2004年度統計力学II 宿題11 (6月28日出題、7月5日提出)
解答

担当 吉森 明

[問題 1.] 平均場近似を使って、イジングモデルの転移温度を求めよ。ただし、授業で省略した計算をきちんとすること。

[解答] まず、自由エネルギーAを求める。Aは、エネルギーEとエントロピーSから

$$A = E - TS \tag{1}$$

と表される。

エントロピーは、上向きのスピンの数をN_+、下向きをN_-とすると、場合の数

$$W = \frac{N!}{N_+!N_-!} \tag{2}$$

から求まる。スターリングの公式を使えば、

$$S = k_{\rm B}\ln W \approx Nk_{\rm B}\ln N - N_+k_{\rm B}\ln N_+ - N_-k_{\rm B}\ln N_- \tag{3}$$

一方、

$$N_+ = \frac{N+NM}{2} = N\frac{1+M}{2} \tag{4}$$

$$N_- = \frac{N-NM}{2} = N\frac{1-M}{2} \tag{5}$$

だから、

$$\begin{aligned} S &= Nk_{\rm B}\ln N - N\frac{1+M}{2}k_{\rm B}\ln\left(N\frac{1+M}{2}\right) \\ &\quad - N\frac{1-M}{2}k_{\rm B}\ln\left(N\frac{1-M}{2}\right) \end{aligned} \tag{6}$$

$$
\begin{aligned}
&= Nk_{\mathrm{B}}\ln N - N\frac{1+M}{2}k_{\mathrm{B}}\ln N - N\frac{1-M}{2}k_{\mathrm{B}}\ln N \\
&\quad - N\frac{1+M}{2}k_{\mathrm{B}}\ln\left(\frac{1+M}{2}\right) \\
&\quad - N\frac{1-M}{2}k_{\mathrm{B}}\ln\left(\frac{1-M}{2}\right) \qquad (7)\\
&= -N\frac{1+M}{2}k_{\mathrm{B}}\ln\left(\frac{1+M}{2}\right) \\
&\quad - N\frac{1-M}{2}k_{\mathrm{B}}\ln\left(\frac{1-M}{2}\right) \qquad (8)
\end{aligned}
$$

エネルギーは、授業でやったように近似を使って、

$$E = -M^2 J\frac{N}{2}z \tag{9}$$

結局、Aは、

$$A = -M^2 J\frac{N}{2}z + NT\frac{1+M}{2}k_{\mathrm{B}}\ln\left(\frac{1+M}{2}\right) + NT\frac{1-M}{2}k_{\mathrm{B}}\ln\left(\frac{1-M}{2}\right) \tag{10}$$

実現するMは、Aが最小になるMだから、

$$\frac{\partial A}{\partial M} = 0 \tag{11}$$

したがって、

$$-NzJM + \frac{N}{2}k_{\mathrm{B}}T\ln\left(\frac{1+M}{2}\right) + \frac{N}{2}k_{\mathrm{B}}T - \frac{N}{2}k_{\mathrm{B}}T\ln\left(\frac{1-M}{2}\right) = 0 \tag{12}$$

だから、

$$NzJM = \frac{N}{2}k_{\mathrm{B}}T\ln\left(\frac{1+M}{1-M}\right) \tag{13}$$

$$zJM = \frac{1}{2}k_{\mathrm{B}}T\ln\left(\frac{1+M}{1-M}\right) \tag{14}$$

ここで、

$$\frac{1+M}{1-M} = e^{2\beta zJM} = X \tag{15}$$

とすると、

$$
\begin{aligned}
1+M &= (1-M)X && (16)\\
M+MX &= X-1 && (17)\\
M &= \frac{X-1}{X+1} = \frac{e^{2\beta zJM}-1}{e^{2\beta zJM}+1} && (18)\\
&= \frac{e^{\beta zJM}-e^{-\beta zJM}}{e^{\beta zJM}+e^{-\beta zJM}} = \tanh\beta zJM && (19)
\end{aligned}
$$

つまり、

$$M = \tanh\beta zJM \tag{20}$$

が得られる。

(20) 式の解は、授業でやったように、$\beta zJ < 1$のとき、$M = 0$で、$\beta zJ > 1$のとき、$M \neq 0$なので、転移温度は、zJ/k_{B}となる。

[問題 2.(余裕があれば)] P184 演習問題 [1]

[解答] (1) H_Aのカノニカル分布で$\langle\sigma_i\rangle$を計算する。

$$\langle\sigma_i\rangle = \frac{1}{q}\sum_{\sigma_i=-1,1}\sigma_i e^{-\beta H_A} \tag{21}$$

ここで

$$q = \sum_{\sigma_i=-1,1} e^{-\beta H_A} \tag{22}$$

H_Aを代入して、

$$
\begin{aligned}
\langle\sigma_i\rangle &= \frac{1}{q}\sum_{\sigma_i=-1,1}\sigma_i e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle\sigma_i-\beta\bar{H}} && (23)\\
&= \frac{1}{q}e^{-\beta\bar{H}}(e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle}-e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle}) && (24)
\end{aligned}
$$

また、

$$q = e^{-\beta\bar{H}}(e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle}+e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle}) \tag{25}$$

ゆえに、

$$\langle\sigma_i\rangle = \tanh(\beta z J\langle\sigma\rangle) \tag{26}$$

(2) $\langle\sigma_i\rangle = \langle\sigma\rangle = M$とおけば、$M = \tanh(\beta z J M)$が導ける。