2023年度 物理工学基礎演習 (統計力学第一) 第5回 問題

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

提出日; 6/26 13:00 (前半クラス), 6/19 13:00 (後半クラス)

I　1次元 Ising 模型の厳密解

L 個のスピンからなる 1 次元 (強磁性) Ising 模型を考える。この系の状態は L 個のスピン変数の配位 $\{\sigma_i\}$ ($\sigma_i = \pm 1$) で指定され、 Hamiltonian は以下で与えられる。

$$H(\{\sigma_i\}) = -\sum_{i=1}^{L} \left(J\sigma_i\sigma_{i+1} + \mu_0 H \frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2} \right).$$

ただし、$J > 0$ とし、周期境界条件 $\sigma_{L+1} = \sigma_1$ を課す。

(1) 添字 $\sigma, \sigma' = \pm 1$ を持つ 2×2 行列 $\hat{T}$ を

$$[\hat{T}]_{\sigma,\sigma'} = \exp\left(\beta J \sigma\sigma' + \beta\mu_0 H \frac{\sigma + \sigma'}{2} \right)$$

で定める (転送行列と呼ばれる)。この時、分配関数 $Z_L(\beta, H)$ が $Z_L(\beta, H) = \mathrm{Tr}\left[\hat{T}^L\right]$ と書けることを示せ。

(2) (1) の結果に従って、分配関数 $Z_L(\beta, H)$ を具体的に求めよ。また、熱力学極限における自由エネルギー密度

$$f(\beta, H) = \lim_{L\to\infty} \frac{1}{L} \left(-\frac{1}{\beta} \ln Z_L(\beta, H) \right)$$

を計算せよ。

(3) 磁化の期待値 $m(\beta, H) = -\frac{\partial f(\beta,H)}{\partial H}$ およびゼロ磁場極限での磁化率 $\chi(\beta) = \left.\frac{\partial m(\beta,H)}{\partial H}\right|_{H=0}$ を計算し、有限温度において $m(\beta, 0) = 0$ であることを示せ。また $T \to 0$ における $\chi(\beta)$ の発散の程度を相互作用がないスピン系と比較せよ。

II　相転移と平均場近似

2 次元以上の Ising 模型を厳密に解くことは一般に困難である ($*$)。以下では平均場近似と呼ばれる手法で d 次元立方格子上の Ising 模型を議論しよう。この系の Hamiltonian は以下で与えられる。

$$H(\{\sigma_i\}) = -J\sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_i\sigma_j - \mu_0 H \sum_{i=1}^{N} \sigma_i.$$

ここで、第 1 項の $\sum_{\langle i,j\rangle}$ は隣接するサイト i, j 間についての和を意味する。また、$J > 0$ および周期境界条件を仮定し、全スピン数 $N = L^d$、あるスピンと隣接するスピン数 (配位数) $z = 2d$ とおく。

II.1

(1) Hamiltonian $H(\{\sigma_i\})$ のもとで実現される熱平衡状態において、スピン変数 σ_i の期待値からのずれ $\delta\sigma_i = \sigma_i - \langle\sigma_i\rangle$ が十分に小さく、$\sum_{\langle i,j\rangle}\delta\sigma_i\delta\sigma_j$ の項が無視できると仮定する。この仮定のもとで Hamiltonian $H(\{\sigma_i\})$ は次で与えられる平均場 (Mean field) Hamiltonian $H_{\mathrm{MF}}(\{\sigma_i\})$ で近似されることを示せ。

$$H_{\mathrm{MF}}(\{\sigma_i\}) = -\sum_{i=1}^{N}(Jz\langle\sigma\rangle + \mu_0 H)\sigma_i + \frac{NJz\langle\sigma\rangle^2}{2}.$$

ただし、系が並進対称で $\langle\sigma_i\rangle$ がサイト i に依存しないため $\langle\sigma\rangle = \langle\sigma_i\rangle$ と書いている。

(2) 平均場 Hamiltonian $H_{\mathrm{MF}}(\{\sigma_i\})$ の下での平衡状態におけるスピン変数の期待値 $\langle\sigma_i\rangle$ を計算し、それが平均場 $\langle\sigma\rangle$ と一致するという要請から、

$$\langle\sigma\rangle = \tanh(\beta Jz\langle\sigma\rangle + \beta\mu_0 H) \tag{1}$$

(自己無撞着方程式) を得よ。また、$H=0$ において自己無撞着方程式の解 $\langle\sigma\rangle$ を調べ、ある温度 T_c を境に定性的に異なる振る舞いを示すことを確認せよ。また、T_c も具体的に求めよ。

II.2

以降の小問では、ゼロ磁場 $H=0$ (あるいはその極限) を考える。

(1) 転移温度付近 $T \simeq T_c$ での振る舞いを調べよう。平均場 Hamiltonian $H_{\mathrm{MF}}(\{\sigma_i\})$ の下での平衡状態における自由エネルギー密度 $f(\beta;m)$ (ただし、磁化を $m = \mu_0\langle\sigma\rangle$ で定義する) を考える。$T \simeq T_c$ では $m \simeq 0$ であることから、m は十分小さいとして 4 次までの級数展開を行うと

$$f(\beta;m) \simeq f_0(\beta) + a(\beta)m^2 + b(\beta)m^4$$

が得られる。この時の係数 $a(\beta), b(\beta)$ を求めよ。また、$T<T_c, T>T_c$ での自由エネルギー密度のグラフの概形から、$T<T_c$ で自発磁化 $m \neq 0$ が現れること (自発的対称性の破れ) を説明せよ。

(2) 低温側から T を T_c に近づけたときの磁化 m 、および高温側から T を T_c に近づけたときの感受率 χ の温度依存性が

$$m \propto (T_c - T)^{\beta} \quad (\beta = 1/2), \quad \chi \propto (T - T_c)^{-\gamma} \quad (\gamma = 1)$$

となることを示せ。また、1 スピンあたりの比熱 c が転移点で発散せずに跳びを持つことを示せ (高温から近づいた時は $c \propto (T-T_c)^{\alpha}$, $\alpha = 0$)。これらの指数 α, β, γ は臨界指数と呼ばれる。

(3) これまでの設問では強磁性的な場合 ($J>0$) を考えてきた。反強磁性的な場合 ($J<0$) も、同じように相転移は起きると言えるだろうか？理由も併せて答えよ。

($*$ 注釈) $H=0$ における 2 次元 Ising 模型の厳密解は Onsager によって得られた (1944 年) のちに様々な方法で解かれている一方で、3 次元以上の Ising 模型、あるいは $H \neq 0$ における 2 次元模型の厳密解は未だに得られていない。

III　Ising 模型に関連した模型

(1) 3 次元立方格子上の各サイトを 2 種類の金属原子 A, B のどちらかが必ず占めているような 2 元合金系を考えよう。隣接する原子間には、その種類に応じて 3 種類の相互作用 J_{AA}, J_{AB}, J_{BB} が働くものとする。この模型が定数項を除いて問題 II の Hamiltonian で記述される Ising 模型と等価であることを示し、J および $\mu_0 H$ を具体的に求めよ (簡単のため、各原子の総数は非保存であるとする)。

(2) 気体分子が 2 次元正方格子上の各サイト上に 1 分子まで吸着できるような状況を考えよう。気体分子の化学ポテンシャルを μ とし、隣り合った格子上の両方に分子が吸着すると $-\phi$ だけエネルギーが下がるとする。この模型が定数項を除いて問題 II の Hamiltonian で記述される Ising 模型と等価であることを示し、J および $\mu_0 H$ を具体的に求めよ。

IV　相転移と熱力学極限

問題 II の Hamiltonian で記述される Ising 模型で磁場 $H = 0$ の場合を考えると、Hamiltonian $H(\{\sigma_i\})$ は全てのスピン変数を反転させる操作 $\sigma_i \to -\sigma_i$ に対して不変である、すなわち $H(\{-\sigma_i\}) = H(\{\sigma_i\})$ であることが分かる (大局的対称性)。一般に、

$$\hat{H}(\{\sigma_i\}, H) = \hat{H}_0(\{\sigma_i\}) - \mu_0 H \sum_{i=1}^{N} \sigma_i, \quad \hat{H}_0(\{-\sigma_i\}) = \hat{H}_0(\{\sigma_i\})$$

で表される、磁場がない時に大局的対称性を満たすハミルトニアン $\hat{H}(\{\sigma_i\}, H)$ において、有限体積・有限温度の場合に自由エネルギーが $F_N(\beta, H) = F_N(\beta, -H)$ であること、および磁化が $M_N(\beta, 0) = 0$ であることを示せ。