統計力学II

空間的に変化がある場合（短距離離相互作用モデル）

$m(\vec{r})$ とすると自由エネルギーは以下のように書ける。(ϕ^4モデル)

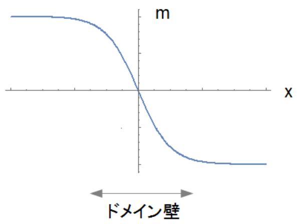

図 1　ϕ^4モデル

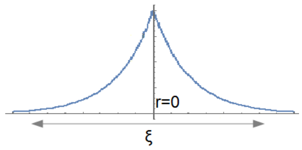

図 2　相関長

$$F = \int \left(\frac{1}{2}(\nabla m)^2 + am^2 + bm^4 \right) d\vec{r}$$

$\frac{\partial F}{\partial m} = 0$ とすると

$$\nabla^2 m = 2am + 4bm^3$$

となるので 1 次元系では $m(x) = m_0 \tanh\left(\frac{x}{\xi}\right)$ となる。
ここで$\xi = \sqrt{\frac{1}{|a|}}$、$m_0 = \sqrt{\frac{|a|}{2b}}$である。
$T \approx T_C$では $a = a_0(T - T_C)$ となるので、$\xi = |T - T_C|^{-\nu}$とすると$\nu = \frac{1}{2}$
相関関数を $\langle m(0)m(r)\rangle$ とすると $\langle m(0)m(r)\rangle = \frac{1}{r^{d-2+\eta}}e^{-r/\xi}$ となる
このξとηを求める

$$\mathcal{H}_i = -H_i\sigma_i - J\sum_{j=1}^{z}\langle\sigma_j\rangle\sigma_i$$

$$\langle\sigma_i\rangle = \frac{Tr\sigma_i \exp[-\beta\sum_{k=1}^{N}(-H_k - J\sum_{j_k=1}^{z} m_{j_k}\sigma_k)]}{Tr\exp[-\beta\sum_{k=1}^{N}(-H_k - J\sum_{j_k=1}^{z} m_{j_k}\sigma_k)]}$$

よって

$$\langle\sigma_i\rangle = m_i = \tanh[\beta H_i + \beta J\sum_{j_k=1}^{z} m_{j_k}] \approx \beta H_i + \beta J\sum_{j_k=1}^{z} m_{j_k} \quad i = 1, 2, \dots N$$

ここで $\langle\sigma_{\vec{k}}\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\langle\sigma_i\rangle e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ とおくと $\langle\sigma_i\rangle = \sum_{\vec{k}}\langle\sigma_{\vec{k}}\rangle e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}$
並進対称性より $\sum_{i=1}^{N}\langle\sigma_{i+\delta_{i_k}}\rangle e^{i\vec{k}\cdot\vec{r_i}} = \sum_{i=1}^{N}\langle\sigma_{i+\delta_{i_k}}\rangle e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r_i}+\delta_{i_k})-i\vec{k}\cdot\delta_{i_k}} = \langle\sigma_{\vec{k}}\rangle e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta_{i_k}}}$ なので

$$\sigma_{\vec{k}} = \frac{1}{N}\beta\sum_{i=1}^{N} H_i e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \beta J[\sigma_{\vec{k}}(\sum_{i_k=1}^{z} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\delta_{i_k}}})]$$

$H_{\vec{k}}\frac{1}{N}\beta\sum_{i=1}^{N} H_i e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$とする
正方格子のとき $\delta_1 = (1, 0,), \delta_2 = (0, 1), \delta_3 = (-1, 0), \delta_4 = (0, -1)$ となり

$$\sigma_{\vec{k}} = \beta H_{\vec{k}} + \beta J\langle\sigma_{\vec{k}}\rangle 2(\cos k_x + \cos k_y)$$

よって

$$\sigma_{\vec{k}} = \frac{\beta H_{\vec{k}}}{1 - 2\beta J(\cos k_x + \cos k_y)}$$

$\langle\sigma_i\rangle = \frac{Tr\sigma_i \exp[-\beta\sum_{k=1}^{N}(-H_k - J\sum_{j_k=1}^{z} m_{j_k}\sigma_k)]}{Tr\exp[-\beta\sum_{k=1}^{N}(-H_k - J\sum_{j_k=1}^{z} m_{j_k}\sigma_k)]}$ より

$$\frac{\partial\langle\sigma_i\rangle}{\partial H_j} = \beta(\langle\sigma_i\sigma_j\rangle - \langle\sigma_i\rangle\langle\sigma_j\rangle) = \beta G(r_{ij})$$

この $G(r)$ を相関関数と呼び, $\xi=\sqrt{\frac{1-z\beta J}{Jz}}$ とすると

$$G(r)=\begin{cases}\frac{1}{r^{(d-1)/2}}e^{-\frac{r}{\xi}} & r>>\xi \\ \frac{1}{r^{d-2}}e^{-\frac{r}{\xi}} & r<<\xi\end{cases}$$

ゆらぎと応答

$$Z=Tre^{\beta(J\sum\sigma_i\sigma_j+H\sum\sigma_i)}$$

$$\langle M\rangle=\frac{TrMe^{\beta(J\sum\sigma_i\sigma_j+H\sum\sigma_i)}}{Z}\quad M=\sum\sigma_i$$

$$\chi=\frac{\partial\langle M\rangle}{\partial H}=\frac{\beta TrM^2e^{\beta(J\sum\sigma_i\sigma_j+H\sum\sigma_i)}}{Z}-TrMe^{\beta(J\sum\sigma_i\sigma_j+H\sum\sigma_i)}\frac{\beta TrMe^{J\sum\sigma_i\sigma_j+H\sum\sigma_i}}{Z^2}$$

よって $\chi=\beta(\langle M^2\rangle-\langle M\rangle^2)$　(kirkwood の関係)

$T>T_C$では $\langle M\rangle=0$

$$\begin{aligned}\chi=\beta\langle M^2\rangle&=\beta(\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\langle\sigma_i\sigma_j\rangle)\\ &\approx\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\frac{e^{-r_{ij}/\xi}}{r_{ij}^{d-2+\eta}}\approx N\sum_{i=1}^{N}\frac{e^{-r_{0i}/\xi}}{r_{0j}^{d-2+\eta}}\\ &\approx N\int d\vec{r}\frac{e^{-r_{ij}/\xi}}{r_{ij}^{d-2+\eta}}\approx\xi^{2-\eta}\end{aligned}$$

ここで $\chi\approx|T-T_C|^{-\gamma},\xi\approx|T-T_C|^{-\nu}$ より $\gamma=\nu(2-\eta)$

Kadanoff のスケーリング

臨界現象　ξの成長で秩序度をあらわす

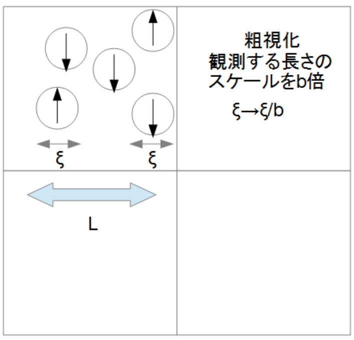

図 3　スケーリング

$\epsilon = (T - T_C), \xi \approx (T - T_C)^{-\nu}, \xi \approx h^{-1/x}$より
$X = \xi^{1/\nu}\epsilon, Y = h\xi^{x}$,特異部での自由エネルギーを $f_S(T, H)$ とすると

$$f_s(T, H) = \xi^{-d} f(\xi^{1/\nu}\epsilon, h\xi^{x}, \xi/L)$$

$E = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z, C = \frac{\partial E}{\partial T} = -\frac{\partial}{\partial T}(k_B T^2)\frac{\partial}{\partial T}(\beta f)$ より $\tilde{f} = X^{(d-\frac{2}{\nu)\nu}} f''$とすると

$$\begin{aligned} C \propto \frac{\partial^2 f}{\partial \epsilon^2} &= \xi^{-d}\xi^{2/\nu} f''(X, Y, \xi/L) & &= \xi^{-d+2/\nu} f''(\dots) \\ &= \xi^{-d+2/\nu}(\xi^{1/\nu}\epsilon)^{(d-2\frac{2}{\nu})\nu}\tilde{f}(\dots) & &= \epsilon^{d\nu-2}\tilde{f} \\ &\propto \epsilon^{-\alpha} \end{aligned}$$

よって $\alpha = 2 - d\nu$
また

$$m = \frac{\partial f}{\partial h} \propto \xi^{-d+x} f'(\dots) = \epsilon^{\nu(d-x)} f'(\dots) \propto \epsilon^{\beta}$$

より $\beta = (d - x)\nu$

$$\xi = \frac{\partial^2 f}{\partial h^2} \propto \xi^{-d+2x} \propto \epsilon^{(d-2x)\nu}$$

より $\gamma = -(d - 2x)\nu = (2 - \eta)\nu, x = \frac{d+2-\eta}{2}$