注意 これは講義ノートではありません。計算の要点を抜粋しただけのものです。

１１-A 相互作用とは

粒子と粒子の間に働く力。 重力、電磁力、弱い相互作用、強い相互作用の４つ。

１１-B 相互作用の無い粒子の系（古典統計）

カノニカル集合の分配関数 $Z = \sum_{\varepsilon_1}\sum_{\varepsilon_2}\cdots\sum_{\varepsilon_N} e^{-\beta(\varepsilon_1+\varepsilon_2+\cdots+\varepsilon_N)}$ の和は個別に実行できるので、

（∵相互作用が無いので他の粒子の状態におかまいなしに自分の ε_i が決まる）

$$Z = \sum_{\varepsilon_1} e^{-\beta\varepsilon_1}\sum_{\varepsilon_2} e^{-\beta\varepsilon_2}\cdots\sum_{\varepsilon_N} e^{-\beta\varepsilon_N} = \underbrace{Z_1 Z_1 \cdots Z_1}_{N\text{ 個}} = Z_1^N$$

$\therefore F = -k_\mathrm{B} T \log Z = -N k_\mathrm{B} T \log Z_1$　$\Rightarrow$ <u>１粒子の自由エネルギーを N 倍するだけでよい</u>

１１-C 相互作用している二つのスピン（古典統計）

$$H = -\mu\left(S_{1z}+S_{2z}\right)H_0 - J\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2$$

但し μ = 磁気モーメントの大きさ($g\mu$ をまとめて μ と書いた), H_0 = 磁場の強さ

　　J = スピン間の交換相互作用の強さ（$J>0$ で強磁性的, $J<0$ で反強磁性的）

二つのスピンの状態は　$\left|\uparrow\uparrow\right\rangle$, $\left|\uparrow\downarrow\right\rangle$, $\left|\downarrow\uparrow\right\rangle$, $\left|\downarrow\downarrow\right\rangle$　で網羅されている（完全系）。

しかし、ハミルトニアンの固有状態ではない（$\left|\uparrow\downarrow\right\rangle$ と $\left|\downarrow\uparrow\right\rangle$ が固有状態でない）。

実際、ハミルトニアンを上の四つの基底ベクトルのもとで行列表示すれば、

$$H = -\begin{pmatrix} \frac{J}{4}+\mu H_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{J}{4} & \frac{J}{2} & 0 \\ 0 & \frac{J}{2} & -\frac{J}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{J}{4}-\mu H_0 \end{pmatrix}$$
である。これを対角化すれば、

　　固有ベクトル：　$\left|\uparrow\uparrow\right\rangle$, $\dfrac{\left|\uparrow\downarrow\right\rangle+\left|\downarrow\uparrow\right\rangle}{\sqrt{2}}$, $\left|\downarrow\downarrow\right\rangle$, $\dfrac{\left|\uparrow\downarrow\right\rangle-\left|\downarrow\uparrow\right\rangle}{\sqrt{2}}$

　　固有エネルギー：　$\frac{J}{4}+\mu H_0$, $\frac{J}{4}$, $\frac{J}{4}-\mu H_0$, $-\frac{3J}{4}$　を得る。

$$\therefore Z = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H} = \sum_{i=1\sim 4}\left\langle i\left|e^{-\beta H}\right|i\right\rangle = e^{-\beta(J/4+\mu H_0)} + e^{-\beta(J/4)} + e^{-\beta(J/4-\mu H_0)} + e^{-\beta(-3J/4)}$$

１１-D 相互作用している多数のスピン

一つのスピンあたり、２つの状態（$S_z = \pm\frac{1}{2}$）なので、

N 個のスピンでは、2^N 個の状態 $\Rightarrow$ 固有状態を求めるには 2^N 次の行列の対角化が必要

（10 個ならば 1024×1024 の行列の対角化が必要）

１１-１ トレース

分配関数の和の計算は、実は行列のトレース：$Z = \sum_i e^{-\beta E_i} = \sum_i \left\langle i\left|e^{-\beta H}\right|i\right\rangle = \mathrm{Tr}\, e^{-\beta H}$

線型代数　行列のトレースは任意の基底で取っても不変

$$\mathrm{Tr}\,\underbrace{C^{-1}AC}_{\text{対角化}} = \mathrm{Tr}\,\underbrace{C\,C^{-1}}_{1}A = \mathrm{Tr}\,A \qquad \because \mathrm{Tr}\,AB = \mathrm{Tr}\,BA$$

よって、H が対角化されていない「元の基底」でトレースを取っても良い。

（但し、スピンの全状態を網羅している基底であることが必要）

１１-E 高温展開

トレースの計算で、$e^{-\beta H}=1+\left(-\beta H\right)+\frac{1}{2}\left(-\beta H\right)^2+\cdots$ なので、H が対角化されていないと、次々と、ハミルトニアンのべきが出てきて結局、大変な計算になる。

しかし、高温（$\beta\to 0$）では、適当なところで、展開を打ち切ってよい≡高温展開。

１１-F 分子場近似

相互作用のある多粒子系の問題を近似する一つのやり方。

$$H=\sum_i -\mu H_0 S_{iz}+\sum_{\langle i,j\rangle}-JS_{iz}S_{jz}$$

イジング相互作用（スピンのベクトルの z 成分の積）しているスピン集団を例に示す。

　　　c.f. ハイゼンベルグ相互作用はスピンの内積

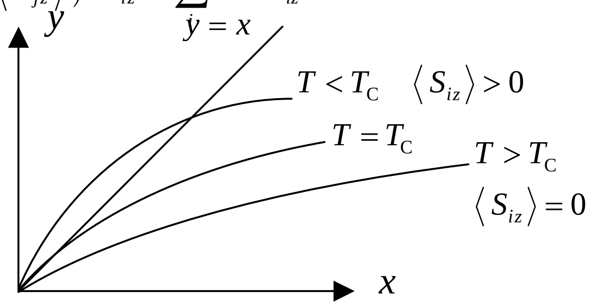
$J>0$ の場合、スピンの方向が揃った方がエネルギーが低い。

第一項＝ゼーマンエネルギー、第二項＝イジング相互作用 $<i,j>$は隣接スピンを表す。

　　　注）i 番目のスピンの状態で和を取ろうとすると、エネルギーが j 番目のスピンの状態によって変わってしまうので独立に取れない。

よって、S_{jz} を平均値$\langle S_z\rangle$で置き換えてしまうという近似を採用する。

$$H=\sum_i -\left(\mu H_0+J\sum_{j(\text{但し}i\text{の隣})}S_{jz}\right)\cdot S_{iz}\approx\sum_i -\left(\mu H_0+Jz\left\langle S_{jz}\right\rangle\right)\cdot S_{iz}\equiv\sum -2aS_{iz}$$



　　　但し、$a=\left(\mu H_0+Jz\langle S_{iz}\rangle\right)$ ，$S_{iz}=\pm\frac{1}{2}$

より、相互作用の無いスピンの問題と全く同じになる。よって、分配関数は一つのスピンのものにして良く、ハミルトニアン $H=-2aS_{iz}$ から、$Z=\sum_{S_{iz}}e^{-\beta H}$ を得る。

これを使って、磁場がゼロの場合、

$$\left\langle S_{iz}\right\rangle=\frac{1}{Z}\cdot\sum_{S_{iz}\text{の状態}}S_{iz}e^{-\beta H}=\frac{1}{2}\times\frac{e^{+a\beta}-e^{-a\beta}}{e^{+a\beta}+e^{-a\beta}}=\frac{1}{2}\tanh\left(Jz\langle S_{iz}\rangle\beta\right)$$

となる。このように両辺に未知数が入っている式は、グラフを使って解く。

　　（解く≡答えの数値がわかる、ということではなく、解の性質を把握するということ）

$x\equiv\left\langle S_{iz}\right\rangle$ と置くと、左辺は、$y=x$、右辺は、$y=\dfrac{1}{2}\tanh\left(Jzx\beta\right)$　となるので、グラフより、

x がゼロでなくなる温度（臨界温度）は $Jz\beta=1$ であり、$T_{\mathrm{C}}=k_{\mathrm{B}}^{-1}Jz$ を得る。

これ以下の温度で、磁場がゼロでも$\left\langle S_z\right\rangle$が有限の強磁性となる。

但し、$\left\langle S_z\right\rangle$の詳しい温度変化は数値計算が必要。

⇒ 相互作用が強いほど、また、最隣接数が多いほど、T_{C} は上がる（強磁性になりやすい）。

［分子場近似の問題点］

・一次元(鎖状に一列につながったスピン集団)でも、相転移が起こるという間違った結果を与えてしまう。

・単純に平均しているので、↓↑↓↑のように互い違いになるような結果は出てこない。しかし、だから全然だめということではなく、一番初めに使って見るには良い近似である。各場合に対して、適用できる・できないを見究めることが大事。

・スピン間の相互作用の話（ハイゼンベルグ・イジング・他）は固体物理 II で。