2004年度統計力学II 授業ノート 3
相転移のパラドックスの答え

2004.7.5 担当 吉森 明

○ $A(M,T)$ の統計力学的基礎

$$\boxed{\text{平均場近似に出てきた}\,A(M,T)\text{って何?}}$$

今、分配関数

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp[-\beta H(\{\sigma_i\})] \tag{1}$$

を考え、$\sum_{\{\sigma_i\}}$ の数え方の順番を変える。

先に $M = \sum_i \sigma_i/N$ を一定にして $\{\sigma_i\}$ の和を取る。
次に M についての和を取る。

$$Z = \sum_M \sum_{M:\text{一定}} \exp[-\beta H(\{\sigma_i\})] \tag{2}$$

例 $N=2$ の場合: 微視状態全部で $2^N = 4$

$$\begin{array}{ccccccl}
\{\sigma_i\} = & \{ & \sigma_1, & \sigma_2 & \} & M & \\
 & \{ & 1, & 1, & \} & 1 & \\
 & \{ & 1, & -1, & \} & 0 & \rdelim\}{2}{*}[\text{まとめる}] \\
 & \{ & -1, & 1, & \} & 0 & \\
 & \{ & -1, & -1, & \} & -1 &
\end{array} \tag{3}$$

$$Z(M) = \sum_{M:\text{一定}} \exp[-\beta H(\{\sigma_i\})] \tag{4}$$

とすると、$H = -J\sigma_1\sigma_2$ だから、

$$Z(1) = \exp[\beta J] \tag{5}$$
$$Z(0) = 2\exp[-\beta J] \tag{6}$$
$$Z(-1) = \exp[\beta J] \tag{7}$$

となり、

$$Z = Z(1) + Z(0) + Z(-1) \tag{8}$$

一般に

$$\boxed{Z = \sum_M Z(M)} \tag{9}$$

平均場近似の $A(M,T)$ は、

$$\boxed{A(M,T) = -k_{\mathrm{B}}T \ln Z(M)} \tag{10}$$

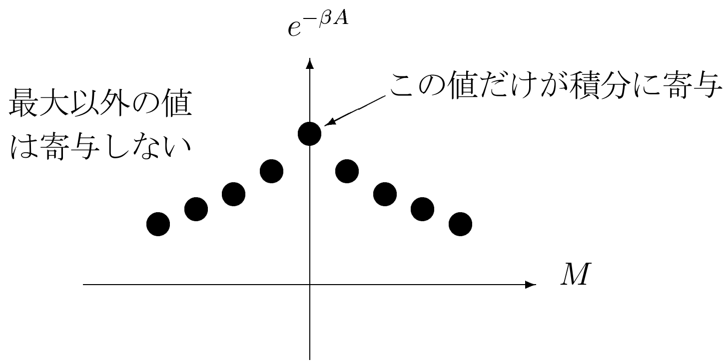
だから、

$$\boxed{Z = \sum_M \exp[-\beta A(M,T)]} \tag{11}$$

○ Mについての和の近似

Aは、普通、格子の数Nに比例: $A \propto N$。例えば、教科書P165(11.8)式を見よ。Nが大きい時、

$$M\text{についての和}\textstyle\sum_M \longleftarrow \boxed{\exp[-\beta A(M,T)]\ \text{の最大の値だけが効く}}$$



また、

$$\exp[-\beta A(M,T)]\ \text{が最大} \longleftrightarrow \boxed{A(M,T)\ \text{が最小}}$$

$N \to \infty$で大きい項と小さい項の差がますます広がる。$A(M,T)$が最小になるMをM_0とすると、$M = M_0$とそれ以外の項との比

$$\frac{\exp[-\beta A(M,T)]}{\exp[-\beta A(M_0,T)]} = \exp[-\beta\{A(M,T) - A(M_0,T)\}] \tag{12}$$

$A(M,T) - A(M_0,T)$は、Nに比例するので、$N\Delta a$とすると、$A(M_0,T)$は最小なので、$\Delta a > 0$

$$= \exp[-\beta N \Delta a] \stackrel{N\to\infty}{\longrightarrow} 0 \tag{13}$$

$T > T_c$で、最小が$M_0$1つしかないとすると、

$$Z = \sum_M \exp[-\beta A(M,T)] \stackrel{N\to\infty}{\longrightarrow} \exp[-\beta A(M_0,T)] \tag{14}$$

同様に、

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_M M \exp[-\beta A(M,T)] \stackrel{N\to\infty}{\longrightarrow} M_0 \tag{15}$$

したがって、

$$\boxed{\langle M \rangle = A(M,T)\ \text{の最小の}\ M}$$

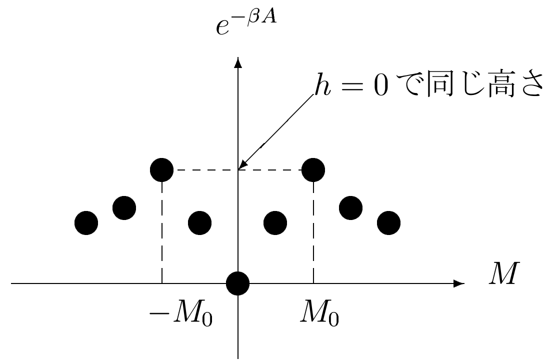
○ $T < T_c$のとき、

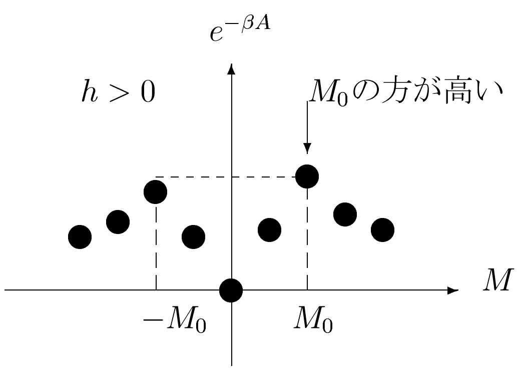
最小値は、$M = \pm M_0$で$\boxed{2\text{つある}}$。

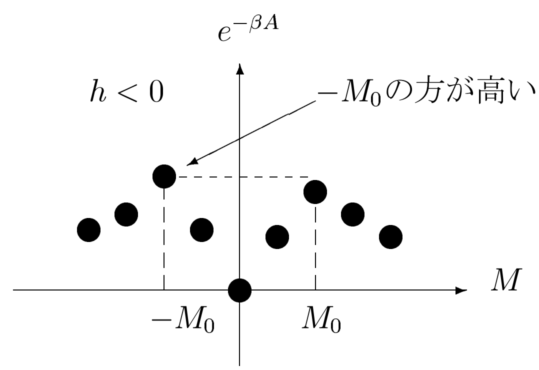
$$Z \stackrel{N\to\infty}{\longrightarrow} \exp[-\beta A(M_0,T)] + \exp[-\beta A(-M_0,T)] \tag{16}$$

$$\langle M\rangle = M_0 - M_0 = 0 \qquad \longleftarrow \text{パラドックス} \tag{17}$$

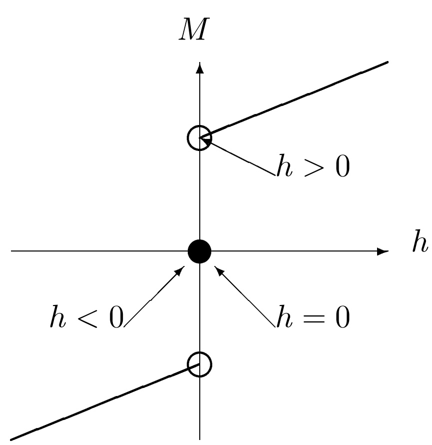
外部磁場hをかけてみる。







つまり、



$$\lim_{h\to+0}\langle M\rangle \neq \lim_{h\to-0}\langle M\rangle \neq \langle M\rangle \qquad : \boxed{\text{不連続}} \tag{18}$$

○パラドックスの答え

全ての温度で$\langle M \rangle = 0$: 正しい
$T < T_c$で不連続がおこり、

$$\boxed{\lim_{h\to\pm 0}\langle M \rangle \neq 0} \tag{19}$$

統計力学では、相転移を不連続と考え、ちょうど$h = 0$では、$M = 0$だが、少しでも$h \neq 0$、$M \neq 0$となる。

宿題(7月12日締め切り)
[1] 教科書P185演習問題[4]のハミルトニアン

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} J\sigma_i\sigma_j \tag{20}$$

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、

$$A(M,T) = -Nk_{\mathrm{B}}T\ln 3 + N\left(\frac{3}{4}k_{\mathrm{B}}T - \frac{zJ}{2}\right)M^2 + \frac{9}{2^6}Nk_{\mathrm{B}}TM^4 \tag{21}$$

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。

[2: 余裕があれば] P184演習問題[3]。

さらに余裕があれば、(21)式を導け。