第 1 問　統計力学: 2 サイト q 状態強磁性 Potts 模型

[1]

$$Z = \sum_{s_1, s_2} e^{J\delta_{s_1,s_2}/k_BT} = \sum_{s_1} \left[e^{J/k_BT} + (q-1) \right] = q\left(e^{J/k_BT} + q - 1 \right) \tag{1.1}$$

[2]

$$F = -k_BT \ln Z = -k_BT \ln \left[q\left(e^{J/k_BT} + q - 1 \right) \right] \tag{2.1}$$

[3]

内部エネルギー U は

$$\begin{aligned} U &= F - T\frac{\partial F}{\partial T} \\ &= -k_BT \ln \left[q\left(e^{J/k_BT} + q - 1 \right) \right] + T\frac{\partial}{\partial T} k_BT \ln \left[q\left(e^{J/k_BT} + q - 1 \right) \right] \\ &= -k_BT \ln \left[q\left(e^{J/k_BT} + q - 1 \right) \right] + k_BT \ln \left[q\left(e^{J/k_BT} + q - 1 \right) \right] - \frac{Je^{J/k_BT}}{e^{J/k_BT} + q - 1} \\ &= -\frac{J}{1 + (q-1)e^{-J/k_BT}} \end{aligned} \tag{3.1}$$

$q = 2$ のときには

$$U = -\frac{J}{1 + e^{-J/k_BT}} \tag{3.2}$$

である。$T \to 0$ のとき $U \to -J$, $T \to \infty$ のとき $U \to -J/2$ となるフェルミ分布のような関数形。

[4]

比熱 C は

$$C = \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}T} = k_B(q-1)\left(\frac{J}{k_BT} \right)^2 \frac{e^{-J/k_BT}}{\left(1 + (q-1)e^{-J/k_BT} \right)^2} \tag{4.1}$$

$q = 2$ のとき、

$$C = k_B\left(\frac{J/k_BT}{2\cosh J/k_BT} \right)^2 = k_B\left(\frac{J}{2k_BT} \right)^2 \left(1 - \tanh^2 \frac{J}{k_BT} \right) \tag{4.2}$$

$T \to 0$ のとき

$$\begin{aligned} C &= k_B\left(\frac{J}{2k_BT} \right)^2 \left\{ 1 - \left(\frac{1 - e^{-2J/k_BT}}{1 + e^{-2J/k_BT}} \right)^2 \right\} \simeq k_B\left(\frac{J}{2k_BT} \right)^2 \left\{ 1 - \left(1 - e^{-2J/k_BT} \right)^4 \right\} \\ &\simeq k_B\left(\frac{J}{2k_BT} \right)^2 \left\{ 1 - \left(1 - 4e^{-2J/k_BT} \right) \right\} = k_B\left(\frac{J}{k_BT} \right)^2 e^{-2J/k_BT} \end{aligned} \tag{4.3}$$

$U \to \infty$ のとき

$$C \simeq k_B\left(\frac{J}{k_BT} \right)^2 \tag{4.4}$$

のように振舞う。

[5]

分配関数は

$$
\begin{aligned}
Z &= \sum_{s_1,s_2} \exp\left[\frac{J\delta_{s_1,s_2} + h(\delta_{s_1,1} + \delta_{s_2,1})}{k_B T}\right] \\
&= \sum_{s_1,s_2\neq 1} \exp\left[\frac{J\delta_{s_1,s_2} + h(\delta_{s_1,1} + \delta_{s_2,1})}{k_B T}\right] + \sum_{s_1\neq 1} \exp\left[\frac{J\delta_{s_1,1} + h(\delta_{s_1,1} + 1)}{k_B T}\right] \\
&\quad + \sum_{s_2\neq 1} \exp\left[\frac{J\delta_{1,s_2} + h(1 + \delta_{s_2,1})}{k_B T}\right] + \exp\left[\frac{J+2h}{k_B T}\right] \\
&= (q-1)\left\{e^{J/k_BT} + (q-2)\right\} + 2e^{h/k_BT} + e^{(J+2h)/k_BT}
\end{aligned} \tag{5.1}
$$

そして秩序変数の期待値は

$$
\begin{aligned}
\langle m \rangle &= \frac{1}{Z}\sum_{s_1,s_2}\left(\delta_{s_1,1} + \delta_{s_2,1} - \frac{2}{q}\right)\exp\left[\frac{J\delta_{s_1,s_2} + h(\delta_{s_1,1} + \delta_{s_2,1})}{k_B T}\right] \\
&= \frac{1}{Z}\sum_{s_1,s_2}\left(k_BT\frac{\partial}{\partial h} - \frac{2}{q}\right)\exp\left[\frac{J\delta_{s_1,s_2} + h(\delta_{s_1,1} + \delta_{s_2,1})}{k_B T}\right] \\
&= \frac{1}{Z}\left(k_BT\frac{\partial}{\partial h} - \frac{2}{q}\right)Z \\
&= k_BT\frac{\partial}{\partial h}\ln Z - \frac{2}{q} \\
&= \frac{2e^{h/k_BT} + 2e^{(J+2h)/k_BT}}{(q-1)\left\{e^{J/k_BT} + (q-2)\right\} + 2e^{h/k_BT} + e^{(J+2h)/k_BT}} - \frac{2}{q}
\end{aligned} \tag{5.2}
$$

これより帯磁率は

$$
\begin{aligned}
\chi &= \frac{1}{k_BT}\left.\frac{2e^{h/k_BT} + 4e^{(J+2h)/k_BT}}{(q-1)\left\{e^{J/k_BT} + (q-2)\right\} + 2e^{h/k_BT} + e^{(J+2h)/k_BT}}\right|_{h=0} \\
&\quad - \frac{1}{k_BT}\left.\left[\frac{2e^{h/k_BT} + 2e^{(J+2h)/k_BT}}{(q-1)\left\{e^{J/k_BT} + (q-2)\right\} + 2e^{h/k_BT} + e^{(J+2h)/k_BT}}\right]^2\right|_{h=0} \\
&= \frac{1}{k_BT}\frac{2+4e^{J/k_BT}}{qe^{J/k_BT} + q(q-1)} - \frac{1}{k_BT}\left[\frac{2+2e^{J/k_BT}}{qe^{J/k_BT} + q(q-1)}\right]^2
\end{aligned} \tag{5.3}
$$

となる。

感想

設問 4 まではそのままやるだけではあるが、設問 5 でやることが多くなって計算ミスが生じやすくなりそう。

q 通りの状態をもつってなんだよと思ったけど、調べてみると軌道内でのスピン配置とかをイメージするとよさそうなのがわかった。結晶場を考えると軌道の準位が分裂しているので磁場をかけたときに特定の軌道になりやすいと考えることができる。軌道とスピンが関わってるので多極子秩序の模型としても使えるらしい。

また、q 種類の元素が関わる合金のモデルとも読める気はする。