演習問題 5:平均場近似

問題 1. 磁場 $\boldsymbol{B}$ の下でのスピン 1/2 の孤立スピンの以下のハミルトニアンを考える。

$$H_0 = -\mu \boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{S},\ \boldsymbol{S}^2 = S(S+1) = 3/4$$

(a) $\boldsymbol{S}^2 = S(S+1) = 3/4$ について説明せよ。

(b) $\boldsymbol{B}$ の方向に z 軸をとって議論して一般性を失わないのはなぜか述べよ。

(c) 分配関数 $Z = e^{-\beta f}$ を求め。自由エネルギー f を求めよ。($\beta = 1/k_B T$)

(d) 温度 T での磁化 $m = \mu\langle S^z\rangle$ を求めよ。

(e) 帯磁率 $\chi = \left.\dfrac{dm}{dB}\right|_{B=0}$ を求め、温度の関数として図示せよ。(キュリー則)

(f) この孤立スピンが N 個ある場合の分配関数 $Z_N = e^{-\beta F_N}$ を求めよ。ただしその導出を丁寧に示せ。また $F_N/N = f$ を確認せよ。

(g) この N スピンの系で協同現象は生じるか否か理由を述べ説明せよ。

問題 2. 配位数 z の d 次元正方格子上で以下の Ising 模型を考える。

$$H = J\sum_{\langle ij\rangle} S_i^z S_j^z - \mu B\sum_i S_i^z$$

(a) $B = 0,\ J < 0$ の時の基底状態に関して述べよ。$J > 0$ の場合はどうか?

(b) 全スピンの個数 N が有限の場合、有限系と呼ぶ。$B = 0$ の場合、有限系での i 番目のスピンのカノニカル平均 $\langle S_i^z\rangle$ は幾らになるか理由とともに述べよ。

(c) 平均場近似のハミルトニアン H_{MF} を

$$H_{MF} = J\sum_i S_i^z z\bar{S} - \mu B\sum_i S_i^z, \quad \bar{S} = \frac{1}{N}\langle\sum_i S_i^z\rangle$$

とすることの意味を述べよ。

(d) $H_{MF} = -\mu B_{eff}\sum_i S_i^z$ としたとき B_{eff} を求めよ。

(e) 平均場近似での磁化 $\bar{m} = \mu\bar{S}$ の表式を書き下し self-consistent 方程式について述べよ。以下平均場近似に関して議論せよ。

(f) $e^x = \sum_{i=0}^{\infty} x^i/i!$ を使って $\tanh x = 1 + x - \frac{1}{3}x^3 + \mathcal{O}(x^4)$ を求めよ。また $y = \tanh x$ のグラフを示せ。

(g) $B = 0$ の時、平均場近似の下で磁化 m はある臨界温度 T_C について $T < T_C$ でゼロでない値をとり、$T > T_C$ では $m = 0$ となる。T_C を求め。この事実を示せ。

(h) ハミルトニアンの対称性と統計平均で与えられる磁化 (秩序変数) に関して対称性の破れの概念を説明せよ。

(i) 対称性の破れを協力現象の観点から説明せよ。

(j) T_C 近傍 $T < T_C$ で $m \sim t^\beta$, $t = \dfrac{T_C - T}{T_C}$ となることを示し β を求めよ。また m を温度の関数として概形を図示せよ。

(k) T_C 近傍 $T > T_C$ で $\chi \sim t^{-\gamma}$ となることを示し γ を求めよ。また χ を温度の関数として概形を図示せよ。

(l) 臨界点直上 $T = T_C$ において B, m が十分小さいとして $B \sim m^\delta$ となることを示し δ を求めよ。

問題 3. 平均場近似の異なる導出について考えてみよう。

(a) $H = J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z$ において, $\delta S_i^z = S_i^z - \bar{S}$ として, これを S_i^z について解き, H へ代入し、δS_i^z の一次までとって $H \sim H_m$ とした時 H_m は以下の形になる。これを導き説明せよ。

$$H_m \;=\; J \sum_{ij} (\bar{S} S_i + \bar{S} S_j - \bar{S}^2) = Jz \sum_i (2\bar{S} S_i - \bar{S}^2)$$

(b) $Z_m = \mathrm{Tr} e^{-\beta H_m} = e^{-\beta F}$ として $\dfrac{dF}{d\bar{S}} = 0$ から以下の条件を導け。

$$\frac{1}{N} \langle \sum_i S_i^z \rangle_m \;=\; \bar{S}$$

ここで $\langle \cdot \rangle_m$ は H_m に関するカノニカル平均である。