熱統計力学 2 レポート No.4

佐々木良輔

問 1

$\log(2\cosh f(x))$ を x で微分すると

$$\frac{d}{dx}\log(2\cosh f(x)) = \frac{df(x)}{dx}\frac{1}{2\cosh f(x)}\frac{d(2\cosh f(x))}{dx} = \frac{df(x)}{dx}\tanh f(x) \tag{1}$$

となるので自由エネルギーの極値条件は

$$\begin{aligned} 0 &= JNd\langle S_z\rangle - Nk_BT \times \frac{\beta g\mu_B}{2}\frac{Jd}{g\mu_B}\tanh\left(\frac{1}{2}\beta g\mu_B\left(H + \frac{Jd}{g\mu_B}\langle S_z\rangle\right)\right) \\ &= \langle S_z\rangle - \frac{1}{2}\tanh\left(\frac{1}{2}\beta g\mu_B\left(H + \frac{Jd}{g\mu_B}\langle S_z\rangle\right)\right) \\ \therefore\ \langle S_z\rangle &= \frac{1}{2}\tanh\left(\frac{1}{2}\beta g\mu_B\left(H + \frac{Jd}{g\mu_B}\langle S_z\rangle\right)\right) \end{aligned} \tag{2}$$

となり自己無撞着方程式が得られた.

問 2

低席比熱は

$$C_V = \frac{\alpha^2}{2b}T \tag{3}$$

であった. ここで

$$\alpha = \frac{JNd}{T_C} \tag{4}$$

$$b = \frac{1}{48}\frac{NJ^4d^4}{k_B^3T^3} \tag{5}$$

なので, 代入すると

$$C_V = 24\frac{Nk_B^3}{J^2d^2}\frac{T^4}{T_C^2} \tag{6}$$

ここで $T \to T_C - 0$ とすると $T_C = Jd/4k_B$ より

$$
\begin{aligned}
C_V &\to 24\frac{Nk_B^3}{J^2d^2}T_c^2 \\
&= 24\frac{Nk_B^3}{J^2d^2}\frac{J^2d^2}{16k_B^2} \\
&= \frac{3}{2}Nk_B
\end{aligned}
\tag{7}
$$

また $T \to T_C + 0$ では $C_V = 0$ なので

$$
\Delta C_V = \frac{3}{2}Nk_B \tag{8}
$$

問 3

Ising 模型での Hamiltonian は

$$
H = -\frac{J}{2}\sum_{(i,j)}\sigma_i\sigma_j - h\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \tag{9}
$$

である．各サイトでの σ を $\sigma_i = \langle\sigma\rangle + \delta\sigma_i$ と表す．このとき相互作用項は

$$
\begin{aligned}
\sum_{(i,j)}\sigma_i\sigma_j &= \sum_{(i,j)}(\langle\sigma_i\rangle + \delta\sigma_i)(\langle\sigma_i\rangle + \delta\sigma_j) \\
&= \sum_{(i,j)}\left(\langle\sigma\rangle^2 + \langle\sigma\rangle(\delta\sigma_i + \delta\sigma_j) + \delta\sigma_i\delta\sigma_j\right) \\
&\simeq \sum_{(i,j)}\left(\langle\sigma\rangle^2 + \langle\sigma\rangle(\sigma_i - \langle\sigma\rangle + \sigma_j - \langle\sigma_j\rangle)\right) \\
&= \sum_{(i,j)}\left(\langle\sigma\rangle(\sigma_i + \sigma_j) - \langle\sigma\rangle^2\right)
\end{aligned}
\tag{10}
$$

ここで $\delta\sigma_i$ の 2 乗項は無視した．また和は近接する対を重複を許して足し合わせているので

$$
\sum_{(i,j)} = Nd, \qquad \sum_{(i,j)} = d\sum_{i=1}^{N} \tag{11}
$$

とできるので

$$
\sum_{(i,j)}\sigma_i\sigma_j = 2d\langle\sigma\rangle\sum_{i=1}^{N}\sigma_i - Nd\langle\sigma\rangle^2 \tag{12}
$$

したがって平均場近似を用いた Hamiltonian は

$$
\begin{aligned}
H_{\text{平}} &= -Jd\langle\sigma\rangle\sum_{i=1}^{N}\sigma_i + \frac{1}{2}JNd\langle\sigma\rangle^2 - h\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \\
&=: -h_{\text{eff}}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i + \frac{1}{2}JdN\langle\sigma\rangle^2
\end{aligned}
\tag{13}
$$

したがって分配関数は

$$
\begin{aligned}
Z_{\text{平}} &= \sum_{\{\sigma_i\}=\pm 1} \mathrm{e}^{-\beta H_{\text{平}}} \\
&= \mathrm{e}^{-\beta J d N \langle\sigma\rangle^2/2} \sum_{\{\sigma_i\}=\pm 1} \mathrm{e}^{\beta h_{\text{eff}}(\sigma_1+\sigma_2+\cdots+\sigma_N)} \\
&= \mathrm{e}^{-\beta J d N \langle\sigma\rangle^2/2} \left(\mathrm{e}^{\beta h_{\text{eff}}} + \mathrm{e}^{-\beta h_{\text{eff}}}\right)^N \\
&= \mathrm{e}^{-\beta J d N \langle\sigma\rangle^2/2} \left(2\cosh(\beta h_{\text{eff}})\right)^N
\end{aligned}
\tag{14}
$$

これを用いて σ_l の期待値を計算する

$$
\begin{aligned}
\langle\sigma_l\rangle &= \frac{1}{Z_{\text{平}}} \sum_{\{\sigma_i\}=\pm 1} \sigma_l \mathrm{e}^{-\beta H_{\text{平}}} \\
&= \frac{\mathrm{e}^{-\beta J d N \langle\sigma\rangle^2/2}}{\mathrm{e}^{-\beta J d N \langle\sigma\rangle^2/2} \left(2\cosh(\beta h_{\text{eff}})\right)^N} \sum_{\{\sigma_i\}=\pm 1} \sigma_l \mathrm{e}^{\beta h_{\text{eff}}(\sigma_1+\sigma_2+\cdots+\sigma_N)} \\
&= \frac{1}{\left(2\cosh(\beta h_{\text{eff}})\right)^N} \left(\mathrm{e}^{\beta h_{\text{eff}}} + \mathrm{e}^{-\beta h_{\text{eff}}}\right)^{N-1} \left(\mathrm{e}^{\beta h_{\text{eff}}} - \mathrm{e}^{-\beta h_{\text{eff}}}\right) \\
&= \frac{\left(2\cosh(\beta h_{\text{eff}})\right)^{N-1} \left(2\sinh(\beta h_{\text{eff}})\right)}{\left(2\cosh(\beta h_{\text{eff}})\right)^N} \\
&= \tanh(\beta h_{\text{eff}}) = \tanh(\beta(h + J d \langle\sigma\rangle))
\end{aligned}
\tag{15}
$$

ここでサイト l における期待値が平均場に等しいとすると

$$
\langle\sigma\rangle = \tanh(\beta(h + J d \langle\sigma\rangle)) \tag{16}
$$

となり, 自己無撞着方程式を得る. ここで $x \ll 1$ で $\tanh x \simeq x$ なので, $h = 0$ かつ $\langle\sigma\rangle \to 0$ で (16) は

$$
\begin{aligned}
\langle\sigma\rangle &= \beta J d \langle\sigma\rangle \\
\therefore\ T &= \frac{Jd}{k_B} := T_C
\end{aligned}
\tag{17}
$$