# 熱統計力学演習 II

## 3 相転移 II

### 3.1 1 次元 Ising モデル (ゼロ磁場)

これまで考えてきた平均場近似では、周りの原子からの有効場をその平均値で置き換えた。この近似は、隣接原子数が多いほどよい近似になると考えられる。低次元系においては隣接原子数が少なく、この近似を正当化することはできない。ここでは、1 次元 Ising モデル

$$H = -J \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (J > 0) \tag{3.1}$$

の熱力学関数を厳密に導出することを考えよう。ただし、以前と同様に $\sigma_i$ は $\pm 1$ の値をとる変数であり、ここでは両端のスピン $\sigma_1$、$\sigma_{N+1}$ がつながっていない自由境界条件とする。

(a) リンク変数 $L_i = \sigma_i \sigma_{i+1} = \pm 1$ を導入することによって、分配関数 $Z$ を導出せよ。さらに、$N \gg 1$ として、自由エネルギー $F/N$ を求めよ。

(b) エントロピー $S$、および、比熱 $C$ を求め、その振る舞いについて考察せよ。

(c) スピン相関

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = \frac{\displaystyle\sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \sigma_i \sigma_{i+r} \mathrm{e}^{-\beta H}}{Z} \tag{3.2}$$

を計算し、$\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle \simeq \mathrm{e}^{-r/\xi}$ として、相関長 $\xi$ を求めよ。
(ヒント：右辺をリンク変数で表してみよ。)

## 3.2　1次元 Ising モデル (有限磁場) I

有限磁場 $h \neq 0$ 下での 1 次元 Ising モデルを考えよう。ハミルトニアンは

$$H = -\sum_{i=1}^{N}\bigl(J\sigma_i\sigma_{i+1} + h\sigma_i\bigr) \quad (J > 0) \tag{3.3}$$

である。ここでは、周期境界条件 $(\sigma_1 = \sigma_{N+1})$ で考える。

(a) 行列要素が

$$\langle\sigma_i|P|\sigma_{i+1}\rangle = \exp\left[\frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}\left(J\sigma_i\sigma_{i+1} + h\frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2}\right)\right]$$

で与えられるような $2\times 2$ 行列 $P$(転送行列とよばれる) を導入する。分配関数 $Z$ が、$Z = \mathrm{Tr}P^N$ と表せることを示し、$Z$ を計算せよ。

(b) $N \gg 1$ として、自由エネルギー $F/N$ を求めよ。また、$h = 0$ のとき、得られた結果を前問 (自由境界条件) の結果と比較せよ。

## 3.3　1次元 Ising モデル (有限磁場) II

前問におけるハミルトニアン (3.3) の磁化率を計算しよう。

(a) 磁化 $m = \dfrac{1}{N}\displaystyle\sum_{i=1}^{N}\langle\sigma_i\rangle$ が、自由エネルギー $F$ の微分として $m = -\dfrac{\partial(F/N)}{\partial h}$ のように表されることを示せ。ここに前問で得られた $F$ を代入し、$m$ を計算せよ。$h \to 0$ のとき、得られた結果を平均場近似の場合と比較して考察せよ。

(b) 磁化率 $\chi = \mu_B \left.\dfrac{\partial m}{\partial h}\right|_{h\to 0}$ を求めよ。