

## 統計力学 II 演習問題 VII

1. a、b 2 種の同数の原子からなる合金を考える。原子同士は互いに最近接格子点にきたときのみ相互作用するものとし、そのエネルギーは

$$\begin{cases} E_{aa} & \text{aa 対} \\ E_{ab} & \text{ab 対} \\ E_{bb} & \text{bb 対} \end{cases}$$

とする。

高温では 2 種の原子は乱雑に混じり合っているが、低温では a が A 副格子、b が B 副格子（またはその逆）に多く分布する規則性の高い状態に相転移（規則・不規則相転移）することがある（副格子については前回の反強磁性体の場合と同じように考えよ。A 副格子が a ばかり、B 副格子が b ばかり（またはその逆）になれば完全に規則的である。）

a 原子、b 原子の数、A 副格子、B 副格子の格子点数を共に  $N/2$  とし、

$$\begin{cases} \text{A 副格子にある a 原子の数} & N_{Aa} \\ \text{A 副格子にある b 原子の数} & N_{Ab} \\ \text{B 副格子にある b 原子の数} & N_{Bb} \\ \text{B 副格子にある a 原子の数} & N_{Ba} \end{cases}$$

とする。

- (a)  $N_{Aa} = N_{Bb} = \frac{N}{4}(1+x)$ 、 $N_{Ab} = N_{Ba} = \frac{N}{4}(1-x)$ 、 $(0 \leq x \leq 1)$  と表せることを示せ。 $(N_{Aa} + N_{Ba} = N_{Ab} + N_{Bb} = N_{Aa} + N_{Ab} = N_{Ba} + N_{Bb} = N/2)$  に注意せよ。 $x = 0$  なら不規則相、 $x \neq 0$  なら規則相にあると考えられる。 $x$  をこの合金の規則度と呼ぶことにする。
- (b)  $x$  を与えたとき、とりうる状態の数  $W$  を求め、エントロピー  $S$  を  $x$  を用いて表せ。
- (c) 平均場近似の考え方にならうと、最近接原子対の数は

$$\begin{cases} \text{aa 対の数} & zN_{Aa}N_{Ba}/(N/2) \\ \text{ab 対の数} & z(N_{Aa}N_{Bb} + N_{Ab}N_{Ba})/(N/2) \\ \text{bb 対の数} & zN_{Ab}N_{Bb}/(N/2) \end{cases}$$

となることを示し、これを使ってエネルギー  $E$  の期待値を  $x$  で表せ。（ブラッグ・ウィリアムズ近似）

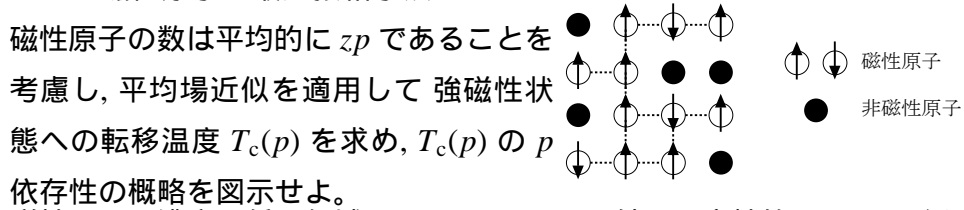
- (d) 基底状態が規則相であるために  $E_{aa}$ 、 $E_{ab}$ 、 $E_{bb}$  はどのような不等式を満たさなくてはならないか。
- (e) 前問の不等式が満たされる時、自由エネルギー  $F = E - TS$  が最小になる条件を求め、規則・不規則相転移の転移温度を求めよ。また、規則度  $x$  の温度依存性を調べよ。

2. 磁性原子と非磁性原子がランダムに混じった強磁性イジング模型のハミルトニアン

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j \quad (J > 0, S_i = \pm 1/2)$$

を考える。すべての格子点は磁性原子・非磁性原子のどちらかによって占められているが、非磁性原子はスピンを持たないので、 $\sum_{\langle i,j \rangle}$  は下の図の点線に示すような最近接格子点上にある磁性原子の対についての和であり、非磁性原子のいる格子点については和を取らない。格子点の総数を  $N$ 、最近接格子点の数を  $z$ 、磁性原子の割合を  $p$ 、非磁性原子の割合を  $1-p$  ( $0 \leq p \leq 1$ ) とする。

(a) 1つの磁性原子の最近接格子点上にある



(b) 磁性原子の濃度の低い領域 ( $p \ll 1$ ) では、この結果は定性的にも正しくなく、相転移は起きないことが知られている。なぜ、このような領域で平均場近似が悪くなるのか考察せよ。

3. 2次相転移のギンツブルグ・ランダウ理論を考える。秩序パラメーター  $m$  を決めたとときの格子点当たりの自由エネルギー  $f(m, T) (\equiv F(m, T)/N)$  は  $m$  の偶関数とし、 $m = 0$  のまわりで次のように展開できるとする。

$$f(m, T) = a_0(T) + \frac{a_2(T)}{2} m^2 + \frac{a_4(T)}{4} m^4 + \frac{a_6(T)}{6} m^6 + \frac{a_8(T)}{8} m^8 \dots$$

$a_4 > 0$  のとき、 $a_6$  以上を無視し、 $a_2 = \alpha(T - T_c)$  ( $\alpha > 0$ )、 $a_4$  は温度によらない定数とする。

(a) 自由エネルギー最小の条件から実際に実現する  $m$  の満たすべき方程式を求めよ。

(b)  $T_c$  の上下での  $m$  の振る舞いを調べ、 $T_c$  が相転移点になることを示せ。

(c) 実際に実現する状態の自由エネルギー  $f(T)$  の温度依存性を調べ、転移点近傍での比熱のとび  $\Delta C$  を求めよ。

秩序パラメーター  $m$  に共役な外場  $h$  をかけると  $f(m, T)$  に  $-mh$  という項が加わる。

(d)  $T > T_c$  で、外場が弱い場合、外場によって引き起こされる秩序パラメーター  $m$  の値を求め、感受率  $\chi = \lim_{h \rightarrow 0} m/h$  の温度依存性を求めよ。

(e) ちょうど  $T = T_c$  で、秩序パラメーター  $m$  に共役な外場  $h$  をかけたとき、外場によって引き起こされる秩序パラメーター  $m$  の値を求めよ。

(f)  $0 < T < T_c$  での感受率を  $\chi = \lim_{h \rightarrow 0} (m(T, h) - m(T, 0))/h$  で定義する。ただし、 $m(T, h)$  は温度  $T$ 、外場  $h$  のもとで実際に実現する  $m$  の値である。このとき  $\chi$  を求めよ。

4. 強磁性のイジングモデルの自由エネルギーを平均場近似で計算し、ギンツブルグ・ランダウ理論の  $\alpha$ 、 $a_4$  の具体的な表式を求めよ。ただし、秩序パラメーター

$m = \langle S_i \rangle$  とせよ。VI の 2 または 3 の結果を利用してよい。

5. 1 次相転移のギンツブルグ・ランダウ理論を考える

3 と同じ形の自由エネルギーを考え、 $a_4 < 0$ 、 $a_6 > 0$  とし、 $a_8$  以上を無視して次の間に答えよ。ただし、 $a_2 = \alpha(T - T^*)$ 、 $a_4$ 、 $a_6$  は温度によらない定数とする。

- (a) 転移温度  $T_c$  を求めよ。
- (b) 秩序パラメータ  $m$  の温度依存性の概略を図示せよ。
- (c) 相転移点における潜熱  $L$  を求めよ。

6. 強磁性体の磁化が格子ひずみと相互作用している系のギンツブルグ・ランダウ理論を考える。自由エネルギーが温度  $T$  および磁化  $M$  および格子ひずみ  $Q$  の関数として、

$$F(T, M, Q) = F(T, 0, 0) + \frac{a_2(T)}{2} M^2 + \frac{a_4(T)}{4} M^4 + \frac{b}{2} Q^2 + \lambda QM$$

と与えられるとする。ただし、 $\lambda = 0$  のときの強磁性の臨界温度を  $T_0$ 、 $a_2(T) = \alpha(T - T_0)$  とし、 $a_4$ 、 $\alpha$ 、 $b$  は正の定数とする。このとき、一般に  $\lambda \neq 0$  の時の転移温度  $T_c$  を求め、磁化  $M$ 、格子歪み  $Q$ 、比熱  $C$  が温度と共にどのように変化するかを調べよ。ただし、 $\lambda$  は温度によらず一定とする。

7. 転送行列法により磁場  $H$  中の 1 次元のスピン 1/2 のイジングモデル

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N S_i S_{i+1} - h \sum_{i=1}^N S_i \quad (S_i = \pm 1/2, h \equiv \mu H, \mu = -g\mu_B)$$

を考える。周期的境界条件  $S_{N+1} = S_1$  を課すものとする。なお、 $J$  の符号は正の場合（強磁性的）も負の場合（反強磁性的）も含めて考えること）

- (a) 転送行列法を用いて自由エネルギー  $F$  を求めよ。
- (b) 磁場  $h = 0$  の場合について、熱容量  $C$  を求め、その低温極限、高温極限の振る舞いを調べ、全温度領域で  $C$  の温度依存性の概略を図示せよ。
- (c)  $h$  のあるとき、温度  $T$  での磁化  $M (= \mu \langle \sum_{i=1}^N S_i \rangle)$  を求めよ
- (d) 温度  $T$  での磁化率  $\chi$  を求めよ。

以下の 2 問は  $J > 0$  の場合と  $J < 0$  の場合を区別して考えなくてはならないことに注意して解くこと。

- (e) 全温度領域で  $\chi$  の温度依存性の概略を図示せよ。
- (f) 温度  $T$  での磁化曲線の概略を図示せよ。また、磁化曲線全体が温度  $T$  とともにどのように変化するかを示せ。

8. 1 次元のスピン 1/2 の強磁性イジングモデルを開放端境界条件で考える。

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1}, \quad (S_i = \pm 1/2, J > 0)$$

- (a)  $T_i = 2S_i S_{i+1}$  ( $i = 1, \dots, N-1$ ) とおくとハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N-1} T_i, \quad (T_i = \pm 1/2, J > 0)$$

とかける。このことを利用して分配関数  $Z$ 、自由エネルギー  $F$  を求めよ。なお、もとの  $S_i$  は  $N$  個あるが、 $T_i$  は  $N - 1$  個しかないので、 $T_i$  だけでは微視的な状態を完全に指定できないことに注意せよ。

(b)

$$S_l S_{l+m} = 2^{m-2} \prod_{i=l}^{l+m-1} T_i$$

を示し、これを用いて相関関数  $\langle S_l S_{l+m} \rangle$  を求めよ。

(c) 相関関数が  $\langle S_l S_{l+m} \rangle \propto \exp(-m/\xi)$  のようにふるまうとき、 $\xi$  を相関距離という。 $\xi$  を求め、低温極限・高温極限での振る舞いを調べ、 $\xi$  の温度依存性の概略を図示せよ。

(d) 一般に帯磁率  $\chi$  は

$$\chi = \frac{\mu^2}{k_B T} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle S_i S_j \rangle$$

で与えられる。これを示し、これを用いて  $\chi$  を求めよ。

---

最後に、この講義で統計力学に興味を持った人と、この講義では統計力学のおもしろさが十分わからないと思った人のために、来年度のお勧めの講義

- 統計力学特論 臨界現象と繰り込み群、モンテカルロ法など 田村亮 (物質・材料研究機構)
- 集中講義 トポロジカル物質 山影相 (名古屋大学)

お楽しみに