2004年度統計力学II 宿題12 (7月5日出題、7月12日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] 教科書P185演習問題[4]のハミルトニアン

$$H = -\sum_{\langle i,j\rangle} J\sigma_i\sigma_j \tag{1}$$

で表される相互作用 ($J > 0$) をするスピン系がある。和は最近接格子点対についてとる。各スピンは $\sigma_i = -1, 0, 1$ の3つの状態をとるものとする。

1. 教科書P184演習問題[1]の考え方を用いた平均場近似により、相転移温度を求めなさい。
2. この系のランダウ自由エネルギーは、平均場近似により、

$$A(M,T) = -Nk_{\mathrm{B}}T\ln 3 + N\left(\frac{3}{4}k_{\mathrm{B}}T - \frac{zJ}{2}\right)M^2 + \frac{9}{2^6}Nk_{\mathrm{B}}T_cM^4 \tag{2}$$

で与えられる。ただし、zは、格子の配位数を表す。転移点で比熱が不連続になることを示し、とびを求めよ。

[解答] 1. 教科書P184演習問題[1]の考え方では、まず、ハミルトニアン(1)式をH_Aに置きかえる。

$$H_A = -zJ\langle\sigma\rangle\sigma_i + \bar{H} \tag{3}$$

このH_Aを使って$\langle\sigma_i\rangle$を計算する。

$$\langle\sigma_i\rangle = \frac{\sum_{\sigma_i=-1,0,1}\sigma_i e^{-\beta H_A}}{\sum_{\sigma_i=-1,0,1} e^{-\beta H_A}} \tag{4}$$

(3)式を代入すると、

$$\begin{aligned}\langle\sigma_i\rangle &= \frac{\sum_{\sigma_i=-1,0,1}\sigma_i e^{-\beta(-zJ\langle\sigma\rangle\sigma_i+\bar{H})}}{\sum_{\sigma_i=-1,0,1} e^{-\beta(-zJ\langle\sigma\rangle\sigma_i+\bar{H})}} &(5)\\ &= \frac{e^{-\beta\bar{H}}\sum_{\sigma_i=-1,0,1}\sigma_i e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle\sigma_i}}{e^{-\beta\bar{H}}\sum_{\sigma_i=-1,0,1} e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle\sigma_i}} &(6)\\ &= \frac{e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle} - e^{-\beta zJ\langle\sigma\rangle}}{e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle} + 1 + e^{-\beta zJ\langle\sigma\rangle}} &(7)\end{aligned}$$

ここで、$\langle\sigma_i\rangle = \langle\sigma\rangle = M$とすると、

$$M = \frac{e^{\beta zJM} - e^{-\beta zJM}}{e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM}} \tag{8}$$

この非線型方程式の解が実現するMとなる。

$$f(M)=\frac{e^{\beta zJM}-e^{-\beta zJM}}{e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM}}-M \tag{9}$$

とおくと、$f'(0)\leq 0$の時、解は$M=0$しかなく、$f'(0)>0$の時、$M\neq 0$の解がある(付録参照)。したがって、

$$\begin{aligned} f'(M) \;=\; & \frac{\beta zJe^{\beta zJM}+\beta zJe^{-\beta zJM}}{(e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM})} \\ & -\frac{(e^{\beta zJM}-e^{-\beta zJM})(\beta zJe^{\beta zJM}-\beta zJe^{-\beta zJM})}{(e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM})^2} \\ & -1 \end{aligned} \tag{10}$$

だから、

$$f'(0)=\frac{\beta zJ+\beta zJ}{(1+1+1)}-1=\frac{2\beta zJ}{3}-1 \tag{11}$$

転移温度T_cは、

$$\frac{2zJ}{3k_{\mathrm{B}}T_c}=1 \tag{12}$$

なので、

$$T_c=\frac{2zJ}{3k_{\mathrm{B}}} \tag{13}$$

2. (2)式で与えられる$A(M,T)$の最小値が実現するMなので、

$$\begin{aligned} \frac{\partial A}{\partial M} &= 2N\left(\frac{3}{4}k_{\mathrm{B}}T-\frac{zJ}{2}\right)M+\frac{9}{2^4}Nk_{\mathrm{B}}T_cM^3 && (14) \\ &= NM\left\{\frac{3}{2}k_{\mathrm{B}}\left(T-\frac{2zJ}{3k_{\mathrm{B}}}\right)+\frac{9}{2^4}k_{\mathrm{B}}T_cM^2\right\}=0 && (15) \end{aligned}$$

$T>2zJ/(3k_{\mathrm{B}})$のとき、最小値は$M=0$だから、

$$A(T)=A(0,T)=-Nk_{\mathrm{B}}T\ln 3 \tag{16}$$

$T\leq 2zJ/(3k_{\mathrm{B}})$のとき、最小値は

$$M_0=\left\{\frac{2^3}{3T_c}\left(\frac{2zJ}{3k_{\mathrm{B}}}-T\right)\right\}^{1/2} \tag{17}$$

だから、

$$
\begin{aligned}
A(T) &= A(M_0, T) && (18)\\
&= -Nk_{\mathrm{B}}T\ln 3 + N\left(\frac{3}{4}k_{\mathrm{B}}T - \frac{zJ}{2}\right)\frac{2^3}{3T_c}\left(\frac{2zJ}{3k_{\mathrm{B}}} - T\right) \\
&\quad + \frac{9}{2^6}Nk_{\mathrm{B}}T_c\left\{\frac{2^3}{3T_c}\left(\frac{2zJ}{3k_{\mathrm{B}}} - T\right)\right\}^2 && (19)\\
&= -Nk_{\mathrm{B}}T\ln 3 - N\frac{3}{4}k_{\mathrm{B}}\frac{2^3}{3T_c}\left(T - \frac{2zJ}{3k_{\mathrm{B}}}\right)^2 \\
&\quad + \frac{Nk_{\mathrm{B}}}{T_c}\left(T - \frac{2zJ}{3k_{\mathrm{B}}}\right)^2 && (20)\\
&= -Nk_{\mathrm{B}}T\ln 3 - Nk_{\mathrm{B}}\frac{2}{T_c}\left(T - \frac{2zJ}{3k_{\mathrm{B}}}\right)^2 \\
&\quad + \frac{Nk_{\mathrm{B}}}{T_c}\left(T - \frac{2zJ}{3k_{\mathrm{B}}}\right)^2 && (21)\\
&= -Nk_{\mathrm{B}}T\ln 3 - Nk_{\mathrm{B}}\frac{1}{T_c}\left(T - \frac{2zJ}{3k_{\mathrm{B}}}\right)^2 && (22)
\end{aligned}
$$

エントロピーは、

$$S = -\frac{\partial A(T)}{\partial T} \tag{23}$$

だから、$T > T_c = 2zJ/(3k_{\mathrm{B}})$ のときは、

$$S = Nk_{\mathrm{B}}\ln 3 \tag{24}$$

$T \leq T_c = 2zJ/(3k_{\mathrm{B}})$ のときは、、

$$S = Nk_{\mathrm{B}}\ln 3 + 2Nk_{\mathrm{B}}\frac{1}{T_c}\left(T - \frac{2zJ}{3k_{\mathrm{B}}}\right) \tag{25}$$

比熱は、

$$C_H = T\frac{\partial S}{\partial T} \tag{26}$$

ただし、C_Hは、外部磁場を一定（この場合は0）にした比熱を表す。$T > T_c = 2zJ/(3k_{\mathrm{B}})$ のときは、

$$C_H = 0 \tag{27}$$

$T \leq T_c = 2zJ/(3k_{\mathrm{B}})$ のときは、、

$$C_H = 2NTk_{\mathrm{B}}\frac{1}{T_c} \tag{28}$$

すなわち、$T = T_c$で、$2Nk_{\mathrm{B}}$のとびがある。

[問題 2.(余裕があれば)] P185 演習問題 [3]

[解答] (1) Hを

$$H = -J\sigma_0(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) - h(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \tag{29}$$

とすると、この Hのカノニカル分布で $\langle\sigma_0\rangle$ を計算する。

$$\langle\sigma_0\rangle = \frac{1}{Z}\sum_{\sigma_0=-1,1}\sum_{\sigma_1=-1,1}\sum_{\sigma_2=-1,1}\sum_{\sigma_3=-1,1}\sigma_0 e^{-\beta H} \tag{30}$$

ここで

$$Z = \sum_{\sigma_0=-1,1}\sum_{\sigma_1=-1,1}\sum_{\sigma_2=-1,1}\sum_{\sigma_3=-1,1} e^{-\beta H} \tag{31}$$

Hを代入して、

$$\begin{aligned}
\langle\sigma_0\rangle &= \frac{1}{Z}\sum_{\sigma_0=-1,1}\sum_{\sigma_1=-1,1}\sum_{\sigma_2=-1,1}\sum_{\sigma_3=-1,1} \\
&\quad \sigma_0 \exp[-\beta\{-J\sigma_0(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3) \\
&\quad - h(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3)\}] \qquad (32)\\
&= \frac{1}{Z}\sum_{\sigma_1=-1,1}\sum_{\sigma_2=-1,1}\sum_{\sigma_3=-1,1}\Big[e^{-\beta\{-J(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3)-h(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3)\}} \\
&\quad -e^{-\beta\{J(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3)-h(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3)\}}\Big] \qquad (33)\\
&= \frac{1}{Z}\sum_{\sigma_1=-1,1}\sum_{\sigma_2=-1,1}\sum_{\sigma_3=-1,1} \\
&\quad \left[\prod_{i=1}^{3} e^{\beta(J+h)\sigma_i} - \prod_{i=1}^{3} e^{-\beta(J-h)\sigma_i}\right] \qquad (34)
\end{aligned}$$

$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$は、互いに独立なので、

$$\begin{aligned}
\langle\sigma_0\rangle &= \frac{1}{Z}\left[\left(\sum_{\sigma=-1,1} e^{\beta(J+h)\sigma}\right)^3 - \left(\sum_{\sigma=-1,1} e^{-\beta(J-h)\sigma}\right)^3\right] \qquad (35)\\
&= \frac{1}{Z}\left[Z_+ - Z_-\right] \qquad (36)
\end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned}
Z_+ &= \left(e^{\beta(J+h)} + e^{-\beta(J+h)}\right)^3 = (2\cosh\beta(J+h))^3 \qquad (37)\\
Z_- &= \left(e^{-\beta(J-h)} + e^{\beta(J-h)}\right)^3 = (2\cosh\beta(J-h))^3 \qquad (38)
\end{aligned}$$

また、Zも同様に

$$Z = Z_+ + Z_- \tag{39}$$

ゆえに、

$$\langle\sigma_0\rangle = \frac{Z_+ - Z_+}{Z_+ + Z_-} \tag{40}$$

(2) 次の公式を使う。

$$-\beta\langle\frac{\partial H}{\partial h}\rangle = \frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial h} \tag{41}$$

証明は各自すること。

Hは、(29) 式で与えられているので、

$$\frac{\partial H}{\partial h} = -(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \tag{42}$$

したがって、

$$\langle\sigma\rangle = \frac{k_{\mathrm{B}}T}{3Z}\frac{\partial Z}{\partial h} \tag{43}$$

$Z = Z_+ + Z_-$だから、(37) 式と (38) 式を使って、

$$\begin{aligned}
\langle\sigma\rangle &= \frac{k_{\mathrm{B}}T}{3(Z_+ + Z_-)}\left(\frac{\partial Z_+}{\partial h} + \frac{\partial Z_-}{\partial h}\right) &(44)\\
&= \frac{k_{\mathrm{B}}T}{3(Z_+ + Z_-)}\left\{\frac{\partial}{\partial h}(2\cosh\beta(J+h))^3 + \frac{\partial}{\partial h}(2\cosh\beta(J-h))^3\right\} &(45)\\
&= \frac{1}{Z_+ + Z_-}\Big\{2\sinh\beta(J+h)(2\cosh\beta(J+h))^2\\
&\quad +2\sinh\beta(J-h)(2\cosh\beta(J-h))^3\Big\} &(46)\\
&= \frac{1}{Z_+ + Z_-}\left\{Z_+\tanh\beta(J+h) + Z_-\tanh\beta(J-h)\right\} &(47)
\end{aligned}$$

(3) 教科書P224 の変形で導ける。

(4) hは、平均場近似の時の、JMに対応する。したがって、T_cで、$h = 0$から、$h \neq 0$になる。

T_cを求めるには、

$$\beta h = \ln\frac{\cosh\beta(h+J)}{\cosh\beta(h-J)} \tag{48}$$

をhについて解かなければならない。T_cの近傍では、hは、十分小さいと考えられるので、右辺を$f(h)$とおき、テーラー展開する。

$$f(h) = f'(0)h + \frac{f'''(0)}{3!}h^3 + \cdots \tag{49}$$

$f'(h)$ と $f'''(h)$ は、$f(h)$ の 1 階微分と 3 階微分を表す。$f(h)$ は、奇関数なので、h の奇数次の項しかない。h^3 の項まで取って、(48) 式に代入すると、

$$\beta h = f'(0)h + \frac{f'''(0)}{3!}h^3 \tag{50}$$

これが、$h=0$ 以外に解があるためには、$f'(0) > \beta$ となればよい。

$$\begin{aligned} f'(h) &= \frac{\partial}{\partial h}\{\ln\cosh\beta(h+J) - \ln\cosh\beta(h-J)\} && (51)\\ &= \beta\tanh\beta(h+J) - \beta\tanh\beta(h-J) && (52)\end{aligned}$$

だから、$f'(0) = 2\beta\tanh\beta J$ となる。したがって、$2\tanh\beta J > 1$ で、$h \neq 0$ となる解があらわれる。つまり、$2\tanh(J/k_{\rm B}T_c) = 1$ から T_c が求まる。

[3. さらに余裕があれば] (2) 式を導け。

[解答] 興味のある人は、私の部屋まで来てください。

[付録] $f'(0) \leq 0$ の時、解は $M=0$ しかなく、$f'(0) > 0$ の時、$M \neq 0$ の解があること。
　(10) 式を通分すると、

$$\begin{aligned} f'(M) &= \frac{\beta zJ}{(e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM})^2}\\ &\quad \times\{(e^{\beta zJM}+e^{-\beta zJM})(e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM})\\ &\quad -(e^{\beta zJM}-e^{-\beta zJM})(e^{\beta zJM}-e^{-\beta zJM})\}-1 && (53)\\ &= \frac{\beta zJ}{(e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM})^2}\\ &\quad \times\{(e^{\beta zJM}+e^{-\beta zJM})^2+(e^{\beta zJM}+e^{-\beta zJM})\\ &\quad -(e^{\beta zJM}-e^{-\beta zJM})^2\}-1 && (54)\\ &= \frac{\beta zJ}{(e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM})^2}\\ &\quad \times\{2+(e^{\beta zJM}+e^{-\beta zJM})+2\}-1 && (55)\\ &= \frac{\beta zJ(4+e^{\beta zJM}+e^{-\beta zJM})}{(e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM})^2}-1 && (56)\\ &= \frac{1}{(e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM})^2}\{\beta zJ(4+e^{\beta zJM}+e^{-\beta zJM})\\ &\quad -(e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM})^2\} && (57)\end{aligned}$$

$g(M) = f'(M)(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2$とすると、

$$
\begin{aligned}
g(M) &= \beta zJ(4 + e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM}) \\
&\quad - (e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2 \qquad (58)
\end{aligned}
$$

$X = e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM}$とすると、

$$
\begin{aligned}
g(M) &= \beta zJ(4 + X) - (1 + X)^2 \qquad (59) \\
&= -X^2 + (\beta zJ - 2)X + 4\beta zJ - 1 \qquad (60)
\end{aligned}
$$

これは、Xについて下に凸の放物線を表す。$M = 0$で、$X = 2$だから、(59)式から、$g(0) = 6\beta zJ - 9$

(1) $g(0) = 6\beta zJ - 9 \le 0 (\beta zJ \le 3/2)$の時

$$
\frac{\partial g}{\partial X} = -2X + (\beta zJ - 2) \qquad (61)
$$

$\beta zJ \le 3/2$だから、$\beta zJ - 2 < 0$となり、$X > 2$で、

$$
\frac{\partial g}{\partial X} < 0 \qquad (62)
$$

$g(0) < 0$だから、$g(M) < 0$となることがわかる。したがって、増減表は

M	0		∞
$g(M)$	$-$	$-$	$-\infty$
$f'(M)$	$-$	$-$	$-\infty$
$f(M)$	0	減少	$-\infty$

つまり、$M > 0$で、$f(M) < 0$となり、$f(M) = 0$となるのは、$M = 0$の1つしかない。

(2) $g(0) = 6\beta zJ - 9 > 0 (\beta zJ > 3/2)$の時
$M \to \infty$で$g(M) \to -\infty$だから、$M > 0$、つまり、$X > 2$で、$g(M) = 0$となる解が1つはある。それを、M_0とすると、増減表は、

M	0		M_0		∞
$g(M)$	$+$	$+$	0	$-$	$-\infty$
$f'(M)$	$+$	$+$	0	$-$	$-\infty$
$f(M)$	0	増加		減少	$-\infty$

つまり、少なくとも$M < M_0$で、$f(M) > 0$なので、$M = 0$以外に$f(M) = 0$を満たすMがある。