2015 年度統計力学 II 宿題 14 (7 月 23 日出題) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] (a) $\sigma_i = -1, 0, 1$ 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。

(b) 授業で与えたランダウ自由エネルギーで比熱のとびを求めなさい。

(c) (ランダウ) 自由エネルギーとして、$F(M, T) = A_0(T) + A_2(T)M^2 + bM^4/4$ を考える。$A_2(T) = e^{aT} - c$ の時の相転移が起こる転移温度 T_c を求めなさい。

[解答] (a) 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、

$$\langle\sigma_1\rangle = \frac{\sum_{\sigma_1=-1,0,1} \sigma_1 e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle\sigma_1}}{\sum_{\sigma_1=-1,0,1} e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle\sigma_1}} \tag{2}$$

$$= \frac{e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle} - e^{-\beta zJ\langle\sigma\rangle}}{e^{\beta zJ\langle\sigma\rangle} + 1 + e^{-\beta zJ\langle\sigma\rangle}} \tag{3}$$

[手順 3] $\langle\sigma_1\rangle = \langle\sigma\rangle$ 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。

(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、

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

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、

$$\begin{aligned} f'(M) = & \frac{\beta zJ}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2}\{(e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM})(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM}) \\ & - (e^{\beta zJM} - e^{-\beta zJM})(e^{\beta zJM} - e^{-\beta zJM})\} - 1 \end{aligned} \tag{10}$$

$$\begin{aligned} = & \frac{\beta zJ}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2} \\ & \times \{(e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM})^2 + (e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM}) \\ & - (e^{\beta zJM} - e^{-\beta zJM})^2\} - 1 \end{aligned} \tag{11}$$

$$= \frac{\beta zJ}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2}\{2 + (e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM}) + 2\} - 1 \tag{12}$$

$$= \frac{\beta zJ(4 + e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM})}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2} - 1 \tag{13}$$

$$\begin{aligned} = & \frac{1}{(e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2}\{\beta zJ(4 + e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM}) \\ & - (e^{\beta zJM} + 1 + e^{-\beta zJM})^2\} \end{aligned} \tag{14}$$

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

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

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、$g(0) = 6\beta zJ - 9$

(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。

(b) ランダウ自由エネルギーは次のように与えられるので、

$$F(M,T) = F_0(T) + \frac{a}{2}(T-T_c)M^2 + \frac{b}{4}M^4 \tag{20}$$

宿題 13 から、$T > T_c$ で最小の M は、0、その時の $F(M,T)$ は、$F_0(T)$、$T < T_c$ で最小の M は、

$$M_0 = \sqrt{\frac{a(T_c - T)}{b}} \tag{21}$$

と $-M_0$ で与えられ、その時の $F(M,T)$ は、

$$F(M_0,T) = F_0(T) - \frac{a^2}{4b}(T-T_c)^2 \tag{22}$$

となる。

ランダウ自由エネルギーの仮定から、最小の M での $F(M,T)$ の値は、普通 (熱力学) のヘルムホルツの自由エネルギー $F(T)$ と一致するので、

$$T \geq T_c \qquad F(T) = F_0(T) \tag{23}$$

$$T < T_c \qquad F(T) = F_0(T) - \frac{a^2}{4b}(T-T_c)^2 \tag{24}$$

エントロピー S の公式 (長岡 P79(3.35)、補習 P16(66) 式)

$$S = -\frac{\partial F(T)}{\partial T} \tag{25}$$

から、

$$T \geq T_c \qquad S = -\frac{dF_0(T)}{dT} \tag{26}$$

$$T < T_c \qquad S = -\frac{dF_0(T)}{dT} + \frac{a^2}{2b}(T-T_c) \tag{27}$$

さらに、比熱 C の公式 (長岡 P57(2.86))

$$C = T\frac{\partial S}{\partial T} \tag{28}$$

から

$$T \geq T_c \qquad C = -T\frac{d^2F_0(T)}{dT^2} \tag{29}$$

$$T < T_c \qquad C = -T\frac{d^2F_0(T)}{dT^2} + T\frac{a^2}{2b} \tag{30}$$

つまり、$T = T_c$ で比熱は、

$$T_c \frac{a^2}{2b} \tag{31}$$

だけのとびがある。

(c) 相転移が起こるのは $A_2(T) = 0$ の温度だから、

$$A_2(T_c) = 0 \tag{32}$$

与式を代入すると、

$$e^{aT_c} - c = 0 \tag{33}$$

T_c について解けば、

$$T_c = \frac{1}{a} \ln c \tag{34}$$

[問題 2.] 1 次相転移を表すために、次の様な (ランダウ) 自由エネルギー

$$F(M, T) = A_0(T) + \frac{a}{2}(T - T_0)M^2 - \frac{b}{4}M^4 + \frac{c}{6}M^6 \tag{35}$$

を考える。この $F(M, T)$ のもとでは、実現する M がある温度 T_c で不連続に変化する。つまり、T_c で M がとびを示すが、このとびを求めなさい。ただし、答えに T_c を使って良い。

[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。)

(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 $F(M, T)$ の 1 階微分が 0 だから、(35) 式を M で微分すると、

$$\frac{\partial F}{\partial M} = M[a(T - T_0) - bM^2 + cM^4] = 0 \tag{36}$$

したがって、極値は、

$$M = 0 \tag{37}$$

$$a(T - T_0) - bM^2 + cM^4 = 0 \tag{38}$$

のどちらかを満たす。

(38) 式が解を持つかどうか調べるために、$X = M^2$ として、

$$f(X) = a(T - T_0) - bX + cX^2 \tag{39}$$

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。

$$D = b^2 - 4ac(T - T_0) \tag{40}$$

$D < 0$、あるいは、

$$T > T_1 \equiv T_0 + \frac{b^2}{4ac} \tag{41}$$

の時、$f(X) = 0$ は解を持たない。したがって、(38) 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

$$X_1 = \frac{b + \sqrt{D}}{2c} \tag{42}$$

$$X_2 = \frac{b - \sqrt{D}}{2c} \tag{43}$$

とすると、X_2 の符号によって、(38) 式の解の個数が変わる。

1. $X_2 > 0$ **の時:** (38) 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 (38) 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、(35) 式で与えられる $F(M, T)$ 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: $F' \equiv \partial F(M, T)/\partial M$ とすると、増減表は

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

つまり、$M = 0$ で、$F(0, T) = A_0(T)$ が最小。

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

M	0		$\sqrt{X_2}$		$\sqrt{X_1}$		∞
F'	0	$+$	0	$-$	0	$+$	∞
$F(M, T)$	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、$F(0,T)$ と $F(\sqrt{X_1},T)$ 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、$F(M,T)$ が最小になる M は、

$$T>T_c\text{の時} \qquad M=0 \tag{44}$$

$$T<T_c\text{の時} \qquad M=\sqrt{X_1}=\sqrt{\frac{b+\sqrt{D}}{2c}} \tag{45}$$

したがって、$T=T_c$ の M のとび ΔM は、

$$\Delta M=\sqrt{\frac{b+\sqrt{D}}{2c}}=\sqrt{\frac{b+\sqrt{b^2-4ac(T_c-T_0)}}{2c}} \tag{46}$$

③ $T_0>T$ の時: 増減表は、

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

つまり最小は、$M=\sqrt{X_1}$ となる。

[付録] T_c の計算

7 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 $F(M,T)$ 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 $F(M,T)$ を計算すると、

$$F(0,T)=A_0(T) \tag{47}$$

$$F(\sqrt{X_1},T)=A_0(T)+\frac{a}{2}(T-T_0)X_1-\frac{b}{4}X_1^2+\frac{c}{6}X_1^3 \tag{48}$$

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

$$\frac{a}{6}(T-T_0)X_1-\frac{b}{6}X_1^2+\frac{c}{6}X_1^3=0 \tag{49}$$

(49) 式を $cX_1^3/6$ について解いて、(48) 式に代入すると、

$$F(\sqrt{X_1},T)=A_0(T)+\frac{a}{3}(T-T_0)X_1-\frac{b}{12}X_1^2 \tag{50}$$

$$=A_0(T)+X_1\left\{\frac{a}{3}(T-T_0)-\frac{b}{12}X_1\right\} \tag{51}$$

つまり、$T = T_c$ では、

$$\frac{a}{3}(T_c - T_0) = \frac{b}{12}X_1 \tag{52}$$

(42) 式を代入すると、

$$= \frac{b}{12}\frac{b+\sqrt{D}}{2c} \tag{53}$$

$$\frac{8ac}{b}(T_c - T_0) = b + \sqrt{D} \tag{54}$$

$$\left\{\frac{8ac}{b}(T_c - T_0) - b\right\}^2 = D \tag{55}$$

(40) 式を代入すると、

$$\left\{\frac{8ac}{b}(T_c - T_0) - b\right\}^2 = b^2 - 4ac(T_c - T_0) \tag{56}$$

$$\frac{64a^2c^2}{b^2}(T_c - T_0) - 16ac = -4ac \tag{57}$$

$$\frac{64a^2c^2}{b^2}(T_c - T_0) = 12ac \tag{58}$$

$$T_c = T_0 + \frac{3b^2}{16ac} \tag{59}$$