統計力学中間試験　　　　　　　　　　　　2001 Nov. 26

注意　途中の式を書いていないものは採点しない。

二準位系についてカノニカル分布(正準分布)を用いて以下の問いに答えよ。

1. 二準位のエネルギーを$\pm\varepsilon$とするとき、一粒子の分配関数を書け
2. 一粒子あたりのヘルムホルツエネルギーFを求めよ。 ヒント― $e^{-\beta F} = \sum_i e^{-\beta\varepsilon_i}$
3. 一粒子あたりのエントロピーを求めよ。さらに、絶対零度及び高温の極限で、エントロピーはどのような値に近づくかをそれぞれ調べよ。
4. 一粒子あたりの内部エネルギー$E \equiv \langle E \rangle$を求め、絶対零度で$F$と一致することを示せ。
5. 一粒子あたりの比熱Cを求めよ。ヒント―内部エネルギーを温度で微分。
6. 一粒子あたりの内部エネルギーの二乗E^2を求め、エネルギーのばらつき(ゆらぎ) $\left\langle \left[E - \langle E \rangle \right]^2 \right\rangle = \left\langle E^2 - 2E\langle E \rangle + \langle E \rangle^2 \right\rangle = \left\langle E^2 \right\rangle - \langle E \rangle^2$を計算し$C$と比較せよ。(講義範囲外)
   ヒント: $E^2 = \sum_i \varepsilon_i^2 e^{-\beta E_i} \Big/ Z$を使えば良い。
7. エネルギー$\pm\varepsilon$が、ゼーマンエネルギーμHである場合を考える。ここで、μは$\pm\mu_{\mathrm{B}}$の二通りの値のみを取るとする。この時、分配関数Zと、磁化$M = \langle \mu \rangle$を求めよ。
8. 磁化率$\frac{\partial M}{\partial H}$を求めよ。ここで、磁化率（帯磁率とも言う）とは、磁化のしやすさであり、単位磁場あたりの磁化である。強磁性体では無限大となる。
9. 磁化の自乗平均$M^2 \equiv \langle \mu^2 \rangle$ を求め、これを使って、磁化の標準偏差（= 分散の平方根）を求めよ。結果は磁化率に比例している。これを「揺動散逸定理」と呼ぶ。

略解

1 $Z=e^{+\beta\varepsilon}+e^{-\beta\varepsilon}=e^{+\varepsilon/k_{\mathrm{B}}T}+e^{-\varepsilon/k_{\mathrm{B}}T}$

2 $F=-k_{\mathrm{B}}T\log Z=-k_{\mathrm{B}}T\log\left(e^{+\beta\varepsilon}+e^{-\beta\varepsilon}\right)$

3 $S=-\dfrac{\partial F}{\partial T}=k_{\mathrm{B}}\log Z+k_{\mathrm{B}}T\dfrac{1}{Z}\dfrac{\partial Z}{\partial T}=k_{\mathrm{B}}\log\left(e^{+\beta\varepsilon}+e^{-\beta\varepsilon}\right)+k_{\mathrm{B}}T\dfrac{e^{+\beta\varepsilon}-e^{-\beta\varepsilon}}{e^{+\beta\varepsilon}+e^{-\beta\varepsilon}}\varepsilon\dfrac{\partial\beta}{\partial T}$

$=k_{\mathrm{B}}\log\left(e^{+\beta\varepsilon}+e^{-\beta\varepsilon}\right)-\dfrac{\varepsilon\tanh(\beta\varepsilon)}{T}=k_{\mathrm{B}}\log\left(e^{+\varepsilon/k_{\mathrm{B}}T}+e^{-\varepsilon/k_{\mathrm{B}}T}\right)-\dfrac{\varepsilon\tanh\left(+\varepsilon/k_{\mathrm{B}}T\right)}{T}$

$T\to\infty$で、$S\sim k_{\mathrm{B}}\log(2)-\dfrac{\varepsilon}{T}\tanh(0)\sim k_{\mathrm{B}}\log(2)$

4 $E=F+TS=-\varepsilon\tanh(\beta\varepsilon)$

あるいは、$E=\dfrac{(-\varepsilon)e^{\beta\varepsilon}+(\varepsilon)e^{-\beta\varepsilon}}{Z}=-\varepsilon\tanh(\beta\varepsilon)$

5 $C=\dfrac{\partial E}{\partial T}=\dfrac{-\varepsilon^2}{\cosh^2(\beta\varepsilon)}\dfrac{\partial\beta}{\partial T}=\dfrac{\varepsilon^2/k_{\mathrm{B}}T^2}{\cosh^2(\beta\varepsilon)}=\dfrac{\varepsilon^2/k_{\mathrm{B}}T^2}{\cosh^2\left(\varepsilon/k_{\mathrm{B}}T\right)}$

6 $E^2=\dfrac{(-\varepsilon)^2e^{+\beta/\varepsilon}+(+\varepsilon)^2e^{-\beta/\varepsilon}}{Z}=\varepsilon^2$であるから、エネルギーのゆらぎは、

$\left\langle\delta E^2\right\rangle=\left\langle E^2\right\rangle-\left\langle E\right\rangle^2=\varepsilon^2\left(1-\tanh^2\right)=\dfrac{\varepsilon^2}{\cosh^2(\beta\varepsilon)}=k_{\mathrm{B}}T^2C$ となる。

7 $Z=e^{-\beta\mu_{\mathrm{B}}H}+e^{+\beta\mu_{\mathrm{B}}H}$, $M=\dfrac{(-\mu_{\mathrm{B}})e^{-\beta\mu_{\mathrm{B}}H}+(\mu_{\mathrm{B}})e^{+\beta\mu_{\mathrm{B}}H}}{Z}=\mu_{\mathrm{B}}\tanh(\beta\mu_{\mathrm{B}}H)$

別解）$M=-\partial F/\partial H=\partial(k_{\mathrm{B}}TlogZ)/\partial H$

8 $\chi=\dfrac{\partial M}{\partial H}=\dfrac{\beta\mu_{\mathrm{B}}^2}{\cosh^2(\beta\mu_{\mathrm{B}}H)}$

9 $M^2=\dfrac{(-\mu_{\mathrm{B}})^2e^{-\beta\mu_{\mathrm{B}}H}+(\mu_{\mathrm{B}})^2e^{+\beta\mu_{\mathrm{B}}H}}{Z}=\mu_{\mathrm{B}}^2$

$\delta M^2=\langle\delta\mu^2\rangle=\langle(\mu-\langle\mu\rangle)^2\rangle=\langle\mu^2-2\mu\langle\mu\rangle+\langle\mu\rangle^2\rangle=\langle\mu^2-2\langle\mu\rangle^2+\langle\mu\rangle^2\rangle=\langle\mu^2-\langle\mu\rangle^2\rangle$

よって、$\delta M^2=\mu_{\mathrm{B}}^2\left(1-\tanh^2\right)=\dfrac{\mu_{\mathrm{B}}^2}{\cosh^2(\beta\mu_{\mathrm{B}}H)}=k_{\mathrm{B}}T\chi$