子の4096倍の状態数になる。そこで，transfer matrixを導入し適当なunitary変換を行う事によりtransfer matrixをblock diagonalized matrixに直し，その後にmatrixの乗算を行う事により状態和が得られるが，この全ての過程を電子計算機を用いて記号処理的に行って状態和を厳密に求め，その複素fugacity平面における零点の分布をJ/kT，J'/kTの幾つかの値の組み合せについて調べた。その結果 1)最近接，第二近接相互作用共に強磁性的相互作用の場合（$J>0, J'>0$），2）$J>0$，$J+2J'>0$の場合，3)最近接相互作用が反強磁性的であり，第二近接相互作用が強磁性的相互作用の場合($J<0, |J|\sim J'>0$)，4)最近接相互作用が反強磁性的であり，第二近接相互作用がない場合（$J<0, J'\sim 0$)，5)最近接相互作用が弱く，第二近接相互作用が反強磁性的相互作用の場合（$J\sim 0$，$J'<0$)の各々の場合に零点の分布は特徴的なpatternを示す事が見出された。

有限系の場合には零点は離散的な点の分布として得られたが，更に大きい系である半無限大の系について状態和の零点分布が分れば状態和の零点の分布を軌跡として得る事ができるので有用である。そこで半無限大の系の状態和の零点の軌跡を求める方法について，零点の軌跡はtransfer matrixの固有値のうちで絶対値が最大のものと二番目のものが入れ換わる点zとして軌跡を決める事ができる事を示した。この方法を用いて4×∞の系の状態和の零点の軌跡を調べ，その結果最近接相互作用が反強磁性的，第二近接相互作用が強磁性的な場合（$J<0$，$J'>0$）には，零点の軌跡はほぼ二重円になる事が示された。更に第二近接相互作用がない場合（$J<0$，$J'=0$）には零点の軌跡は複素fugacity平面の右半面にも現われ，〃C〃字型である事が示された。

厳密に解けるmodelについて調べる事により温度を変化させた時複素fugacity 平面の零点分布

がどの様に変化するのか，特に臨界温度近くの複素 fugacity 平面の零点分布を調べる事ができる。そこで Ising 反強磁性体の分子場近似が厳密に成り立つ model である two sublattice Husimi − Temperley model を導入し，この系を用いて Ising反強磁性体の分子場近似における状態和の零点の分布を調べた。この系の状態和の零点の軌跡を求める方法として静電 analogy を拡張して次の様な方法で零点の軌跡を求める事ができる事を示した。即ち正の実数z に対する自由 energy を，zを複素数に解析接続する事により多価の複素自由 energy が得られる。それらの複素自由energy のうちで実数部の値が最も小さい branch と二番目に実数部の値が小さい branch が入れ換わる点 z として軌跡を決める事ができる。この方法を用いて分子場近似の場合の状態和の零点の軌跡が低温で二つの円状の曲線になり，軌跡は正の実軸を二点で切っている事を見出した。相互作用比 γ ($\equiv J'/J$) が $\gamma < -1/3$ の場合 tricritical temperature $t_t = (1+\frac{1}{3\gamma})\, t_c$ (t_c は critical temperature : $1-\gamma$) が存在し，$t < t_t$ では一次の相転移が生じ零点の軌跡は正の実軸と直角に交わる。$t_t < t < t_c$ では二次の相転移になり零点の外側の軌跡は正の実軸と$\pm 3/4\pi$の角度で交わり，零点の密度は z_c からの距離に比例する。臨界温度で二つの曲線は $z=1$ で交わり，正の実軸との角度は$\pm 3/8\pi$と$\pm 5/8\pi$であり，密度は $z_c(=1)$ からの距離の三乗に比例する。更に高温では零点は一つの閉じた曲線上に分布し，正の実軸を切る事はない。また第二近接相互作用がない場合 ($\gamma=0$) には負の実軸上の一部にも零点が分布する事を見出した。

次に厳密に解く事ができるFisherの超交換反強磁性体の零点の分布を調べた。複素 fugacity平面では低温で軌跡は正の実軸と二点で直角に交わり，零点の密度はz_c からの距離に比例している。臨界温度では$z_c=1$で内側の軌跡と外側の軌跡は交叉し，正の実軸との角度は$\pm 1/4\pi$と$\pm 3/4\pi$であり，零点の密度はz_c からの距離の三乗に比例している。複素温度平面では零点の軌跡は虚軸に関して対称なソラ豆状の曲線になり，正の実軸を二点で切る。正の実軸との内側の交点が臨界温度x_c に対応し，x_c の磁場依存性は

$$x_c \sim a + bH^2 + O(H^3) \quad |H| \ll 1 \qquad (\ a,\ b \text{は定数}\ )$$

である。この場合零点の軌跡は正の実軸と直角に交わり，密度は x_c からの距離に比例している。これらの結果から磁化と帯磁率の特異性を調べると

$$M \sim -(H-H_c)\ \ln|H-H_c|$$

$$\chi \sim D\cdot(T-T_c)\ \ln|T-T_c| - D'\cdot H^2 \ln|T-T_c|$$

を得る。ここでD，D' は定数である。

状態和の零点の全体の軌跡と密度から，自由 energy の磁場依存性を決める事ができ，又逆も可能である。特に正の実軸近傍の零点の軌跡と密度から自由 energy の磁場特異性を決める事ができる。ところで分子場近似の結果は Ising model の全体的な振舞いをよく表わしているが転移点近傍の振舞いは異なっている。又 Fisher model の転移点近傍の振舞いは Ising model のものによく似ていると考えられている。従ってこれらの結果をふまえて，有限系の場合に得られた零点の pattern，半無限大の系の場合に得られた零点の軌跡を考え合せる事により，強磁性的な第二近接相互作用をもつ Ising 反強磁性体の複素 fugacity平面における零点の軌跡は低温ではほぼ二重円上に分布し正の実軸を二点で切り，温度上昇に伴って正の実軸を切っている二点は互いに接近し臨界温度で正の実軸を切る二点は $z=1$ で一致し，$z=1$ で軌跡は交わり，更に高温では軌跡は閉じた

一つの曲線になり正の実軸を切らない事を示す事ができた。

なお関連する研究として，二次元 Ising model の複素温度平面の零点分布，誘電体の Slater model の複素 fugacity 平面，複素温度平面の零点分布及び hard core lattice gas の複素fugacity 平面における零点分布について調べた。

二次元 Ising model の複素温度平面の状態和は 4 項の和になるので，その零点はその内の1項について Fisher の示した二つの円，すなわち± 1を中心とする半径$\sqrt{2}$の円上 に分布する事は自明ではない。そこで二次元 Ising model の複素温度平面の零点分布を調べるために最大10×10格子まで正確に状態和を求め、零点の分布を調べた。その結果零点は系が無限大の極限で漸近的に Fisher の示した二つの円上に分布するであろう事を示した。

誘電体の Slater model を二次元化した Lieb の KDP , Rys の F , Wu の modified KDP model について複素 fugacity 平面，複素温度平面で状態和の零点の分布を調べた。その結果 KDP model の複素 fugacity 平面の状態和の零点は低温では単位円上に分布する事および KDP model の高温と F model の全温度で複素 fugacity 平面の零点の分布は二次元分布である事を見出した。二次元分布の具体的な例を示したのは本研究が最初であり，二次元分布と相転移の関係は今後の研究を待たなければならない。

hard core lattice gas の系の相転移については Alder 型相転移を示す model として関心を集めている。そこで，hard core lattice gas の相転移の存在及び性質について，零点の分布から論じるため半無限大の系（$6\times\infty$格子）の場合について調べた。分子間力として hard core の他に井戸型引力をもつ場合には，低温でほぼ円状の軌跡になり正の実軸を一点で切っている。しかし温度上昇に伴って正の実軸近傍の軌跡は外側にそれる傾向を示す。hard core のみの系では軌跡はゆるやかなカーブで正の実軸に接近し再び正の実軸から離れる事が見出された。$2\times\infty$，$4\times\infty$格子の場合も考え合せ系が無限大の極限では軌跡は正の実軸と交わるものと考えられる。

以上本論文により Ising 反強磁性体の状態和の零点分布と相転移の関係について明らかにすると共に Slater model や hard core lattice gas の場合についても状態和の零点分布と相転移の関係を明らかにする事ができた。

論文審査の結果の要旨

本研究は状態和の零点の分布と相転移との関係を種々の系，特に反強磁性 Ising モデルについて論じたものである。状態和の零点分布と相転移の関係については，Yang－Leeが有限系の状態和の複素 fugacity 平面の零点が系を大きくした極限で正実軸上の一点に集積すれば，この点が相転移点であるという定理を与え，また強磁性的相互作用をなす Ising モデルにおいては，円定理が成立つことを示した。

以後，Yang－Lee の定理を反強磁性的相互作用をもつ系に適用したらどうなるかを調べるため，多くの研究が行なわれたが，本研究以前に得られた結果の殆んどにおいては，大部分の零点は複素 fugacity 平面の負の実軸上に分布するという結果であったので，反強磁性系の相転移を Yang－Lee の定理との関係において理解することは出来ていなかった。

著者はこの点を明らかにするために，反強磁性 Ising モデルの 1．有限系　2．半無限の系　3．分子場近似（Husimi－Temperley model）　4．Fisher の超交換反強磁性モデルについて零点分布を求め，その解析を行なった。

有限系については，4×6，6×6の系について零点を求めた。6×6についてはこの際 transfer matrix の生成および乗算を電子計算機に記号処理的に行なわせることにより計算時間の2桁～3桁の短縮を行なって，実行を可能ならしめた。最近接相互作用 J の他，第二近接相互作用 J' を導入し，その各が正および負の種々の場合につき，すべてに零点を求め，それぞれの場合に応じ数種のパターンを得た。

半無限の系においては，transfer matrix の最大固有値と絶対値が最大の次の固有値が等しい所が零点分布の軌跡であるという原理の成立つことを示し，この原理により零点の軌跡を求めた。

反強磁性の分子場近似が正確に成立つ系である反強磁性的 Husimi－Temperley モデルを導入し，この系の自由エネルギーを複素 fugacity 平面に解析接続したとき，Real part が最小の分枝とその次に小さい分枝とが等しくなる点が零点の軌跡であることを導き，これにより零点の軌跡を求めた。

Fisher の超交換反強磁性モデルの状態和を Onsager の2次元 Ising モデルの状態和に帰着せしめ，これから零点の軌跡を求めた。

以上の結果を総合して考えると，Ising 反強磁性体（$J<0, J'>0$）の零点の分布は，低温では正の実軸を2回きる二重円的であり，高温では正の実軸をきらないそら豆型，臨界点では正の実軸を一度きる中間の型であることを推論することができた。このことによりこれまで説明することのできなかった Yang－Lee の定理と反強磁性の相転移の関係は明らかにされたといってよい。

なお，本論文では，以上の外に強誘電体の Slater モデル，剛体球格子気体，2次元 Ising モデルの温度平面の零点分布等についても論じ，興味ある結果を得ている。特に Slater モデルにおいて，零点の2次元分布が存在することをはじめて見い出した。

以上述べた如く，阿部芳彦の提出の論文は，状態和の零点分布と相転移の関係を反強磁性的相互作用をもつ Ising モデルの場合，その他，二，三の場合について明らかにしたもので，この際導いた零点分布の求め方についての原理とともに，統計力学における新たな知見を加えるものである。

よって，理学博士の学位論文として合格と認める。