2008 年度統計力学 II 宿題 12 (7 月 9 日出題、7 月 16 日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] (1)　P.185　演習問題 [4]

(2)　$f(M) = A_0 + A_2M^2 + A_4M^4$ 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、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。

$f'(0) \le 0$ 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、

$$\begin{aligned} f'(M) &= \frac{\beta zJ}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2}\{(e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM})(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM}) \\ &\quad - (e^{\beta zJM} - e^{-\beta zJM})(e^{\beta zJM} - e^{-\beta zJM})\} - 1 && (10) \\ &= \frac{\beta zJ}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2} \\ &\quad \times \{(e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM})^2 + (e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM}) - (e^{\beta zJM} - e^{-\beta zJM})^2\} - 1 && (11) \\ &= \frac{\beta zJ}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2}\{2 + (e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM}) + 2\} - 1 && (12) \\ &= \frac{\beta zJ(4 + e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM})}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2} - 1 && (13) \\ &= \frac{1}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2}\{\beta zJ(4 + e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM}) \\ &\quad - (e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2\} && (14) \end{aligned}$$

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

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

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

$$\begin{aligned} g(M) &= \beta zJ(4 + X) - (1 + X)^2 && (16) \\ &= -X^2 + (\beta zJ - 2)X + 4\beta zJ - 1 && (17) \end{aligned}$$

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.]P.185 演習問題 [3]

[解答] (1) H を

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

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、

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

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

$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ 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、

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

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

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。

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

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、

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

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

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

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

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

$$\left.-2\sinh\beta(J-h)(2\cosh\beta(J-h))^2\right\} \tag{42}$$

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

(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、

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

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

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

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、

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

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、

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、$2\tanh(J/k_{\mathrm{B}}T_c)=1$ から T_c が求まる。