お名前〔　　　　　　　　　　〕番号〔　　　　　　　　〕　理工2016試験 統計力学解答用紙 1／19(木)2限 3−421 SCT69000 担当 後藤貴行

〔問1〕二準位系($E=-\varepsilon,+\varepsilon$)の占有数をそれぞれ$n_-, n_+$ とし、$N=n_-+n_+$ が非常に大きいとき、イ)ボルツマンの原理からエントロピーSを求めよ。そしてどういう状態がS最大となるか調べよ。ロ)次にシャノンのエントロピー$S=-k_{\mathrm{B}}\sum_{i=1,2}P_i\log P_i$ を求め、これについても最大となる条件を求めよ。ヒント)$P_1=n_-/N$, $P_2=n_+/N$ である。

$S=k_{\mathrm{B}}\log{}_NC_{n_+}=k_{\mathrm{B}}\log\frac{N!}{(N-n_+)!n_+!}\simeq k_{\mathrm{B}}(N\log N-N-(N-n_+)\log(N-n_+)+(N-n_+)-n_+\log n_++n_+)$ でありNが非常に大きく、かつ、S最大のを与えるn_+も十分大きいはずなので連続変数とみなすことができ、$k_{\mathrm{B}}^{-1}\,\partial S/\partial n_+=\log(N-n_+)+1-\log n_+-1=0$ より、極値を与えるのは $\frac{N-n_+}{n_+}=1$ のときで、よって$n_+=N/2$

次にクロード・シャノンによって定義されたエントロピーでは$S=-k_{\mathrm{B}}\left(\frac{n_+}{N}\right)\log\left(\frac{n_+}{N}\right)-k_{\mathrm{B}}\left(\frac{n_-}{N}\right)\log\left(\frac{n_-}{N}\right)=-k_{\mathrm{B}}\left(\frac{n_+}{N}\right)\log\left(\frac{n_+}{N}\right)-k_{\mathrm{B}}\left(1-\frac{n_+}{N}\right)\log\left(1-\frac{n_+}{N}\right)$ であるので、これも微分して$k_{\mathrm{B}}^{-1}\,\partial S/\partial n_+=-\left(\frac{1}{N}\right)\log\left(\frac{n_+}{N}\right)-\left(\frac{1}{N}\right)+\left(\frac{1}{N}\right)\log\left(1-\frac{n_+}{N}\right)+\left(\frac{1}{N}\right)=0$ の条件は$\left(\frac{N}{n_+}\right)\left(1-\frac{n_+}{N}\right)=1$であるから、ボルツマンの原理から求めた結果と一致する。

〔問2〕量子力学に従うミクロな調和振動子を考え、エネルギーが$E_n=\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$ である。但し$\hbar$ とωは正の定数で、n はゼロまたは正の整数である。この調和振動子が多数集まった系でお互いに相互作用していない場合、一つの振動子あたりの分配関数Z、ヘルムホルツの自由エネルギーF、内部エネルギーEを求め、高温で等分配則が成立することを示せ。
ヒント $d\cosh x/dx=\sinh x$, $d\sinh x/dx=\cosh x$, $d(\log\sinh x)/dx=\cosh x/\sinh x$, $\cosh x\simeq 1$ (for $x\to 0$), $\sinh x\simeq x$ (for $x\to 0$), $1+x+x^2+\cdots=\frac{1}{1-x}$ など。

まずただちに $Z=e^{-\hbar\omega\frac{1}{2}\beta}+e^{-\hbar\omega(1+\frac{1}{2})\beta}+e^{-\hbar\omega(2+\frac{1}{2})\beta}+\cdots=e^{-\hbar\omega\frac{1}{2}\beta}(1+X+X^2+\cdots)=e^{-\hbar\omega\frac{1}{2}\beta}\frac{1}{1-X}=\frac{\sqrt{X}}{1-X}$ ここで$X=e^{-\hbar\omega\beta}$である。
よって、 $Z=\frac{1}{\sqrt{1/X}-\sqrt{X}}=\frac{1}{2\sinh\hbar\omega\frac{1}{2}\beta}$ となる。これより、$F=-k_{\mathrm{B}}T\log Z=k_{\mathrm{B}}T\log 2+k_{\mathrm{B}}T\log\sinh\hbar\omega\frac{1}{2}\beta$ となり、$S=-F'$より、
$S=-k_{\mathrm{B}}\log 2-k_{\mathrm{B}}\log\sinh\hbar\omega\frac{1}{2}\beta-k_{\mathrm{B}}T\coth\hbar\omega\frac{1}{2}\beta\cdot(-\hbar\omega\frac{1}{2}/k_{\mathrm{B}}T^2)=-k_{\mathrm{B}}\log 2-k_{\mathrm{B}}\log\sinh\hbar\omega\frac{1}{2}\beta+\coth\hbar\omega\frac{1}{2}\beta\cdot(\hbar\omega\frac{1}{2}/T)$ を得る。
これを使って、$E=F+TS=(\frac{1}{2}\hbar\omega)\coth\hbar\omega\frac{1}{2}\beta$ を得る。
高温の極限($\beta\to 0$)では、$E\simeq(\frac{1}{2}\hbar\omega)\cdot 1/\hbar\omega\frac{1}{2}\beta=k_{\mathrm{B}}T$ となり、運動エネルギーとポテンシャルエネルギーにそれぞれ$\frac{1}{2}k_{\mathrm{B}}T$ずつ等分配されている。

〔問3〕4準位系(エネルギー$0,\varepsilon,2\varepsilon,3\varepsilon$)で3つの粒子があるとする。イ)古典統計に従う場合(＝粒子がお互いに触れ合わない)、ボース統計に従う場合、フェルミ統計に従う場合、の三つに分けて可能な配置と場合の数を図示せよ。ロ)そして集まりやすさの違いを述べよ。(ヒント)3つとも同じ準位、2 つだけ同じ準位、みんなバラバラ、と分けると良い。全部で20通り。

	−	−	−	○○○	−	−	○	−	−	○	−	−	○	○○	○○	○○	−	○	○	○
	−	−	○○○	−	−	○	−	−	○	−	○○	○○	○○	−	−	○	○	−	○	○
	−	○○○	−	−	○	−	−	○○	○○	○○	−	○	−	−	○	−	○	○	−	○
	○○○	−	−	−	○○	○○	○○	○	−	−	○	−	−	○	−	−	○	○	○	−
場合の数																				
古典	1	1	1	1	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	6	6	6	6
F	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1
B	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

フェルミオンは絶対に集まらず、完全にバラバラ。古典粒子はボソンよりもばらばらになる確率が高い。

〔問4〕 二次相転移する系においてヘルムホルツの自由エネルギーが$F = x^4 + ax^2$ で与えられる。但し$a = a_0 \cdot (T - T_\mathrm{C})$であり、$T_\mathrm{C}$ とa_0は正の定数とする。イ)Fの最小値を与えるxの温度依存性を求め、グラフ(横軸T)にせよ。ロ)次にFが極小値を取るところでのFの曲率$(= (\partial^2 F/\partial x^2)^{-1}$)を求め、これらもグラフにせよ。余談)最後のは臨界発散と呼ばれる。

$dF/dx = 4x^3 + 2a_0(T - T_\mathrm{C})x = 0$ より、4次関数の形を思い浮かべれば極小値は、$T > T_\mathrm{C}$では$x_\mathrm{min} = 0$、$T < T_\mathrm{C}$では$x_\mathrm{min} = \sqrt{a_0(T_\mathrm{C} - T)/2}$
$F'' = 12x^2 + 2a$ であるので、$T > T_\mathrm{C}$では$1/F''(0) = 1/2a = 1/2a_0(T - T_\mathrm{C})$ 、一方、
$T < T_\mathrm{C}$では、$1/F''\left(\sqrt{a_0(T_\mathrm{C} - T)/2}\right) = 1/\left(12\,a_0(T_\mathrm{C} - T)/2 + 2a_0(T - T_\mathrm{C})\right) = 1/4a_0(T_\mathrm{C} - T)$

〔問5〕 相互作用するスピン$S_{iz} = \pm½$のエネルギーが$E = \sum_{\langle i,j\rangle} -J\,S_{jz}S_{iz}$ と与えられる。但し$\langle i,j\rangle$ は相互作用するペア、J は正の定数である。ここで変数S_{iz} を平均値$\langle S_{iz}\rangle$ で近似すると、$E = \sum_i\ -g\mu_\mathrm{B}B_\mathrm{eff}S_{iz}$ と書ける。但し、$B_\mathrm{eff} = J\langle S_{iz}\rangle z$ であり、また、スピンi と相互作用する周囲のスピンの個数をz個とし、g と$g\mu_\mathrm{B}$ は正の定数である。イ)一体の分配関数Zを求め、これを使って$\langle S_{iz}\rangle$ を求め、$\langle S_{iz}\rangle > 0$ となる条件を示せ。ヒント)磁化 $M = g\mu_\mathrm{B}\langle S_{iz}\rangle = -\partial F/\partial B$ 　ロ)$\langle S_{iz}\rangle$ が小さい場合の温度依存性をT とT_C のみを使って書け。ヒント)$x \ll 1$ では $\tanh x \simeq x - x^3/3$ である(この近似を必ず使え)。

片方のスピン変数S_{iz}のみを平均値$\langle S_{iz}\rangle$で置き換える。S_{jz}と相互作用しているスピンはz個であるから$E = \sum_j\ -J\,zS_{jz}\langle S_{iz}\rangle$となる。ここで$Jz\langle S_{iz}\rangle = g\mu_\mathrm{B}B_\mathrm{eff}$ と置けば、$E = \sum_j\ -g\mu_\mathrm{B}B_\mathrm{eff}\,S_{jz}$ となって、相互作用のないスピン系の話と等価になる。
よってただちに、$Z = e^{+½g\mu_\mathrm{B}B_\mathrm{eff}\beta} + e^{-½g\mu_\mathrm{B}B_\mathrm{eff}\beta} = 2\cosh ½g\mu_\mathrm{B}B_\mathrm{eff}\beta$ を得る。これより$F = -k_\mathrm{B}T\log 2\cosh ½g\mu_\mathrm{B}B_\mathrm{eff}\beta$ となる。
さらに、熱力学の関係式より、磁化の式 $M = -\partial F/\partial B_\mathrm{eff} = k_\mathrm{B}T\,\frac{\sinh ½g\mu_\mathrm{B}B_\mathrm{eff}\beta}{\cosh ½g\mu_\mathrm{B}B_\mathrm{eff}\beta}\cdot ½g\mu_\mathrm{B}\beta =\ ½g\mu_\mathrm{B}\tanh ½g\mu_\mathrm{B}B_\mathrm{eff}\beta$ を得る。
ここで磁化は$M = g\mu_\mathrm{B}\langle S_{iz}\rangle$ であるから、$\langle S_{iz}\rangle = ½\tanh\frac{½g\mu_\mathrm{B}B_\mathrm{eff}}{k_\mathrm{B}T}$ を得る。
右辺のB_effを再び元に戻せば、$\langle S_{iz}\rangle = ½\tanh\frac{½Jz\langle S_{iz}\rangle}{k_\mathrm{B}T}$ と言う式になる。これが$\langle S_{iz}\rangle \neq 0$の解を持つ条件は、「右辺の原点の勾配＞1」であるから、
$\left[\frac{½}{\cosh^2 ½Jz\langle S_{iz}\rangle\beta}\cdot ½Jz\beta\right]_{\langle S_{iz}\rangle=0} = \frac{Jz}{4k_\mathrm{B}T} > 1$ を得る。よって$T_\mathrm{C} = \frac{Jz}{4k_\mathrm{B}}$ となる。

次に$\langle S_{iz}\rangle$が小さい場合と言うのは温度がわずかにT_Cより低い状態である。このとき、$\langle S_{iz}\rangle \simeq ½\left(\frac{½Jz\langle S_{iz}\rangle}{k_\mathrm{B}T} - \left(\frac{½Jz\langle S_{iz}\rangle}{k_\mathrm{B}T}\right)^3\right) = ½\left(\frac{2T_\mathrm{C}\langle S_{iz}\rangle}{T} - \left(\frac{2T_\mathrm{C}\langle S_{iz}\rangle}{T}\right)^3\right)$
であるから、
$1 \simeq ½\left(\frac{2T_\mathrm{C}}{T} - \left(\frac{2T_\mathrm{C}}{T}\right)^3\langle S_{iz}\rangle^2\right)$ となる。よって、$\langle S_{iz}\rangle^2 \simeq \frac{2T_\mathrm{C}/T - 2}{(2T_\mathrm{C}/T)^3} = T^2\cdot\frac{2T_\mathrm{C} - 2T}{8T_\mathrm{C}^3} = T^2\cdot\frac{T_\mathrm{C} - T}{4T_\mathrm{C}^3} = \frac{T^2}{4T_\mathrm{C}^3}\cdot(T_\mathrm{C} - T)$

感想、または、来学期の量子統計と物質科学入門(大槻先生、桑原先生)、さ来学期の低温電子物性(後藤)に向けて抱負をどうぞ