

である。

(3) m の満たすべき条件は，最初に設定した平均値がこの平均場エネルギーによって得られる平均値と同じであるとする²⁵。その条件は，

$$m = \langle S_i \rangle_{\text{MFA}} = \frac{\sum_{S_i} S_i e^{-\beta E_{\text{MFA}}}}{\sum_{S_i} e^{-\beta E_{\text{MFA}}}} = \frac{e^{\beta J m z} - e^{-\beta J m z}}{e^{\beta J m z} + e^{-\beta J m z}} = \tanh(\beta J z m) \quad (5.43)$$

である。あるサイトのスピンの期待値はそのサイトから z 個ある周辺のサイトから平均的な磁場 Jm がかかっている問題と同じである。隣のサイトのスピン変数を平均値で置き換えている近似が平均場近似である。一方で，前問で求めた自由エネルギーが極値を持つ条件は，

$$0 = \frac{\partial}{\partial m} F(m) = N J z m - \frac{N}{\beta} J z \beta \tanh(\beta J z m) = N J z (m - \tanh(\beta J z m)) \quad (5.44)$$

となり，式 (5.43) と同じである。

(4) まず，温度によらず $m = 0$ はいつでも解になっていることがわかる。増減表を調べたり，グラフを描けば明かである。

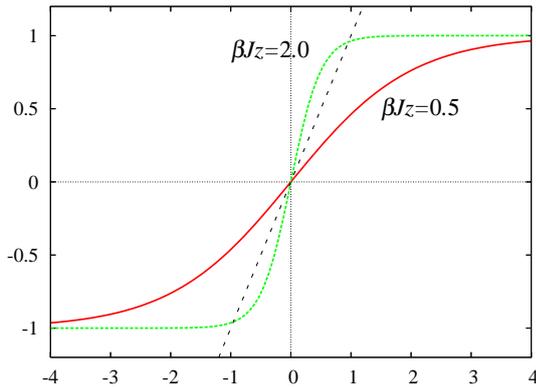


図 9: m の決定方程式の両辺をグラフに描いてみる。点線は左辺 $y = x$ を表し，二本の曲線は右辺 $\tanh \beta J z m$ を表していて，それぞれ $\beta J z = 2.0$ と 0.5 である。 $\beta J z = 1$ を境界に， $m = 0$ の解だけの場合 ($\beta J z > 1$) と $m \neq 0$ の解が現れる場合 ($\beta J z < 1$) に区別できる。

転移温度は， $\tanh(\beta J z m)$ の $m = 0$ での傾きが 1 になるときなので， $\beta J z = 1$ より，

$$k_B T_c = J z \quad (5.45)$$

が求まる。

(5) 低温 ($\beta J \gg 1$) では， $\tanh(\beta J z m) = \frac{1 - \exp(-2\beta J z m)}{1 + \exp(-2\beta J z m)} \simeq 1 - 2 \exp(-2\beta J z m)$ なので，

$$\begin{aligned} m &= \tanh \beta J z m \simeq 1 - 2e^{-2\beta J z m} \simeq 1 - 2 \exp(-2\beta J z (1 - 2e^{-2\beta J z})) \\ &\simeq 1 - 2 \exp(-2\beta J z) \end{aligned} \quad (5.46)$$

²⁵この m の決定方程式は，Self-consistent Equation と呼ばれている。日本語では自己無撞着方程式である。日本語は難しい。

となる .

(6) 一方で , 転移温度近傍では , $m \ll 1$ であり , $\tanh(\beta Jzm) \simeq Jzm - \frac{1}{3}(Jzm)^3$ なので ,

$$\begin{aligned} m &\simeq \beta Jzm - \frac{1}{3}(\beta Jzm)^3 = \frac{T_c}{T}m - \frac{1}{3}\left(\frac{T_c}{T}\right)^3 m^3 \\ m &\simeq \sqrt{3}\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}\left(\frac{T_c}{T} - 1\right)^{1/2} = \sqrt{3}\left(\frac{T}{T_c}\right)\left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)^{1/2} \end{aligned} \quad (5.47)$$

となる .

(7) 帯磁率 (磁化率) を求めるには , 磁場中での計算を行う必要がある . エネルギー関数に磁場のエネルギー $-H \sum_i S_i$ を加えると , 式 (5.40) の第二項 Jmz を $Jmz + H$ に変更すればよいことがわかる . このことから , m の決定方程式 (5.43) は磁場中では ,

$$m = \tanh(\beta(Jzm + H)) \quad (5.48)$$

と変更される . さて , 磁化率 χ は $\chi = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial m}{\partial H}$ で定義される .

$$\begin{aligned} \chi &= \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial m}{\partial H} = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial H} \tanh(\beta(Jzm + H)) \\ &= \lim_{H \rightarrow 0} \left[\beta \left(Jz \frac{\partial m}{\partial H} + 1 \right) \frac{1}{\cosh^2(\beta(Jzm + H))} \right] = \frac{\beta(Jz\chi + 1)}{\cosh^2(\beta(Jzm + H))} \\ &\downarrow \left(\frac{1}{\cosh^2 \beta Jzm} = 1 - \tanh^2 \beta Jzm = 1 - m^2 \right) \\ &= \beta(Jz\chi + 1)(1 - m^2) \end{aligned}$$

これを χ について解いて ,

$$\chi = \frac{\beta(1 - m^2)}{1 - \frac{T_c}{T}(1 - m^2)} \quad (5.49)$$

となり , スピンの平均値 m を用いて表すことができた . m はこれまでに求めてあるので , これらをまとめると以下ようになる .

転移温度より高温: $T \geq T_c$, $m = 0$ であり ,

$$\chi = \frac{1}{k_B T} \frac{1}{1 - \frac{T_c}{T}}$$

となる . これは温度を下げて転移温度に向かって来ると , 発散することを意味している . 二準位系のキュリー-則とは著しく異なるこの振舞いは , キュリー=ワイス則と呼ばれている .

転移温度よりごく低温: $T \sim T_c$ では $m \ll 1$ であり, $m^2 = 3 \left(\frac{T_c}{T}\right)^2 \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right) \simeq 3 \left(\frac{T_c - T}{T_c}\right)$ より,

$$\chi = \frac{\beta(1 - m^2)}{1 - \frac{T_c}{T}(1 - m^2)} \simeq \frac{1}{2k_B(T_c - T)}$$

となる. 上と同様に温度が T_c に近づくにつれやはり発散する. ただし, その係数が 2 倍だけ異なる.

絶対零度近傍: $T \sim 0$ では, $\beta Jz \gg 1$ であり, $m = 1 - 2e^{-2\beta Jz}$ から, $1 - m^2 \simeq 4e^{-2\beta Jz}$ であり,

$$\chi \simeq \frac{4e^{-2\frac{T_c}{T}}}{k_B T}$$

となり, 絶対零度ではゼロになる.

(8) エネルギーは,

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z_{\text{MFA}} = \frac{NJzm^2}{2} - NJzm \tanh \beta Jzm \\ &= NJzm \left(\frac{m}{2} - \tanh \beta Jzm \right) = -\frac{NJz}{2} m^2 \end{aligned} \quad (5.50)$$

であり, m の値を代入すればよい. また, 比熱も,

$$\begin{aligned} C &= \frac{\partial}{\partial T} \langle E \rangle = -NJz \frac{\partial \beta}{\partial T} m \frac{\partial m}{\partial \beta} = NT_c \frac{m}{k_B T^2} \frac{\partial m}{\partial \beta} \\ &\downarrow \text{最後の微分は, } m \text{ の決定方程式を再び使って,} \\ &\downarrow \frac{\partial m}{\partial \beta} = \frac{\partial(\tanh \beta Jzm)}{\partial \beta} = \left(Jzm + \beta z \frac{\partial m}{\partial \beta} \right) \frac{1}{\cosh^2 \beta Jzm} = \left(Jzm + \beta z \frac{\partial m}{\partial \beta} \right) (1 - m^2) \\ &\downarrow \text{これを解いて } \frac{\partial m}{\partial \beta} = \frac{T_c m (1 - m^2)}{1 - \frac{T_c}{T} (1 - m^2)} \\ &= N \frac{m^2 T_c^2}{k_B T^2} \frac{1 - m^2}{1 - \frac{T_c}{T} (1 - m^2)} \end{aligned} \quad (5.51)$$

であり, m を代入すればよい. 転移温度より高温では, エネルギーの期待値も比熱もゼロである. これは, 平均場近似のために隣のスピンを期待値で置き換えてしまっている結果である.

(9) エントロピーは,

$$\begin{aligned} S &= \frac{E - F}{T} = \frac{1}{T} \left[-\frac{NJzm^2}{2} - \left\{ \frac{NJzm^2}{2} - \frac{N}{\beta} \log(2 \cosh \beta Jzm) \right\} \right] \\ &= N \left(-\frac{JZm^2}{T} + \log(2 \cosh \beta Jzm) \right) \end{aligned} \quad (5.52)$$

である. 高温では $m = 0$ なので, $S = Nk_B \log 2$ である.

図 10: 点は m の決定方程式を数値的に解いた結果 . 二本の線はそれぞれ , 低温極限の振舞い (5.46) と転移温度近傍での振舞い (5.47) の式を表している .

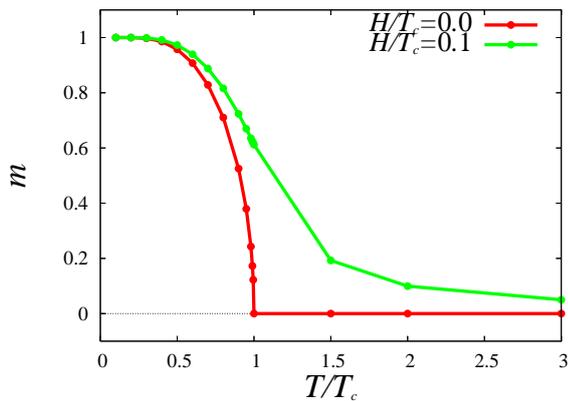
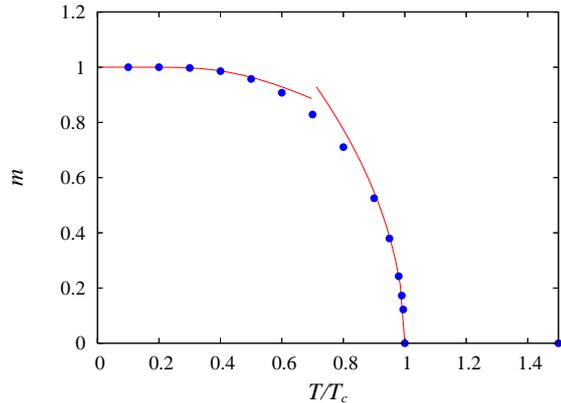


図 11: $H = 0$. と $H = 0.1$ の平均磁化の温度依存性 . 磁場があることで , 相転移が消えていることがわかる .

おまけ 上で求めた平均磁化の温度依存性の結果をグラフに描いてみた .

また , 磁場がある場合の M の決定方程式 (5.48) を反復方程式として解いてみる .

問題 2-8 磁場中イジングモデル :

- (1) これは問題 3-7(7) で示した .
- (2) 磁場があるときの “自由エネルギー” $F(m)$ は ,

$$F(m) = N \frac{Jz m^2}{2} - \frac{N}{\beta} \log (2 \cosh \beta (Jz m + H))$$

である . 一階の微係数は ,

$$\frac{\partial}{\partial m} F(m) = NJz(m - \tanh \beta (Jz m + H))$$

であり , これがゼロになる条件が m の決定方程式になっている . また , 二階の微係数は ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial m^2} F(m) &= NJz \left(1 - \frac{\beta Jz}{\cosh^2 \beta (Jz m + H)} \right) \\ &= NJz \left[(1 - \beta Jz) + \beta Jz \tanh^2 \beta (Jz m + H) \right] \end{aligned} \quad (5.53)$$

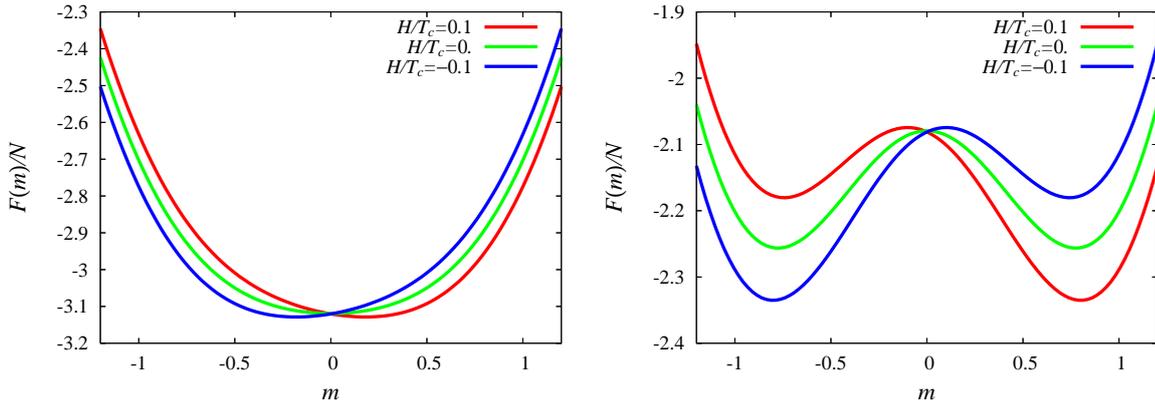


図 12: (左) $T > T_c$ のときの“自由エネルギー”の m 依存性．磁場の値は $H/T_c = 0.1, 0, -0.1$ の 3 つの場合が示されている．自由エネルギーの最小は一つしか無く，最小の m の値は H の減少にともない，正から負に連続的に移動している．(右) $T < T_c$ のときの“自由エネルギー”の極小値は 2 つあり，その m の値は H の減少にともない，正から負に移動しており， $H = 0$ のときに不連続になっている．

となる．この式から， $1 - \beta Jz \geq 0$ のとき，すなわち，ゼロ磁場での転移温度を $T_c = Jz$ とすると， $T \geq T_c$ のときは， $\frac{\partial^2}{\partial m^2} F(m) \geq 0$ であり，ひとつだけ極小値をもつことがわかる．磁場を正から負に変えたときも，唯一の最小値が H とともに変化するだけである．

一方で， $T < T_c$ の場合には，2 つの極小があり， H と同じ方向の m の値が自由エネルギーの最小になる．そこで， H の符号を正から負に変えると，その m の値は $H = 0$ のところで不連続になる．概略図は，図 12 に示した．

(3) M の決定方程式を反復方程式として解いた結果は，問題 3-7 の図 11 に示した．

問題 2-9 一次元格子上的イジングモデル：

ここでは一次元イジングモデルについて，正確に分配関数を計算して，相転移が起こらないことを見تينることにする．

(1) 分配関数を定義に基づいて書き下してみる．

$$\begin{aligned}
 Z(T) &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \exp \left(\beta J \sum_i S_i S_{i+1} + \beta H \sum_i S_i \right) \\
 &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \exp \left(\sum_i \left(\beta J S_i S_{i+1} + \beta \frac{H}{2} (S_i + S_{i+1}) \right) \right) \\
 &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \prod_i \exp \left(\beta J S_i S_{i+1} + \frac{\beta H}{2} (S_i + S_{i+1}) \right) \\
 &= \sum_{s_1=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \prod_i W(S_i, S_{i+1})
 \end{aligned}$$

ただし， $S_{N+1} = S_1$ である．

(2) 行列 \mathbf{W} の要素は，それぞれ $W(S, S')$ と次のような関係がある．

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} W(1, 1) & W(1, -1) \\ W(-1, 1) & W(-1, -1) \end{pmatrix}$$

この行列の積は，

$$\begin{aligned} \mathbf{W}^2 &= \begin{pmatrix} W(1, 1) & W(1, -1) \\ W(-1, 1) & W(-1, -1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} W(1, 1) & W(1, -1) \\ W(-1, 1) & W(-1, -1) \end{pmatrix} \\ &= \sum_{S=\pm 1} \begin{pmatrix} W(1, S)W(S, 1) & W(1, S)W(S, -1) \\ W(-1, S)W(S, 1) & W(-1, S)W(S, -1) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となり，これを繰り返すことで分配関数になることが示せる．

$$Z(T) = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \cdots \sum_{S_N} W(S_1, S_2)W(S_2, S_3) \cdots W(S_N, S_1) = \text{Tr} \mathbf{W}^N$$

(3) 行列 \mathbf{W} を対角化する行列 \mathbf{U} とする． \mathbf{W} の固有値を λ_{\pm} ， 2×2 の単位行列を \mathbf{I} として，

$$\mathbf{W}\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} \mathbf{U}, \quad \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{I}$$

と表せることに注意すると，

$$Z(T) = \text{Tr} (\mathbf{W}^N \mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger) = \text{Tr} (\mathbf{U}^\dagger \mathbf{W}^N \mathbf{U}) = \text{Tr} \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (5.54)$$

であることが分かる．また，固有値方程式は，

$$(\lambda - e^{\beta(J+H)})(\lambda - e^{\beta(J-H)}) - e^{-2\beta J} = 0$$

$$\lambda^2 - 2e^{\beta J} \cosh(\beta H) \lambda + 2 \sinh \beta J = 0$$

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \cosh(\beta H) \pm \sqrt{e^{2\beta J} \cosh^2(\beta H) - 2 \sinh \beta J}$$

$$= e^{\beta J} \cosh(\beta H) \pm \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta H) + e^{-2\beta J}}$$

(4) N が十分大きいときには，自由エネルギーは，

$$-\beta F(T) = \log Z(T) \simeq N \log \lambda_+ = N \log \left(e^{\beta J} \cosh(\beta H) + \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2(\beta H) + e^{-2\beta J}} \right)$$

であり，エネルギーは，

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z = -N \frac{\partial}{\partial \beta} \log \lambda_+ = -N \frac{\frac{\partial \lambda_+}{\partial \beta}}{\lambda_+} \quad (5.55)$$

を計算すればよい．ここでは簡単のため，磁場ゼロの条件で考えることにする．

$$\frac{\partial \lambda_+}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} (e^{\beta J} + e^{-\beta J}) = 2J \sinh \beta J$$

結局，

$$E(T) = -NJ \tanh \beta J$$

となる．磁化については，その後で磁化率を計算するために磁場がある条件で計算しなければいけない．磁化は，

$$M = \left\langle \sum_i S_i \right\rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial H} \log Z = \frac{N}{\beta} \frac{\partial}{\partial H} \log \lambda_+ = \frac{N}{\beta \lambda_+} \frac{\partial \lambda_+}{\partial H}$$

で計算される．続きを計算すると，

$$\begin{aligned} M &= \dots \\ &= \frac{\sin \beta H}{\sqrt{\sin^2 \beta H + e^{-4\beta J}}} \end{aligned} \quad (5.56)$$

(5) 帯磁率も定義どおり計算すると，

$$\chi \equiv \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial M}{\partial H} = \beta N e^{2\beta J} = N \frac{e^{\frac{2J}{k_B T}}}{k_B T} \quad (5.57)$$

低温極限では，キュリー則よりも強い指数関数的な発散になっている．ここに相互作用の効果が表れている．しかしながら，有限温度で帯磁率が発散することはない．これは絶対零度でのみ秩序化が起きていることを意味している．

問題 2-10 全連結型イジングモデル：

ここでは，全連結型のモデルを正確に取り扱くと，平均場近似と同じ答えがでることを示す．つまり，近似が正確になるモデルが存在するというわけである．このことから，全連結型のモデルはたびたび平均場モデルと呼ばれている．

(1) 例えば全ての S_i が 1 だとすると， $(\sum_i S_i)^2 = N^2$ であり，エネルギーの第一項が $O(N)$ になるためには係数は $1/N$ である必要がある．エネルギーが示量変数でないモデルは熱力学的に異常である．

(2) 単純に右辺から左辺を導く．

$$\text{右辺} = \sqrt{\frac{\tilde{N}}{2\pi}} \int dm \exp(-\tilde{N}(m-A)^2 + \tilde{N}A^2) = \exp(\tilde{N}A^2) = \text{左辺} \quad (5.58)$$

(3) $\tilde{N} = N\beta J$ ， $A = \sum_i S_i$ として，この式を用いると，分配関数は，

$$Z = \sum_{\{S_i\}} \exp \left(N\beta J \left(\frac{1}{N} \sum_i S_i \right)^2 + \beta H \sum_i S_i \right)$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\frac{N\beta J}{2\pi}\right)^{1/2} \int dm \sum_{\{S_i\}} \exp\left(-N\beta Jm^2 + 2mN\beta J\left(\frac{1}{N}\sum_i S_i\right) + \beta H\sum_i S_i\right) \\
&= \left(\frac{N}{2\pi}\right)^{1/2} \int dm \sum_{\{S_i\}} \exp\left(-N\beta Jm^2 + (2m\beta J + \beta H)\sum_i S_i\right) \\
&= \left(\frac{N}{2\pi}\right)^{1/2} \int dm e^{-N\beta Jm^2} \exp(N \log(2 \cosh(2m\beta J + \beta H))) \\
&= \left(\frac{N}{2\pi}\right)^{1/2} \int dm \exp\left(-N\beta Jm^2 + N \log(2 \cosh(2m\beta J + \beta H))\right)
\end{aligned}$$

と計算出来る．結局、求めたい $f(m)$ は、

$$f(m) = \beta Jm^2 - \log(2 \cosh(2m\beta J + \beta H)) \quad (5.59)$$

である．

(4) $f(m)$ の極値の条件は、

$$f'(m) = 2\beta Jm - 2\beta J \tanh(\beta(2mJ + H))$$

から、

$$m = \tanh(\beta(2mJ + H))$$

である．

(5) 零磁場のときの上の方程式は、平均場近似のときの自己無撞着方程式と同じ構造を持っている．平均場のときは上の $2J$ が zJ になっていた．今の問題では、相互作用する手の数が $2N$ 本あり、それぞれが J/N の強さなので、 zJ に相当する値は $2J$ である．相転移する議論は平均場近似のときと全く同じである．

問題 2-11 グランドカノニカル分布：

(1) 注目する系と熱浴（粒子浴）からなる孤立系を考える．この系の全エネルギーは E_T 、粒子数は N_T とする．等重率の原理を仮定すると、注目する系がエネルギー E_j 、粒子数 N_j であるミクロな状態 j が実現する確率 P_j は、

$$P_j \propto W_{II}(E_T - E_j, N_T - N_j)$$

である．ここで、 $W_{II}(E, N)$ は熱浴がエネルギー E 、粒子数 N を持つミクロな状態の場合の数である．注目する系のエネルギー及び粒子数は多くないとする、つまり、 $E_T \gg E_j, N_T \gg N_j$ とする．このとき、ある定数を C として、確率 P_j は、

$$\begin{aligned}
P_j &= \log W_{II}(E_T - E_j, N_T - N_j) + C \\
&\simeq \left. \frac{\partial}{\partial E_{II}} \log W_{II}(E_T - E_j, N_T - N_j) \right|_{E_{II}=E_T} (E_{II} - E_T)
\end{aligned}$$