2023年度 物理工学基礎演習 (統計力学第一)
第6回 解答例

担当; 水田 郁 (mizuta@qi.t.u-tokyo.ac.jp, 工学部9号館325号室)

提出日; 7/10 13:00 (前半クラス), 7/3 13:00 (後半クラス)

I 自由スピン系

N 個の独立なスピンからなる系に、一様磁場を加えた状況を考える。系の Hamiltonian は以下で与えられる。

$$H = g\mu_B \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{H}.$$

ここで、g, μ_B, $\boldsymbol{S}_i$, $\boldsymbol{H}$ はそれぞれ g 因子、Bohr 磁子、($\hbar$ を単位とした) スピン角運動量および外部磁場を指す。以下では、$\boldsymbol{H}$ は z 軸方向に平行であるとする。

(1) スピン角運動量 $\boldsymbol{S}_i$ を大きさ S の古典的ベクトル $\boldsymbol{S}_i = S(\sin\theta_i\cos\phi_i, \sin\theta_i\sin\phi_i, \cos\theta_i)$ とみなし、$H(\{\phi_i,\theta_i\}) = g\mu_B SH\sum_i \cos\theta_i$ と書こう。このとき、系の磁気モーメント $\boldsymbol{\mu} = -g\mu_B\sum_i \boldsymbol{S}_i$ の z 成分期待値を計算せよ。

解答.— 分配関数 $Z(\beta)$ を

$$Z(\beta) = \int \prod_{i=1}^{N} \mathrm{d}\Omega_i e^{-\beta H(\{\phi_i,\theta_i\})}, \quad \int \mathrm{d}\Omega_i = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi_i \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta_i \sin\theta_i$$

で定義する。これを計算すると、

$$\begin{aligned}
Z(\beta) &= \prod_{i=1}^{N} \left(\int \mathrm{d}\Omega_i e^{-\beta g\mu_B SH\cos\theta_i} \right) \\
&= \left(\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \sin\theta e^{-\beta g\mu_B SH\cos\theta} \right)^N \\
&= \left(2\pi \left[(\beta g\mu_B SH)^{-1} e^{-\beta g\mu_B SH\cos\theta} \right]_{\theta=0}^{\theta=\pi} \right)^N \\
&= \left(4\pi(\beta g\mu_B SH)^{-1}\sinh(\beta\mu_B SH) \right)^N
\end{aligned}$$

出る。磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}$ の z 成分 $-g\mu_B S\sum_i \cos\theta_i$ の期待値 $\langle\mu_z\rangle$ は、

$$\begin{aligned}
\langle\mu_z\rangle &= \int \prod_{i=1}^{N} \mathrm{d}\Omega_i \left(-g\mu_B S\sum_i \cos\theta_i \right) \frac{e^{-\beta g\mu_B SH\sum_i\cos\theta_i}}{Z(\beta)} \\
&= \frac{\partial}{\partial(\beta H)} \ln Z(\beta) \\
&= N\frac{\partial}{\partial(\beta H)} \left(-\ln(\beta g\mu_B SH) + \ln\sinh(\beta g\mu_B SH) \right) \\
&= N\left(-\frac{1}{\beta H} + g\mu_B S\coth(\beta g\mu_B SH) \right)
\end{aligned}$$

である。

注釈.— 磁場 $H\to 0$ の極限で singular に見えるが、$\coth x = 1/x + x/3 + \mathcal{O}(x)^3$ より、

$$\langle \mu_z \rangle = \frac{1}{3}N(g\mu_B S)^2 \beta H + \mathcal{O}\big((\beta H)^3\big)$$

であり、$H\to 0$ で $\langle \mu_z \rangle \to 0$ という直感に整合している。

(2) スピン角運動量の量子化軸を $\boldsymbol{H}$ の方向に取ると、系の Hamiltonian は $H(\{S_i^z\}) = g\mu_B H \sum_i S_i^z$ と書ける。ただし、S_i^z の取りうる値は $-S, -S+1, \ldots, S$ である。このとき、系の磁気モーメントの z 成分期待値を計算せよ。

解答.— 分配関数 $Z(\beta)$ は

$$\begin{aligned}
Z(\beta) &= \sum_{S_1=-S}^{S} \cdots \sum_{S_N=-S}^{S} e^{-\beta g\mu_B H \sum_i S_i} \\
&= \left(\sum_{s=-S}^{S} e^{-\beta g\mu_B H s} \right)^N \\
&= \left(e^{\beta g\mu_B S H} \frac{1-e^{-(2S+1)\beta g\mu_B H}}{1-e^{-\beta g\mu_B H}} \right)^N \\
&= \left(\frac{\sinh((2S+1)\beta g\mu_B H/2)}{\sinh(\beta g\mu_B H/2)} \right)^N
\end{aligned}$$

である。よって磁気モーメントの z 成分の期待値は

$$\begin{aligned}
\langle \mu_z \rangle &= \sum_{S_1=-S}^{S} \cdots \sum_{S_N=-S}^{S} \left(-g\mu_B \sum_i S_i \right) \frac{e^{-\beta g\mu_B H \sum_i S_i}}{Z(\beta)} \\
&= \frac{\partial}{\partial(\beta H)} \ln Z(\beta) \\
&= N \frac{\partial}{\partial(\beta H)} \left(\ln\sinh((2S+1)\beta g\mu_B H/2) - \ln\sinh(\beta g\mu_B H/2) \right) \\
&= \frac{1}{2} N g\mu_B \left((2S+1)\coth(2S+1)\beta g\mu_B H/2 - \coth \beta g\mu_B H/2 \right)
\end{aligned}$$

である。

(3) (2) で求めた磁気モーメントの期待値について、$g\mu_B S =$ 一定 としたまま $S\to\infty$ としたときの極限値を求めよ。また、(1) での古典スピンに対する結果とも簡単に比較せよ。

解答.— $g\mu_B S =$ 一定 としたまま $S\to\infty$ とすると、$g\mu_B\to 0$ であり、この時

$$\begin{aligned}
(2S+1)g\mu_B \coth(2S+1)\beta g\mu_B H/2 &\sim 2S g\mu_B \coth \beta g\mu_B S H, \\
\coth \beta g\mu_B H/2 &\sim (\beta g\mu_B H/2)^{-1}
\end{aligned}$$

である。これを代入すると、

$$\begin{aligned}
\langle \mu_z \rangle &\sim \frac{1}{2} N g\mu_B \left(2S \coth \beta g\mu_B S H - \frac{2}{\beta g\mu_B S H} \right) \\
&= N \left(-\frac{1}{\beta H} + g\mu_B S \coth(\beta g\mu_B S H) \right)
\end{aligned}$$

となる。これは、古典の結果と一致する。

II　真性半導体

状態密度 $D(\epsilon)$ が以下で与えられる理想 Fermi 気体を考える。

$$D(\epsilon)=\begin{cases} A(\epsilon-\Delta)^{d/2-1} & (\Delta\leq\epsilon), \\ 0 & (0<\epsilon<\Delta), \\ B(-\epsilon)^{d/2-1} & (\epsilon\leq 0). \end{cases}$$

ここで、A, B は適当な定数であり、d は系の次元を表す。また絶対零度においては、$\epsilon\leq 0$ の状態は全て埋まり $\epsilon\geq\Delta$ の状態は完全に空であるとする。

(1) 系が十分低温であるとき、化学ポテンシャル μ を逆温度 β の関数として求めよ。

解答.— 基底エネルギーを $\epsilon_{\min}$ とする (実際の計算では $\epsilon_{\min}\to-\infty$ とみなして良い)。絶対零度において、$\epsilon<0$ の状態は全て埋まり $\epsilon>0$ の状態は完全に空であるので、粒子数 N は

$$N=\int_{\epsilon_{\min}}^{0}\mathrm{d}\epsilon D(\epsilon)$$

で与えられる ($\epsilon_{\min}<0$ は基底エネルギーの値)。また、絶対零度における化学ポテンシャル μ は $\beta\to\infty$ における Fermi 分布関数 $f_F(\epsilon)=(e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1)^{-1}$ が $\epsilon>\Delta$ で 0, $\epsilon<0$ で 1 を取るステップ関数となることから、$0<\mu(\beta=\infty)<\Delta$ である。故に系が十分低温である時の化学ポテンシャルも、$0<\mu<\Delta$ の範囲にある。

一方で、有限温度 β においても同じように粒子数を考えると

$$N = \int_{\epsilon_{\min}}^{\infty}\mathrm{d}\epsilon D(\epsilon)f_F(\epsilon)$$

であり、粒子数の保存から

$$\begin{aligned}\int_{\epsilon_{\min}}^{0}\mathrm{d}\epsilon D(\epsilon) &= \int_{\epsilon_{\min}}^{\infty}\mathrm{d}\epsilon D(\epsilon)f_F(\epsilon) \\ &= \int_{\epsilon_{\min}}^{0}\mathrm{d}\epsilon D(\epsilon)f_F(\epsilon)+\int_{\Delta}^{\infty}\mathrm{d}\epsilon D(\epsilon)f_F(\epsilon)\end{aligned}$$

が成立する。ただし、$\epsilon\in(0,\Delta)$ で $D(\varepsilon)=0$ であることを用いた。これを少し変形して

$$\int_{\Delta}^{\infty}\mathrm{d}\epsilon D(\epsilon)f_F(\epsilon) = \int_{\epsilon_{\min}}^{0}\mathrm{d}\epsilon D(\epsilon)(1-f_F(\epsilon))$$

が得られる。

まず左辺に関して、

$$\begin{aligned}\int_{\Delta}^{\infty}\mathrm{d}\epsilon D(\epsilon)f_F(\epsilon) &= \int_{\Delta}^{\infty}\mathrm{d}\epsilon A(\epsilon-\Delta)^{d/2-1}\frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1} \\ &\sim A\int_{0}^{\infty}\mathrm{d}\epsilon\, \epsilon^{d/2-1}e^{-\beta(\epsilon+\Delta-\mu)} \\ &= A\Gamma(d/2)\beta^{-d/2}e^{\beta(\mu-\Delta)}\end{aligned}$$

である。ただし、最初の式変形で十分低温で β が大きく $0<\mu<\Delta$ であることより $e^{\beta(\epsilon-\mu)}\gg 1$ $(\epsilon>\Delta)$ を用いた。次に右辺に関しても同様にして、

$$\begin{aligned}\int_{\epsilon_{\min}}^{0}\mathrm{d}\epsilon D(\epsilon)(1-f_F(\epsilon)) &= \int_{\epsilon_{\min}}^{0}\mathrm{d}\epsilon B(-\epsilon)^{d/2-1}\frac{1}{1+e^{-\beta(\epsilon-\mu)}}\\ &\sim B\int_{-\infty}^{0}\mathrm{d}\epsilon(-\epsilon)^{d/2-1}e^{-\beta(\mu-\epsilon)}\\ &= Be^{-\beta\mu}\int_{0}^{\infty}\mathrm{d}\epsilon\,\epsilon^{d/2-1}e^{-\beta\epsilon}\\ &= B\Gamma(d/2)\beta^{-d/2}e^{-\beta\mu}\end{aligned}$$

となる。

以上をまとめると、

$$A\Gamma(d/2)\beta^{-d/2}e^{\beta(\mu-\Delta)}=B\Gamma(d/2)\beta^{-d/2}e^{-\beta\mu}$$

が満たされ、これを化学ポテンシャル μ について解くと、

$$\mu=\frac{1}{2}\Delta+\frac{1}{2}\beta^{-1}\ln\frac{B}{A}$$

が得られる (これは確かに β が十分大きい (低温である) とき、$0<\mu<\Delta$ を満たしている)。

(2) $d=2$ および $d=3$ の場合において、低温で励起される粒子数および比熱を求めよ。

解答.— 励起された粒子数 N_e は、$\epsilon>\Delta$ の状態を占有する粒子数であるので

$$\begin{aligned}N_e &= \int_{\Delta}^{\infty}\mathrm{d}\epsilon D(\epsilon)f_F(\epsilon)\\ &\sim A\Gamma(d/2)\beta^{-d/2}e^{\beta(\mu-\Delta)}\\ &= \sqrt{AB}\,\Gamma(d/2)\beta^{-d/2}e^{-\beta\Delta/2}\\ &= \begin{cases}\sqrt{AB}\beta^{-1}e^{-\beta\Delta/2} & (d=2)\\ \frac{\sqrt{\pi}}{2}\sqrt{AB}\beta^{-3/2}e^{-\beta\Delta/2} & (d=3)\end{cases}\end{aligned}$$

である。

次に比熱 c を考えるために、エネルギー期待値を考えよう。絶対零度で $\epsilon<0$ が詰まっている時のエネルギー E_0 は

$$E_0=\int_{\epsilon_{\min}}^{0}\mathrm{d}\epsilon D(\epsilon)\epsilon \qquad (\text{定数})$$

である。有限温度 β におけるエネルギー期待値 E は

$$
\begin{aligned}
E &= \int_{\epsilon_{\min}}^{\infty} \mathrm{d}\epsilon D(\epsilon) f_F(\epsilon)\epsilon \\
&= \int_{\Delta}^{\infty} \mathrm{d}\epsilon D(\epsilon) f_F(\epsilon)\epsilon + \int_{\epsilon_{\min}}^{0} \mathrm{d}\epsilon D(\epsilon) f_F(\epsilon)\epsilon \\
&= \int_{\Delta}^{\infty} \mathrm{d}\epsilon D(\epsilon) f_F(\epsilon)\epsilon - \int_{\epsilon_{\min}}^{0} \mathrm{d}\epsilon D(\epsilon)(1-f_F(\epsilon))\epsilon + E_0 \\
&\sim A\int_{\Delta}^{\infty} (\epsilon-\Delta)^{d/2-1} e^{-\beta(\epsilon-\mu)}\epsilon \mathrm{d}\epsilon - B\int_{-\infty}^{0} (-\epsilon)^{d/2-1} e^{\beta(\epsilon-\mu)}\epsilon \mathrm{d}\epsilon + E_0 \\
&= Ae^{\beta(\mu-\Delta)}\int_{0}^{\infty} (\epsilon+\Delta)\epsilon^{d/2-1} e^{-\beta\epsilon} \mathrm{d}\epsilon + Be^{-\beta\mu}\int_{0}^{\infty} \epsilon^{d/2} e^{-\beta\epsilon} \mathrm{d}\epsilon + E_0 \\
&= Ae^{\beta(\mu-\Delta)}\beta^{-d/2}\left(\beta^{-1}\Gamma(d/2+1) + \Delta\Gamma(d/2)\right) + Be^{-\beta\mu}\beta^{-d/2-1}\Gamma(d/2) + E_0 \\
&= \sqrt{AB}\beta^{-d/2}e^{-\beta\Delta/2}\left(2\beta^{-1}\Gamma(d/2+1) + \Delta\Gamma(d/2)\right) + E_0 \\
&= \sqrt{AB}\beta^{-d/2}e^{-\beta\Delta/2}\Gamma(d/2)(d\beta^{-1}+\Delta) + E_0
\end{aligned}
$$

である。なお、これに $\beta\Delta \gg 1$ という十分低温であるという近似を入れて (今は常に考えている)、

$$
E \simeq \sqrt{AB}\beta^{-d/2}e^{-\beta\Delta/2}\Gamma(d/2)\Delta + E_0 = N_e\Delta + E_0 \tag{1}
$$

としても良い (N_e は低温で励起される粒子数で、単にその分だけエネルギーが増大していることを意味している)。従って、比熱 c は

$$
\begin{aligned}
c &= \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} \\
&= -\frac{1}{k_BT^2}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\beta} \\
&= -\frac{1}{k_BT^2}\sqrt{AB}\beta^{-d/2}e^{-\beta\Delta/2}\Gamma(d/2)\left\{\left(-\frac{d}{2}\beta^{-1} - \frac{\Delta}{2}\right)(d\beta^{-1}+\Delta) + d\beta^{-2}\right\}
\end{aligned}
$$

である。再び、$\beta^{-1} \ll \Delta$ であることを用いると、

$$
c = \frac{\Delta^2}{2k_BT^2}\sqrt{AB}\beta^{-d/2}e^{-\beta\Delta/2}\Gamma(d/2) = \frac{k_B}{2}(\beta\Delta)^2\sqrt{AB}\beta^{-d/2}e^{-\beta\Delta/2}\Gamma(d/2) \tag{2}
$$

となる。なお、これを励起されている粒子数を使って表現すると、$c = \frac{N_e k_B}{2}\cdot(\beta\Delta)^2$ となる。

注釈.— 途中で導いた関係式

$$
\int_{\Delta}^{\infty} \mathrm{d}\epsilon D(\epsilon) f_F(\epsilon) = \int_{\epsilon_{\min}}^{0} \mathrm{d}\epsilon D(\epsilon)(1-f_F(\epsilon))
$$

の別の見方として、

$$
(\epsilon > \Delta \text{ に励起された粒子の個数}) = (\epsilon < 0 \text{ に生成されたホール (hole) の個数})
$$

として捉えることができる。左辺は文字通りの意味である。右辺に関して、粒子がない状況を “空孔 (ホール, hole)” として定義する。この時、エネルギー ϵ のホールの個数は $n'(\epsilon) = 1 - n(\epsilon)$ となる。ホールに対する分布関数は

$$
f_F'(\epsilon) = \langle n'(\epsilon)\rangle = \langle 1 - n(\epsilon)\rangle = 1 - f_F(\epsilon)
$$

となるので、右辺は $\epsilon < 0$ に生成されたホールの個数をカウントしている。元々 $\epsilon < 0$ にあった粒子が $\epsilon > \Delta$ に励起された時、粒子のあった準位 $\epsilon < 0$ はホールとなる。従って、両者の個数が一致するのは、ただ単に粒子数保存を意味している (ので物理的には上記の計算過程と等価である)。

注釈 2.— 比熱を計算する際、エネルギー E 中で定数部分 E_0 は寄与せず、残りの 2 項

$$A\int_{\Delta}^{\infty}(\epsilon-\Delta)^{d/2}e^{-\beta(\epsilon-\mu)}\mathrm{d}\epsilon+B\int_{-\infty}^{0}(-\epsilon)^{d/2}e^{\beta(\epsilon-\mu)}\mathrm{d}\epsilon$$

が支配的であることがわかる。第 1 項は $\epsilon>\Delta$ に励起された粒子の寄与、第 2 項は $\epsilon<0$ に生成されたホールの寄与ということができる。さらにそれぞれの積分においては、Fermi エネルギー $\epsilon_F=\mu(\beta=\infty)=\Delta/2$ 付近の寄与が dominant であり、そこから ϵ が離れると指数的に小さな影響となる。すなわち、"比熱においては Fermi エネルギー付近を占有する粒子がその性質を決める" と言える。一般に、十分低温にある fermion 系において、Fermi エネルギーから十分離れたエネルギーを占有する粒子は多少系が変化しても変化しない。故に励起によって決まるような物理量 (比熱, 磁化) などは、Fermi エネルギー近傍を占有する粒子によってのみ性質が決まる傾向がある。

III　無限レンジ Ising 模型

(∗ 修正: Hamiltonian の符号)

N 個のスピンからなり、全てのスピン対が距離によらず等しく相互作用を持つような Ising 模型 (無限レンジ Ising 模型) を考える。その Hamiltonian は以下で与えられる。

$$H=-\frac{J}{N}\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j.$$

ここで、$J>0$ は相互作用の大きさ、$i,j\in\{1,2,\ldots,N\}$ はサイトを表し、和 $\sum_{\langle i,j\rangle}$ は全てのスピン対に関して取るものとする。また、スピン σ_i,σ_j は ±1 の値を取る。以下の問いに答えよ。

(1) この系の分配関数が以下のように書かれることを示せ (Hint: Gauss 積分公式を用いよ)。

$$Z=\sqrt{\frac{\beta JN}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}m\ \exp\left(-N\frac{\beta Jm^2}{2}+N\ln(2\cosh(\beta Jm))\right).$$

解答.—

$$H=-\frac{J}{2N}\left(\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\sigma_i\sigma_j-\sum_{i=1}^{N}\sigma_i^2\right)=-\frac{J}{2N}\left(\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\right)^2+\frac{J}{2}$$

より、

$$Z\ =\ \sum_{\sigma_1=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}\exp\left(\frac{\beta J}{2N}\left(\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\right)^2-\frac{\beta J}{2}\right)$$

である。ここで、Gauss 積分の公式

$$\sqrt{\frac{\pi}{a}}=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}me^{-a(m-b)^2},\quad a>0,\quad b\in\mathbb{C}$$

を用いると、

$$e^{ab^2}=\sqrt{\frac{a}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}me^{-am^2+2abm}$$

が導かれる。これに対して、

$$a=\frac{N\beta J}{2},\quad b=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i$$

とおいた上で、分配関数 Z に代入すると、

$$
\begin{aligned}
Z &= \sqrt{\frac{\beta JN}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}m\sum_{\sigma_1=\pm1}\dots\sum_{\sigma_N=\pm1}\exp\left(-N\frac{\beta Jm^2}{2}+\beta J\sum_{i=1}^{N}\sigma_i+\beta J\right)\\
&= \sqrt{\frac{\beta JN}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}m\,\exp\left(-N\frac{\beta Jm^2}{2}+\beta J\right)\left(\sum_{\sigma=\pm1}e^{\beta Jm\sigma}\right)^N\\
&= \sqrt{\frac{\beta JN}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}m\,\exp\left(-N\frac{\beta Jm^2}{2}+N\ln(2\cosh(\beta Jm))+\beta J\right)
\end{aligned}
$$

となる。系サイズ N が大きい時、定数項 βJ の部分は無視できて設問の分配関数の式と一致する。

注釈.— ここで使った、“Gauss 積分を用いて補助場 m を導入し、スピン変数 $\{\sigma_i\}$ についての和を実行することで、分配関数を補助場 m による表式に変換する” 手法を、Hubbard-Stratonovich 変換と呼ぶ。Gauss 積分で $m \simeq b = (1/N)\sum_i \sigma_i$ が主要な寄与を持つことから、補助場 m はおおよそ平均場としての役割を果たす (以降の設問を参照)。Hubbard-Stratonovich 変換は問題の解きやすさを変えるわけではない (=元々分配関数を解析的に計算できなければ、これを施しても計算できるようになるわけではない) が、平均場近似やそれを超える Gauss 近似などを体系的に与えることができ、ここでのスピン系の他に fermion 系における超伝導現象の解析などにも用いられる。

(2) 上の積分値を評価するため、被積分関数の指数部分を与える
(* 修正: $g(m)$ の符号)

$$g(m) = -\frac{\beta Jm^2}{2} + \ln(2\cosh(\beta Jm))$$

を考えよう。$g(m)$ のグラフの概形を描き、$g(m)$ が最大となる点 m^* を決定する方程式を求めよ。また、$m^* \neq 0$ がその解となるような逆温度 β の範囲を求め、平均場近似の結果と比較せよ。

解答.—

$$g'(m) = -\beta Jm + \beta J\tanh(\beta Jm)$$

であるので、$\beta J < 1$ の時 $g(m)$ は極値を 1 つ持つ ($m = 0$)。一方、$\beta J > 1$ の時 $g(m)$ は極値を 3 つ持つ。極値を持つ m は

$$\beta Jm = \beta J\tanh(\beta Jm)$$

で決まり、解の一つ $m = 0$ が極大値を与え、他 2 つの解 $m^* \neq 0$ が最小値を与える。

また、この結果は平均場近似における自己無撞着方程式と完全に一致している。具体的には、各スピン対の相互作用の大きさ $J' = J/N$ に対して配位数 $z = N-1 \sim N$ とした時の自己無撞着方程式

$$m = \tanh(\beta J'zm) \tag{3}$$

と一致している。すなわち、平均場近似は分配関数

$$Z \propto \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}m e^{Ng(m)}$$

において、$g(m)$ が最大となって最も大きな寄与を与える m^* のみを考えるという第ゼロ近似となっている。

(3) $\beta \neq \beta_c$ の場合を考える。関数 $g(m)$ を $m = m^*$ 周りで 2 次まで展開したもので近似するとき、分配関数 Z および 1 スピンあたりの自由エネルギー f を計算せよ。

解答.— $m=m^*$ の周りで、$g(m)$ を微小量 $m-m^*$ の 2 次まで展開すると、$g'(m^*)=0$ より

$$
\begin{aligned}
g(m) &= g(m^*)+g'(m^*)(m-m^*)+\frac{g''(m^*)}{2}(m-m^*)^2+\mathcal{O}\big((m-m^*)^3\big) \\
&= -\frac{\beta J(m^*)^2}{2}+\ln(2\cosh(\beta Jm^*))-\frac{1}{2}\left\{\beta J-\frac{(\beta J)^2}{\cosh^2(\beta Jm^*)}\right\}(m-m^*)^2+\mathcal{O}\big((m-m^*)^3\big)
\end{aligned}
$$

ここで、2 次項の係数は $\beta\neq\beta_c$ では

$$
\frac{g''(m^*)}{2}=-\frac{1}{2}\left\{\beta J-\frac{(\beta J)^2}{\cosh^2(\beta Jm^*)}\right\}<0
$$

である。これは、$m=m^*$ における $g(m)$ の最大性からくる。Gauss 積分の公式が使えて

$$
\begin{aligned}
Z &\sim \sqrt{\frac{\beta JN}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}m\,\exp\left(Ng(m^*)+N\frac{g''(m^*)}{2}(m-m^*)^2\right) \\
&= \sqrt{\frac{\beta JN}{2\pi}}e^{Ng(m^*)}\sqrt{\frac{2\pi}{-Ng''(m^*)}} \\
&= \left(1-\frac{\beta J}{\cosh^2(\beta Jm^*)}\right)^{-1/2}\left(2e^{\beta J(m^*)^2/2}\cosh(\beta Jm^*)\right)^N
\end{aligned}
$$

となる。1 スピン当たりの自由エネルギー f は

$$
\begin{aligned}
f &= \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\left(-\frac{1}{\beta}\ln Z\right) \\
&= -\frac{1}{\beta}\left(\ln 2-\frac{1}{2}\beta J(m^*)^2+\ln(\cosh(\beta Jm^*))\right)
\end{aligned}
$$

である。これは、平均場近似による結果と一致している。

注釈 (熱力学極限での平均場近似への厳密な一致).— 上記の問題では、無限レンジ Ising 模型に対して鞍点近似 ($m=m^*$ まわりで展開して積分を評価する) の下で平均場近似の自由エネルギーに一致することをみた。ここでは、熱力学極限ではこの議論が厳密になる、すなわち無限レンジ模型の厳密解が平均場近似で与えられることを見よう。

ここでは $\beta>\beta_c$ の場合を考えるが、$\beta<\beta_c$ の場合も同様である。この時、$g(m)$ は極値を 3 つ持ち、うち 2 つが $m=\pm m^*$ における極大値である。関数 $g(m)$ に関して $\beta\neq\beta_c$ では $g''(m^*)<0$ (すなわち $m=m^*$ 近傍で 2 次関数であること) と、$|m|\to\infty$ で $g(m)\sim-\beta Jm^2/2+\beta J|m|\in\Theta(m^2)$ であることより、次のようなことが言える:

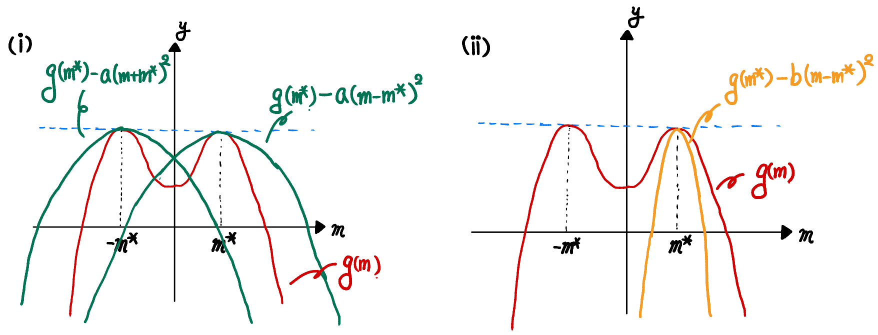
“全ての $m\in\mathbb{R}$ に関して、$g(m)\leq g(m^*)-a(m-m^*)^2$ か $g(m)\leq g(m^*)-a(m+m^*)^2$ の少なくとも一方を満たす” ような βJ のみに依存する定数 $a>0$ が存在する。

これは、図示すると (i) のようになることから分かる ($g(-m^*)=g(m^*)$ を用いた)。同じようにして、次のようなことも言える:

“全ての $m\in\mathbb{R}$ に関して、$g(m)\geq g(m^*)-b(m-m^*)^2$ を満たす” ような βJ のみに依存する定数 $b>0$ が存在する。

これも、図示すると (ii) であることから分かる。これらの関数を用いると

$$e^{Ng(m^*)-Nb(m-m^*)^2} \leq e^{Ng(m)} \leq e^{Ng(m^*)-Na(m-m^*)^2} + e^{Ng(m^*)-Na(m+m^*)^2} \tag{4}$$



このことから、分配関数 Z は次のような不等式で評価される。

$$\sqrt{\frac{\beta JN}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}m\, e^{Ng(m^*)-Nb(m-m^*)^2} \leq Z \leq 2\sqrt{\frac{\beta JN}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}m\, e^{Ng(m^*)-Na(m-m^*)^2} \tag{5}$$

である。左辺・右辺を設問 (3) で行ったように Gauss 積分公式で評価すれば

$$\sqrt{\frac{\beta J}{2b}}e^{Ng(m^*)} \leq Z \leq 2\sqrt{\frac{\beta J}{2a}}e^{Ng(m^*)} \tag{6}$$

となる。故に熱力学極限での自由エネルギー密度 f としては、a, b も含めて系サイズに依存しない係数部分は寄与せず、挟み撃ちの原理から

$$f = \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\left(-\beta^{-1}\ln Z\right) = -\frac{1}{\beta}g(m^*) \tag{7}$$

が言える。すなわち、無限レンジ模型の自由エネルギーは厳密に平均場理論のそれと一致する。

注釈 2(場 m と磁化の関係).— ここで積分変数として現れた m と、平均場近似で導入した m (すなわち、スピンの平均値 $(1/N)\sum_i \sigma_i$) の関係を調べよう。物理量期待値である磁化 $\tilde{m}$ は、磁場 h を印加した下で

$$\tilde{m} = -\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}h} \tag{8}$$

で与えられる (ここでは区別のため $\tilde{m}$ と書く)。磁場 h を印加した Hamiltonian

$$H(h) = -\frac{J}{N}\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j - h\sum_i \sigma_i \tag{9}$$

を考える。同じようにして分配関数を与えると、

$$Z = \sqrt{\frac{\beta JN}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}m\,\exp\left(-N\frac{\beta Jm^2}{2} + N\ln(2\cosh\beta(Jm+h))\right) \tag{10}$$

となり、被積分項の鞍点 m^* は

$$m = \tanh\beta(Jm+h) \tag{11}$$

の方程式の解として与えられる (平均場近似と一致)。また、この解 m^* を用いて

$$g(m^*) = -\frac{\beta J(m^*)^2}{2} + \ln(2\cosh\beta(Jm^*+h)) \tag{12}$$

と表現される。ただし、m^* も h に依存することに注意。$f = -\beta^{-1} g(m^*)$ より、

$$
\begin{aligned}
\tilde{m} &= -\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}h} && (13)\\
&= \frac{1}{\beta}\left(\frac{\partial g(m^*)}{\partial m^*}\frac{\mathrm{d}m^*}{\mathrm{d}h} + \frac{\partial g(m^*)}{\partial h}\right) && (14)\\
&= \frac{1}{\beta}\frac{\partial g(m^*)}{\partial h} && (15)\\
&= \tanh\beta(Jm^* + h) && (16)\\
&= m^* && (17)
\end{aligned}
$$

である。以上より、磁化 $\tilde{m}$ は、補助場 m に対する $g(m)$ の鞍点 m^* と一致する。

IV　自由な 2 量子スピン系

以下の Hamiltonian で記述される量子スピン模型を考える。

$$
H = -J\sum_{i=1}^{N/2} \boldsymbol{S}_{2i-1}\cdot\boldsymbol{S}_{2i}.
$$

すなわち、相互作用し合う $N/2$ 個のスピン対が独立に存在しているような系を考える。ただし、スピン $\boldsymbol{S}_i$ は $S = 1/2$ $(\hbar = 1)$ の量子力学的なスピン演算子であるとする。

(1) 一つのスピン対のみがある系 $(N = 2)$ でのエネルギー固有値と対応するエネルギー固有状態を書き下せ。

解答.— $S = 1/2$ におけるスピン演算子 $\boldsymbol{S}$ は Pauli 演算子

$$
\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}
$$

を用いて、$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{\sigma}/2 = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)/2$ で与えられる。この時、2 体のスピン間相互作用は

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2 &= \frac{1}{4}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma_2}\\
&= \frac{1}{4}(\sigma_x\otimes\sigma_x + \sigma_y\otimes\sigma_y + \sigma_z\otimes\sigma_z)\\
&= \frac{1}{4}\left\{\begin{pmatrix} 0&0&0&1\\ 0&0&1&0\\ 0&1&0&0\\ 1&0&0&0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0&0&0&-1\\ 0&0&1&0\\ 0&1&0&0\\ -1&0&0&0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1&0&0&0\\ 0&-1&0&0\\ 0&0&-1&0\\ 0&0&0&1 \end{pmatrix}\right\}\\
&= \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1&0&0&0\\ 0&-1&2&0\\ 0&2&-1&0\\ 0&0&0&1 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

である。この行列の固有値・固有ベクトルを計算すると、$-J\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2$ の固有値は

$$\text{固有値};\ -J/4,\quad \text{固有ベクトル};\ |\uparrow\uparrow\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix},\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)=\begin{pmatrix}0\\\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}\\0\end{pmatrix},\quad |\downarrow\downarrow\rangle=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix},$$

$$\text{固有値};3J/4,\quad \text{固有ベクトル};\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)=\begin{pmatrix}0\\\frac{1}{\sqrt{2}}\\-\frac{1}{\sqrt{2}}\\0\end{pmatrix}$$

である。

別解.—–

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2 &= \frac{1}{2}\left\{(\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2)^2-\boldsymbol{S}_1^2-\boldsymbol{S}_2^2\right\}\\ &= \frac{1}{2}\left\{(\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2)^2-\frac{3}{2}\right\}\qquad (\leftarrow \boldsymbol{S}_{1,2}^2=1/2(1/2+1))\end{aligned}$$

スピン $S=1/2$ の合成 $\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2$ は $S=1$ のスピン演算子であり、

$$(\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2)^2=S_{\rm tot}(S_{\rm tot}+1),\quad S_{\rm tot}=0,1$$

の固有値を持つ。従って、$-J\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2$ の固有値は $-J/4, 3J/4$ である。対応する固有状態は、$S_{\rm tot}=1$ を持つ $|\uparrow\uparrow\rangle$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$, $|\downarrow\downarrow\rangle$ および $S_{\rm tot}=0$ を持つ $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)$ である。

(2) 全系の分配関数 Z を求めよ。また、低温極限での比熱 C とエントロピー S を $J>0$ と $J<0$ の場合のそれぞれについて求めよ。

解答.—–

$$Z = \left(3e^{\beta J/4}+e^{-3\beta J/4}\right)^{N/2}$$

である。

エネルギー期待値は

$$\begin{aligned}\langle E\rangle &= \frac{N}{2}\left(-\frac{J}{4}\right)\frac{3e^{\beta J/4}}{3e^{\beta J/4}+e^{-3\beta J/4}}+\frac{N}{2}\left(\frac{3J}{4}\right)\frac{e^{-3\beta J/4}}{3e^{\beta J/4}+e^{-3\beta J/4}}\\ &= \left(-\frac{3NJ}{8}\right)\frac{e^{\beta J}-1}{3e^{\beta J}+1}\end{aligned}$$

であるので、比熱 $C(T)$ は

$$
\begin{aligned}
C(T) &= \frac{\mathrm{d}\langle E\rangle}{\mathrm{d}T} \\
&= \frac{1}{k_B T^2}\left(\frac{3NJ}{8}\right)\frac{Je^{\beta J}(3e^{\beta J}+1)-(e^{\beta J}-1)3Je^{\beta J}}{(3e^{\beta J}+1)^2} \\
&= \frac{N}{2}k_B(\beta J)^2\frac{3e^{\beta J}}{(3e^{\beta J}+1)^2}
\end{aligned}
$$

である。低温極限 $\beta\to\infty$ において、$J>0$ ならば $e^{\beta J}\gg 1$, $J<0$ ならば $e^{\beta J}\ll 1$ である。これを利用すると、

$$
C(T)\sim\begin{cases}\frac{1}{6}Nk_B(\beta|J|)^2e^{-\beta|J|} & (J>0)\\ \frac{3}{2}Nk_B(\beta|J|)^2e^{-\beta|J|} & (J<0)\end{cases}
$$

が得られる。従って、J の大きさ $|J|$ に対する依存性は変わらないが、比熱の大きさは変化する。

次にエントロピー S は

$$
\begin{aligned}
S &= -\frac{\partial F}{\partial T} \\
&= \frac{1}{k_B T^2}\frac{\partial}{\partial\beta}\left(-\frac{1}{\beta}\ln Z\right) \\
&= -\frac{N}{2}k_B\beta^2\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\beta^{-1}\ln\left(3e^{\beta J/4}+e^{-3\beta J/4}\right)\right) \\
&= -\frac{N}{2}k_B\beta^2\left(-\beta^{-2}\ln\left(3e^{\beta J/4}+e^{-3\beta J/4}\right)+\frac{3}{4}J\beta^{-1}\frac{e^{\beta J/4}-e^{-3\beta J/4}}{3e^{\beta J/4}+e^{-3\beta J/4}}\right)
\end{aligned}
$$

である。低温極限 $\beta\to\infty$ を考える。$J>0$ では

$$
\begin{aligned}
S &\sim -\frac{N}{2}k_B\beta^{-2}\left(-\beta^{-2}\ln\left(3e^{\beta J/4}\right)+\frac{1}{4}J\beta^{-1}\right) \\
&= \frac{Nk_B\ln 3}{2}
\end{aligned}
$$

となる。一方、$J<0$ では

$$
\begin{aligned}
S &\sim -\frac{N}{2}k_B\beta^{2}\left(-\beta^{-2}\ln\left(e^{-3\beta J/4}\right)-\frac{3}{4}J\beta^{-1}\right) \\
&= 0
\end{aligned}
$$

となる。これは、十分低温では基底状態のみが占有されるが、$J>0$ では 3 重縮退、$J<0$ では縮退なし、であることを反映している。