お名前〔　　〕番号〔　　〕　理工2017試験　統計力学解答用紙　1／18(木)2限　6－304　SCT69000 担当 後藤貴行

〔問1〕二準位系のエネルギー準位を$\varepsilon_\pm = \pm B\mu_\mathrm{B}$（但しは$B$磁場，$\mu_\mathrm{B}$ は定数)とし，各エネルギー準位$\varepsilon_\pm$ の粒子占有数を $n_\pm$ とする。ここで粒子総数を$N = n_+ + n_-$とする。 イ)n_+及びn_-を求め，横軸を温度T のグラフを描け。 ロ）磁化$M = (n_- - n_+)\cdot\mu_\mathrm{B}$ を求め，横軸T のグラフを描け。 ハ）高温かつ低磁場極限において，Mはどのような法則で表わされるかを求めよ。またその法則名の元になった科学者の名前をフルネームで答えよ。

$P = Ce^{-\varepsilon\beta}$より，$n_+ = NP(\varepsilon_+) = NCe^{-\beta B\mu}$，$n_- = NP(\varepsilon_-) = NCe^{+\beta B\mu}$，ここで$N = n_+ + n_- = NC\left(e^{-\beta B\mu} + e^{+\beta B\mu}\right)$より，$C = \frac{1}{e^{-\beta B\mu}+e^{+\beta B\mu}}$

$M = (n_- - n_+)\cdot\mu_\mathrm{B} = \mu_\mathrm{B} N \tanh\beta B\mu_\mathrm{B} \simeq N\beta B\mu_\mathrm{B}^2 = \frac{NB\mu_\mathrm{B}^2}{k_\mathrm{B}T}$

〔問2〕 ヘルムホルツの自由エネルギーFが，秩序変数x に対して、$F(x) = x^4 - ax^2$ のようになっており，aは温度Tに対し $a(T) = a_0\cdot(T_\mathrm{C} - T)$ のように振る舞うとする。但しT_C , a_0 は正の定数とする。 イ)Fの極小値を与える秩序変数x の温度依存性を求めグラフを描け。なお，縦軸に $T = 0$ における秩序変数x，横軸には T_C の位置を書き入れること。 ロ)Fの極小値の温度依存性をグラフに描き，$F(0)$の値と比べ，相転移の起こるようすを説明せよ。

$4x^3 - 2ax = 0$，$x = \sqrt{½a_0(T_\mathrm{C} - T)}$，$F = ¼a_0^2(T_\mathrm{C} - T)^2 - a_0(T_\mathrm{C} - T)½a_0(T_\mathrm{C} - T) = -¼a_0^2(T_\mathrm{C} - T)^2$

感想をどうぞ

〔問3〕 相互作用するスピン$S_{iz}=\pm½$ の磁場B中でのエネルギーが $\varepsilon=\sum_{\langle i,j\rangle}-J\,S_{jz}S_{iz}-\sum_i\ -g\mu_{\mathrm{B}}S_{iz}B$ と与えられるとする。ここで $\langle i,j\rangle$ は相互作用するスピンのペアであり，J，g，μ_B は正の定数である。ここで変数S_{iz} を平均値$\langle S_{iz}\rangle$ で近似し，スピンi と相互作用する周囲のスピンの個数をz個とすれば，$\varepsilon=\sum_i\ -g\mu_{\mathrm{B}}S_{iz}\,B_{\mathrm{eff}}$ と書ける。但し $B_{\mathrm{eff}}=B+\langle S_{iz}\rangle Jz/g\mu_{\mathrm{B}}$ を分子場と呼ぶ。 イ）一体の分配関数Z を書け。 ロ）$\langle S_{iz}\rangle$ を与える表式を求めよ。ヒント $\frac{\Sigma S_{iz}\times 確率}{\Sigma\,確率}$ である（解く必要なし）。 ハ）高温で，$\langle S_{iz}\rangle$ はどのような近似式で表わされるか求め，温度依存性のグラフを描け。 注）高温だけでよい。

$Z=e^{-½\beta g\mu_{\mathrm{B}}B_{\mathrm{eff}}}+e^{+½\beta g\mu_{\mathrm{B}}B_{\mathrm{eff}}}=2\cosh ½\beta g\mu_{\mathrm{B}}B_{\mathrm{eff}}$，$S_{iz}=½$の方が低エネルギーとして，$\langle S_{iz}\rangle=\frac{(-½)e^{-½\beta g\mu_{\mathrm{B}}B_{\mathrm{eff}}}+(+½)e^{+½\beta g\mu_{\mathrm{B}}B_{\mathrm{eff}}}}{Z}=½\tanh ½\beta g\mu_{\mathrm{B}}B_{\mathrm{eff}}$

$\langle S_{iz}\rangle\simeq ½\cdot ½\beta g\mu_{\mathrm{B}}B_{\mathrm{eff}}=¼\beta g\mu_{\mathrm{B}}(B+\langle S_{iz}\rangle Jz/g\mu_{\mathrm{B}})=¼\beta g\mu_{\mathrm{B}}B+¼\beta\langle S_{iz}\rangle Jz$，$\therefore\langle S_{iz}\rangle(k_{\mathrm{B}}T-¼Jz)=¼g\mu_{\mathrm{B}}B$，$\langle S_{iz}\rangle=½\cdot\frac{½g\mu_{\mathrm{B}}B}{(k_{\mathrm{B}}T-¼Jz)}$

〔問4〕 質量m の単原子理想気体分子N個が体積Vの箱に入っている。 イ）ギブスの補正（$1/N!$）及び不確定性原理($dx\cdot dp\simeq h$) を考慮して，分配関数Z を求めよ。ロ）ヘルムホルツの自由エネルギーFを求めよ。 ハ）熱力学公式 $p=-\partial F/\partial V$ を用いて公式を導け。 ニ） 比熱の等分配則を導け。ヒント $\log AB=\log A+\log B$，$\log C^n=n\log C$ などを上手く使うこと。また，ガウス積分の値は$\sqrt{\pi}$ である。

$Z=\Sigma_{全ての粒子の状態}e^{-\beta\varepsilon}=\frac{1}{h^{3N}N!}\int d^3\vec{x}_1d^3\vec{p}_1\ldots d^3\vec{x}_Nd^3\vec{p}_Ne^{-\beta\varepsilon}=\frac{V^N}{h^{3N}N!}\int d^3\vec{p}_1\ldots d^3\vec{p}_Ne^{-\beta\varepsilon}=\frac{V^N}{h^{3N}N!}\left(\int d^3\vec{p}_1e^{-\beta\vec{p}_1^2/2m}\right)^N=\frac{V^N}{h^{3N}N!}\left(\int dpe^{-\beta p^2/2m}\right)^{3N}$

$=\frac{V^N}{h^{3N}N!}\left(\int\frac{1}{\sqrt{\beta/2m}}d\xi e^{-\xi^2}\right)^{3N}=\frac{V^N}{h^{3N}N!}\left(\sqrt{\frac{\pi}{\beta/2m}}\right)^{3N}$

$F=-k_{\mathrm{B}}T\log\frac{V^N}{h^{3N}N!}\left(\sqrt{2m\pi k_{\mathrm{B}}T}\right)^{3N}=-k_{\mathrm{B}}T\left(N\log V-3N\log h-N\log N+N+3N\log\sqrt{2m\pi k_{\mathrm{B}}T}\right)$

$p=-\partial F/\partial V=k_{\mathrm{B}}TN\cdot\frac{1}{V}$，$E=-T^2\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{F}{T}\right)=-T^2\frac{\partial}{\partial T}(-k_{\mathrm{B}}\cdot 3N½\log(2m\pi k_{\mathrm{B}}T))=T^2\frac{\partial}{\partial T}(k_{\mathrm{B}}\cdot 3N½\log T)=k_{\mathrm{B}}\cdot 3N½T$,

$C=\frac{\partial E}{\partial T}=k_{\mathrm{B}}3N½$

〔問5〕 ある物質について低温で比熱を測定したら e^{-a/k_BT} に比例する温度依存性が得られた。イ）比熱の温度依存性をグラフに描け。 ロ） この実験結果から推定できることを述べよ。

$e^{-a/k_BT}\to 0(T\to 0),\to 1(T\to\infty)$，微分$=-\frac{-a}{k_{\mathrm{B}}T^2}e^{-a/k_BT}>0$ より、単調増加。