

2007 年度統計力学 II 宿題 12 (6 月 27 日出題、7 月 4 日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] (1) P.185 演習問題 [4]

(2)  $f(M) = A_0 + A_2 M^2 + A_4 M^4$  で  $A_2 > 0$  と  $A_2 < 0$  の場合に  $f(M)$  を最小とする  $M_0$  と  $f(M_0)$  をすべて求めよ。ただし、 $A_4 > 0$ 。(予習)

[解答](実際の解答にはここまで計算を丁寧に書かなくて良い。)

(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、 $\sigma_1$  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、

$$H_A = -zJ\langle\sigma\rangle\sigma_1 + C \quad (1)$$

$C$  は、 $\sigma_1$  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、

$$\langle \sigma_1 \rangle = \frac{\sum_{\sigma_1=-1,0,1} \sigma_1 e^{\beta z J \langle \sigma \rangle \sigma_1}}{\sum_{\sigma_1=-1,0,1} e^{\beta z J \langle \sigma \rangle \sigma_1}} \quad (2)$$

$$= \frac{e^{\beta z J \langle \sigma \rangle} - e^{-\beta z J \langle \sigma \rangle}}{e^{\beta z J \langle \sigma \rangle} + 1 + e^{-\beta z J \langle \sigma \rangle}} \quad (3)$$

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

$$\langle \sigma \rangle = \frac{e^{\beta z J \langle \sigma \rangle} - e^{-\beta z J \langle \sigma \rangle}}{e^{\beta z J \langle \sigma \rangle} + 1 + e^{-\beta z J \langle \sigma \rangle}} \quad (4)$$

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。

$$f(M) = \frac{e^{\beta z J M} - e^{-\beta z J M}}{e^{\beta z J M} + 1 + e^{-\beta z J M}} - M \quad (5)$$

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、

$$f'(M) = \frac{\beta z J e^{\beta z J M} + \beta z J e^{-\beta z J M}}{(e^{\beta z J M} + 1 + e^{-\beta z J M})} - \frac{(e^{\beta z J M} - e^{-\beta z J M})(\beta z J e^{\beta z J M} - \beta z J e^{-\beta z J M})}{(e^{\beta z J M} + 1 + e^{-\beta z J M})^2} - 1 \quad (6)$$

だから、

$$f'(0) = \frac{\beta z J + \beta z J}{(1 + 1 + 1)} - 1 = \frac{2\beta z J}{3} - 1 \quad (7)$$

転移温度  $T_c$  は、

$$\frac{2zJ}{3k_B T_c} = 1 \quad (8)$$

なので、

$$T_c = \frac{2zJ}{3k_B} \quad (9)$$

$f'(0) \leq 0$  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、

$$f'(M) = \frac{\beta z J}{(e^{\beta z J M} + 1 + e^{-\beta z J M})^2} \{ (e^{\beta z J M} + e^{-\beta z J M})(e^{\beta z J M} + 1 + e^{-\beta z J M}) - (e^{\beta z J M} - e^{-\beta z J M})(e^{\beta z J M} - e^{-\beta z J M}) \} - 1 \quad (10)$$

$$= \frac{\beta z J}{(e^{\beta z J M} + 1 + e^{-\beta z J M})^2} \times \{ (e^{\beta z J M} + e^{-\beta z J M})^2 + (e^{\beta z J M} + e^{-\beta z J M}) - (e^{\beta z J M} - e^{-\beta z J M})^2 \} - 1 \quad (11)$$

$$= \frac{\beta z J}{(e^{\beta z J M} + 1 + e^{-\beta z J M})^2} \{ 2 + (e^{\beta z J M} + e^{-\beta z J M}) + 2 \} - 1 \quad (12)$$

$$= \frac{\beta z J(4 + e^{\beta z J M} + e^{-\beta z J M})}{(e^{\beta z J M} + 1 + e^{-\beta z J M})^2} - 1 \quad (13)$$

$$= \frac{1}{(e^{\beta z J M} + 1 + e^{-\beta z J M})^2} \{ \beta z J(4 + e^{\beta z J M} + e^{-\beta z J M}) - (e^{\beta z J M} + 1 + e^{-\beta z J M})^2 \} \quad (14)$$

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

$$g(M) = \beta z J(4 + e^{\beta z J M} + e^{-\beta z J M}) - (e^{\beta z J M} + 1 + e^{-\beta z J M})^2 \quad (15)$$

$X = e^{\beta z J M} + e^{-\beta z J M}$  とすると、

$$g(M) = \beta z J(4 + X) - (1 + X)^2 \quad (16)$$

$$= -X^2 + (\beta z J - 2)X + 4\beta z J - 1 \quad (17)$$

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、 $g(0) = 6\beta z J - 9$

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

$$\frac{\partial g}{\partial X} = -2X + (\beta z J - 2) \quad (18)$$

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

$$\frac{\partial g}{\partial X} < 0 \quad (19)$$

$g(0) < 0$  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		$\infty$
$g(M)$	-	-	$-\infty$
$f'(M)$	-	-	$-\infty$
$f(M)$	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  $g(0) = 6\beta z J - 9 > 0$  ( $\beta z J > 3/2$ ) の時

$M \rightarrow \infty$  で  $g(M) \rightarrow -\infty$  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		$M_0$		$\infty$
$g(M)$	+	+	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

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

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:

$$M_0 = \sqrt{\frac{-A_2}{2A_4}} \quad (21)$$

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

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

$$= A_0 - \frac{A_2^2}{2A_4} + \frac{A_2^2}{4A_4} \quad (23)$$

$$= A_0 - \frac{A_2^2}{4A_4} \quad (24)$$

[問題 2.]P.185 演習問題 [3]

[解答] (1)  $H$  を

$$H = -J\sigma_0(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) - h(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \quad (25)$$

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。

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

ここで

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

$H$  を代入して、

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

$\sigma_0$  について和を取ると、

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

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

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

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

$$= \frac{1}{Z} [Z_+ - Z_-] \quad (32)$$

ここで、

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

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

また、 $Z$  も同様に

$$Z = Z_+ + Z_- \quad (35)$$

ゆえに、

$$\langle \sigma_0 \rangle = \frac{Z_+ - Z_-}{Z_+ + Z_-} \quad (36)$$

(2) 次の公式を使う。

$$-\beta \left\langle \frac{\partial H}{\partial h} \right\rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial h} \quad (37)$$

証明は各自すること。

$H$  は、(25) 式で与えられているので、

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

したがって、

$$\langle \sigma \rangle = \frac{k_B T}{3Z} \frac{\partial Z}{\partial h} \quad (39)$$

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

$$\langle \sigma \rangle = \frac{k_B T}{3(Z_+ + Z_-)} \left( \frac{\partial Z_+}{\partial h} + \frac{\partial Z_-}{\partial h} \right) \quad (40)$$

$$= \frac{k_B T}{3(Z_+ + Z_-)} \left\{ \frac{\partial}{\partial h} (2 \cosh \beta(J + h))^3 + \frac{\partial}{\partial h} (2 \cosh \beta(J - h))^3 \right\} \quad (41)$$

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

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

(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、

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

を  $h$  について解かなければならない。今、関数  $f(h)$  を

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

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、

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

$$= \beta \tanh \beta(h+J) - \beta \tanh \beta(h-J) - \beta \quad (47)$$

$$f''(h) = \beta^2 \operatorname{sech}^2 \beta(h+J) - \beta^2 \operatorname{sech}^2 \beta(h-J) \quad (48)$$

双曲線関数  $\operatorname{sech}^2 x$  は、 $|x| > |y|$  となる  $x$  と  $y$  に対して、 $\operatorname{sech}^2 x < \operatorname{sech}^2 y$  となる。今、 $h > 0$  ならば、 $|h+J| > |h-J|$  だから、 $\operatorname{sech}^2(h+J) < \operatorname{sech}^2(h-J)$  が言える。したがって、

$$f''(h) = \beta^2 \operatorname{sech}^2 \beta(h+J) - \beta^2 \operatorname{sech}^2 \beta(h-J) < 0 \quad (49)$$

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、

$$f'(0) = 2\beta \tanh \beta J - \beta \quad (50)$$

$f'(\infty) = -\beta$  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、

1.  $f'(0) > 0$  の時:  $f(h)$  は、 $h > 0$  に極値を1つだけ持つ。したがって、 $f(0) = 0$  から  $f(h)$  は増加し、1つしかない極値から減少に転ずる。その後は減少し続けるだけで、 $f(\infty) < 0$  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。
2.  $f'(0) < 0$  の時:  $f(h)$  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、 $2 \tanh(J/k_B T_c) = 1$  から  $T_c$  が求まる。