

2014 年度統計力学 II 宿題 13 (7 月 17 日出題、7 月 24 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。となりあう粒子の数を z とする。

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

[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、

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

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、

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

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

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。

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

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		∞
$g(M)$	-	-	$-\infty$
$f'(M)$	-	-	$-\infty$
$f(M)$	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		∞
$g(M)$	+	+	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

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

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

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

[問題 2.] N 個のイジングスピンの環状に並んだ系でハミルトニアンが①と同じとき ($\sigma_i = \pm 1$) $\exp(k\sigma_i\sigma_{i+1}) = \cosh k + \sigma_i\sigma_{i+1} \sinh k$ を使って分配関数を厳密に求めよ。

[解答] 温度を T として $k = J/k_B T$ とすると、分配関数 Z は

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp[-k \sum_i^N \sigma_i \sigma_{i+1}] \quad (25)$$

問題で与えられている関係式から

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

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

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