

問1. 磁場中におかれた  $S = 1/2$  の局在スピンの系について考えよう。スピンは  $S_z = \pm 1/2$  の状態をとるものとし、磁場  $B$  におけるゼーマンエネルギーが  $\varepsilon = g\mu_B S_z B$  で与えられるとしたとき、内部エネルギー  $E$  と自由エネルギー  $F$  を求め、 $T = 0 \sim +\infty$  での温度依存性をグラフにせよ。ここで  $B > 0$  であり、また、 $g$  と  $\mu_B$  は定数である。

問2. 粒子のエネルギーが、 $\varepsilon = \hbar\omega(n + 1/2)$  と与えられる ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ) とき分配関数  $Z$  を求めよ。さらに自由エネルギー  $F$  とエントロピー  $S$  を求め、内部エネルギー  $E = F + TS$  を求め、 $E$  を温度で微分して比熱  $C$  を求め、 $C$  が低温と高温の極限でどのような振る舞いをするか調べよ。

問3. 相互作用するスピン集団のエネルギーが  $E = \sum_{\langle i, j \rangle} -J S_{iz} S_{jz}$  と与えられるとする。ここで変数  $S_{iz}$  を平均値  $\langle S_{iz} \rangle$  と近似と、エネルギーは  $E = \sum_i -g\mu_B B_{\text{eff}} S_{iz}$  と書ける。

但し、 $S_{iz} = \pm 1/2$  であり、 $\langle i, j \rangle$  は相互作用するペア、 $J$  は相互作用の強さを表す正の定数とし、また、スピン  $S_{iz}$  の周囲に居て  $S_{iz}$  と相互作用するスピンの個数を  $z$  する。

- イ)  $g\mu_B B_{\text{eff}} = J \langle S_{iz} \rangle z$  を簡潔に示せ
- ロ) 一粒子の分配関数  $Z$  を求めよ
- ハ)  $Z$  を規格化に使うて  $\langle S_{iz} \rangle$  を求める式を導出せよ
- ニ) 前の (ハ) の式が  $\langle S_{iz} \rangle \neq 0$  の解を持つ条件を求めよ

問4. 異なる三つのエネルギー準位に二つの粒子を詰めることを考えよう。古典粒子、ボソン、フェルミオンについて、可能な配置と場合の数を図示せよ (表でも可)。注意) 粒子数は3ではなく2である。粒子のスピンは考えない。

$$\begin{aligned}
 \text{自己責任で使用 } \beta &= \frac{1}{k_B T} & \frac{\partial \beta}{\partial T} &= \frac{-1}{k_B T^2} & \sinh x &= \frac{e^x - e^{-x}}{2} & \sinh(x \approx 0) &\approx x & \cosh x &= \frac{e^x + e^{-x}}{2} & \cosh(x \rightarrow \infty) &\approx \frac{1}{2} e^x \\
 \cosh(x \approx 0) &\approx 1 + \frac{1}{2} x^2 & \tanh x &= \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} & \tanh(x \approx 0) &\approx x & \tanh(x \rightarrow \infty) &\approx 1 - 2e^{-2x} & \frac{\partial}{\partial T} e^{\hbar\omega\beta} &= -\frac{\hbar\omega}{k_B T^2} e^{\hbar\omega\beta} \\
 \tanh' x &= \frac{1}{\cosh^2 x} & \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} &= \frac{e^{\hbar\omega\beta}}{(e^{\hbar\omega\beta} - 1)^2} \frac{\hbar\omega}{k_B T^2} & \frac{\partial}{\partial T} \log(1 - e^{-\hbar\omega\beta}) &= \frac{-e^{-\hbar\omega\beta}}{1 - e^{-\hbar\omega\beta}} \cdot \frac{\hbar\omega}{k_B T^2} & 1 + z + z^2 + \dots &= \frac{1}{1-z}
 \end{aligned}$$

問1. 磁場中におかれた  $S = 1/2$  の局在スピンの系について考えよう。スピンは  $S_z = \pm 1/2$  の状態をとるものとし、磁場  $B$  におけるゼーマンエネルギーが  $\varepsilon = g\mu_B S_z B$  で与えられるとしたとき、内部エネルギー  $E$  と自由エネルギー  $F$  を求め、 $T = 0 \sim +\infty$  での温度依存性をグラフにせよ。ここで  $B > 0$  であり、また、 $g$  と  $\mu_B$  は定数である。

$$F = -k_B T \log Z = -k_B T \log(2 \cosh \frac{1}{2} g\mu_B B\beta) \quad \text{注) } O(\dots) \text{ は微小量のオーダーを表す}$$

$$F(T \approx 0) \approx -k_B T \log(e^{\frac{1}{2} g\mu_B B\beta}) = -k_B T (\frac{1}{2} g\mu_B B\beta) = -\frac{1}{2} g\mu_B B - O(e^{-g\mu_B B\beta})$$

$$F(T \approx \infty) \approx -k_B T \log(2 \cdot (1 + (\frac{1}{2} g\mu_B B\beta)^2)) \approx -k_B T (\log 2 + O(T^{-2}))$$

$$E = -\frac{1}{2} g\mu_B B \tanh(\frac{1}{2} g\mu_B B\beta)$$

$$E(T \approx 0) \approx -\frac{1}{2} g\mu_B B + O(e^{-g\mu_B B\beta}), \quad E(T \approx \infty) \approx -(\frac{1}{2} g\mu_B B)^2 \beta \propto 1/T$$

問2. 粒子のエネルギーが、 $\varepsilon = \hbar\omega(n + 1/2)$  と与えられるとき分配関数  $Z$  を求めよ。さらに、自由エネルギー  $F$  とエントロピー  $S$  を求め、内部エネルギー  $E = F + TS$  を求め、 $E$  を温度で微分することで比熱  $C$  を求め、 $C$  が低温と高温の極限でどのような振る舞いをするか調べよ。

$$F = -k_B T \log Z = -k_B T \log(e^{-\hbar\omega(\frac{1}{2})\beta} + e^{-\hbar\omega(1+\frac{1}{2})\beta} + \dots) = -k_B T \log(e^{-\frac{1}{2}\hbar\omega\beta} \cdot (1 + e^{-\hbar\omega\beta} + e^{-2\hbar\omega\beta} + \dots)) = -k_B T \left( -\frac{\hbar\omega\beta}{2} + \log\left(\frac{1}{1-e^{-\hbar\omega\beta}}\right) \right) = \frac{\hbar\omega}{2} + k_B T \log(1 - e^{-\hbar\omega\beta})$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -k_B \log(1 - e^{-\hbar\omega\beta}) - \frac{-k_B T e^{-\hbar\omega\beta}}{1 - e^{-\hbar\omega\beta}} \cdot \left( -\frac{\hbar\omega}{k_B(-T^2)} \right) \text{ より、} E = F + TS = \frac{\hbar\omega}{2} \coth \frac{\hbar\omega\beta}{2}, \text{ よって、}$$

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{1}{4 \sinh^2 \frac{1}{2} \hbar\omega\beta} \frac{(\hbar\omega)^2}{k_B T^2}, \text{ 低温 } (\beta \approx \infty) \text{ では } C(T \approx 0) \approx e^{-\hbar\omega\beta} \frac{(\hbar\omega)^2}{k_B T^2} \rightarrow 0 \quad (E_{\text{gap}} = \hbar\omega)$$

$$\text{高温では、} C(T \approx \infty) = \frac{1}{4 \cdot (\frac{1}{2} \hbar\omega\beta)^2} \frac{(\hbar\omega)^2}{k_B T^2} = k_B \quad (\text{バネと運動エネルギーの等分配則})$$

問3. 相互作用するスピン集団のエネルギーが  $E = \sum_{\langle i,j \rangle} -J S_{iz} S_{jz}$  と与えられるとする。ここで変数  $S_{iz}$  を平均値  $\langle S_{iz} \rangle$  と近似と、エネルギーは  $E = \sum_i -g\mu_B B_{\text{eff}} S_{iz}$  と書ける。但し  $S_{iz} = \pm 1/2$  で、 $\langle i,j \rangle$  は相互作用するペア、 $J$  は相互作用の強さを表す正の定数として、スピン  $S_{iz}$  の周囲に居て  $S_{iz}$  と相互作用するスピンの個数を  $z$  する。

イ)  $g\mu_B B_{\text{eff}} = J \langle S_{iz} \rangle z$  を簡潔に示せ      ロ) 一粒子の分配関数  $Z$  を求めよ。      ハ)  $Z$  を規格化にして  $\langle S_{iz} \rangle$  を求める式を導出せよ      ニ) 前の(ハ)の式が  $\langle S_{iz} \rangle \neq 0$  の解を持つ条件を求めよ。

$$E \approx \sum_i -J z \langle S_{iz} \rangle S_{iz} = \sum_i -g\mu_B B_{\text{eff}} S_{iz}, \quad Z = e^{-(-\frac{1}{2})g\mu_B B_{\text{eff}}\beta} + e^{-\frac{1}{2}g\mu_B B_{\text{eff}}\beta}$$

$$\langle S_{iz} \rangle = \frac{\frac{1}{2} e^{\frac{1}{2}g\mu_B B_{\text{eff}}\beta} - \frac{1}{2} e^{-\frac{1}{2}g\mu_B B_{\text{eff}}\beta}}{Z} = \frac{1}{2} \tanh(\frac{1}{2} g\mu_B B_{\text{eff}}\beta) \quad \text{この式を} \langle S_{iz} \rangle \text{ が変数であるとして解く。}$$

$\langle S_{iz} \rangle \neq 0$  の解が存在するためには右辺の原点での勾配が1以上であるから、右辺の変数を戻せば、 $= \frac{1}{2} \tanh(\frac{1}{2} J \langle S_{iz} \rangle z \beta)$  となるので、 $\frac{\partial}{\partial \langle S_{iz} \rangle} \frac{1}{2} \tanh(\frac{1}{2} J \langle S_{iz} \rangle z \beta) = \frac{\frac{1}{4} J z \beta}{\cosh^2(\frac{1}{2} J \langle S_{iz} \rangle z \beta)} \Big|_{\langle S_{iz} \rangle = 0} = \frac{1}{4} \frac{J z}{k_B T} > 1$

が、スピンの自発的に揃う条件と言うことになる。

問4. 異なる三つのエネルギー準位に二つの粒子を詰めることを考えよう。古典粒子、ボソン、フェルミオンについて、可能な配置と場合の数を図示せよ(表でも可)。注意) 粒子数は3ではなく2。粒子のスピンは考えなくても良い。

準位						
第一準位の粒子数	0	0	2	0	1	1
第二準位の粒子数	0	2	0	1	1	0
第三準位の粒子数	2	0	0	1	0	1
古典粒子の場合の数	1	1	1	2	2	2
ボース粒子の場合の数	1	1	1	1	1	1
フェルミ粒子の場合の数	0	0	0	1	1	1

自己責任で使用  $\beta = \frac{1}{k_B T}$      $\frac{\partial \beta}{\partial T} = \frac{-1}{k_B T^2}$      $\sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$      $\sinh(x \approx 0) \approx x$      $\cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$      $\cosh(x \rightarrow \infty) \approx \frac{1}{2} e^x$

$\cosh(x \approx 0) \approx 1 + \frac{1}{2} x^2$      $\tanh x = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$      $\tanh(x \approx 0) \approx x$      $\tanh(x \rightarrow \infty) \approx 1 - 2e^{-2x}$      $\frac{\partial}{\partial T} e^{\hbar\omega\beta} = -\frac{\hbar\omega}{k_B T^2} e^{\hbar\omega\beta}$

$\tanh' x = \frac{1}{\cosh^2 x}$      $\frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{e^{\hbar\omega\beta} - 1} = \frac{e^{\hbar\omega\beta}}{(e^{\hbar\omega\beta} - 1)^2} \frac{\hbar\omega}{k_B T^2}$      $\frac{\partial}{\partial T} \log(1 - e^{-\hbar\omega\beta}) = \frac{-e^{-\hbar\omega\beta}}{1 - e^{-\hbar\omega\beta}} \cdot \frac{\hbar\omega}{k_B T^2}$      $1 + z + z^2 + \dots = \frac{1}{1-z}$