Statistical Mechanics

Toshiya Tanaka

April 11, 2022

1 磁性体の統計力学

1.1 方針

大まかな流れは，次のようである．

1. 分配関数の計算
2. エネルギー，磁化，磁化率の期待値の計算
3. 温度，磁場に対する振る舞いを考察

この方針は変えず，個々の系に対し様々なテクニックを使う．

1.2 すべての spin が独立にある場合

N 粒子系を考える．粒子 j の spin を $\sigma_j = \pm 1$ で指定し，スピン角運動量の固有値は $\pm\mu_0$ とする．磁場 H 中にある系のエネルギー固有値は

$$E = -\sum_{j=1}^{N} \mu_0 \sigma_j \mathsf{H} \tag{1.1}$$

で，一つの粒子だけに注目したとき

$$E_j = -\mu_0 \sigma_j \mathsf{H} \tag{1.2}$$

である．spin1 つの期待値は期待値の定義から

$$\begin{aligned} \langle \sigma_j \rangle &= \frac{1}{Z_j(\beta)} \left(\mu_0 e^{\beta\mu_0\mathsf{H}} - \mu_0 e^{\beta\mu_0\mathsf{H}} \right) &(1.3)\\ &= \mu_0 \tanh(\beta\mu_0\mathsf{H}) &(1.4) \end{aligned}$$

である．

独立なので，一粒子の情報がわかれば十分で，一粒子の分配関数は

$$\begin{aligned} Z_j(\beta) &= e^{\beta\mu_0\mathsf{H}} + e^{-\beta\mu_0\mathsf{H}} &(1.5)\\ &= 2\cosh(\beta\mu_0\mathsf{H}) &(1.6) \end{aligned}$$

である．よって，N 粒子あったとき，分配関数は

$$Z(\beta) = (2\cosh(\beta\mu_0\mathsf{H})) \tag{1.7}$$

となる．エネルギー期待値は

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= -\frac{\partial}{\partial\beta} \log(2\cosh(\beta\mu_0\mathsf{H})) &(1.8)\\ &= -N\mu_0\mathsf{H}\tanh(\beta\mu_0\mathsf{H}) &(1.9) \end{aligned}$$

である．

Definition 1.1 (磁化)
磁化を

$$m = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \mu_0 \sigma_j \tag{1.10}$$

と定める．スピンの平均値と思ってよい．

Table 1　Eq. (1.19) のスピンを含む箇所の計算結果.

(σ_1,σ_2)	$(1,1)$	$(1,-1)$	$(-1,1)$	$(-1,-1)$
$\sigma_1\sigma_2$	1	-1	-1	1
$\sigma_1+\sigma_2$	2	0	0	-2
$E_{N=2}$	$-J-2\mu_0\mathsf{H}$	J	J	$-J+2\mu_0\mathsf{H}$

磁化の期待値は，Eq. (1.4) と期待値の線形性から

$$\begin{aligned}\langle m\rangle &= \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\mu_0\langle\sigma_j\rangle &(1.11)\\ &=\mu_0\tanh(\beta\mu_0\mathsf{H}) &(1.12)\end{aligned}$$

である．

Definition 1.2 ($\mathsf{H}=0$ での磁化率)
磁化率 χ を

$$\chi=\left.\frac{\partial m}{\partial\mathsf{H}}\right|_{\mathsf{H}=0} \tag{1.13}$$

と定める．磁場 H を揺すったときの磁石になりやすさと解釈できる．

磁化率も計算する．

$$\chi=\frac{\mu_0^2}{k_{\mathrm{B}}T} \tag{1.14}$$

となる．
本筋とは外れるが，エントロピーを計算する．そのためにまず，Helmholtz free energy の計算をする．

$$\begin{aligned}F(\beta,\mathsf{H},N) &= -\frac{1}{\beta}\log Z(\beta) &(1.15)\\ &= -Nk_{\mathrm{B}}T\log\left(2\cosh\left(\frac{\mu_0\mathsf{H}}{k_{\mathrm{B}}T}\right)\right) &(1.16)\end{aligned}$$

ここから，エントロピーが計算できて，

$$\begin{aligned}S(\beta,\mathsf{H},N) &= -\frac{\partial}{\partial T}F(\beta,\mathsf{H},N) &(1.17)\\ &= Nk_{\mathrm{B}}\frac{\mu_0\mathsf{H}}{k_{\mathrm{B}}T}\left(\cosh\left(\frac{\mu_0\mathsf{H}}{k_{\mathrm{B}}T}\right)-\log\left(2\cosh\left(\frac{\mu_0\mathsf{H}}{k_{\mathrm{B}}T}\right)\right)\right) &(1.18)\end{aligned}$$

となり，$\mathsf{H}/k_{\mathrm{B}}$ 単位で現れる．これを用いて，$(T_1,\mathsf{H}_1)\to(T_2,\mathsf{H}_2)$ の断熱準静操作を行うとき，エントロピーが普遍なので，この単位も不変である．磁場 H をゆっくり変えることで温度を変えることが[i.]できる．これを断熱消磁と呼ぶ．

1.3　ペアを形成し，ペア同士は独立な場合

次に，二つの粒子が相互作用しペアを形成していて，ペア同士は相互作用していない状況を考える．粒子数 N はわかりやすく．偶数としておく．
このときのエネルギー固有値は

$$E_\sigma=-J\sum_{j=1}^{N/2}\sigma_{2j-1}\sigma_{2j}-\mu_0\mathsf{H}\sum_{k=1}^{N}\sigma_k \tag{1.19}$$

とする．第一項が相互作用による項で Heisenberg 交換相互作用とよばれる．
J は物質による定数で，J が正の場合ペアのスピンは揃いやすく，負の場合，反対を向きやすい．
以上の設定で考える．
まず，ペアたちは独立なので，(σ_1,σ_2) だけ選んで考える．Eq. (1.19) にでてくる量を計算し，Table. 1.3
これで，分配関数が計算できる．

$$\begin{aligned}Z(\beta) &= e^{-\beta(-J-2\mu_0\mathsf{H})}+2e^{-\beta J}+e^{-\beta(-J+2\mu_0\mathsf{H})} &(1.20)\\ &= 2e^{\beta J}\left(\cosh(2\beta\mu_0\mathsf{H})+e^{-2\beta J}\right). &(1.21)\end{aligned}$$

i. 主に低温を作る．

エネルギー期待値は

$$\langle H\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\log Z(\beta) \tag{1.22}$$

$$= -\frac{N}{2}\frac{J(e^{-2\beta J}-\cosh(2\beta\mu_0\mathsf{H}))-2\mu_0\mathsf{H}\sinh(2\beta\mu_0\mathsf{H})}{\cosh(2\beta\mu_0\mathsf{H})+e^{-2\beta J}} \tag{1.23}$$

となる．ここで，$\mathsf{H}=0$ とすると，

$$\langle H\rangle = -\frac{N}{2}\tanh\beta J \tag{1.24}$$

である．

spin のペアの期待値は

$$\langle\sigma_1+\sigma_2\rangle = \frac{1}{Z(\beta)}\Big(2e^{\beta(J+2\mu_0\mathsf{H})}-e^{-\beta(J-2\mu_0\mathsf{H})}\Big) \tag{1.25}$$

$$= \frac{2\sinh(2\beta\mu_0\mathsf{H})}{\cosh(2\beta\mu_0/mf)+e^{-2\beta J}} \tag{1.26}$$

磁化は

$$\langle m\rangle = \left\langle\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\sigma_j\right\rangle \tag{1.27}$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N/2}\langle\sigma_{2j-1}\sigma_{2j}\rangle \tag{1.28}$$

$$= \frac{\sinh(2\beta\mu_0\mathsf{H})}{\cosh(2\beta\mu_0\mathsf{H})+e^{-2\beta J}} \tag{1.29}$$

$$= \frac{2\beta\mu_0^2\mathsf{H}+\mathcal{O}\big((\beta\mu_0\mathsf{H})^3\big)}{1+\mathcal{O}((\beta\mu_0\mathsf{H})^2)+e^{-2\beta\mu_0\mathsf{H}}} \tag{1.30}$$

となる．最後は磁化率を求めるために H を含む冪で展開した．

磁化率は H で微分して $\mathsf{H}=0$ とするので，二次以上の項は消えて，

$$\chi(\beta) = \left.\frac{\partial\langle m\rangle}{\partial\mathsf{H}}\right|_{\mathsf{H}=0} \tag{1.31}$$

$$= \frac{2\beta\mu_0^2}{1+e^{2\beta J}} \tag{1.32}$$

となる．

1.4 一次元イジングモデル

エネルギー固有値は

$$E_\sigma = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j-\mu_0\mathsf{H}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \tag{1.33}$$

とする．ここで，$\langle i,j\rangle$ は隣り合う i, j に関して和をとることを表し，周期的境界条件 $\sigma_{N+1}=\sigma_1$ を入れると，

$$E_\sigma = -J\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\sigma_{i+1}-\mu_0\mathsf{H}\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\sigma_i+\sigma_{i+1}}{2}\right) \tag{1.34}$$

と書き換えることができる．

分配関数は

$$Z(\beta) = \sum_\sigma e^{E_\sigma} \tag{1.35}$$

$$= \sum_\sigma e^{\sum_{i=1}^{N}(\beta J\sigma_i\sigma_j+\beta\mu_0\mathsf{H}(\sigma_i+\sigma_{i+1})/2)} \tag{1.36}$$

$$= \sum_{\sigma_1=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}\prod_{i=1}^{N}e^{\beta J\sigma_i\sigma_j+\beta\mu_0\mathsf{H}(\sigma_i+\sigma_{i+1})/2} \qquad = \sum_{\sigma_1=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1}\prod_{i=1}^{N}M_{\sigma_i,\sigma_{i+1}} \tag{1.37}$$

となる．行列 M は転送行列とよばれ，

$$M = \begin{pmatrix} e^{\beta J+\beta\mu_0\mathsf{H}} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta_j} & e^{\beta J-\beta\mu_0\mathsf{H}} \end{pmatrix} \tag{1.38}$$

である．さらに分配関数は計算できて，

$$Z(\beta) = \mathrm{Tr}\left(M^N\right) \tag{1.39}$$

$$= \lambda_+^N + \lambda_-^N \tag{1.40}$$

で，$\lambda_\pm$ は転送行列の固有値で

$$\lambda_\pm = e^{\beta J}\cosh\beta\mu_0\mathsf{H} \pm \sqrt{e^{2\beta J}\cosh^2\beta\mu_0\mathsf{H} - 2\sinh\beta J} \tag{1.41}$$

である．

これを用いて，各物理量を求める．自由エネルギー密度は

$$f_N(\beta) = -\frac{1}{\beta N}\log Z(\beta) \tag{1.42}$$

$$= -\frac{1}{\beta}\log\lambda_+ - \frac{1}{\beta N}\log\left(1+\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right) \tag{1.43}$$

なので，$N\to\infty$ で $f(\beta) = -\log\lambda_+/\beta$ となる．

磁化は

$$m(\beta,\mathsf{H}) = \frac{\mu_0\sinh\beta\mu_0\mathsf{H}}{\sqrt{\sinh^2\beta\mu_0\mathsf{H} + e^{-4\beta J}}} \tag{1.44}$$

で，磁化率は

$$\chi(\beta) = \beta\mu_0^2 e^{2\beta J} \tag{1.45}$$

である．

References

[田崎 08] 田崎晴明. 統計力学. 新物理学シリーズ / 山内恭彦監修, No. 37-38. 培風館, 2008.