

# 統計力学I 演習問題V

1. 大きさ  $S$  のスピン角運動量  $S$  をもつ  $N$  個の磁性原子からなる系を考える。各原子は  $-g\mu_B S$  の磁気モーメントを持つ。一般の  $S$  の値について  $z$  方向の強さ  $H$  の磁場中では各原子は  $g\mu_B S^z H$ , ( $S^z = -S, -S + 1, \dots, S - 1, S$ ) のエネルギーを持つ  $2S + 1$  通りの状態をとり得る。スピン間の相互作用を無視するとき次の問に答えよ。
  - (a) この系の分配関数  $Z$ 、熱容量  $C$  を求め、高温 ( $k_B T \gg g\mu_B H$ ) 及び低温 ( $k_B T \ll g\mu_B H$ ) でのふるまいを調べよ。
  - (b) 磁化の磁場方向の成分の期待値  $M$  を求め、帯磁率  $\chi$  を求めよ。
  
2.  $N$  個の独立な磁性原子の集団を考える。それぞれの原子は大きさ  $S = 1$  のスピン角運動量  $S$  を持ち、磁気モーメント  $-g\mu_B S$  を持っているとする。また、結晶の異方性のため、異方性エネルギー  $DS_z^2$  ( $D > 0$ ) をもつとする。この系に  $z$  方向の磁場  $H$  がかかっている場合を考える。
  - (a) この磁性原子が  $z$  方向の磁場  $H$  中にあるとき、 $S_z = -1, 0, 1$  のそれぞれの状態での1つの磁性原子のエネルギーを求め、この磁性原子  $N$  個からなる系全体の分配関数  $Z$  を求めよ。
  - (b)  $H = 0$  の場合の熱容量  $C$  の表式を求め、低温 ( $k_B T \ll D$ )、高温 ( $k_B T \gg D$ ) での近似式を求めた上で、これをもとに  $C$  の温度依存性の概略を図示せよ。
  - (c)  $H \geq 0$  での、磁化  $M$  の表式を求め、低温  $k_B T \ll D$  の場合に磁化曲線の概略を図示せよ。
  - (d) 帯磁率  $\chi$  の表式を求め、温度依存性の概略を図示せよ。
  
3. (少し分量が多いので (a),(b),(c) それぞれを分担して解答してもらう予定)
 

ある分子のスピン状態がスピン  $S = 1$  の状態と  $S = 0$  の状態を取り得るとする。磁場のない時、 $S = 1$  の状態のエネルギーを  $J$ 、 $S = 0$  の状態のエネルギーを  $0$  とする。 $S = 1$  の状態はさらに  $S_z = 1, 0, -1$  の3つの状態を取り得る。 $S = 0$  の状態は  $S_z = 0$  の1つの状態しか取り得ない。この分子が  $N$  個、 $z$  方向の磁場  $H$  中にある。磁場との相互作用のエネルギーは  $g\mu_B S_z H$  と書けることに注意して次の問に答えよ。なお、スピン以外の自由度は考えないことにする。

  - (a)
    - i. 一つの分子のすべての可能な状態、その状態のエネルギーを列挙せよ。
    - ii. 分配関数  $Z$  を求めよ。
    - iii.  $H = 0$  での熱容量  $C$  を求めよ
    - iv.  $H \geq 0$  での磁化  $M$ 、帯磁率  $\chi$  の表式を求めよ。
  - (b)  $J > 0$  の場合
    - i.  $H = 0$  での熱容量  $C$  の低温  $k_B T \ll J$ 、高温  $k_B T \gg J$  での振る舞いを調べ、温度  $T$  の関数として概略を図示せよ。
    - ii. 帯磁率  $\chi$  の低温  $k_B T \ll J$ 、高温  $k_B T \gg J$  での振る舞いを調べ、 $\chi$  の温度依存性の概略を図示せよ。
    - iii. 低温  $0 < k_B T \ll J$ 、高温  $k_B T \gg J$  それぞれの場合について磁化曲線の概略を図示し、温度の変化に伴う磁化曲線の変化の様子を説明せよ。
  - (c)  $J < 0$  のとき、
    - i.  $H = 0$  での熱容量  $C$  の低温  $k_B T \ll |J|$ 、高温  $k_B T \gg |J|$  での振る舞いを調べ、温度  $T$  の関数として概略を図示せよ。

- ii. 帯磁率  $\chi$  の低温  $k_B T \ll |J|$ 、高温  $k_B T \gg |J|$  での振る舞いを調べ、 $\chi$  の温度依存性の概略を図示せよ。低温領域から高温領域への移り変わりのようすをわかりやすく図示するには、どのような量をプロットすればよいか工夫して示せ。
4.  $N$  個の 2 原子分子からなる体積  $V$  の理想気体を考える。この分子は二つの原子を結ぶ方向に大きさ  $p$  の電気双極子  $p_i$  をもち、重心のまわりに自由に回転できるものとする。また、分子間の相互作用は無視し、分子の運動は古典力学に従うとしてよい。

(a)  $z$  方向に強さ  $E$  の電場がかかっているとき、この系のハミルトニアンをかけ。

(b) この系の単位体積当たりの電気分極  $P = \frac{1}{V} \left\langle \sum_{i=1}^N p_i \right\rangle$  の  $z$  成分 (電場方向の成分) が

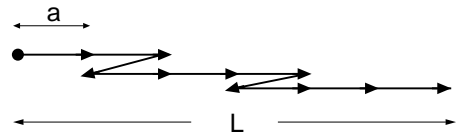
$$P = \rho p L(pE/k_B T), \quad \rho = N/V$$

と書けることを示せ。ただし、 $L(x) = \coth x - \frac{1}{x}$  (ランジュバン関数)。

(c) この物質の単位体積当たりの分極率  $\chi_e = \lim_{E \rightarrow 0} P/E$  を求めよ。 ( $|x| \ll 1$  で  $L(x) \simeq x/3$  となることを示して利用せよ)

5. (\*)  $N$  個の長さ  $a$  の単量体からなる図のような 1 次元的なゴムのモデルを考える。それぞれの単量体は両端で隣の単量体とつながっているが、その間の角度は 0 度または 180 度しか取れないものとし、この二つの状態でエネルギーの差はないものとする。

(a) 長さを  $L$  に固定したとき、とりうる状態の数  $W$  を求め、エントロピー  $S$  を求めよ。また、これを用いて、張力  $X$  を求めよ。

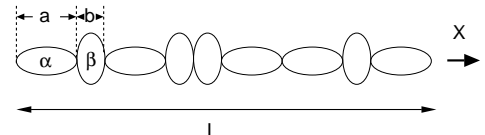


(b)  $X \rightarrow 0$  と  $X \rightarrow \infty$  での  $L$  の振る舞いを調べ、 $L$  の  $X$  依存性の概略を図示せよ。

(c) 張力  $X$  が与えられたとして、 $X =$  一定のカノニカル分布の考え方で長さ  $L$  の期待値を求めよ。

6.  $N$  個の単量体からなる図のような 1 次元的な鎖を考える。それぞれの単量体は  $\alpha$ 、 $\beta$  の 2 通りの状態をとり得る。それぞれの状態での単量体の長さは図に示すように  $a$ 、 $b$  ( $a > b$ ) である。また、それぞれの状態での単量体のエネルギーを  $0$ 、 $\epsilon$  とする。2 つの状態を区別するのに  $s_i$  という変数を導入し、 $i$  番目の要素が  $\alpha$  の状態のとき  $s_i = 0$ 、 $\beta$  の状態のとき  $s_i = 1$  と表すことにする。温度を  $T$  とする。

(a) 全体の長さ  $L$  を  $a$ 、 $b$ 、 $s_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ) を用いて  $x$  で表せ。また、全エネルギー  $E$  を  $\epsilon$ 、 $s_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ) を用いて表せ。



(b) 張力がかかっていないとき  $L$  の期待値 (自然長) を求め、 $\epsilon > 0$  の場合と  $\epsilon < 0$  の場合に分けて、 $L$  の温度依存性の概略を図示せよ。

(c) 張力  $X$  がかかっているとき  $L$  の期待値を求め、自然長からの伸び  $\Delta L$  が小さいとき、 $\Delta L$  は  $X$  に比例する ( $\Delta L = \kappa X$ ) ことを示し、比例係数  $\kappa$  を求めよ。

(d) 高温  $k_B T \gg |\epsilon|$  と低温  $k_B T \ll |\epsilon|$  での  $\kappa$  の振る舞いを調べ、温度依存性の概略を図示せよ。

(e) 十分低温 ( $|\epsilon| \gg k_B T$ ) での  $L$  と  $X$  の関係の概略を  $\epsilon > 0$  の場合と  $\epsilon < 0$  の場合に分けて図示せよ。(まずは  $T = 0$  の場合どうなるか考えよ。その他、前問までの結果なども参考にして考えるとよい)