統計力学演習　第5回　小正準分布・正準分布

2011年5月24日

$\boxed{\text{問題 1}}$　[小正準分布による2準位系の計算]

N 個の磁性原子からなる磁性体を考える。各磁性原子は上向きスピン、下向きスピンの2状態をとるとし、その磁気モーメントを μ とする。磁性体には磁場 H がかかっていて、各原子はスピンが上向きの時は $-\mu H$、下向きの時は μH のエネルギーを持つ。

(1-1) N 個の磁性原子のうち上向きスピンの数が $N_\uparrow$ であるとき、磁性体の全エネルギー E を求めよ。

(1-2) N 個の磁性原子のうち、上向きスピンの数が $N_\uparrow$ となるような微視的状態数 W を求めよ。

(1-3) ボルツマンの公式 $S = k_B \log W$ から、エントロピー S を計算せよ。その際、スターリングの公式 $\log N! = N \log N - N$ を用いよ。

(1-4) 熱力学の公式 $1/T = \partial S/\partial E$ を用いて、温度 T の関数として磁性体のエネルギー $E = E(T)$ を計算せよ。

(1-5) 横軸:温度 T、縦軸:エネルギー $E(T)$ のグラフの概形を描け。

$\boxed{\text{問題 2}}$ [正準分布]

温度 T で熱平衡にある系を考える。系の取りうる全ての微視的状態に $n = 1, 2, 3, \cdots$ と通し番号をつけ、そのときの系のエネルギーを $E_1, E_2, E_3, \cdots$ とする。

(2-1) 正準分布によると、エネルギーが E_n であるような状態 n をとる確率 p_n は $e^{-\beta E_n}$ に比例する。ここで、β は逆温度 $\beta = 1/(k_B T)$ である。このとき、

$$p_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} \tag{1}$$

を示せ。ここで、Z は分配関数 (状態和)

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} \tag{2}$$

である。

(2-2) 系のエネルギー期待値 E は、$E = \displaystyle\sum_n p_n E_n$ と計算される。これは分配関数 Z を使って、

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z \tag{3}$$

と書けることを示せ。

(2-3) この結果とギブス・ヘルムホルツの式 $E = -T^2 \left[\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{F}{T}\right)\right]$ を比較することにより、

$$F = -\frac{1}{\beta} \log Z \tag{4}$$

を示せ。

$\boxed{\text{問題 3}}$ [正準分布による 2 準位系の計算]

問題 1 と同じ、磁性体に磁場をかけた系を考える。

(3-1) 分配関数 Z を計算せよ。

(3-2) ヘルムホルツの自由エネルギー F を計算せよ。

(3-3) エネルギー E を計算し、問題 (1-4) の結果と一致することを確かめよ。

(3-4) 絶対零度における磁性体のエネルギー $E(T \to 0)$ と、温度無限大におけるエネルギー $E(T \to \infty)$ を求め、その物理的意味を述べよ。