1.5　平均場近似〜その２〜

1.5.1　Hamiltonian を用いた平均場近似

前章と同じように、モデルとしてイジングモデルを用いよう。

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

この式で S_i^z が演算子であるが、これを恒等式

$$S_i^z = m + (S_i^z - m) \tag{2}$$

を用いて書き換える。予想されるように、c 数 m は前章で出てきた平均場と同じものになる。

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= -J\sum_{(i,j)}\{m+(S_i^z-m)\}\left\{m+(S_j^z-m)\right\} - g\mu_{\mathrm{B}}H\sum_i\{m+(S_i^z-m)\}\\ &= -J\sum_{(i,j)}\Big[m^2+m(S_i^z-m)+m(S_j^z-m)+(S_i^z-m)(S_j^z-m)\Big] - g\mu_{\mathrm{B}}H\sum_i\{m+(S_i^z-m)\}\end{aligned} \tag{3}$$

さて、平均場近似は、最後の式の $(S_i^z-m)(S_j^z-m)$ を無視することに対応する。m が演算子 S_i^z の平均値（期待値）のようなものだと考えるので、(S_i^z-m) は平均値からのずれ、$(S_i^z-m)(S_j^z-m)$ は平均値の周りの「揺らぎ」に相当する（標準偏差として統計学で習ったもの）。揺らぎが小さいと仮定して、この揺らぎの項を落としてしまおうというのが、平均場近似である。（後で、結果として揺らぎが本当に小さかったかどうかを検証する必要はある。）

この近似を認めてしまえば、近似による「平均場の Hamiltonian」は

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\mathrm{MF}} &= -J\sum_{(i,j)}\Big[m^2+m(S_i^z-m)+m(S_j^z-m)\Big] - g\mu_{\mathrm{B}}H\sum_i\{m+(S_i^z-m)\}\\ &= -J\sum_{(i,j)}\Big[-m^2+mS_i^z+mS_j^z\Big] - g\mu_{\mathrm{B}}H\sum_i S_i^z\end{aligned} \tag{4}$$

となる。（磁場の項は結局変更を受けていない。これは (S_i^z-m) のような 1 次のものしか現れなかったからである）この式をよく見ると、$\sum_{(i,j)} mS_i^z$ の j についての和や、$\sum_{(i,j)} mS_j^z$ の i についての和が無駄であることがわかる。この和を取るためには、「ボンド (i,j)」の和を少し書き換えて

$$\sum_{(i,j)} = \frac{1}{2}\sum_i^{[\text{すべてのサイト}]}\ \sum_{[j\text{ は }i\text{ の隣のサイトのみ}]} = \frac{1}{2}\sum_j^{[\text{すべてのサイト}]}\ \sum_{[i\text{ は }j\text{ の隣のサイトのみ}]} \tag{5}$$

というものを考えればよい。そうすると $\sum_{(i,j)} mS_i^z$ の j についての和はとれてしまって、単に z 倍ということになる。結局

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\mathrm{MF}} &= \frac{J}{2}Nzm^2 - \frac{J}{2}z\sum_i mS_i^z - \frac{J}{2}z\sum_j mS_j^z - g\mu_{\mathrm{B}}H\sum_i S_i^z\\ &= \frac{J}{2}Nzm^2 - (Jzm+g\mu_{\mathrm{B}}H)\sum_i S_i^z\end{aligned} \tag{6}$$

（添え字の MF は平均場 (mean-field) の省略形である。）

これが Hamiltonian による平均場近似の重要な式である。第 1 項は演算子を含まないが、以下の議論では重要な意味を持つ項である。第 2 項は、磁場と同じ形でかけているので、$(Jzm+g\mu_{\mathrm{B}}H)$ を

$g\mu_{\rm B}H_{\rm eff}$ と書けば、$H_{\rm eff}$ が実効的な磁場ということになる。このように変形すれば、$\mathcal{H}_{\rm MF}$ は解ける形となり、前章と全く同じように分配関数などが計算できる。第1項に注意すると、

$$Z_{\rm MF} = e^{-\beta\frac{J}{2}Nzm^2}\left(2\cosh\frac{Jzm+g\mu_{\rm B}H}{2k_{\rm B}T}\right)^N \tag{7}$$

$$F_{\rm MF} = \frac{J}{2}Nzm^2 - k_{\rm B}TN\ln\left(2\cosh\frac{Jzm+g\mu_{\rm B}H}{2k_{\rm B}T}\right) \tag{8}$$

最後に、$F_{\rm MF}$ の中にはまだ決めていない変数 m が残っている。これを決めるには、$\partial F_{\rm MF}/\partial m = 0$ として m について最小となるように m を決めればよいことにする。（これは量子力学でいう変分法に対応する。詳しくは別に）この変分を行うと、

$$\frac{\partial F_{\rm MF}}{\partial m} = JNzm - \frac{JzN}{2}\tanh\frac{Jzm+g\mu_{\rm B}H}{2k_{\rm B}T} = 0 \tag{9}$$

結局、前章の自己無撞着方程式

$$m = \frac{1}{2}\tanh\frac{Jzm+g\mu_{\rm B}H}{2k_{\rm B}T} \tag{10}$$

と全く同じものが得られる。これを m について解けば、自己無撞着な解が得られる。

1.5.2 有限磁場の場合の平均場近似の解：　【レポート問題２】締切 12 月 15 日

有限磁場の場合に、自己無撞着方程式の解が温度 T の関数としてどのように振舞うか、大体の形を求めよ。磁場 0 の場合を書いて、磁場が小さいときに、解がどのようにずれるかを考えてグラフにすればよい。

1.5.3 平均場近似での内部エネルギー、エントロピー、比熱

以下磁場 H が 0 の場合を考えよう。この場合の自己無撞着方程式の解 $m_0(T)$ は前章で議論した。得られた m を $F_{\rm MF}$ に代入すれば、平均場近似における自由エネルギーが得られる。

まず $H=0$ で $T>T_{\rm c}$ の場合を考える。このとき自己無撞着方程式の解は $m=0$ であるから、自由エネルギーは単純で

$$F_{\rm MF} = -k_{\rm B}TN\ln 2 \tag{11}$$

となる。エントロピーなどは熱力学の関係式から得られて、

$$\begin{aligned} S_{\rm MF} &= -\frac{\partial F_{\rm MF}}{\partial T} = k_{\rm B}N\ln 2 \\ U_{\rm MF} &= F + TS = 0 \\ C_{\rm MF} &= 0 \end{aligned} \tag{12}$$

となる。

次に $H=0$ で $T<T_{\rm c}$ の場合には、自己無撞着方程式の解として $m_0(T)=0$ を $F_{\rm MF}$ に代入する。そうすると自己エネルギーは $F_{\rm MF}(m_0(T),T)$ という関数ということになる。これを温度で微分するときは、T そのものの偏微分とともに、$m_0(T)$ を通しての微分も考慮しないといけない。これに注意すると

$$\begin{aligned} S_{\rm MF} &= -\frac{\partial F_{\rm MF}}{\partial T} \\ &= k_{\rm B}N\ln\left(2\cosh\frac{Jzm_0(T)}{2k_{\rm B}T}\right) - \frac{JzNm_0(T)}{2T}\tanh\frac{Jzm_0(T)}{2k_{\rm B}T} + \left.\frac{\partial F_{\rm MF}}{\partial m}\right|_{m=m_0(T)} \times \frac{dm_0}{dT} \end{aligned} \tag{13}$$

となる。第 3 項の $\frac{\partial F_{\mathrm{MF}}}{\partial m}\Big|_{m=m_0(T)}$ の部分は $m_0(T)$ を決める式そのものなので、 0 となる。このエントロピーを用いれば、内部エネルギーは

$$U_{\mathrm{MF}} = \frac{J}{2}Nzm_0(T)^2 - \frac{JzNm_0(T)}{2}\tanh\frac{Jzm_0(T)}{2k_{\mathrm{B}}T} \tag{14}$$

さらに、自己無撞着方程式を第 2 項に用いれば

$$U_{\mathrm{MF}} = \frac{J}{2}Nzm_0(T)^2 - JzNm_0^2(T)2 = -\frac{J}{2}Nzm_0(T)^2 \tag{15}$$

という簡潔な形となる。比熱は

$$C_{\mathrm{MF}} = -JNzm_0(T)\frac{dm_0}{dT} \tag{16}$$

以上は一般式だったが、前章で求めた T が T_{c} の近傍（$T < T_{\mathrm{c}}$）での $m_0(T)$ の形

$$m_0(T) \sim \sqrt{\frac{3}{4}\frac{(T_{\mathrm{c}}-T)}{T_{\mathrm{c}}}} \tag{17}$$

を用いると、T が T_{c} のすぐ下では

$$\begin{aligned} S_{\mathrm{MF}} &= k_{\mathrm{B}}N\ln 2 - \frac{3}{2}k_{\mathrm{B}}N\frac{T_{\mathrm{c}}-T}{T_{\mathrm{c}}} \\ U_{\mathrm{MF}} &= -\frac{3}{8}JzN\frac{T_{\mathrm{c}}-T}{T_{\mathrm{c}}} = -\frac{3}{2}Nk_{\mathrm{B}}(T_{\mathrm{c}}-T) \\ C_{\mathrm{MF}} &= \frac{3JzN}{8T_{\mathrm{c}}} = \frac{3}{2}Nk_{\mathrm{B}} \end{aligned} \tag{18}$$

これらの関数系を図に描くと以下のようになる。（図省略）

1.5.4 平均場近似での帯磁率

磁場が有限のときはレポート課題であるが、磁場が非常に小さい場合の 1 次近似の場合をここでは考える。磁場のある場合の自己無撞着方程式

$$m = \frac{1}{2}\tanh\frac{Jzm + g\mu_{\mathrm{B}}H}{2k_{\mathrm{B}}T} \tag{19}$$

を解かなければならないが、磁場 H が小さいときに解析的に解いてみよう。

まず $T > T_{\mathrm{c}}$ の場合には、磁場 0 で $m = 0$ なので、磁場の 1 次の範囲でも m は小さいと考えられる。そこで $m = \delta m$ とおいて、磁場 H および δm が小さいとして自己無撞着方程式をテイラー展開して解を求める。$\tanh x = x - x^3/3 + \cdots$ というのを用いれば

$$\delta m = \frac{Jz\delta m + g\mu_{\mathrm{B}}H}{4k_{\mathrm{B}}T} \tag{20}$$

この式から δm を求めれば、

$$\delta m = \frac{\frac{g\mu_{\mathrm{B}}H}{4k_{\mathrm{B}}T}}{1-\frac{Jz}{4k_{\mathrm{B}}T}} = \frac{\frac{g\mu_{\mathrm{B}}H}{4k_{\mathrm{B}}}}{T-T_{\mathrm{c}}} \tag{21}$$

と求まる。系の全磁化は

$$\langle M\rangle = g\mu_{\mathrm{B}}N\langle m\rangle = g\mu_{\mathrm{B}}N\delta m = \frac{g^2\mu_{\mathrm{B}}^2HN}{4k_{\mathrm{B}}}\frac{1}{T-T_{\mathrm{c}}} \tag{22}$$

帯磁率は

$$\chi = \frac{\partial\langle M\rangle}{\partial H}\bigg|_{H\to 0} = \frac{g^2\mu_{\mathrm{B}}^2N}{4k_{\mathrm{B}}}\frac{1}{T-T_{\mathrm{c}}} \tag{23}$$

帯磁率はTがT_cに近づくにつれて$1/(T-T_\mathrm{c})$という形で発散する。

次に$T<T_\mathrm{c}$の場合には、磁場0で$m=m_0(T)$なので、磁場の1次の範囲での補正を含めると、$m(T,H)=m_0(T)+\delta m$となっていることがわかる。これを自己無撞着方程式に代入する。δmの0次の項は、$m_0(T)$を決める式そのものなので、自動的に成立する。δmの1次の項は

$$\begin{aligned}\delta m &= \frac{1}{2\cosh^2\frac{Jzm_0(T)}{2k_\mathrm{B}T}}\left(\frac{Jz\delta m+g\mu_\mathrm{B}H}{2k_\mathrm{B}T}\right)\\ &= \frac{1}{2}\left(1-\tanh^2\frac{Jzm_0(T)}{2k_\mathrm{B}T}\right)\left(\frac{Jz\delta m+g\mu_\mathrm{B}H}{2k_\mathrm{B}T}\right)\\ &= \frac{1}{2}\left(1-4m_0^2(T)\right)\left(\frac{Jz\delta m+g\mu_\mathrm{B}H}{2k_\mathrm{B}T}\right) \qquad (24)\end{aligned}$$

となる。この式をδmについて解いて、さらにT_c近傍での$m_0(T)$の形を代入すると

$$\begin{aligned}\delta m &= \frac{\frac{g\mu_\mathrm{B}H}{4k_\mathrm{B}T}(1-4m_0^2(T))}{1-\frac{Jz}{4k_\mathrm{B}T}(1-4m_0^2(T))}\\ &\sim \frac{\frac{g\mu_\mathrm{B}H}{4k_\mathrm{B}T}(1-3\frac{T_\mathrm{c}-T}{T_\mathrm{c}})}{1-\frac{T_\mathrm{c}}{T}(1-3\frac{T_\mathrm{c}-T}{T_\mathrm{c}})}\\ &\sim \frac{\frac{g\mu_\mathrm{B}H}{4k_\mathrm{B}}}{2(T_\mathrm{c}-T)} \qquad (25)\end{aligned}$$

これを用いると系の帯磁率は

$$\chi=\frac{g^2\mu_\mathrm{B}^2N}{4k_\mathrm{B}}\frac{1}{2(T_\mathrm{c}-T)} \qquad (26)$$

と求まる。$T>T_\mathrm{c}$の場合と同じように発散するが、係数が異なっている。まとめて書けば$\chi\propto 1/|T-T_\mathrm{c}|$と書ける。

最後に温度がちょうど転移温度の場合を考える。このときは$tanhx$のテイラー展開の3次までが必要になる。$m_0(T_\mathrm{c})=0$なので、mは小さいとして$m=\delta m$とおくと

$$\delta m=\frac{1}{2}\tanh\frac{Jz\delta m+g\mu_\mathrm{B}H}{2k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}}\sim\frac{1}{2}\left(\frac{Jz\delta m+g\mu_\mathrm{B}H}{2k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}}\right)-\frac{1}{6}\left(\frac{Jz\delta m+g\mu_\mathrm{B}H}{2k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}}\right)^3 \qquad (27)$$

$k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}=Jz/4$を代入して整理すると、$\delta m$の1次はちょうど消えて、

$$\frac{g\mu_\mathrm{B}H}{4k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}}=\frac{1}{6}\left(\frac{Jz\delta m}{2k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}}\right)^3=\frac{4}{3}(\delta m)^3 \qquad (28)$$

したがって

$$\delta m=\left(\frac{3}{16}\frac{g\mu_\mathrm{B}H}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{c}}\right)^{1/3} \qquad (29)$$

が得られ、磁化は$H^{1/3}$に比例するという結果となる。