

## 統計力学 II 演習問題 VI

### 1. (\*) スピン 1/2 のイジングモデル

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j - \sum_{i=1}^N \mu H S_i \quad (S_i = \pm 1/2, \langle i, j \rangle \text{ は最近接格子点の対, } \mu = -g\mu_B)$$

を、 $J > 0$  (強磁性的) の場合について平均場近似で取り扱い、以下の問に答えよ。ただし、最近接格子点の数を  $z$  とし、格子点の総数を  $N$  とする。

(a) まず、磁場のない場合 ( $H = 0$ ) を考える。

- i. 秩序パラメータ  $m = \langle S_i \rangle$  に対する自己無撞着方程式を導き、転移温度  $T_c$  を求めよ
- ii.  $T \simeq T_c$  および  $T \simeq 0$  での自発磁化  $M = \mu \langle \sum_i S_i \rangle$  の温度依存性を求め、全温度領域での  $M$  の温度依存性の概略を図示せよ。

(b) 次に、磁場  $H$  をかけた場合を考える。

- i. 自己無撞着方程式をたてよ。
- ii. 転移温度以上での帯磁率  $\chi$  を求め、温度依存性を図示せよ。
- iii.  $T = T_c$  で磁場が十分弱いとき、磁化  $M$  は磁場  $H$  にどのように依存するか。
- iv. ここまでの結果を考え合わせ、 $T < T_c$ 、 $T = T_c$ 、 $T > T_c$  それぞれの温度領域での磁化曲線の概略を一つの図の中に違いがよく分かるように図示せよ。

### 2. (\*) 1 の強磁性イジングモデルにおいて、磁場のない時、与えられた磁化のもとでの平均場近似での自由エネルギー $F(M, T)$ を考える。

- (a) エントロピー  $S$  を  $m = \langle S_i \rangle$  を用いて表せ。
- (b) エネルギー  $E$  を  $m$  を用いて表せ。
- (c) 自由エネルギー  $F = E - TS$  が  $m$  に関して最小になる条件を求め、これが 1(a) で求めた自己無撞着方程式に一致することを確かめよ。
- (d)  $T \simeq T_c$  および  $T \simeq 0$  での熱容量  $C$  の温度依存性を求め、全温度領域での  $C$  の温度依存性の概略を図示せよ。

### 3. 1 の強磁性イジングモデルのハミルトニアン ( $H = 0$ ) について

(a)

$$\mathcal{H} = -mzJ \sum_{i=1}^N S_i + \frac{zJm^2N}{2} - J \sum_{\langle i, j \rangle} (S_i - m)(S_j - m), \quad m = \langle S_i \rangle$$

と書き直せることを示せ。

- (b) 第3項は  $S_i$  の期待値  $m$  からの揺らぎを表す項である。これを無視したハミルトニアン、

$$\tilde{\mathcal{H}}^{\text{MF}} = -mzJ \sum_{i=1}^N S_i + \frac{zJm^2N}{2}$$

を用いて、自由エネルギー  $\tilde{F}^{\text{MF}}(m, T)$  を求めよ。

- (c)  $\tilde{F}^{\text{MF}}(m, T)$  が  $m$  に関して最小になる条件を求め、これが 1(a) で求めた自己無撞着方程式に一致することを確認せよ。

#### 4. 各サイトに異方性エネルギーがあるスピン1のイジングモデル

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + D \sum_{i=1}^N S_i^2 \quad (S_i = -1, 0, 1; \langle i, j \rangle \text{ は最近接格子点の対})$$

について

- (a) 基底状態の候補として (1) すべてのスピンの  $S_i = 1$  の場合 (強磁性状態) (2) すべての隣り合うスピンの向きが逆向きにそろっている場合 (反強磁性状態) (3) すべてのスピンの  $S_i = 0$  の場合のエネルギーを求めよ。また、基底状態ではこの3通りの状態のどれかが実現するとして、 $J$ - $D$  平面のどの領域でどの状態が実現するか (基底状態相図) 定めよ。
- (b) 基底状態が強磁性状態になる領域で、有限温度の振る舞いを平均場近似で取り扱い、転移温度を与える式を求めよ。
- (c) 基底状態が強磁性状態になる領域の内、 $D$  の小さい領域で転移温度が  $D$  とともにどう変わるか調べよ。
- #### 5. スピン $S$ の強磁性ハイゼンベルグモデル

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (\mathbf{S}_i \text{ は大きさ } S \text{ のスピン演算子}, J > 0, \langle i, j \rangle \text{ は最近接格子点の対})$$

を平均場近似で取り扱い、自己無撞着方程式を求め  $T_c$  を求めよ。 $\mathbf{m} = \langle \mathbf{S}_j \rangle$  とおき、 $\mathbf{m}$  の向きは任意なので  $\mathbf{m} = (0, 0, m)$  とおくとよい。

#### 6. 古典強磁性ハイゼンベルグモデル

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (\mathbf{S}_i \text{ は長さ } 1 \text{ のベクトル}, J > 0, \langle i, j \rangle \text{ は最近接格子点の対})$$

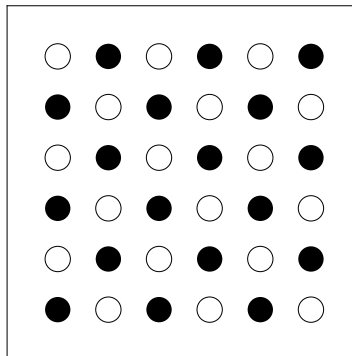
を平均場近似で取り扱い、次の問に答えよ。

- (a) 前問と同様に定義した秩序パラメータに対する自己無撞着方程式を導け。(平均場近似をした後の計算は、統計力学 I の V の 4、あるいは統計力学 の I の 7 の計算が参考になる)
- (b) 転移温度  $T_c$  を求めよ
- (c)  $T \simeq T_c$  および  $T \simeq 0$  での自発磁化  $M = \mu \langle \sum_i S_i \rangle$ , ( $\mu = -g\mu_B$ ) および熱容量  $C$  の温度依存性を求め、全温度領域での  $C$  と  $M$  の温度依存性の概略を図示せよ。

7. スピン 1/2 の反強磁性イジングモデル

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \mu H \sum_{i=1}^N S_i \quad (S_i = \pm 1/2, J > 0, \langle i, j \rangle \text{ は最近接格子点の対})$$

を考える。平均場近似で取り扱うために、格子全体を図のように二つの同等な副格子 A (黒丸) B (白丸) に分ける。ただし、副格子 A に属する格子点の最近接格子点は必ず副格子 B に属し、副格子 B に属する格子点の最近接格子点は必ず副格子 A に属するように分けられるとする。(このように分けることの出来ない場合は、この近似は使えない) また、 $M_A = \mu \sum_{i \in A} \langle S_i \rangle$ 、 $M_B = \mu \sum_{i \in B} \langle S_i \rangle$  をそれぞれの副格子の副格子磁化と呼ぶ。A 副格子のスピンと B 副格子のスピンは逆向きになるうとすることに注意し、次の問に答えよ。(このような秩序をネール秩序という)



- (a) 磁場  $H = 0$  のとき、各副格子のスピン期待値  $m_A = \langle S_i \rangle_{i \in A}$ 、 $m_B = \langle S_i \rangle_{i \in B}$  について自己無撞着方程式をたて、転移温度  $T_N$  (ネール温度) を求めよ。(副格子 A のスピンの作る平均場が副格子 B のスピンにかかり、副格子 B のスピンの作る平均場が副格子 A のスピンにかかることに注意せよ。また、対称性から  $m_A = -m_B \equiv m$  とおけることに注意して、 $m$  の満たす方程式を求めるとよい。)
- (b) ネール温度以上で、磁場  $H$  があるときの自己無撞着方程式をたて、帯磁率  $\chi$  を求めよ。
- (c) ネール温度以下で、磁場  $H$  があるときの自己無撞着方程式をたて、帯磁率  $\chi$

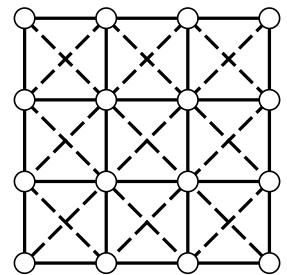
を求めよ。(外部磁場があるときは、ネール温度以下でも  $m_A \neq -m_B$  であることに注意せよ。磁化  $M$  は  $M_A + M_B$  で与えられる。) また、磁場のない時の副格子磁化  $m$  は  $\chi$  の式の中に含んでよい。

- (d)  $T \simeq T_c$  および  $T \rightarrow 0$  での帯磁率  $\chi$  の温度依存性を調べ、全温度領域で帯磁率の温度依存性の概略を図示せよ。(  $m$  の温度依存性は (a) で求めた自己無撞着方程式に従うことを利用せよ )

8. 右図に示すような2次元正方格子において、最近接相互作用  $J$  (実線) が強磁性、次近接相互作用  $J'$  (破線) が反強磁性のスピンの  $1/2$  イジングモデル

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + J' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} S_i S_j$$

( $J > 0, J' > 0, S_i = \pm 1/2$ )



を考える。  $\langle i, j \rangle$  は最近接格子点の対についての和、  $\langle\langle i, j \rangle\rangle$  は次近接格子点の対についての和を表す。

- (a)  $J = 0$  のとき、  $J' > 0$  で基底状態のスピンの配置はどのようになるか。格子の図を描いて各格子点上のスピンの向きを矢印で表せ。(以下、この状態をコリニア状態と呼ぶことにする)
- (b) 一般の  $J > 0, J' > 0$  の値に対し、基底状態の候補として強磁性状態とコリニア状態を考え、それぞれが基底状態となる  $\alpha \equiv J'/J$  の領域を求めよ。
- (c) 強磁性状態が基底状態となる領域で、平均場近似により転移温度  $T_c^F$  を求めよ。
- (d) コリニア状態が基底状態となる領域で、平均場近似により転移温度  $T_c^C$  を求めよ。
- (e)  $\alpha - T$  平面上に  $T_c^F$  と  $T_c^C$  を図示せよ。