統計力学演習　第 8 回　イジング模型 (2)

2011 年 6 月 14 日

$\boxed{\text{問題 1}}$　[イジング模型]

N 個の磁性原子からなる磁性体を考える。各磁性原子は上向きスピン $(s = 1)$、下向きスピン $(s = -1)$ の 2 状態をとるとし、その磁気モーメントを μ とする。磁性体には磁場 H がかかっていて、各原子は $-s\mu H$ のエネルギーを持つとする。

第 5 回で取り扱ったこの磁性体のモデルに、相互作用の効果を取り入れる。最近接のスピン同士で相互作用し、スピンが互いに同じ向きのときは $-J$、反対向きのときは $+J$ の相互作用エネルギーを持つとする。これは強磁性磁石を記述する最も単純な模型となっており、イジング模型と呼ばれる。

系の状態は N 個のスピンの向き $s_1 = \pm 1, s_2 = \pm 1, \cdots, s_N = \pm 1$ で指定され、全状態数は 2^N である。スピン配置が $(s_1, s_2, \cdots, s_N)$ のときの磁性体の全エネルギーは

$$E(s_1, s_2, \cdots, s_N) = -J \sum_{<j,k>} s_j s_k - \mu H \sum_{j=1}^{N} s_j \tag{1}$$

と書ける。ここで、$\sum_{<j,k>}$ は、最近接のスピンの組全てにわたる和を表す。この磁性体の分配関数 Z は、2^N 個の全ての状態に対してボルツマン重率 $e^{-\beta E}$ を足したものである：

$$Z = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} e^{-\beta E(s_1, s_2, \cdots, s_N)} \tag{2}$$

(1-1) 相互作用のない場合 $(J = 0)$ には、原子ひとつの分配関数を z として、$Z = z^N$ となることを示せ。

以下、リング上に磁性原子が配列している場合を考える（周期境界条件を課した 1 次元イジング模型)。このとき、全エネルギーは以下で与えられる：

$$E(s_1, s_2, \cdots, s_N) = -J(s_1 s_2 + s_2 s_3 + \cdots + s_{N-1} s_N + s_N s_1) - \mu H(s_1 + s_2 + \cdots + s_N). \tag{3}$$

(1-2) $M_{s,s'} = e^{\beta J s s' + \beta\mu H(s+s')/2}$ とすると、分配関数 Z は

$$Z = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} M_{s_1,s_2} M_{s_2,s_3} \cdots M_{s_{N-1},s_N} M_{s_N,s_1} \tag{4}$$

と書けることを示せ。

(1-3) s 行 s' 列成分が $M_{s,s'}$ で与えられる行列を M とする。具体的に行列表示すると、

$$M = \begin{pmatrix} M_{+1,+1} & M_{+1,-1} \\ M_{-1,+1} & M_{-1,-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\beta J+\beta\mu H} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J-\beta\mu H} \end{pmatrix} \tag{5}$$

となる。この行列 M を使って、分配関数は $Z = \mathrm{tr} M^N$ と書けることを示せ。

(1-4) 行列 M の固有値が下の式で与えられることを示せ。

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J}\left(\cosh\beta\mu H \pm \sqrt{\sinh^2\beta\mu H + e^{-4\beta J}}\right) \tag{6}$$

(1-5) 分配関数 Z を計算せよ。

(1-6) 公式 $F = -\dfrac{1}{\beta}\log Z$ により、ヘルムホルツの自由エネルギー F を計算せよ。ただし、原子数 N は十分大きいとして、$\lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N\left\{1 + (\lambda_-/\lambda_+)^N\right\} \sim \lambda_+^N$ としてよい。

(1-7) 「どのくらい磁石になっているか」を表す物理量として、磁化 M を $M = \left\langle \mu\sum_{j=1}^{N} s_j \right\rangle$ で定義する。状態 $(s_1, s_2, \cdots, s_N)$ をとる確率が $p(s_1, s_2, \cdots, s_N) = (1/Z)e^{-\beta E(s_1,s_2,\cdots,s_N)}$ であることに注意して、以下を示せ。

$$M = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial H}\log Z = -\frac{\partial F}{\partial H} \tag{7}$$

(1-8) 上の式に従って磁化 M を計算し、以下を示せ。

$$M = N\mu\frac{\sinh\beta\mu H}{\sqrt{\sinh^2\beta\mu H + e^{-4\beta J}}} \tag{8}$$

(1-9) (a) 絶対零度, (b) 有限温度, (c) 温度無限大のそれぞれにおいて、縦軸：磁化 M、横軸：磁場 H のグラフの概形を描け。

(1-10) 「どのくらい磁石になりやすいか」を表す物理量として、磁化率 (帯磁率)χ を

$$\chi = \left.\frac{\partial M}{\partial H}\right|_{H=0} \tag{9}$$

で定義する。これを計算し、$\chi = N\mu^2\beta e^{2\beta J}$ を示せ。

(1-11) 縦軸：磁化率 χ, 横軸：温度 T のグラフの概形を描け。

(1-12) 温度 T が J/k_B よりも十分に高温ならば、キュリーの法則 $\chi \propto 1/T$ が成り立つことを示せ。