統計力学II

3. 長距離相互作用

$$\mathcal{H}_{MF} = \sum_{i=1}^{N} Jzm\sigma_i - \sum_{i=1}^{N} H\sigma_i$$

これに $m = \sum_{i=1}^{N} \sigma_i / N$ を代入して

$$\mathcal{H}_{LR} = \frac{Jz}{2N} \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \sigma_i\sigma_j - \sum_{i=1}^{N} H\sigma_i = -\frac{Jz}{2N}(\sum_{i=1}^{N}\sigma_i)^2 - \sum_{i=1}^{N} H\sigma_i$$

$M = \sum_{i=1}^{N} \sigma_i, N_+$を$\sigma_i = +1$ の数$, N_-$を$\sigma_i = -1$ の数とすると
$N_+ + N_- = N, N_+ - N_- = M$ より $N_\pm = \frac{N \pm M}{2}$である
これを用いると

$$\mathcal{H}_{LR} = -\frac{Jz}{2N}M^2 - HM$$

$$Z = Tre^{-\beta H} = Tre^{\frac{\beta Jz}{2N}M^2 + \beta HM} = \sum_{M=-N}^{N} {}_N C_{N_+} e^{\frac{\beta Jz}{2N}M^2 + \beta HM}$$

ここでスターリングの近似 $n! \approx \left(\frac{n}{e}\right)^n$ より

$${}_N C_{N_+} = \frac{N!}{N_+! N_-!} \approx \frac{N^N}{(\frac{N+M}{2})^{\frac{N+M}{2}} (\frac{N-M}{2})^{\frac{N-M}{2}}} = \frac{1}{(\frac{1+m}{2})^{\frac{1+m}{2}} (\frac{1-m}{2})^{\frac{1-m}{2}}}$$

よって

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{M=-N}^{M=N} \exp\left(\frac{\beta Jz}{2N}M^2 + \beta HM - N\ln[(\frac{1+m}{2})^{\frac{1+m}{2}}(\frac{1-m}{2})^{\frac{1-m}{2}}]\right) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dM \exp\left(\frac{\beta Jz}{2}m^2 + \beta HNm - N\ln[(\frac{1+m}{2})^{\frac{1+m}{2}}(\frac{1-m}{2})^{\frac{1-m}{2}}]\right) \end{aligned}$$

鞍点法 $\frac{\partial}{\partial m}(\ldots) = 0$ より

$$\beta JzmN + \beta HN = \frac{\partial}{\partial m}\ln[(\frac{1+m}{2})^{\frac{1+m}{2}}(\frac{1-m}{2})^{\frac{1-m}{2}}] \qquad (BW \text{ 近似と同じ式})$$

$$F/N = -\frac{Jzm^2}{2} - Hm + k_BT\ln[(\frac{1+m}{2})^{\frac{1+m}{2}}(\frac{1-m}{2})^{\frac{1-m}{2}}]$$

別解

$$Z = Tre^{\frac{\beta Jz}{2N}M^2+\beta HM}$$

ここで $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{2}+ax}dx = e^{\frac{a^2}{2}}$ より $a = \sqrt{\frac{\beta Jz}{N}}M$ とすると

$$\begin{aligned}
Z &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-\frac{x^2}{2} + x\sqrt{\frac{\beta zJ}{N}}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i + \beta H\sum_{i=1} N\sigma_i]dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} dxe^{-\frac{x^2}{2}}2\cosh\left[x\sqrt{\frac{\beta zJ}{N}} + \beta H\right]^N \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} dxe^{-\frac{x^2}{2}+N\ln 2\cosh[x\sqrt{\frac{\beta zJ}{N}}+\beta H]} \\
&= \sqrt{\frac{N}{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} dye^{-\frac{Ny^2}{2}+N\ln 2\cosh[y\sqrt{\beta zJ}+\beta H]} \qquad (y = x/\sqrt{N} = \sqrt{\beta Jz}m) \\
f(m) &= \frac{1}{2}Jzm^2 - k_BT\ln 2cosh[\beta Jzm + \beta H]
\end{aligned}$$

変分法的な考え方

$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{MF} + \mathcal{H} - \mathcal{H}_{MF}, F = -k_BT\ln Tre^{-\beta\mathcal{H}}$を踏まえると以下の式により F の上限が与えられる

$$F \le F_{MF} + \langle\mathcal{H} - \mathcal{H}_{MF}\rangle_{MF}$$

ここで $\langle\ldots\rangle_{MF} = \frac{Tr\ldots e^{-\beta\mathcal{H}_{MF}}}{Tre^{-\beta\mathcal{H}_MF}}$ である。
今、$\mathcal{H}, \mathcal{H}_{MF}, F_{MF}$は次のようになっている

$$\mathcal{H}_{MF} = -\sum_{i=1}^{N} Jzm\sigma_i$$

$$F_{MF} = -k_BTN\ln 2\cosh(\beta Jzm)$$

$$\mathcal{H} = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j$$

これらを用いると

$$\begin{aligned}
\langle\mathcal{H}\rangle_{MF} &= -\frac{JzN}{2}\langle\sigma_i\sigma_j\rangle_{MF} = -\frac{JzN}{2}\langle\sigma_i\rangle_{MF}\langle\sigma_j\rangle_{MF} = -\frac{JzN}{2}(\tanh(\beta Jzm))^2 \\
\langle\mathcal{H}_{MF}\rangle_{MF} &= -NJzm\tanh(\beta Jzm) \\
F_{MF} + \langle\mathcal{H} - \mathcal{H}_{MF}\rangle &= -Nk_BT2\cosh(\beta zJm) - \frac{JzN}{2}\tanh^2(\beta zJm) + NzJm\tanh(\beta zJm)
\end{aligned}$$

これを m で偏微分すると $m = \tanh(\beta zJm)$ が得られる

Landau の現象論的自由エネルギー

$f(m) = f(T,H,m)\ldots$熱力学的な安定するためにポテンシャルのようなもの
$\frac{\partial f}{\partial m} = 0$ としたが実際は $dF = TdS - HdM$ より $\frac{\partial f}{\partial m} = -H$ となる
本来は $Z = Tre^{-\beta\mathcal{H}} = \sum_m Tr\delta(\sum_{i=1}^{N}\sigma_i/N - m)e^{-\beta\mathcal{H}} = \sum_m e^{-\beta f(m)N}$でこれまでは $e^{-\beta f(m)N}$が一番大きくなるところを計算していた
$T \approx T_C$のとき

$$f(m) = a_0(T - T_C)m^2 + bm^4 + \cdots - Hm \quad \leftarrow Landau\text{ の自由エネルギー}$$

$$\frac{\partial f}{\partial m} = 0 \rightarrow 2a_0(T - T_C)m + 4bm^3 - H = 0$$

$H = 0, T < T_C$のとき $m = \pm\sqrt{\frac{2a_0}{4b}(T_C - T)}$となる。
$H \neq 0, T > T_C$のとき $m \propto \frac{1}{T-T_C}$
1 次相転移のふるまいは $f(m) = am^2 + bm^4 + cm^6$により説明される $(a > 0, b < 0)$

また磁化 $m(\vec{r})$ が場所ごとに違うとすると

$$f(m(\vec{r})) = \int d\vec{r}\ am(\vec{r})^2 + bm(\vec{r})^4 + c(\nabla m(\vec{r}))^2 + \cdots - Hm(\vec{r})$$

これを GL 自由エネルギーという

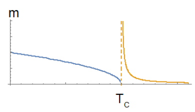

図 1　臨界近くの磁化

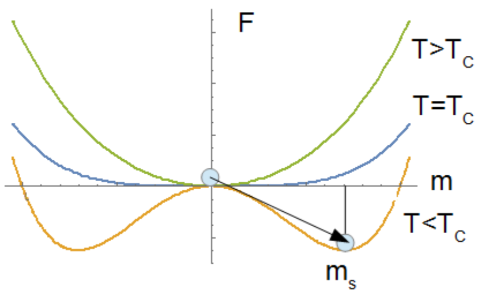

図 2　2 次相転移

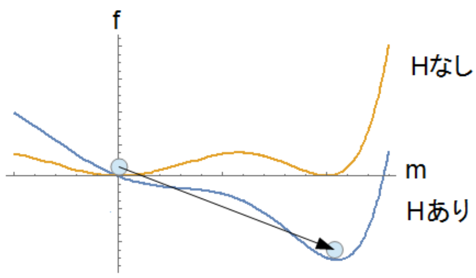

図 3　1 次相転移

スケーリング則

臨界指数 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ は $t = \frac{T - T_C}{T_C}$ を用いると以下のように書ける

$$m = |t|^{\beta}, \chi = |t|^{-\gamma}, C = |t|^{-\alpha}, m = h^{\frac{1}{\delta}}$$

ウィドムのスケーリング

$m = t^{\beta}\psi(\frac{t^{\beta}}{h^{\frac{1}{\delta}}})$ と書けるとする。

$$\begin{aligned} m &= t^{\beta}\psi\left(\frac{t^{\beta}}{h^{\frac{1}{\delta}}}\right) \\ &= t^{\beta}\Psi\left(\frac{t^{\beta\delta}}{h}\right) \\ &= t^{\beta}\left(\frac{t^{\beta\delta}}{h}\right)^{-\frac{1}{\delta}}\left(\frac{t^{\beta\delta}}{h}\right)^{\frac{1}{\delta}}\Psi\left(\frac{t^{\beta\delta}}{h}\right) \\ &= h^{\frac{1}{\delta}}\tilde{\Psi}\left(\frac{t^{\beta\delta}}{h}\right) \qquad \left(\tilde{\Psi}\left(\frac{t^{\beta\delta}}{h}\right) = \left(\frac{t^{\beta\delta}}{h}\right)^{\frac{1}{\delta}}\Psi\left(\frac{t^{\beta\delta}}{h}\right)\right) \end{aligned}$$

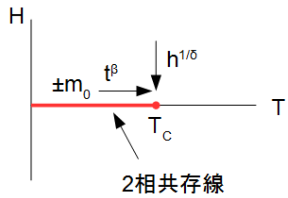

図 4 m のスケーリング

したがって

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = t^{\beta}\frac{1}{t^{\beta\delta}}\Phi'\left(\frac{h}{t^{\beta\delta}}\right) = t^{\beta(1-\delta)}\Phi'(\dots) \propto t^{-\gamma}$$

よって $\gamma = \beta(\delta - 1)$

また

$$\begin{aligned} f &\propto -mh \\ &= t^{\beta}\Phi\left(\frac{h}{t^{\beta\delta}}\right)h \\ &= t^{\beta}\Phi\left(\frac{h}{t^{\beta\delta}}\right)\frac{h}{t^{\beta\delta}}\frac{t^{\beta\delta}}{h}h \\ &= t^{\beta}\tilde{\Phi}\left(\frac{h}{t^{\beta\delta}}\right)\frac{t^{\beta\delta}}{h}h \\ &\propto t^{\beta(1+\delta)} \end{aligned}$$

より

$$C \propto \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = t^{\beta(1+\delta)-2} = t^{-\alpha}$$

より $\alpha = 2 - \beta(1 + \delta)$ 以上の式より $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$

空間的に変化する指数（短距離）相互作用モデル

相関関数 $\langle\sigma_i\sigma_j\rangle = r^{-(d-2+\eta)}e^{-r/\xi}$

(ξ : 相関長, $r = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$, d : 次元)

$\xi \propto t^{-\nu}$　　(ν : 相関長の臨界指数)