2006年度統計力学II 宿題12 (7月5日出題、12日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] (1) P185 演習問題 [4]
(2) $f(M) = A_0 + A_2M^2 + A_4M^4$ で、 A_2 が正の場合と負の場合に、$f(M)$ を最小にする M_0 と $f(M_0)$ をすべて求めよ

[訂正](2) で、$A_4 > 0$ です。またやってしまいました。申し分けありません。

[解答] (1) 授業にならって3つの手順で解く。
[手順 1] まず、問題のハミルトニアンで、σ_1 以外のスピンを $\langle\sigma\rangle$ に置きかえる。置き換えたハミルトニアンを H_A とすると、

$$H_A = -zJ\langle\sigma\rangle\sigma_1 + C \tag{1}$$

C は、σ_1 によらない定数を表す。
[手順 2] 次に、この H_A を使って $\langle\sigma_1\rangle$ を計算する。カノニカル分布を使って、

$$\langle\sigma_1\rangle = \frac{\sum_{\sigma_1=-1,0,1}\sigma_1 e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle\sigma_1}}{\sum_{\sigma_1=-1,0,1} e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle\sigma_1}} \tag{2}$$

$$= \frac{e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle} - e^{-\beta zJ\langle\sigma\rangle}}{e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle} + 1 + e^{-\beta zJ\langle\sigma\rangle}} \tag{3}$$

ここで、$\langle\sigma_1\rangle = \langle\sigma\rangle$ とすると、

$$\langle\sigma\rangle = \frac{e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle} - e^{-\beta zJ\langle\sigma\rangle}}{e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle} + 1 + e^{-\beta zJ\langle\sigma\rangle}} \tag{4}$$

この非線型方程式の解が実現する $\langle\sigma\rangle$ となる。
[手順 3](4) 式の解の個数を温度を変えて調べる。

$$f(M) = \frac{e^{\beta zJM} - e^{-\beta zJM}}{e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM}} - M \tag{5}$$

とおくと、$f(M) = 0$ を満たす M が $\langle\sigma\rangle$ になる。

$f'(0) \leq 0$ の時、解は $M = 0$ しかなく、$f'(0) > 0$ の時、$M \neq 0$ の解がある (後で説明)。したがって、

$$f'(M) = \frac{\beta zJe^{\beta zJM} + \beta zJe^{-\beta zJM}}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})} - \frac{(e^{\beta zJM} - e^{-\beta zJM})(\beta zJe^{\beta zJM} - \beta zJe^{-\beta zJM})}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2} - 1 \tag{6}$$

だから、

$$f'(0) = \frac{\beta zJ + \beta zJ}{(1+1+1)} - 1 = \frac{2\beta zJ}{3} - 1 \tag{7}$$

転移温度 T_c は、

$$\frac{2zJ}{3k_{\mathrm{B}}T_c} = 1 \tag{8}$$

なので、

$$T_c = \frac{2zJ}{3k_{\mathrm{B}}} \tag{9}$$

● **$f'(0) \leq 0$ 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。** (6) 式を通分すると、

$$f'(M) = \frac{\beta zJ}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2}\{(e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM})(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM}) - (e^{\beta zJM} - e^{-\beta zJM})(e^{\beta zJM} - e^{-\beta zJM})\} - 1 \tag{10}$$

$$= \frac{\beta zJ}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2} \times \{(e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM})^2 + (e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM}) - (e^{\beta zJM} - e^{-\beta zJM})^2\} - 1 \tag{11}$$

$$= \frac{\beta zJ}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2}\{2 + (e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM}) + 2\} - 1 \tag{12}$$

$$= \frac{\beta zJ(4 + e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM})}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2} - 1 \tag{13}$$

$$= \frac{1}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2}\{\beta zJ(4 + e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM}) - (e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2\} \tag{14}$$

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

$$\begin{aligned} g(M) = &\beta zJ(4+e^{\beta zJM}+e^{-\beta zJM}) \\ &-(e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM})^2 \end{aligned} \tag{15}$$

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

$$g(M) = \beta zJ(4+X)-(1+X)^2 \tag{16}$$

$$= -X^2+(\beta zJ-2)X+4\beta zJ-1 \tag{17}$$

これは、X について上に凸の放物線を表す。$M=0$ で、$X=2$ だから、(16) 式から、$g(0)=6\beta zJ-9$

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

$$\frac{\partial g}{\partial X} = -2X+(\beta zJ-2) \tag{18}$$

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

$$\frac{\partial g}{\partial X} < 0 \tag{19}$$

$g(0)<0$ 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。

(2) $f(M)$ の増減を調べるために、微分をとると

$$f'(M) = 2A_2M + 4A_4M^3 = M(2A_2 + 4A_4M^2) \tag{20}$$

①$A_2 > 0$ の時:
　常に $2A_2 + 4A_4M^2 > 0$ だから

M		0	
$f'(M)$	$-$	0	$+$
$f(M)$	減少	A_0	増加

したがって、$M = 0$ が唯一の極小で、最小。その値は、$f(0) = A_0$ となる。
②$A_2 < 0$ の時:

$$M_0 = \sqrt{\frac{-A_2}{2A_4}} \tag{21}$$

とすると $|M| > M_0$ のとき、$2A_2 + 4A_4M^2 > 0$ となり、$|M| < M_0$ のとき、$2A_2 + 4A_4M^2 < 0$ だから、

M		$-M_0$		0		M_0	
$f'(M)$	$-$	0	$+$	0	$-$	0	$+$
$f(M)$	減少		増加		減少		増加

したがって、$M = 0$ は極小で、最小は $M = \pm M_0$ になる。関数の値は、

M_0 を代入して

$$f(M_0) = A_0 + A_2\left(\frac{-A_2}{2A_4}\right) + A_4\left(\frac{-A_2}{2A_4}\right)^2 \tag{22}$$

$$= A_0 - \frac{A_2^2}{2A_4} + \frac{A_2^2}{4A_4} \tag{23}$$

$$= A_0 - \frac{A_2^2}{4A_4} \tag{24}$$

[問題 2.] 教科書 p185、演習問題 [3]

[解答] (1) H を

$$H = -J\sigma_0(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3) - h(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3) \tag{25}$$

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。

$$\langle\sigma_0\rangle = \frac{1}{Z}\sum_{\sigma_0=-1,1}\sum_{\sigma_1=-1,1}\sum_{\sigma_2=-1,1}\sum_{\sigma_3=-1,1}\sigma_0 e^{-\beta H} \tag{26}$$

ここで

$$Z = \sum_{\sigma_0=-1,1}\sum_{\sigma_1=-1,1}\sum_{\sigma_2=-1,1}\sum_{\sigma_3=-1,1} e^{-\beta H} \tag{27}$$

H を代入して、

$$\langle\sigma_0\rangle = \frac{1}{Z}\sum_{\sigma_0=-1,1}\sum_{\sigma_1=-1,1}\sum_{\sigma_2=-1,1}\sum_{\sigma_3=-1,1}\sigma_0\exp[-\beta\{-J\sigma_0(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3) - h(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3)\}] \tag{28}$$

σ_0 について和を取ると、

$$= \frac{1}{Z}\sum_{\sigma_1=-1,1}\sum_{\sigma_2=-1,1}\sum_{\sigma_3=-1,1}\Big[e^{-\beta\{-J(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3)-h(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3)\}} - e^{-\beta\{J(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3)-h(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3)\}}\Big] \tag{29}$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=-1,1} \sum_{\sigma_2=-1,1} \sum_{\sigma_3=-1,1} \left[\prod_{i=1}^{3} e^{\beta(J+h)\sigma_i} - \prod_{i=1}^{3} e^{-\beta(J-h)\sigma_i} \right] \tag{30}$$

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

$$\langle \sigma_0 \rangle = \frac{1}{Z} \left[\left(\sum_{\sigma=-1,1} e^{\beta(J+h)\sigma} \right)^3 - \left(\sum_{\sigma=-1,1} e^{-\beta(J-h)\sigma} \right)^3 \right] \tag{31}$$

$$= \frac{1}{Z} \left[Z_+ - Z_- \right] \tag{32}$$

ここで、

$$Z_+ = \left(e^{\beta(J+h)} + e^{-\beta(J+h)} \right)^3 = (2\cosh \beta(J+h))^3 \tag{33}$$

$$Z_- = \left(e^{-\beta(J-h)} + e^{\beta(J-h)} \right)^3 = (2\cosh \beta(J-h))^3 \tag{34}$$

また、Z も同様に

$$Z = Z_+ + Z_- \tag{35}$$

ゆえに、

$$\langle \sigma_0 \rangle = \frac{Z_+ - Z_+}{Z_+ + Z_-} \tag{36}$$

(2) 次の公式を使う。

$$-\beta \langle \frac{\partial H}{\partial h} \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial h} \tag{37}$$

証明は各自すること。

H は、(25) 式で与えられているので、

$$\frac{\partial H}{\partial h} = -(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \tag{38}$$

したがって、

$$\langle \sigma \rangle = \frac{k_{\mathrm{B}} T}{3Z} \frac{\partial Z}{\partial h} \tag{39}$$

$Z = Z_+ + Z_-$ だから、(33) 式と (34) 式を使って、

$$\langle\sigma\rangle = \frac{k_\mathrm{B}T}{3(Z_+ + Z_-)}\left(\frac{\partial Z_+}{\partial h} + \frac{\partial Z_-}{\partial h}\right) \tag{40}$$

$$= \frac{k_\mathrm{B}T}{3(Z_+ + Z_-)}\left\{\frac{\partial}{\partial h}(2\cosh\beta(J+h))^3 + \frac{\partial}{\partial h}(2\cosh\beta(J-h))^3\right\} \tag{41}$$

$$= \frac{1}{Z_+ + Z_-}\left\{2\sinh\beta(J+h)(2\cosh\beta(J+h))^2\right.$$
$$\left.+2\sinh\beta(J-h)(2\cosh\beta(J-h))^2\right\} \tag{42}$$

$$= \frac{1}{Z_+ + Z_-}\{Z_+\tanh\beta(J+h) + Z_-\tanh\beta(J-h)\} \tag{43}$$

(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、

$$\beta h = \ln\frac{\cosh\beta(h+J)}{\cosh\beta(h-J)} \tag{44}$$

を h について解かなければならない。今、関数 $f(h)$ を

$$f(h) = \ln\frac{\cosh\beta(h+J)}{\cosh\beta(h-J)} - \beta h \tag{45}$$

とすると、$f(0) = 0$、$f(\infty) = -\infty$ となる。

$f(h)$ の増減を調べるために微分をすると、

$$f'(h) = \frac{\partial}{\partial h}\{\ln\cosh\beta(h+J) - \ln\cosh\beta(h-J)\} - \beta \tag{46}$$

$$= \beta\tanh\beta(h+J) - \beta\tanh\beta(h-J) - \beta \tag{47}$$

$$f''(h) = \beta^2\,\mathrm{sech}^2\,\beta(h+J) - \beta^2\,\mathrm{sech}^2\,\beta(h-J) \tag{48}$$

双曲線関数 $\mathrm{sech}^2\,x$ は、$x > 0$ で減少関数だから、$J > 0$ であれば、$h > 0$ で $\beta^2\,\mathrm{sech}^2\,\beta(h+J) < \beta^2\,\mathrm{sech}^2\,\beta h$ が言えるので、

$$f''(h) < \beta^2\,\mathrm{sech}^2\,\beta h - \beta^2\,\mathrm{sech}^2\,\beta(h-J) < 0 \tag{49}$$

これは、$h > 0$ で $f'(h)$ が単純減少になることを示している。一方、

$$f'(0) = 2\beta \tanh \beta J - \beta \tag{50}$$

$f'(\infty) = -\beta$ だから、$f'(0) > 0$ の時だけ、$h > 0$ で $f'(h) = 0$ の解が 1 つある。$f'(0) < 0$ の時は、$f'(h) < 0$ となり、$f'(h)$ は 0 にならない。

以上のことから、$f'(0) > 0$ の時、$f(h)$ は、$h > 0$ に極値を 1 つだけ持ち、その時の $f(h)$ は、正なので、$f(\infty) < 0$ から、この場合は、$h > 0$ に、$f(h) = 0$ の解を 1 つだけ持つ。$f(h)$ は、奇関数なので、$h < 0$ にもう 1 つ解を持ち、さらに $h = 0$ も解なので、全部で 3 つあることになる。一方、$f'(0) < 0$ の時は、$f(h)$ は単純減少で、$f(0) = 0$ なので、$f(h) = 0$ の解は、$h = 0$ の 1 つしかない。 (50) 式から、$2 \tanh \beta J > 1$ で、$h \neq 0$ となる解があらわれることになる。つまり、$2 \tanh(J/k_{\mathrm{B}} T_c) = 1$ から T_c が求まる。