初稿公開日: 2022 年 2 月 4 日
最終更新日: 2022 年 2 月 4 日
日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター 久保勝規

# 平均場近似とランダウ理論

繰り返す添字については和を取ることにする。ハミルトニアンが

$$H = \hat{M}_i \lambda_{ij} \hat{M}_j,$$

と与えられるとき、平均場近似のハミルトニアンを

$$H(\boldsymbol{M}) = M_i \lambda_{ij} \hat{M}_j + \hat{M}_i \lambda_{ij} M_j - M_i \lambda_{ij} M_j,$$

とする。$\boldsymbol{M}$ を秩序変数という。対称操作のもとで、秩序変数 $\boldsymbol{M}$ が演算子 $\hat{\boldsymbol{M}}$ と同じ変換性を持つとすれば、平均場近似のハミルトニアンは元のハミルトニアンと同じ対称性を持つことになる。

$$H = H(\boldsymbol{M}) + (\hat{M}_i - M_i) \lambda_{ij} (\hat{M}_j - M_j),$$

として最後の揺らぎの項を、揺らぎではない項より小さいとして無視したものが平均場近似のハミルトニアンである。無秩序状態 $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{0}$ や $\boldsymbol{M}$ の小さい転移点近傍では、揺らぎではない項がゼロか小さいので、平均場近似は正当化できない。平均場近似では

$$\langle \hat{\boldsymbol{M}} \rangle_{\mathrm{MF}} = \frac{\mathrm{Tr} \hat{\boldsymbol{M}} e^{-\beta H(\boldsymbol{M})}}{\mathrm{Tr} e^{-\beta H(\boldsymbol{M})}},$$

が $\boldsymbol{M}$ に等しいとする。これを平均場方程式という。

一方、平均場ハミルトニアンに対する自由エネルギー

$$F(\boldsymbol{M}) = -\frac{1}{\beta} \ln \mathrm{Tr} e^{-\beta H(\boldsymbol{M})},$$

を $M_i$ について微分する。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial H(\boldsymbol{M})}{\partial M_i} &= \lambda_{ij} \hat{M}_j + \hat{M}_j \lambda_{ji} - \lambda_{ij} M_j - M_j \lambda_{ji} \\
&= \lambda_{ij} (\hat{M}_j - M_j) + (\hat{M}_j - M_j) \lambda_{ji} \\
&= (\lambda_{ij} + \lambda_{ji})(\hat{M}_j - M_j),
\end{aligned}$$

を用いれば

$$\frac{\partial F(\boldsymbol{M})}{\partial M_i} = \frac{\mathrm{Tr} \frac{\partial H(\boldsymbol{M})}{\partial M_i} e^{-\beta H(\boldsymbol{M})}}{\mathrm{Tr} e^{-\beta H(\boldsymbol{M})}} = (\lambda_{ij} + \lambda_{ji})(\langle \hat{M}_j \rangle_{\mathrm{MF}} - M_j).$$

よって、自由エネルギー $F(\boldsymbol{M})$ が $\boldsymbol{M}$ の関数として極値になる条件と平均場方程式は等価である。だたし、ここまでの議論だけでは、平均場解が複数得られたとき、どの解を採用すべきか決められない。

そこで、平均場方程式を満たすときには、平均場ハミルトニアンでの期待値が $\langle H(\boldsymbol{M})\rangle_{\mathrm{MF}} = \langle H\rangle_{\mathrm{MF}}$ となることを要請する。このときは、ボゴリューボフ–ファインマンの不等式（計算メモ「自由エネルギーに対する変分原理」参照）から、$F(\boldsymbol{M})$ を最小にする解を選べば良いことがわかる。このことから、ランダウ理論の自由エネルギーとしては、この $F(\boldsymbol{M})$ を採用して、最小化すればよいこともわかる。

実際の平均場近似の計算では、$F(\boldsymbol{M})$ が極値となる点を探すより、平均場方程式を解く方が簡単なので、以下の手順を行う。

1. 平均場方程式を満たすときには、$\langle H(\boldsymbol{M})\rangle_{\mathrm{MF}} = \langle H\rangle_{\mathrm{MF}}$ となる平均場ハミルトニアンを採用する。
2. 平均場方程式を解く。
3. 複数の解が得られた時には $F(\boldsymbol{M})$ を最小にする解を選ぶ。

## イジングモデルの平均場近似

$$H = -J \sum_{<i,j>} \hat{M}_i \hat{M}_j,$$

とする。$\hat{M}_i = \pm 1$、$i, j$ はサイトを表し $<i,j>$ は最近接サイトの対についての和を表す。サイトに依存しない秩序変数 $M$ を考え、平均場ハミルトニアンを

$$\begin{aligned} H(M) &= -J \sum_{<i,j>} \left( M\hat{M}_j + \hat{M}_i M - M^2 \right) \\ &= -J \sum_{<i,j>} \left( 2M\hat{M}_i - M^2 \right) \\ &= -J \sum_i \frac{z}{2} \left( 2M\hat{M}_i - M^2 \right) \\ &= N\frac{z}{2} J M^2 - zJM \sum_i \hat{M}_i, \end{aligned}$$

とする。ここで $z$ は最近接サイト数、$N$ は全サイト数。この平均場ハミルトニアンでは各サイトについて独立に状態和をとることができるので、平均場ハミルトニアンでの期待値が $\langle \hat{M}_i \hat{M}_j\rangle_{\mathrm{MF}} = \langle \hat{M}_i\rangle_{\mathrm{MF}} \langle \hat{M}_j\rangle_{\mathrm{MF}}$ となる。さらに、平均場方程式 $\langle \hat{M}_i\rangle_{\mathrm{MF}} = M$ を課せば、

$\langle H(M)\rangle_{\mathrm{MF}} = \langle H\rangle_{\mathrm{MF}}$ となる。

$$\langle \hat{M}_i\rangle_{\mathrm{MF}} = \frac{e^{\beta zJM} - e^{-\beta zJM}}{e^{\beta zJM} + e^{-\beta zJM}} = \tanh(\beta zJM).$$

よって、平均場方程式は $M = \tanh(\beta zJM)$。$J \leq 0$ では $M = 0$ のみが解である。以下では、$J > 0$ とする。$0 \leq M \ll 1$ では、

$$M = \tanh(\beta zJM) \simeq \beta zJM - \frac{1}{3}(\beta zJ)^3 M^3.$$

$M$ の 1 次の係数から、$M$ がゼロでない解が現れる転移温度は $T_{\mathrm{c}} = zJ$。これを用いて

$$\left(\frac{T_{\mathrm{c}}}{T} - 1\right) M \simeq \frac{1}{3}\left(\frac{T_{\mathrm{c}}}{T}\right)^3 M^3,$$

よって $T \lesssim T_{\mathrm{c}}$ では、$M \neq 0$ の解として

$$M \simeq \sqrt{3(T_{\mathrm{c}} - T)/T_{\mathrm{c}}},$$

が得られる。ただし、これだけでは $M = 0$ の解とどちらを採用するべきか決めることが出来ない。

## イジングモデルに対するランダウ理論

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr} e^{-\beta H(M)} &= \mathrm{Tr} e^{-\beta\left(N \frac{T_{\mathrm{c}}}{2} M^2 - T_{\mathrm{c}} M \sum_i \hat{M}_i\right)} \\
&= e^{-\beta N \frac{T_{\mathrm{c}}}{2} M^2} \mathrm{Tr} e^{\beta T_{\mathrm{c}} M \sum_i \hat{M}_i} \\
&= e^{-\beta N \frac{T_{\mathrm{c}}}{2} M^2} \mathrm{Tr} \prod_i e^{\beta T_{\mathrm{c}} M \hat{M}_i} \\
&= e^{-\beta N \frac{T_{\mathrm{c}}}{2} M^2} \left(e^{\beta T_{\mathrm{c}} M} + e^{-\beta T_{\mathrm{c}} M}\right)^N .
\end{aligned}$$

$M$ の 4 次まで自由エネルギーを展開する。

$$
\begin{aligned}
\ln(e^x + e^{-x}) &= \ln\left[\left(1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} + \cdots\right) + \left(1 - x + \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} + \cdots\right)\right] \\
&= \ln\left[2\left(1 + \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} + \cdots\right)\right] \\
&= \ln 2 + \ln\left(1 + \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} + \cdots\right) \\
&= \ln 2 + \left(\frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} + \cdots\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} + \cdots\right)^2 + \cdots \\
&\simeq \ln 2 + \frac{x^2}{2} - \frac{x^4}{12},
\end{aligned}
$$

を用いれば

$$
\begin{aligned}
F(M) = -T\ln \mathrm{Tr} e^{-\beta H(M)} &= N\frac{T_\mathrm{c}}{2}M^2 - NT\ln\left(e^{\beta T_\mathrm{c} M} + e^{-\beta T_\mathrm{c} M}\right) \\
&\simeq N\frac{T_\mathrm{c}}{2}M^2 - NT\ln 2 - NT\frac{1}{2}\left(\frac{T_\mathrm{c}}{T}\right)^2 M^2 + NT\frac{1}{12}\left(\frac{T_\mathrm{c}}{T}\right)^4 M^4 \\
&= -NT\ln 2 + N\left[-\frac{T_\mathrm{c}}{2}\left(\frac{T_\mathrm{c}}{T} - 1\right)M^2 + \frac{T_\mathrm{c}}{12}\left(\frac{T_\mathrm{c}}{T}\right)^3 M^4\right].
\end{aligned}
$$

$$
\frac{dF(M)}{dM} \simeq NMT_\mathrm{c}\left[-\left(\frac{T_\mathrm{c}}{T} - 1\right) + \frac{1}{3}\left(\frac{T_\mathrm{c}}{T}\right)^3 M^2\right].
$$

よって $T \lesssim T_\mathrm{c}$ では、$dF(M)/dM = 0$ の $M \neq 0$ となる解として、平均場方程式を直接解いたときと同様に

$$
M \simeq \sqrt{3(T_\mathrm{c} - T)/T_\mathrm{c}},
$$

が得られる。また、$T \lesssim T_\mathrm{c}$ では $F(M)$ の $M^2$ の係数が負になっているので、上記の $M \neq 0$ の解が $F(M)$ を最小にすることがわかる。

なお、展開しなくても

$$
\begin{aligned}
\frac{dF(M)}{dM} &= NT_\mathrm{c}M - NT\beta T_\mathrm{c}\frac{e^{\beta T_\mathrm{c} M} - e^{-\beta T_\mathrm{c} M}}{e^{\beta T_\mathrm{c} M} + e^{-\beta T_\mathrm{c} M}} \\
&= NT_\mathrm{c}\left[M - \tanh\left(\frac{T_\mathrm{c}}{T}M\right)\right],
\end{aligned}
$$

となり、$F(M)$ が極値をとる条件と平均場方程式が一致することは容易に確かめられる。