統計力学II

平均場近似

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

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

ここで $T_C = Jz/k_B$ とすると $H \approx 0, T \approx T_C$ のとき、$\tanh(x) \approx x - \frac{1}{3}x^3$ より

$$m = \beta Jzm - \frac{1}{3}(\beta Jzm)^3$$

$$m^2 = \frac{3(\beta Jz - 1)}{(\beta Jz)^3} \approx 3\left(\frac{k_B T_C}{k_B T} - 1\right) = 3\frac{T_C - T}{T} \approx 3\frac{T_C - T}{T_C}$$

よって

$$m = \pm\sqrt{3\frac{T_C - T}{T_C}}$$

$$E = -\frac{Jz}{2}m^2 N = -\frac{JzN}{2}3\frac{T_C - T}{T_C}$$

$$C = \frac{dE}{dT} = \frac{3JzN}{2T_C}$$

また $H \neq 0$ のとき

$$m = \tanh(\beta Jzm + \beta H) \approx \beta Jzm + \beta H$$

$$m = \frac{H}{k_B T - k_B T_C} \propto \frac{1}{T - T_C}H$$

$$\chi = \frac{\partial m(H)}{\partial H}\Big|_{H=0} = \frac{1}{2k_B(T_C - T)} \propto \frac{1}{|T - T_C|}$$

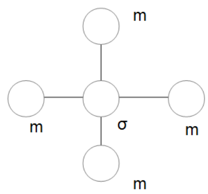

図 1　平均場

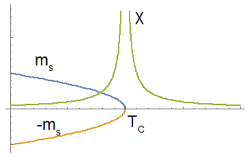

図 2　磁化と磁化率

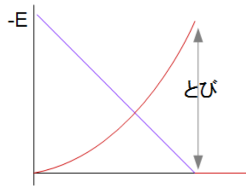

図 3　E と C

臨界現象

$m \propto (T_C - T)^\beta, \chi \propto |T - T_C|^{-\gamma}, C \propto |T - T_C|^{-\alpha}, m \propto H^{\frac{1}{\delta}}$ となる。$\beta, \gamma, \alpha, \delta$ を臨界指数とよぶ

平均場において $\beta = \frac{1}{2}, \gamma = 1, \alpha = 0, \delta = 3$ である

$\tanh(\beta Jzm + \beta H) \approx (\beta Jzm + \beta H) - \frac{1}{3}(\beta Jzm + \beta H)^3$ より $T = T_C, \beta Jz = 1$ では

$$m = (m + \beta H) - \frac{1}{3}(m + \beta H)^3$$

$$\beta H = \frac{1}{3}(m^3 + 3m^2\beta H + 3m(\beta H)^2 + (\beta H)^3)$$

よって H が小さいとき、$H \propto m^3, m \propto H^{\frac{1}{3}}$

また $m = \tanh(\beta Jzm + \beta H)$ より $H = k_B T \tanh^{-1}(m) - Jzm$ となるので

$$\frac{dH}{dm} = \frac{k_B T}{2}[\frac{1}{1+m} + \frac{1}{1-m}] - Jz$$

$$\frac{dH}{dm}\Big|_{m=0} = k_B T - Jz$$

これらをふまえると、m と H の関係は図のようになる

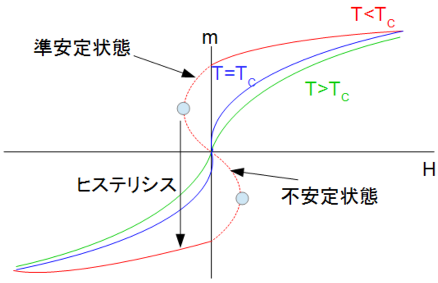

図 4　各温度での m と H の関係

平均場近似での自由エネルギー

$Z = Tre^{-\beta\mathcal{H}}, F = -k_BT\ln Z$ であるから、$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{MF} = Jzm\sigma$とすると

$$Z^0_{MF} = Tre^{-\beta\mathcal{H}_{MF}} = 2\cosh(\beta Jzm)$$

$$F^0_{MF} = -k_BT\ln(2\cosh(\beta Jzm)) \approx -k_BT\ln(1+\frac{1}{2}(\beta Jzm)^2) \propto -m^2$$

F が上に凸なのでこの系はどの m に対して不安定となってしまっている。これは近似が不十分であるためである。これを改善するため以下の方法を紹介する。

1. 揺らぎを無視する方法

$\delta_i = \sigma_i - m$ とすると$\sigma_i = m + \delta_i$であるから

$$\mathcal{H} = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j = -J\sum_{\langle i,j\rangle}(m+\delta_i)(m+\delta_j) = -J\sum_{\langle i,j\rangle}[m^2 + m(\delta_i+\delta_j) + \delta_i\delta_j]$$

$\delta_i\delta_j$を無視すると

$$\mathcal{H}_{MF} = -J\sum_{\langle i,j\rangle}[m^2 + m(\delta_i+\delta_j)] = \frac{JzN}{2}m^2 - Jzm\sum_i\sigma_i$$

$$Z_{MF} = Tre^{-\beta\mathcal{H_{MF}}} = e^{-\frac{\beta JzN}{2}m^2}[2\cosh(\beta Jzm)]^N$$

$$F_{MF} = k_BT\ln Z = \frac{Jzm^2}{2}N - k_BTN\ln[2\cosh(\beta Jzm)]$$

$$f_{MF} = F_{MF}/N = \frac{Jzm^2}{2} - k_BT\ln[2\cosh(\beta Jzm)]$$

この f_{MF}と m の関係は図 5 のようになる
f_{MF}を最小にする m は$\frac{\partial f_{MF}}{\partial m} = 0$ をみたすので

$$\frac{\partial f_{MF}}{\partial m} = Jz[m - \tanh(\beta Jzm)] = 0$$

$H \neq 0$ のときは f_{MF}を $f_{MF} - mH$ に置き換えればよい。このときの F と m の関係は図 6, 7 のようになる

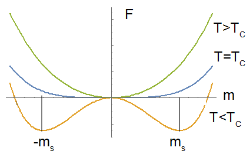

図 5　F と m の関係式

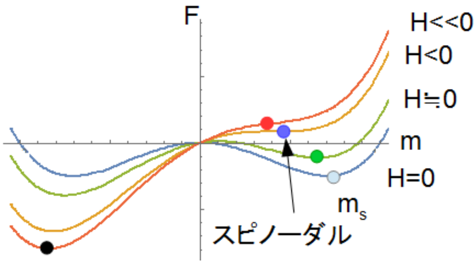

図 6　各磁場における m と F の関係

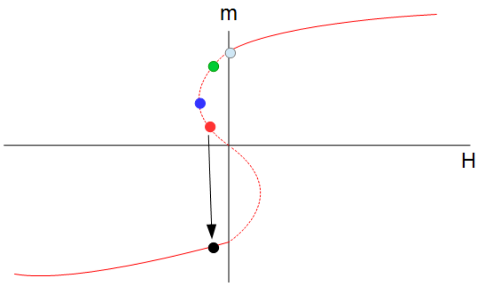

図 7　磁場と m の対応関係

2.Bragg-Williams 近似

$F = E - TS$ を用いる。ここで $E = -\frac{Jzm^2}{2}N$ である。また

$$S = -k_B \sum_{\sigma_1=\pm1\ldots\sigma_N=\pm1} P(\sigma_1\ldots\sigma_N)\ln(P(\sigma_1\ldots\sigma_N))$$

$$P(\sigma_1\ldots\sigma_N) = \prod_{i=1}^{N} p(\sigma_i)$$

ここで

$$p(\sigma) = \begin{cases} p_+ & (\sigma = +1) \\ p_+ & (\sigma = +1) \end{cases}$$

また $p_+ + p_- = 1, p_+ - p_- = m$ より

$$p_+ = \frac{1+m}{2}, p_- = \frac{1-m}{2}$$

よって S は

$$S = -k_B N[\frac{1+m}{2}\ln\frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2}\ln\frac{1-m}{2}]$$

$$f = -\frac{Jzm^2}{2} + k_B T[\frac{1+m}{2}\ln\frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2}\ln\frac{1-m}{2}]$$

F が最小となる m は $\frac{\partial f_{MF}}{\partial m} = 0$ をみたすので

$$\frac{\partial f_{MF}}{\partial m} = -Jzm + k_B T\frac{1}{2}\ln\frac{1+m}{1-m} = 0$$

$$\beta Jzm = \tanh^{-1} m$$