統計力学II

復習

熱力学 $dU = TdS - PdV + \mu dN$

統計力学 $Z = \sum_{all\ states\ i} e^{-\beta E_i}, F = -k_B T \ln Z$

$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p_i}^2}{2m}$ の系では

$$
\begin{aligned}
Z &= \frac{1}{N!h^3} \int\int e^{-\frac{\beta}{2m}\sum_{i=1}^{N}(p_{ix}^2+p_{iy}^2+p_{iz}^2)} d\vec{x_1}\ldots d\vec{x_n} d\vec{p_1}\ldots d\vec{p_n} \\
&= \frac{1}{N!h^3}[\int dp_x dp_y dp_z e^{-\frac{\beta}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)} V]^N \\
&= \frac{1}{N!h^3}(\sqrt{2\pi m k_B T})^3 N V^N
\end{aligned}
$$

2 順位系

$$
\mathcal{H}_2 = E_0 + \frac{\Delta E}{2}\sigma \qquad \left(\sigma = \begin{cases} 1 & B \text{ のとき} \\ -1 & A \text{ のとき} \end{cases}\right)
$$

ただし、$E_0 = \frac{E_A+E_B}{2}, \Delta E = E_B - E_A$ このとき分配関数は

$$
\begin{aligned}
Z &= \sum_{\sigma_1=\pm1,\ldots\sigma_N=\pm1} e^{-\beta\sum_{i=1}^{N}(E_0+\frac{\Delta E}{2}\sigma_i)} \\
&= (\sum_{\sigma=\pm1} e^{-\beta(E_0+\frac{\Delta E}{2}\sigma)})^N \\
&= (e^{-\beta E_0} 2\cosh(\frac{\beta\Delta E}{2}))^N
\end{aligned}
$$

よって

$$
E = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z = \frac{Tr\mathcal{H}e^{-\beta\mathcal{H}}}{Z} = E_0 N - \frac{\Delta E}{2} N \tanh(\frac{\beta\Delta E}{2})
$$

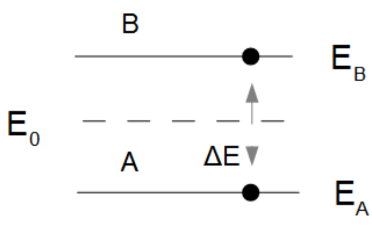

図１　２準位のエネルギー

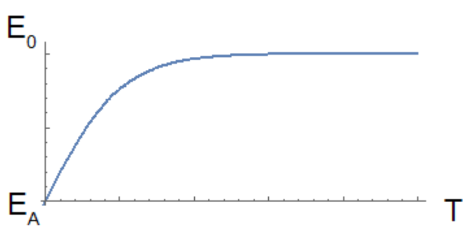

図２　E と T の関係

Ising model

$$\mathcal{H} = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j - H\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \qquad (\sigma_i = \pm 1, \frac{\Delta E}{2} = -H, J > 0)$$

このモデルではスピンがそろったときエネルギー（$-J$）得する。（強磁性体モデル）

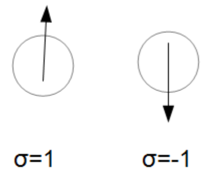

図 3　σの符号

$J = 0$ のとき

$$Z = Tre^{\beta H\sum_{i=1}^{N}\sigma_i} = (2\cosh\beta H)^N$$

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial\beta} = -NH\tanh(\beta H)$$

磁化 $M = \sum_{i=1}^{N}\sigma_i$ とすると

$$\langle M\rangle = \frac{Tr\ Me^{\beta HM}}{Tr\ e^{\beta HM}} = \frac{\partial}{\partial(\beta H)}\ln Z = N\tanh(\beta H)$$

このとき 帯磁率χ は

$$\chi = \frac{\partial\langle M\rangle}{H} = \frac{N\beta}{(\cosh(\beta H))^2} \xrightarrow[H\to 0]{} N\beta \qquad \text{(Curie 則)}$$

$J \neq 0$ のとき

$$Tre^{\beta(J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j + H\sum_i\sigma_i)}$$

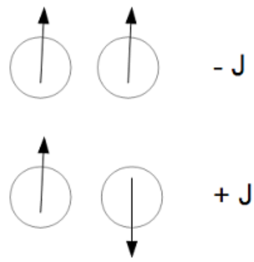

図 4　相互作用 J

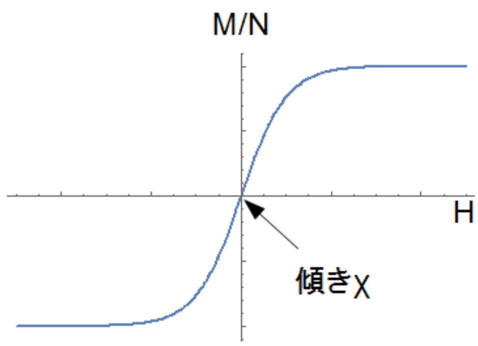

図 5　磁化と磁場の関係

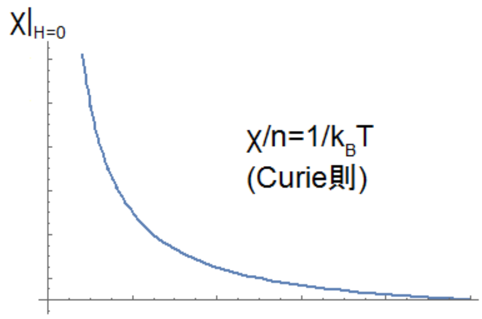

図 6　Curie 則

ここで摂動展開をすると

$$e^{\beta J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j}e^{H\sum_i\sigma_i}=[1+\beta J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j+O(\beta^2J^2)]e^{H\sum_i\sigma_i}$$

よって $\langle\ldots\rangle_0=\frac{Tr\ldots e^{H\sum_i\sigma_i}}{Tre^{H\sum_i\sigma_i}}, Z_0=Tre^{H\sum_i\sigma_i}$ とすると

$$\begin{aligned}Z&=\frac{Tre^{\beta J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j}e^{H\sum_i\sigma_i}}{Tre^{H\sum_i\sigma_i}}Tre^{H\sum_i\sigma_i}\\&=\langle e^{\beta J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j}\rangle_0 Z_0\\&=(1+\beta J\sum_{\langle i,j\rangle}\langle\sigma_i\sigma_j\rangle_0+\ldots)Z_0\end{aligned}$$

ここで $\langle\sigma_i\sigma_j\rangle_0=\langle\sigma_i\rangle_0\langle\sigma_j\rangle_0=(\tanh\beta H)^2$ より

$$Z\approx Z_0(1+\frac{\beta JNz}{2}(\tanh\beta H)^2)\qquad(z\text{ は 1 サイトの }bond\text{ 数})$$

$$\chi=\frac{\partial}{\partial H}\langle M\rangle=\frac{\partial}{\partial H}\frac{\partial}{\partial\beta H}(\ln Z)\approx\chi_0+ZJN\beta^2=(1+ZJ\beta)N\beta$$

$$\chi^{-1}=\frac{1}{N\beta(1+zJ\beta)}\approx\frac{1}{N\beta}(1-zJ\beta)=\frac{1}{N}(k_BT-zJ)$$

よって

$$\chi\propto N\frac{1}{T-T_0}\qquad\text{Curie}-\text{Weiss 則}$$

平均場近似（Mean field approx）

$\sigma_i\to\langle\sigma_i\rangle=m,-J\sigma_i(\sum_j\sigma_j)\to-J\sigma_izm,\mathcal{H}_{MF}=-J\sigma_izm-H\sigma_i$ とする

$$\langle\sigma_i\rangle=\frac{Tr\sigma_ie^{-\beta\mathcal{H}_{MF}}}{Tre^{-\beta\mathcal{H}_{MF}}}=\tanh(\beta Jzm+\beta H)=m\qquad(\text{セルフコンシステント方程式})$$

$\tanh(\beta Jzm+\beta H)\approx\beta Jzm+\beta H$ とすると

$$\beta Jzm+\beta H=m$$

$$\frac{m}{H}=\beta\frac{1}{1-\beta Jz}$$

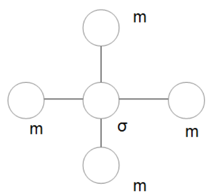

図 7　平均場

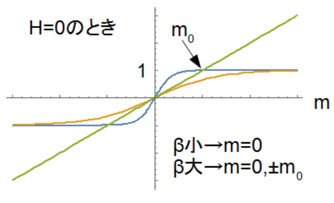

図 8　セルフコンシステント方程式の解