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$\sigma_i = -1, 0, 1$ の 3 つの状態をとるスピン系で $H = -\sum_{(i,j)} J\sigma_i\sigma j (J > 0)$ の相転移温度 T_c を平均場近似で求めよ。隣り合う粒子の数を z とする。
②(予習)$f(M) = A_0 + A_2M^2 + A_4M^4$ で $A_2 > 0$ と $A_2 \le 0$ のそれぞれで $f(M)$ を最小にする M とその M の $f(M)$ をすべて求めよ。$A_4 > 0$

[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。

$f'(0)\leq 0$ 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、

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

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、

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

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

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

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

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

[問題 2.] N 個のイジングスピンが環状に並んだ系で**問題 1** の①と同じ H

を考える ($\sigma_i = \pm 1$)

$$\exp(k\sigma_i\sigma_{i+1}) = \cosh k + \sigma_i\sigma_{i+1}\sinh k \tag{25}$$

を使って分配関数を求めよ。ただし、平均場近似を使わずに厳密に求めなさい。[*1]

[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

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm 1}\exp[-k\sum_i^N \sigma_i\sigma_{i+1}] \tag{26}$$

問題で与えられている関係式から

$$= \sum_{\sigma_1=\pm 1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm 1}\prod_{i=1}^N(\cosh k + \sigma_i\sigma_{i+1}\sinh k) \tag{27}$$

$\prod_{i=1}^N(\cosh k + \sigma_i\sigma_{i+1}\sinh k)$ を計算すると、σ_i が 1 つしか含まれない項は、$\sum_{\sigma_i=\pm 1}$ 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、

$$Z = 2^N[(\cosh k)^N + (\sinh k)^N] \tag{28}$$

[*1] 最後の文は黒板には書いていませんでしたが、追加して下さい。