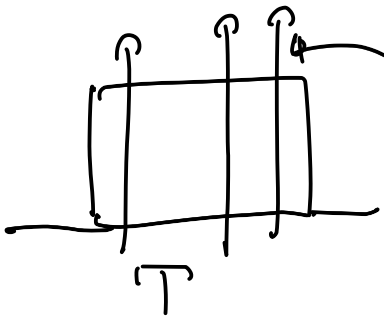
統計力学A XI

講義メモ

2022/12/27

§例：磁性体



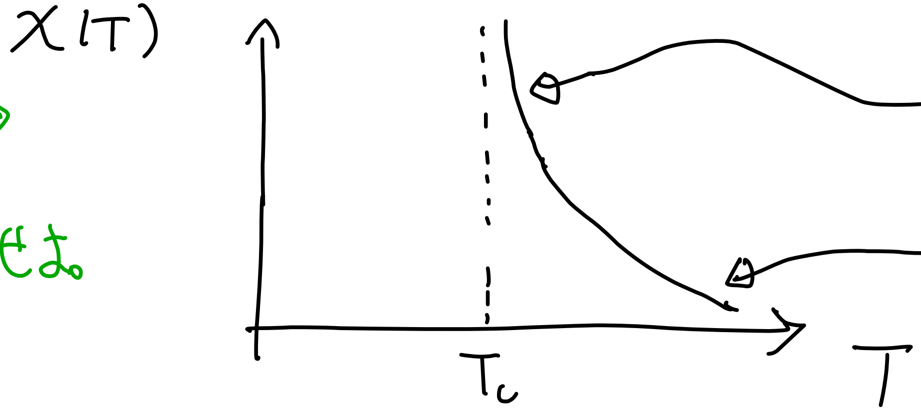
✓ 外部磁場の大きさ h ← 測定可能

✓ 磁化 $M = M(T,h)$

帯磁率 $\chi(T) \equiv \left.\frac{\partial M(T,h)}{\partial h}\right|_{h=0}$

例：

観測されたとせよ。



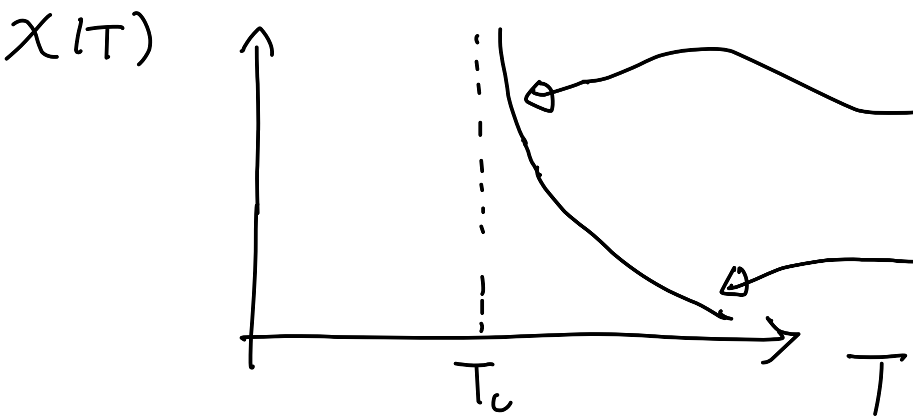
$\chi(T) \simeq \frac{1}{(T-T_c)^{\gamma}}$

$\chi(T) \propto \frac{1}{T}$ (キュリー則)

問：どのような条件で，どのように生じる？

§ 問題設定

現象



$$\chi(T) \simeq \frac{1}{(T-T_c)^{\gamma}}$$

$$\chi(T) \propto \frac{1}{T}$$

- 説明できるのか？
- 予言できるのか？

有効モデル

$$H(\sigma) = -J\sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_i \sigma_j - \mu h \sum_{i\in\Lambda} \sigma_i$$

etc . . .

§ 統計力学：公式

$$Z(\beta,h) = \sum_{\sigma} e^{-\beta H_h(\sigma)}$$

- カノニカル分布

$$P^{c}_{T,h}(\sigma) = \frac{1}{Z(\beta,h)} e^{-\beta H_h(\sigma)}$$

$$H_h(\sigma) = -J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j - \mu h\sum_{i\in\Lambda}\sigma_i$$

- 磁化

$$M = \mu\sum_{i\in\Lambda}\sigma_i$$

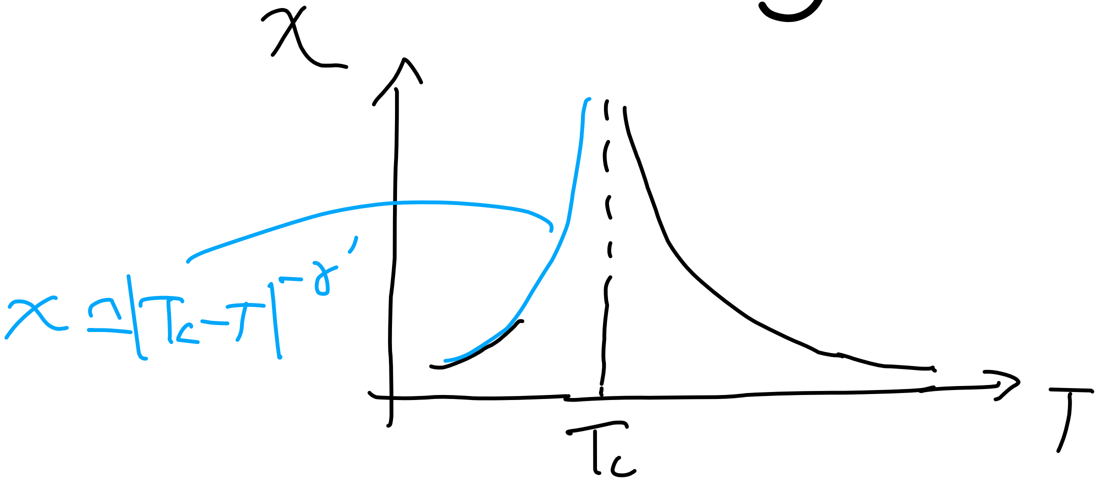
$$\langle M\rangle^{c}_{\beta,h} = \frac{1}{Z(\beta,h)}\sum_{\sigma}\boxed{\sum_{i\in\Lambda}\mu\sigma_i}\, e^{+\beta J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j + \beta h\boxed{\mu\sum_{i\in\Lambda}\sigma_i}}$$

$$= \frac{1}{Z(\beta,h)} k_B T \frac{\partial}{\partial h}\underbrace{\sum_{\sigma} e^{\beta J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j + \beta\mu h\sum_{i\in\Lambda}\sigma_i}}_{\equiv Z(\beta,h)}$$

$$= k_B T\frac{\partial}{\partial h}\log Z(\beta,h)$$

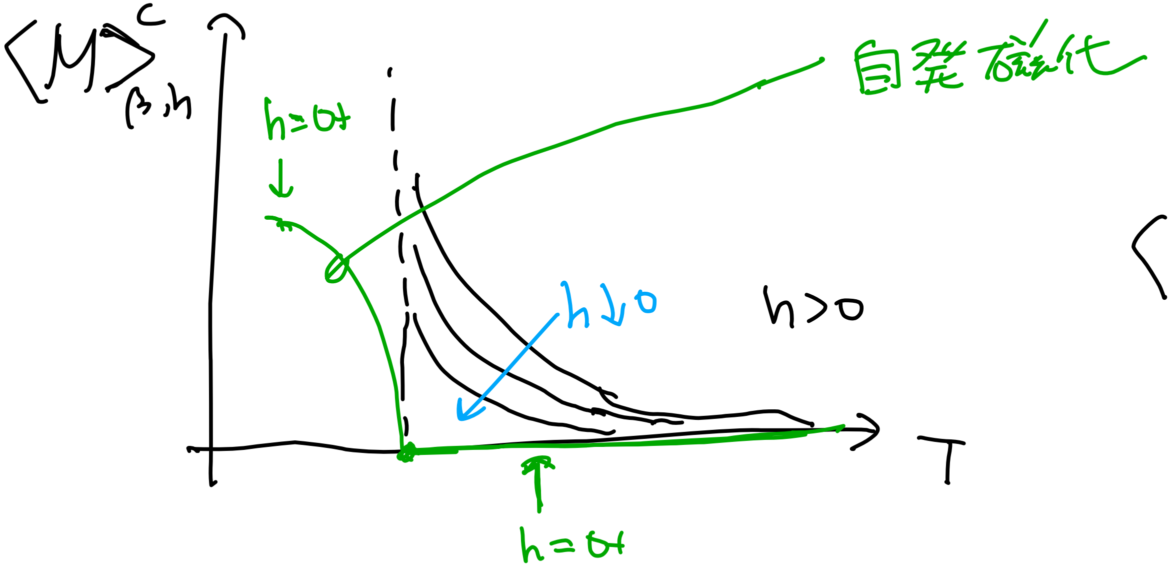
//

§ 磁化



$$\chi = \left.\frac{\partial \langle M \rangle^c_{\beta,h}}{\partial h}\right|_{h=0}$$

$$\underbrace{\chi \simeq |T - T_c|^{-\gamma}}$$



$$\underbrace{\langle M \rangle^c_{\beta,h} \simeq (T_c - T)^{\beta}}$$

~Intermission~

§ 分配関数

$$Z(\beta, h) \equiv \sum_{\sigma} e^{\beta J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + \beta \mu h \sum_i \sigma_i}$$

$$\langle M \rangle^c_{\beta, h} = k_B T \frac{\partial}{\partial h} \log Z(\beta, h)$$

$$\chi = \left. \frac{\partial \langle M \rangle^c_{\beta, h}}{\partial h} \right|_{h=0}$$

✍ $Z(\beta, h)$ は (β, h) について特異性がない??

（任意のβについて h について微分可能にみえる……）

それどころか……

$$\langle M \rangle^c_{\beta, h=0} = 0$$

（自発磁化なし）

§ 証明

$$\langle M \rangle^c_{\beta, h=0} = \frac{\mu}{Z(\beta, h=0)} \sum_{\sigma} \left(\sum_i \sigma_i \right) e^{\beta J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j}$$

$$\sigma_i' = -\sigma_i$$

$$= \frac{-\mu}{Z(\beta, h=0)} \sum_{\sigma'} \left(\sum_i \sigma_i' \right) e^{\beta J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i' \sigma_j'}$$

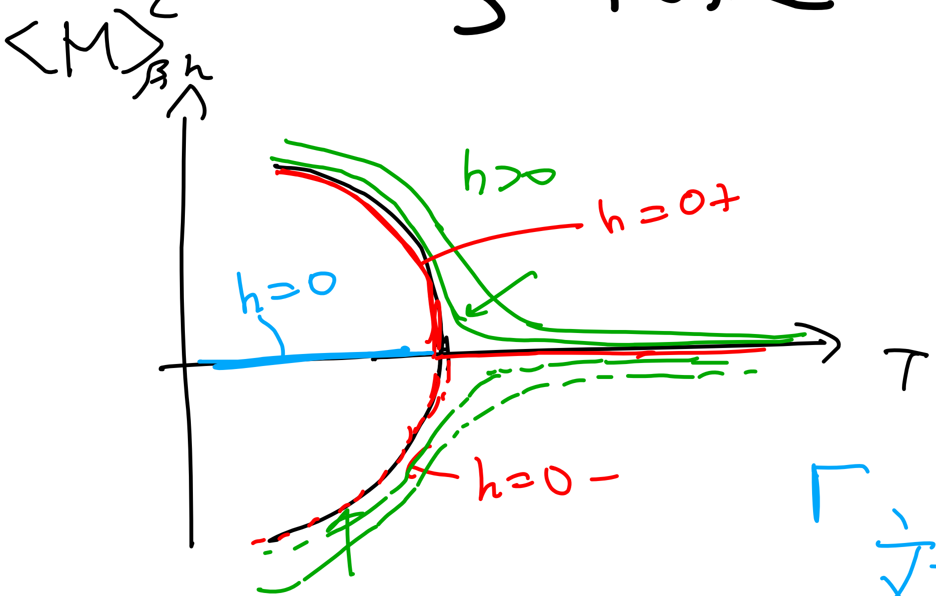
$$= - \langle M \rangle^c_{\beta, h=0}$$

$$\therefore \langle M \rangle^c_{\beta, h=0} = 0$$

「ハミルトニアンが
$\sigma_i \to -\sigma_i$ に対して
対称（不変）」

$\mathbb{Z}_2$ 対称性

§ 問題の本質



$$\langle M\rangle^c_{\beta,h=0+} = -\langle M\rangle^c_{\beta,h=0-}$$

$$\neq \langle M\rangle^c_{\beta,h=0} = 0$$

「対称性の自発的破れ」

が、

$$Z(\beta,h) \equiv \sum_{\sigma} e^{\beta J\sum_{\langle ij\rangle}\sigma_i\sigma_j + \beta\mu h\sum_i \sigma_i}$$

$$\langle M\rangle^c_{\beta,h} = k_B T \frac{\partial}{\partial h}\log Z(\beta,h)$$

$Z(\beta,h)$に特異性ないので起こりえない？

§ 熱力学極限

$$m(\beta, h) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \langle M \rangle^c_{\beta, h}$$

$$= \lim_{N\to\infty} k_B T \frac{\partial}{\partial h} \underbrace{\frac{1}{N} \log Z(\beta, h)}_{N\to\infty \text{で特異的になってもよい。}}$$

$Z(\beta, h) = e^{-N\beta f(\beta, h)}$

$f(\beta, h)$

$$\chi(\beta) = \frac{\partial}{\partial h} m(\beta, h)\Big|_{h=0}$$

$$\simeq \frac{1}{|T - T_c|^{\gamma}}$$ になってもよい。

※ $\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \left(\lim_{h\to 0} \frac{\partial}{\partial h} \langle M \rangle^c_{\beta, h} \Big|_{h=0} \right)$ は特異的でない!

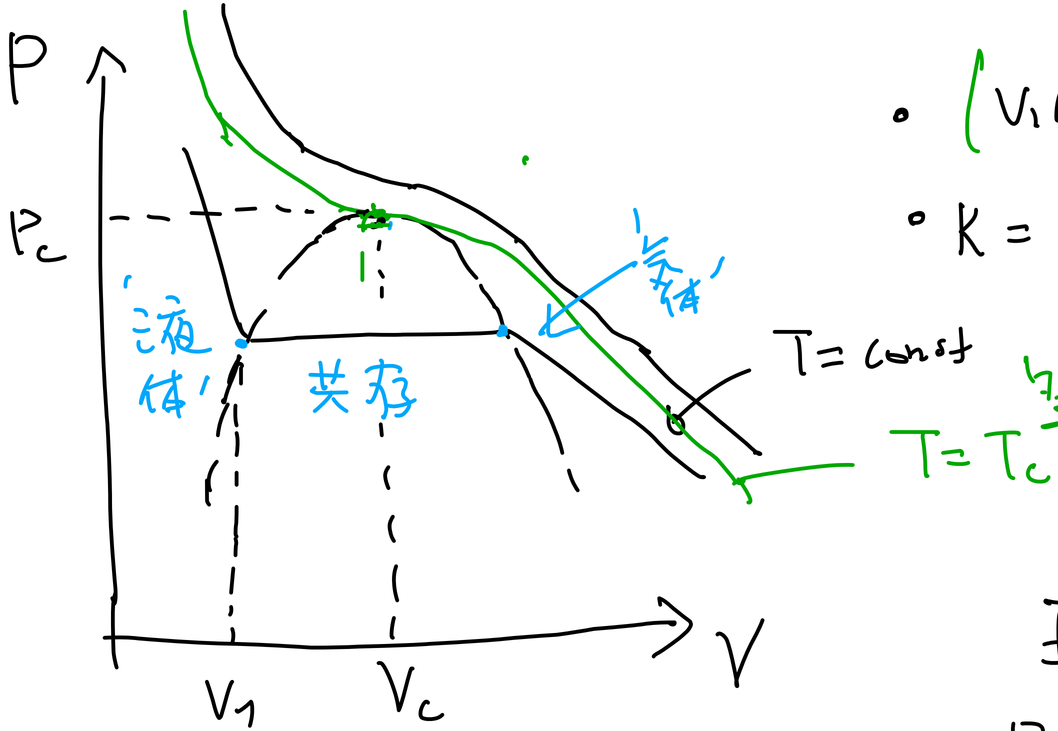
§ 結果

	β	γ	……
$d \geqq 4$	$\frac{1}{2}$	1	ワイスの理論/平均場理論
$d = 3$	$0.326\cdots$	$1.25\cdots$	
$d = 2$	$\frac{1}{8}$	$\frac{7}{4}$	オンサーガの厳密解
$d = 1$	$T_c = 0$ なし	$T_c = 0$ なし	転送行列法

e.g
$$H(\sigma) = -\frac{J}{2N}\left(\sum_i \sigma_i\right)^2$$

~ Intermission ~

§ 気液臨界点



- $|V_1(T) - V_c| \simeq (T_c - T)^{\beta_{LG}}$
- $K = -\dfrac{1}{V}\left(\dfrac{\partial V}{\partial p}\right)_T \simeq (T - T_c)^{-\gamma_{LG}}$

等温圧縮率

理想気体

$$P = \frac{NRT}{V} \qquad \left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T = -\frac{P}{V}$$

$$K = +\frac{1}{\cancel{V}}\frac{\cancel{V}}{P} = \frac{V}{NRT}$$

（キュリー則と同じ）

ファンデルワールス状態方程式

$$\Longrightarrow \quad \beta_{LG} = \frac{1}{2}, \quad \gamma_{LG} = 1$$

（平均場理論と同じ）

§ おどろくべきこと

$d=3$

- $\beta_{LG} = \beta$
- $\gamma_{LG} = \gamma$

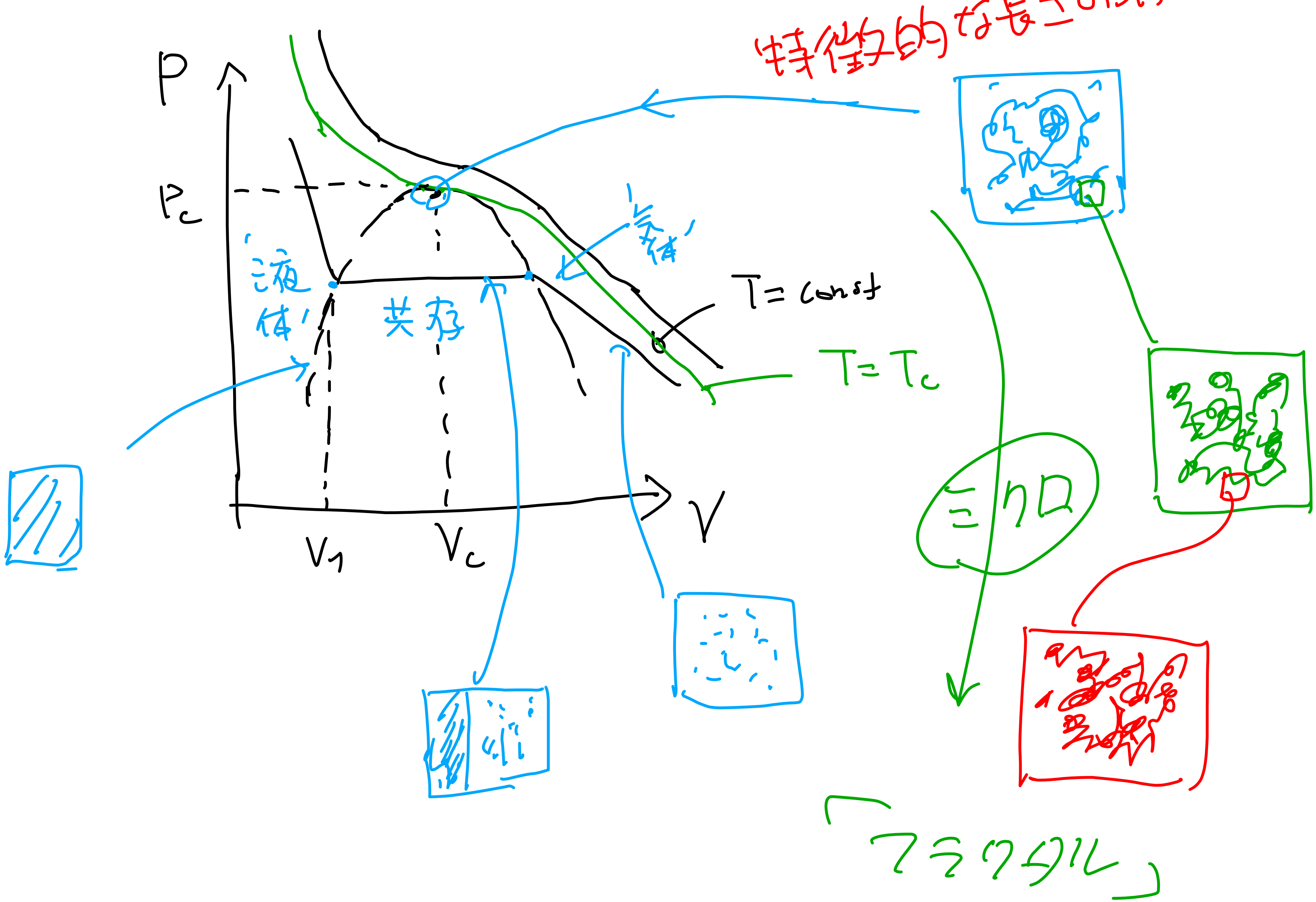
（数値計算，実験からの予想）

気液臨界点
（物質の種類に依存しない）

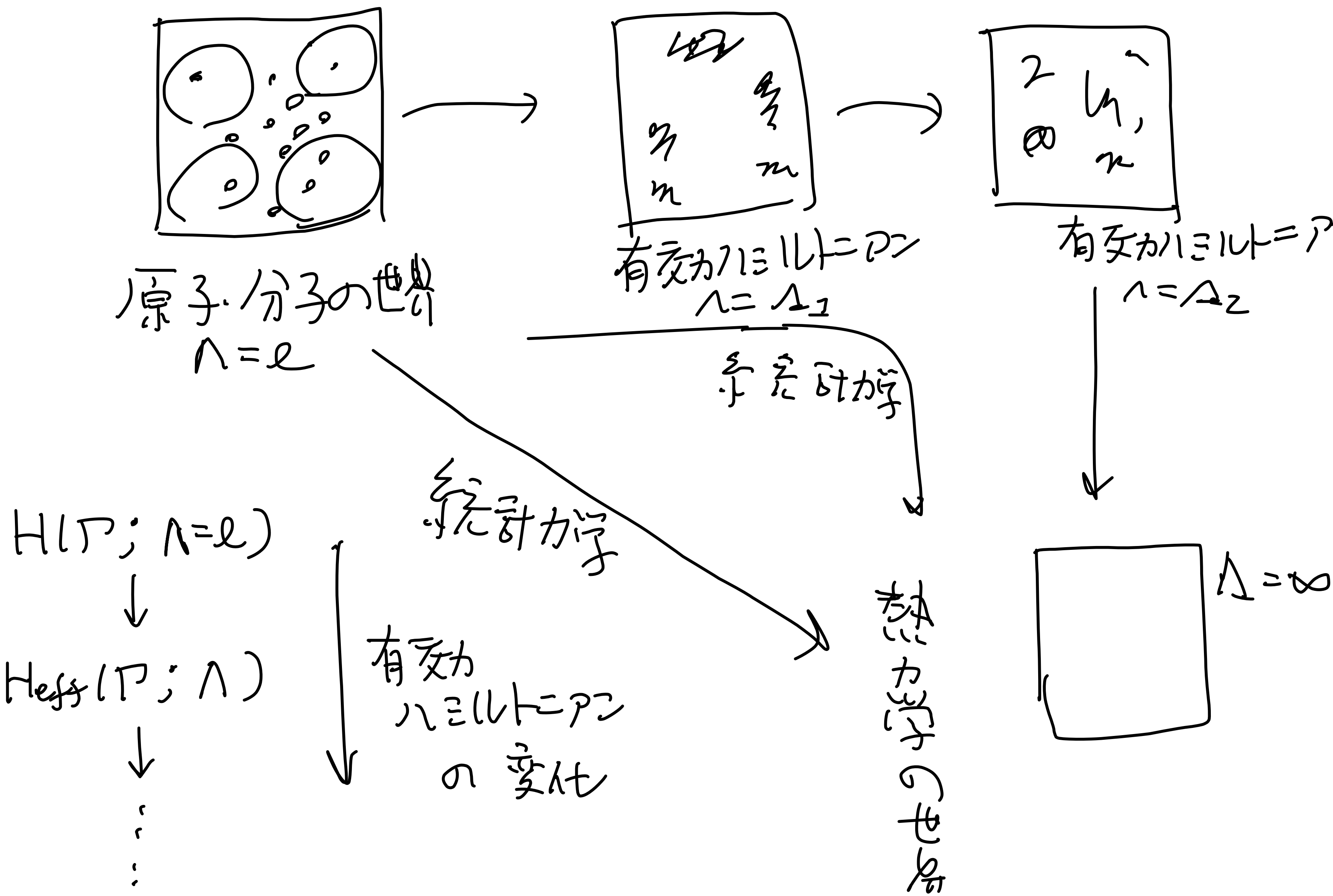
Ising model
（異方的磁性体）

「Universality class が同じ」

§ 何故？



§ くりこみ群


原子・分子の世界
Λ=ℓ
有効ハミルトニアン
Λ=Λ₁
有効ハミルトニアン
Λ=Λ₂
統計力学
統計力学
熱力学の世界
Λ=∞
H(Γ; Λ=ℓ)
↓
Heff(Γ; Λ)
↓
⋮
有効ハミルトニアンの変化

§ くりこみ群 II

$$e^{-\beta H_{eff}(\Gamma_{eff};\Lambda)} \equiv \int d\Gamma\ \delta(\Gamma_{eff}-\Gamma_{eff}(\Gamma))\, e^{-\beta H(\Gamma;\Lambda=\ell)}$$

$$\frac{d}{d\Lambda} H_{eff}(\Gamma_{eff};\Lambda) \equiv G(\Gamma_{eff};\Lambda)$$

これを計算する方法

$\Longrightarrow$ Wilson 1971

// Nobel prize.

※ $d=4-\varepsilon$ 次元 $(\varepsilon>0)$

での計算.

~Intermission~

§ まとめ

▷ 熱力学量の特異性（発散，不連続）
は 統計力学で計算できる！

▷ 気液臨界点 と Ising model の転移点は
Universality class が同じ！

▷ "スケール" に依存した有効モデルの変化
によって Universality class を記述できる！