熱統計力学演習 II

4　相転移 III

4.1　Landau 理論：2 次相転移

以前扱った強磁性 Ising モデル ($J > 0$) の平均場ハミルトニアン

$$H_{\mathrm{MF}} = -Jzm\sum_{i=1}^{N}\sigma_i + \frac{N}{2}Jzm^2 \tag{4.1}$$

において、その転移点近傍の振る舞いについて考えよう。

(a) スピン 1 個あたりの自由エネルギー $f(m) \equiv F(m)/N$ を、秩序パラメータ m の絶対値が小さいとして m の 4 次までで展開し、同時に $T \approx T_{\mathrm{c}}$ を仮定して、$f(m) = f_0 + a_0(T - T_{\mathrm{c}})m^2 + bm^4$ の形に表せることを示せ。ただし、T_{c} は転移温度、$f_0 = -k_{\mathrm{B}}T\ln 2$ であり、a_0 と b は温度 T によらない正の定数である。ここで得られた展開式で、m の奇数次が現れない理由を考えてみよ。

(b) $f(m) - f_0$ を m の関数としてグラフに描くと、その概形は温度に応じてどう変わるか。このとき、平衡状態での m の値 m_{s} はどうなるか。

(c) 転移点前後でのエントロピーと比熱を計算し、転移点においてエントロピーにはとびがないが、比熱には有限のとびが存在することを示せ。

(d) 微小磁場 $h(> 0)$ を考え、上記自由エネルギー $f(m)$ に項 $-hm$ を加えることによって、T_{c} 前後での磁化率 (感受率)χ を求めよ。

4.2　Landau 理論：1 次相転移

前問では、強磁性 Ising モデルの平均場近似を念頭に、秩序パラメータ m の 4 次までを考慮した自由エネルギーに基いて、2 次相転移 (相転移に

ともなう潜熱の発生がない) を議論した。しかし、状況によっては、m の 4 次の係数が負になる場合もある。ここでは、6 次までの展開を考慮した

$$f(m) = f_0 + a_0(T - T_\mathrm{c})m^2 - bm^4 + cm^6$$

の形の自由エネルギーが記述する相転移について考えよう。ただし、f_0 は温度 T のなめらかな関数であり、a_0、b、c はいずれも温度によらない正の定数であるとする。これは 1 次相転移の例である。

(a) $f(m) - f_0$ を m の関数としてグラフに描き、その概形が温度とともにどのように変化するかを説明せよ。特に、ある温度 T^*（1 次転移点とよばれる）を境に、平衡状態での秩序パラメータの値が有限のとびを伴って変化することを示せ。また、T_c はどのような温度を意味するか。

(b) $T = T^*$ におけるエントロピーのとびを求めよ。

4.3 臨界現象

転移点 ($T = T_\mathrm{c}$) 近傍における比熱、秩序変数、感受率の温度依存性をそれぞれ

$$C \propto |T - T_\mathrm{c}|^{-\alpha} \tag{4.2a}$$

$$m \propto (T_\mathrm{c} - T)^{\beta} \quad (T < T_\mathrm{c}) \tag{4.2b}$$

$$\chi \propto |T - T_\mathrm{c}|^{-\gamma} \tag{4.2c}$$

と表し、また、転移点における秩序パラメータの外場 (h) 依存性を

$$m \propto h^{1/\delta} \tag{4.3}$$

とするとき、正の数 α、β、γ、δ を臨界指数という。臨界指数は、臨界現象を特徴づける基本的な量であり、物理現象としては異なっていても臨界指数が同じであれば、相転移の性質の本質的な部分は同じである。これを臨界現象のユニバーサリティという。

(a) 問題 4.1 で扱った 2 次転移の平均場近似における臨界指数を求めよ。

(b) 問題 4.2 で $b = 0$ とした場合の転移点は 3 重臨界点と呼ばれ、いつもの 2 次転移とは異なる特徴を示す。この場合について、m、C、χ それぞれの温度依存性を求めよ。さらに、$T = T_\mathrm{c}$ における m と h の間の関係式を計算せよ。これらの結果から、3 重臨界点における臨界指数を求めよ。

(c) 上記 2 つの場合 (a),(b) について、スケーリング関係式

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \qquad \gamma = \beta(\delta - 1) \tag{4.4}$$

が成り立っていることを確かめよ。

4.4 Ginzburg-Landau 自由エネルギー

Landau 理論では秩序パラメータの空間的に一様な揺らぎについて考察したが、ここでは、それがゆるやかに空間変化する場合を考えよう。その最も簡単な形は、以下の GL 自由エネルギーで与えられる。

$$F = \int d\boldsymbol{r} \left\{ am(\boldsymbol{r})^2 + bm(\boldsymbol{r})^4 + c|\nabla m(\boldsymbol{r})|^2 \right\} \tag{4.5}$$

ここで、秩序パラメータ $m(\boldsymbol{r})$ を

$$m(\boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{k}} m_{\boldsymbol{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{4.6}$$

のようにフーリエ展開するとき、上記自由エネルギーはどのように書かれるか？また、十分高温では 4 次項を無視することができる。このとき、相関関数 $G(\boldsymbol{r}) = \langle m(\boldsymbol{r}) m(\boldsymbol{0}) \rangle$ の距離 r 依存性を計算せよ。

4.5 1 次元 Ising モデルの繰り込み変換

再び、1 次元強磁性イジング模型

$$\beta H = -K_0 \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (K_0 = \beta J > 0) \tag{4.7}$$

について考える。その分配関数

$$Z = \sum_{\sigma_0, \sigma_1, \cdots = \pm} \exp\left\{ K_0 (\sigma_0\sigma_1 + \sigma_1\sigma_2 + \cdots) \right\} \tag{4.8}$$

を求めるに当たって、まず偶数番目のスピンについて和を取ることで、

$$Z = \sum_{\sigma_1, \sigma_3, \cdots = \pm} A \exp\left\{K_1(\sigma_1\sigma_3 + \sigma_3\sigma_5 + \cdots)\right\} \quad (A : 定数) \tag{4.9}$$

と表されることを示し、K_0 と K_1 の関係を求めよ。この操作を繰り返す事で、残ったスピンの数は半減し、それに伴い相互作用パラメータは $K_0 \to K_1 \to K_2 \to \cdots$ のように変化する。この粗視化の手続きを無限に繰り返す時、パラメータがどのように変化していくかを図に示して説明せよ。得られる２つの固定点はどのような状態に対応するか？