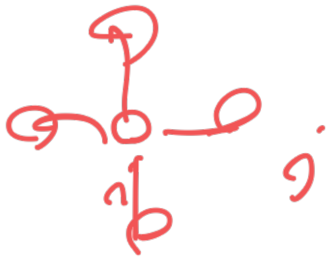
5.2 平均場近似による相転移

外場Bによる項　　自発的 B→0

相互作用する自由度（磁性体）の最も簡単な模型として，次の~~の~~ Ising 模型を考えよう。



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

$S_i^z = \pm 1/2$ ↑↓

$J > 0$　↑↑ もしくは ↓↓ $+1/4$

ただし各サイトのまわりには z このサイトがあるとしよう (配位数 z)．ここで i サイト周りのスピン S_j^z, $j \in \langle ij \rangle$ をその期待値

↑↓ → $-1/4$

両近接子

$$\bar{S} = \langle S_j^z \rangle$$

2D→ $z = 4$

1D $z = 2$

$\frac{J}{4} > 0$

↑↑ もしくは ↓↓ となる

で置き換えよう。さらにここで $\langle S_j^z \rangle$ は j に依存しないとする。つまり 全体がそろう

強磁性のモデル

$$\boxed{-J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z} \approx -J \sum_i S_i^z \sum_{j \in \langle ij \rangle} \underbrace{\langle S_j^z \rangle}_{\bar{S}}$$

$$\boxed{= -J z \bar{S} \sum_i S_i^z}$$

近似　　同じ形

と近似するわけである。よって

$$
\begin{aligned}
H \approx & H_{\mathrm{MF}} \\
H_{\mathrm{MF}} =& \mu B \sum_i S_i^z - J\bar{S}z \sum_i S_i^z \\
=& \mu B_{\mathrm{eff}} \sum_i S_i^z \\
B_{\mathrm{eff}} =& B - \frac{Jz}{\mu}\bar{S} = B - \frac{Jz}{\mu^2} m \\
m =& \mu \bar{S}
\end{aligned}
$$

$(\mu B - J\bar{s}z)\sum S_i^z$

$\underbrace{\mu\left(B - \frac{Jz}{\mu}\bar{S}\right)}_{B_{\mathrm{eff}}}$

これは孤立スピンが実効的外場 (分子場) B_{eff} の中に存在することに対応する。

孤立スピンの問題は既に解析したのでそれをもちいてまずスピンあたりの自由エネルギーは

$$
\bar{f}_{\mathrm{MF}} = -\frac{1}{\beta}\log\left(2\cosh\frac{\beta\mu B_{\mathrm{eff}}}{2}\right)
$$

となり、磁化は

$$
\begin{aligned}
m =& \frac{\partial f}{\partial B_{\mathrm{eff}}} = -\frac{\mu}{2}\tanh\frac{\beta\mu B_{\mathrm{eff}}}{2} \\
=& -\frac{\mu}{2}\tanh\frac{\beta\mu}{2}\left(B - \frac{Jz}{\mu^2}m\right) \quad \text{セルフコンシステントな条件}
\end{aligned}
$$

m が両辺

ここで，この関係式の異なる見方も以下紹介しよう。

$$\delta S_i^z = S_i - \bar{S}$$

ゆらぎ

ゆらぎの2乗
無視

とすれば，$S_i^z = \bar{S} + \delta S_i^z$ であって，δS_i^z の 2 次の項を無視して

$$
\begin{aligned}
H =& \mu B \sum_i S_i^z - J \sum_{\langle ij \rangle} S_i^z S_j^z = \mu B \sum_i S_i^z - J \sum_{\langle ij \rangle} (\bar{S} + \delta S_i^z)(\bar{S} + \delta S_j^z) \\
&\sim \mu B \sum_i S_i^z - J \sum_{\langle ij \rangle} (\bar{S}^2 + \bar{S}\delta S_i^z + \bar{S}\delta S_j^z) \\
&= \mu B \sum_i S_i^z - J \sum_i \frac{z}{2} (\bar{S}^2 + 2\bar{S}\delta S_i^z) \\
&= \mu B \sum_i S_i^z - J \sum_i z(\bar{S} S_i - \frac{1}{2}\bar{S}^2) \\
&= \boxed{\mu B_{\mathrm{eff}} \sum_i S_i^z} + \frac{zJN}{2}\bar{S}^2 = \mu B_{\mathrm{eff}} \sum_i S_i^z + \frac{zJN}{2\mu^2} m^2 \equiv H_{\mathrm{eff}}
\end{aligned}
$$

$\cancel{\delta S_i \delta S_j}$

ペアでの和

定数

と近似しよう。よってこの近似の下でのスピンあたりの自由エネルギー f_{eff} を以下のように定める。

$$e^{-\beta N f_{\mathrm{eff}}} = \mathrm{Tr} e^{-\beta H_{\mathrm{eff}}}$$

よって

$$f_{\mathrm{eff}} = -\frac{1}{\beta}\log(2\cosh\frac{\beta\mu B_{\mathrm{eff}}}{2}) + \frac{zJ}{2\mu^2}m^2$$

$\delta f_{\mathrm{eff}} = 0$ と（自由エネルギー最小に）なるように m を定めると

$$0 = \frac{\partial f_{\mathrm{eff}}}{\partial m} = \frac{\partial B_{\mathrm{eff}}}{\partial m}\frac{f_{\mathrm{eff}}}{\partial B_{\mathrm{eff}}} + \frac{zJ}{\mu^2}m$$
$$= -\frac{zJ}{\mu^2}\frac{\partial f_{\mathrm{eff}}}{\partial B_{\mathrm{eff}}} + \frac{zJ}{\mu^2}m$$

この条件は，H_{eff} に関して $m = \mu\langle S_i\rangle$ を定める $m = \frac{\partial f_{\mathrm{eff}}}{\partial B_{\mathrm{eff}}}$ に等しい。

$B = 0$ の時、　セルフコンシステントな条件

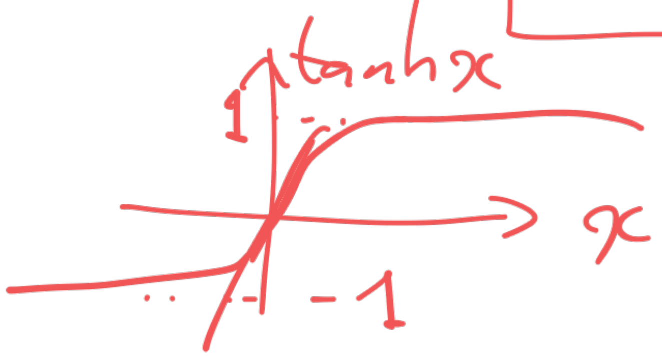
自発的

$$\boxed{m = \frac{\mu}{2}\tanh\frac{\beta Jz}{2\mu}m}$$

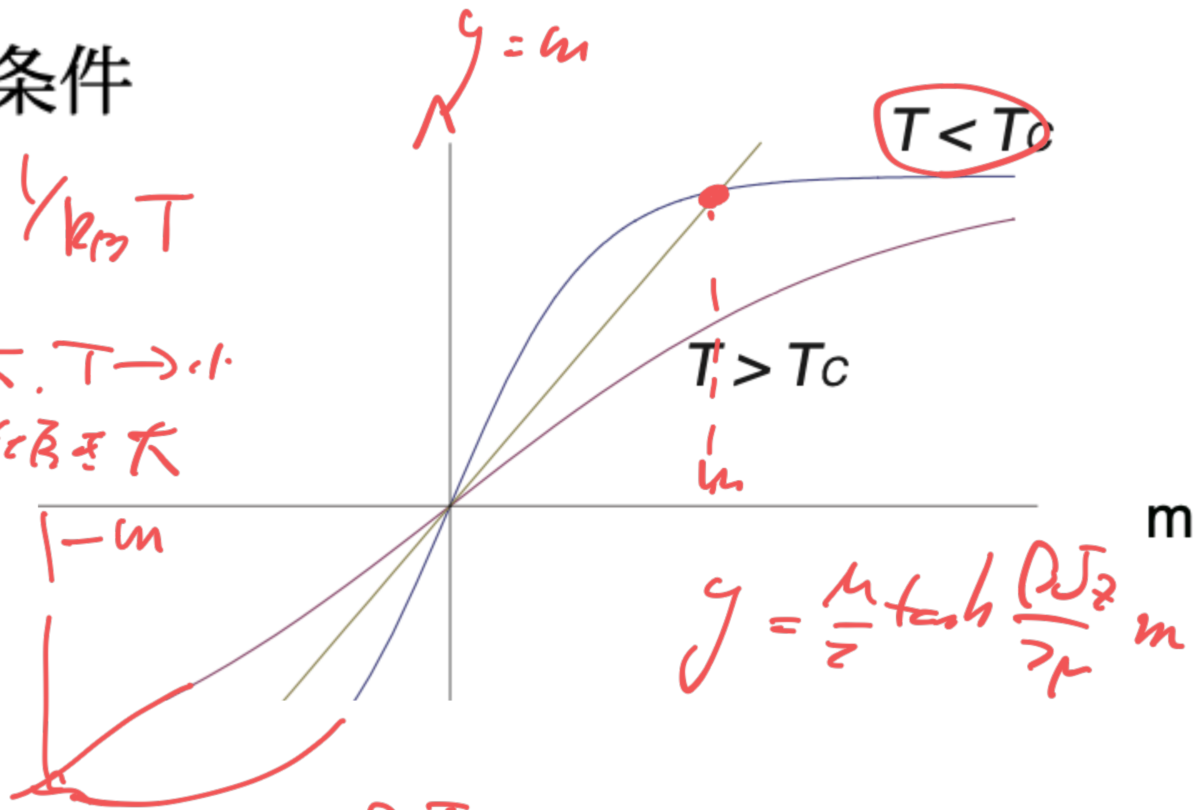
$\beta : 1/k_B T$

β 大, $T \to$ 小

傾き大



$$\frac{\mu}{2}\frac{\beta Jz}{2\mu} = \frac{\beta Jz}{4} \geq 1$$



であれば $m \neq 0$ の解を持つ。すなわち

$$\boxed{T < T_C}$$

$$\boxed{k_B T_C = \frac{Jz}{4}}$$

β

T_C

$\frac{\beta Jz}{4} = \frac{Jz}{4k_B T} = 1$

であれば非自明な磁化をもつこととなる。

ここでの磁化 m はこの相転移 (phase transition) を特徴的づけると考えられ、この相転移の秩序変数 (order parameter) とよばれる。

平均場近似内での取り扱いではあるが、これは高温相で系が持っていた

$$m \rightleftarrows -m$$

という対称性が低温相では存在しないことを示唆し、一般的観点からハミルトニアンの持つ対称性を秩序変数が持たないことを指す自発的対称性の破れ (Spontaneous symmetry breaking) とよばれる重要な概念の現れである。