2009 年度統計力学 II 宿題 12 (7 月 15 日出題) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.](1) p185 演習問題 [4]
(2) 教科書 p173(11.28) の形のランダウ自由エネルギーを考えた時、温度 T_c での M のとびを求めなさい。

[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、

$$\begin{aligned}\langle\sigma_1\rangle &= \frac{\sum_{\sigma_1=-1,0,1}\sigma_1 e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle\sigma_1}}{\sum_{\sigma_1=-1,0,1}e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle\sigma_1}} && (2)\\ &= \frac{e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle} - e^{-\beta zJ\langle\sigma\rangle}}{e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle}+1+e^{-\beta zJ\langle\sigma\rangle}} && (3)\end{aligned}$$

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、

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

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

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

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

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

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

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

$\beta zJ \leq 3/2$ 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) (ランダウ) 自由エネルギーは、最小が平衡の値なので、最小を求めるためにまず極値を求める。極値は $A(M,T)$ の 1 階微分が 0 だから、教科書 p173(11.29) 式で

$$\frac{\partial A}{\partial M} = M[a(T-T_0) - bM^2 + cM^4] = 0 \tag{20}$$

したがって、極値は、

$$M = 0 \tag{21}$$

$$a(T-T_0) - bM^2 + cM^4 = 0 \tag{22}$$

のどちらかを満たす。

(22) 式が解を持つかどうか調べるために、$X = M^2$ として、

$$f(X) = a(T-T_0) - bX + cX^2 \tag{23}$$

を考える。$f(X) = 0$ が解を持つのは、判別式 D を計算すれば分かる。

$$D = b^2 - 4ac(T-T_0) \tag{24}$$

$D < 0$、あるいは、

$$T > T_1 \equiv T_0 + \frac{b^2}{4ac} \tag{25}$$

の時、$f(X) = 0$ は解を持たない。したがって、(22) 式も解を持たない。また、$f(X) > 0$ も示せる。

$D > 0$ の時は、$f(X) = 0$ の解は 2 つあって、それぞれ

$$X_1 = \frac{b+\sqrt{D}}{2c} \tag{26}$$

$$X_2 = \frac{b-\sqrt{D}}{2c} \tag{27}$$

とすると、X_2 の符号によって、(22) 式の解の個数が変わる。

1. $X_2 > 0$ **の時:** (22) 式の解は、$\pm\sqrt{X_1}$ と $\pm\sqrt{X_2}$ の 4 つある。$X_2 > 0$ になるためには、$b > \sqrt{D} = \sqrt{b^2 - 4ac(T-T_0)}$ だから、$T > T_0$ の時に相当する。

2. $X_2 < 0$ **の時:** $X = M^2$ なので、X_2 に対応する (22) 式の解は無い。したがって、解は $\pm\sqrt{X_1}$ の 2 つしかない。$X_2 < 0$ となるのは、$T < T_0$ の時。

結局、(11.28) で与えられる $A(M,T)$ のグラフの形は、次の 3 通りが考えられる。

① $T \geq T_1$ の時: $A' \equiv \partial A(M,T)/\partial M$ とすると、増減表は

M	$-\infty$		0		∞
A'	$-\infty$	$-$	0	$+$	∞
$A(M,T)$	∞	減少	極小	増加	∞

つまり、$M = 0$ で、$A(0,T) = A_0(T)$ が最小。

② $T_1 > T \geq T_0$ の時: $A(M,T)$ は偶関数なので、増減表を $M \geq 0$ で書くと、

M	0		$\sqrt{X_2}$		$\sqrt{X_1}$		∞
A'	0	$+$	0	$-$	0	$+$	∞
$A(M,T)$	極小	増加	極大	減少	極小	増加	∞

この場合は極小が $M = 0$ と $M = \sqrt{X_1}$ の 2 つあり、$A(0,T)$ と $A(\sqrt{X_1},T)$ の大小で最小が決まる。 付録で示したように、この大小は $T = T_c$ で入れ替わる。つまり、$A(M,T)$ が最小になる M は、

$$T > T_c \text{の時} \qquad M = 0 \tag{28}$$

$$T < T_c \text{の時} \qquad M = \sqrt{X_1} = \sqrt{\frac{b+\sqrt{D}}{2c}} \tag{29}$$

したがって、$T = T_c$ の M のとび ΔM は、

$$\Delta M = \sqrt{\frac{b+\sqrt{D}}{2c}} = \sqrt{\frac{b+\sqrt{b^2-4ac(T_c-T_0)}}{2c}} \tag{30}$$

③ $T_0 > T$ の時: 増減表は、

M	0		$\sqrt{X_1}$		∞
A'	0	$-$	0	$+$	∞
$A(M,T)$	極大	減少	極小	増加	∞

つまり最小は、$M = \sqrt{X_1}$ となる。

[問題 2.] 教科書演習問題 p185[3]

[解答] 教科書 P223 演習問題解答を参照の事。

[付録] [問題 1.] の T_c の計算

6 ページで説明したように、$T_1 > T \geq T_0$ の時、極小が 2 つあって、その時の $A(M,T)$ の値が等しい温度が T_c になる。それぞれの極小について $A(M,T)$ を計算すると、

$$A(0,T) = A_0(T) \tag{31}$$

$$A(\sqrt{X_1},T) = A_0(T) + \frac{a}{2}(T-T_0)X_1 - \frac{b}{4}X_1^2 + \frac{c}{6}X_1^3 \tag{32}$$

$a(T-T_0) - bX_1 + cX_1^2 = 0$ なので、これの両辺に $X_1/6$ をかけると、

$$\frac{a}{6}(T-T_0)X_1 - \frac{b}{6}X_1^2 + \frac{c}{6}X_1^3 = 0 \tag{33}$$

(33) 式を $cX_1^3/6$ について解いて、(32) 式に代入すると、

$$A(\sqrt{X_1},T) = A_0(T) + \frac{a}{3}(T-T_0)X_1 - \frac{b}{12}X_1^2 \tag{34}$$

$$= A_0(T) + X_1\left\{\frac{a}{3}(T-T_0) - \frac{b}{12}X_1\right\} \tag{35}$$

つまり、$T = T_c$ では、

$$\frac{a}{3}(T_c-T_0) = \frac{b}{12}X_1 \tag{36}$$

(26) 式を代入すると、

$$= \frac{b}{12}\frac{b+\sqrt{D}}{2c} \tag{37}$$

$$\frac{8ac}{b}(T_c - T_0) = b + \sqrt{D} \tag{38}$$

$$\left\{\frac{8ac}{b}(T_c - T_0) - b\right\}^2 = D \tag{39}$$

(24) 式を代入すると、

$$\left\{\frac{8ac}{b}(T_c - T_0) - b\right\}^2 = b^2 - 4ac(T_c - T_0) \tag{40}$$

$$\frac{64a^2c^2}{b^2}(T_c - T_0) - 16ac = -4ac \tag{41}$$

$$\frac{64a^2c^2}{b^2}(T_c - T_0) = 12ac \tag{42}$$

$$T_c = T_0 + \frac{3b^2}{16ac} \tag{43}$$