1.4 平均場近似〜その１〜

相互作用がないと相転移はしないのだが、相互作用が入った途端に問題は解けなくなることが多い。そのため、最も直観的でシンプルな近似として平均場近似がある。これについて以下の節で詳しく調べる。どのような問題でも、「とりあえず平均場近似」をしてみるのは、研究の第一歩であるといっても過言ではない。（過言か？）

1.4.1 平均場近似の心

モデルとしてイジングモデルを用いよう。

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(i,j)} S_i^z \cdot S_j^z - g\mu_{\mathrm{B}} H \sum_i S_i^z \tag{1}$$

第 1 項が相互作用項であるが、i サイトのスピン S_i^z は近くの z 個のスピン S_j^z と相互作用している。S_j^z もスピン演算子であることが問題をむずかしくしているので、これを c 数の「期待値」に置き換えてしまおう、というのが平均場近似の考え方である。「平均場」とは、S_j^z を i サイトのまわりの平均的な「場」とみなすという意味である。

S_j^z の期待値 $\langle S_j^z \rangle$ をサイト j にも依存しないとして

$$\langle S_j^z \rangle = m \tag{2}$$

と置く。そうすると S_i^z にとっての有効ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\mathrm{eff}} &= -Jzm \sum_i S_i^z - g\mu_{\mathrm{B}} H \sum_i S_i^z \\
&= -(g\mu_{\mathrm{B}} H + Jzm) \sum_i S_i^z \\
&= -g\mu_{\mathrm{B}} H_{\mathrm{eff}} \sum_i S_i^z
\end{aligned} \tag{3}$$

と書ける。ここで

$$H_{\mathrm{eff}} = H + \frac{Jzm}{g\mu_{\mathrm{B}}} \tag{4}$$

であり、磁場 H が有効的な磁場 H_{eff} に置き換わったとみなすことができる。まわりの平均場が i サイトのスピンに対する有効的な磁場になっているのである。

1.4.2 自己無撞着方程式（self-consistency equation）

こうしてできた有効ハミルトニアン $\mathcal{H}_{\mathrm{eff}}$ は、前節で計算していた相互作用の（見かけ上）無いハミルトニアンと同じである。そのため、前節と同じ計算をして、磁場 H を有効磁場 H_{eff} に置き換えればよいだけである。とくに磁気モーメントの期待値は

$$\langle \hat{M}_z \rangle = \frac{g\mu_{\mathrm{B}}}{2} N \tanh \frac{g\mu_{\mathrm{B}} H_{\mathrm{eff}}}{2k_{\mathrm{B}} T} \tag{5}$$

である。

一方、左辺は $\hat{M}_z = g\mu_{\mathrm{B}} \sum_i S_i^z$ の定義から、今の場合

$$\langle \hat{M}_z \rangle = g\mu_{\mathrm{B}} \sum_i \langle S_i^z \rangle = g\mu_{\mathrm{B}} N m \tag{6}$$

となっているはずである。H_{eff} の式を代入すると、結局上の式は

$$m = \frac{1}{2}\tanh\frac{g\mu_{\mathrm{B}}H + Jzm}{2k_{\mathrm{B}}T} \tag{7}$$

となる。平均場 m というのは、われわれが勝手に仮定したもので、どのような値であるかは決まっていなかった。実はこの式の両辺に m が含まれていて、m はこの式を矛盾なく満たすように決めればよいのである。このため、上式のことを自己無撞着方程式（自分で矛盾を生じないための方程式）と呼ぶ。

以下磁場 H が 0 の場合を考えよう。この場合、自己無撞着方程式は、

$$m = \frac{1}{2}\tanh\frac{Jzm}{2k_{\mathrm{B}}T} \tag{8}$$

となる。これは超越方程式なのであるが、m を x 軸とするグラフによって大体の解の振舞いは理解できる。高温では tanh の関数は m の関数として横になった関数なので、m の解は $m = 0$ しか存在しない。しかし低温では tanh の関数は $m = 0$ 付近で急に変化しているので、方程式の解は 3 つあることが分かる。この解の温度依存性を示したのが図である。ある温度を境に、解が 1 つから 3 つになっていることがわかる。これを解の分岐 (bifurcation) といったりする。

解が分岐する点（今の場合は温度）が、特異点となっている。ここが相転移温度となる。このように、単純な平均場近似によって非自明な相転移現象が理解できることがわかった。

次節で調べるように、自由エネルギーの大小を比べるとわかるが、低温での $m = 0$ の解は不安定解である。したがって、低温では $m = +m_0(T)$ の解と $m = -m_0(T)$ の解の 2 つが存在することになる。磁場がかかっていなくても、自発的に磁気モーメントの期待値 $\langle \hat{M}_z\rangle = g\mu_{\mathrm{B}}\sum_i \langle S_i^z\rangle$ が発生したといえる。これが第 1 節で説明した「自発的対称性の破れ」の１例である。

1.4.3 転移温度と臨界現象

自己無撞着方程式からいくつかのことがわかる。まず転移温度であるが、これは図から、tanh の $m = 0$ での傾きが 1 になったときである。この傾きは $Jz/4k_{\mathrm{B}}T$ であるから、これが 1 となるのは、

$$T_{\mathrm{c}} = \frac{Jz}{4k_{\mathrm{B}}} \tag{9}$$

である。転移温度における、特徴的な熱エネルギーは

$$k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}} = \frac{Jz}{4} \tag{10}$$

である。相互作用の強さ J が大きければ転移温度 T_{c} は高くなる。また、サイト i のまわりのサイト数 z が大きくても転移温度は高くなる。たとえば、1 次元系では $z = 2$ なので、$k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}} = J/2$、2 次元正方格子では $z = 4$ なので、$k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}} = J$、3 次元の立法格子では $k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}} = 3J/2$ などとなる。まわりの数が多いと、まわりに迎合しやすくなって一斉に対称性を破るという転移温度が高くなるのである。

逆に低温の極限では、tanh の $m = 0$ での傾きはどんどん大きくなるので、解 m_0 は $1/2$ に近づくことがわかる。これは低温の極限で、すべてのスピンが上向き (m_0) になるか、すべてのスピンが下向き ($-m_0$) になるかどちらかとなることを示している。これがいわゆる強磁性状態である。鉄とかニッケルの室温の状態はほぼこれである。

もう１つ特徴的な振舞いは転移温度近傍での $m_0(T)$ の振舞いである。$T \sim T_{\mathrm{c}}$ では、$m_0(T)$ はまだ小さい値なので、自己無撞着方程式を m が小さいとして解いてみよう。tanh のテイラー展開 $\tanh x = x - x^3/3 + \cdots$ を用いると、自己無撞着方程式は

$$m = \frac{1}{2}\left\{\frac{Jzm}{2k_{\mathrm{B}}T} - \frac{1}{3}\left(\frac{Jzm}{2k_{\mathrm{B}}T}\right)^3 + \cdots\right\} \tag{11}$$

となる。このままだと多少複雑だが、$k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}} = Jz/4$ を用いて整理すると

$$m = \frac{mT_{\mathrm{c}}}{T} - \frac{4}{3}\left(\frac{mT_{\mathrm{c}}}{T}\right)^3 + \cdots \tag{12}$$

m が十分小さいとき、$T > T_{\mathrm{c}}$ なら解は $m = 0$ だけだが、$T < T_{\mathrm{c}}$ では、

$$m_0(T) = \sqrt{\frac{3}{4}\frac{T^2(T_{\mathrm{c}} - T)}{T_{\mathrm{c}}^3}} \sim \sqrt{\frac{3}{4}\frac{(T_{\mathrm{c}} - T)}{T_{\mathrm{c}}}} \tag{13}$$

つまり、$m_0(T)$ はルートで立ち上がっているのである。これは平均場近似の特徴である。