2010 年度統計力学 II 宿題 13 (7 月 15 日出題、7 月 22 日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.]

① (予習)$f(M) = A_0 + A_2M^2 + A_4M^4 (A_4 > 0)$ で $A_2 > 0$ と $A_2 < 0$ 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。

② $\sigma_i = -1, 0, 1$ の 3 つの状態をとるスピン系で $H = \sum_{(i,j)} J\sigma_i\sigma_j (J > 0)$ の T_c を平均場近似で求めよ。

[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 $f(M)$ の増減を調べるために、微分をとると

$$f'(M) = 2A_2M + 4A_4M^3 = M(2A_2 + 4A_4M^2) \tag{1}$$

(1) $A_2 > 0$ の時:

常に $2A_2 + 4A_4M^2 > 0$ だから

M		0	
$f'(M)$ $f(M)$	$-$ 減少	0 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:

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

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

したがって、$M=0$ は極大で、最小は $M=\pm M_0$ になる。関数の値は、M_0 を代入して

$$f(M_0) = A_0 + A_2\left(\frac{-A_2}{2A_4}\right) + A_4\left(\frac{-A_2}{2A_4}\right)^2 \tag{3}$$

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

$$= A_0 - \frac{A_2^2}{4A_4} \tag{5}$$

② 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、

$$H_A = -zJ\langle\sigma\rangle\sigma_1 + C \tag{6}$$

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、

$$\langle\sigma_1\rangle = \frac{\sum_{\sigma_1=-1,0,1}\sigma_1 e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle\sigma_1}}{\sum_{\sigma_1=-1,0,1}e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle\sigma_1}} \tag{7}$$

$$= \frac{e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle} - e^{-\beta zJ\langle\sigma\rangle}}{e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle} + 1 + e^{-\beta zJ\langle\sigma\rangle}} \tag{8}$$

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

$$\langle\sigma\rangle = \frac{e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle} - e^{-\beta zJ\langle\sigma\rangle}}{e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle} + 1 + e^{-\beta zJ\langle\sigma\rangle}} \tag{9}$$

この非線型方程式の解が実現する $\langle\sigma\rangle$ となる。

[手順 3](9) 式の解の個数を温度を変えて調べる。

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

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、

$$
\begin{aligned}
f'(M) = &\frac{\beta zJe^{\beta zJM} + \beta zJe^{-\beta zJM}}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})} \\
&- \frac{(e^{\beta zJM} - e^{-\beta zJM})(\beta zJe^{\beta zJM} - \beta zJe^{-\beta zJM})}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2} - 1
\end{aligned}
\tag{11}
$$

だから、

$$
f'(0) = \frac{\beta zJ + \beta zJ}{(1+1+1)} - 1 = \frac{2\beta zJ}{3} - 1 \tag{12}
$$

転移温度 T_c は、

$$
\frac{2zJ}{3k_{\mathrm{B}}T_c} = 1 \tag{13}
$$

なので、

$$
T_c = \frac{2zJ}{3k_{\mathrm{B}}} \tag{14}
$$

● **$f'(0) \leq 0$ 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。**

(11) 式を通分すると、

$$f'(M) = \frac{\beta zJ}{(e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM})^2}\{(e^{\beta zJM}+e^{-\beta zJM})(e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM}) - (e^{\beta zJM}-e^{-\beta zJM})(e^{\beta zJM}-e^{-\beta zJM})\} - 1 \tag{15}$$

$$= \frac{\beta zJ}{(e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM})^2} \times \{(e^{\beta zJM}+e^{-\beta zJM})^2 + (e^{\beta zJM}+e^{-\beta zJM}) - (e^{\beta zJM}-e^{-\beta zJM})^2\} - 1 \tag{16}$$

$$= \frac{\beta zJ}{(e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM})^2}\{2+(e^{\beta zJM}+e^{-\beta zJM})+2\} - 1 \tag{17}$$

$$= \frac{\beta zJ(4+e^{\beta zJM}+e^{-\beta zJM})}{(e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM})^2} - 1 \tag{18}$$

$$= \frac{1}{(e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM})^2}\{\beta zJ(4+e^{\beta zJM}+e^{-\beta zJM}) - (e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM})^2\} \tag{19}$$

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

$$g(M) = \beta zJ(4+e^{\beta zJM}+e^{-\beta zJM}) - (e^{\beta zJM}+1+e^{-\beta zJM})^2 \tag{20}$$

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

$$g(M) = \beta zJ(4+X) - (1+X)^2 \tag{21}$$

$$= -X^2 + (\beta zJ - 2)X + 4\beta zJ - 1 \tag{22}$$

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、(21) 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

$$\frac{\partial g}{\partial X} = -2X + (\beta zJ - 2) \tag{23}$$

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

$$\frac{\partial g}{\partial X} < 0 \tag{24}$$

$g(0) < 0$ 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。

[問題 2.] N 個のイジングスピンが環状に並んだ系で H が 1.②と同じとき $\exp[k\sigma_i\sigma_{i+1}] = \cosh k + \sigma_i\sigma_{i+1}\sinh k$ を使って分配関数を求めよ。ただし、$\sigma_i = \pm 1$ とする。[*1]

[*1] この赤字の部分は板書と最終の講義にお配りしたプリントにありませんでした。もし、$\sigma_i = -1, 0, 1$ と勘違いした人がいたら申し訳ありません。

[解答] 温度を T として $k = J/k_{\mathrm{B}}T$ とすると、分配関数 Z は

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm1} \exp[-k \sum_{i}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1}] \tag{25}$$

問題で与えられている関係式から

$$= \sum_{\sigma_1=\pm1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm1} \prod_{i=1}^{N} (\cosh k + \sigma_i \sigma_{i+1} \sinh k) \tag{26}$$

$\prod_{i=1}^{N}(\cosh k + \sigma_i \sigma_{i+1} \sinh k)$ を計算すると、σ_i が 1 つしか含まれない項は、$\sum_{\sigma_i=\pm1}$ で消える。残る項は σ_i が含まれないか 2 乗で含まれる項なので、

$$Z = 2^N [(\cosh k)^N + (\sinh k)^N] \tag{27}$$