

# 1 統計力学の復習

## 1.1 理想気体

体積  $V$  のなかに閉じ込められた  $N \gg 1$  個の単原子分子からなる理想気体をカノニカル分布で考えて見よう。この系のハミルトニアンは

$$H = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m}$$

で与えられる。

1. この時の分配関数

$$Z = \frac{1}{h^{3N} N!} \int \exp(-\beta H) d\vec{p}_1 \cdots d\vec{p}_N d\vec{x}_1 \cdots d\vec{x}_N$$

を求めよ。ただし、 $\beta = (k_B T)^{-1}$ 。

2. スターリングの公式を用い、自由エネルギー  $F$  を求めよ。 ( $F = -k_B T \log Z$  である。)
3. 理想気体の状態方程式を

$$p = - \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_T$$

から求めよ。

## 1.2 2 準位系

スピン  $1/2$  の粒子が磁場  $H$  の中に置かれると、ゼーマン効果により、エネルギー準位は粒子の持つ磁気モーメントを  $\mu$  として  $-\mu H$  と  $\mu H$  の 2 つに分かれる。このような粒子  $N$  個が一様磁場  $H$  のなかにおかれ、温度が  $T$  に保たれているとき、以下の問に答えよ。

1. 粒子は独立なので、系全体の分配関数  $Z$  は 1 粒子の分配関数  $Z_1$  の  $N$  乗で与えられる。 $Z_1$  を計算し、 $Z$  を求めよ。
2. 自由エネルギー  $F$  をもとめ、

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)$$

より、エントロピー  $S$  を求めよ。

3. 内部エネルギー  $U = F + TS$  を求めよ。
4. 全体の磁気モーメント  $M = -(\partial F / \partial H)$  を求めよ。
5. 比熱  $C = (\partial U / \partial T)_H$  を求め、温度の関数として図示せよ。

### 1.3 グランドカノニカル分布

グランドカノニカル分布の考え方をもちいて、理想気体の状態方程式を求めてみよう。 $N \gg 1$  個の単原子分子からなる理想気体を考えると、ハミルトニアンは

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m}$$

で与えられる。

#### 1. 大分配関数

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} \lambda^N Z_N$$

を求めよ。ただし、

$$Z_N = \frac{1}{h^{3N} N!} \int \exp(-\beta H) d\vec{p}_1 \cdots d\vec{p}_N d\vec{x}_1 \cdots d\vec{x}_N$$

であり、 $\beta = (k_B T)^{-1}$  である。

#### 2. 粒子数 $N$ の平均値

$$\langle N \rangle = \frac{\sum_{N=0}^{\infty} N \lambda^N Z_N}{\Xi} = \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln \Xi$$

を求めよ。

#### 3. 状態方程式は $pV = k_B T \ln \Xi$ で与えられることを用い、理想気体の状態方程式が

$$pV = \langle N \rangle k_B T$$

となることを示せ。

## 2 調和振動子とその応用

### 2.1 調和振動子

質量  $m$ 、固有角振動数  $\omega$  を持つ一次元の調和振動子のハミルトニアンは、

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2q^2$$

で与えられる。ここで、 $q$  は振動子の位置座標、 $p$  は運動量を表す。

1. 古典的には、分配関数は

$$Z_{cl} = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\beta H) dq dp$$

で与えられる。この分配関数  $Z_{cl}$  を計算せよ。ただし、 $\beta = (k_B T)^{-1}$  である。

2. 今度は量子的に分配関数を計算しよう。量子的には振動子のエネルギー準位  $\varepsilon_n$  は

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$

で与えられる ( $n$  はゼロ以上の整数、 $\hbar = h/(2\pi)$ ) ことを用い、量子的な分配関数

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta \varepsilon_n)$$

を求めよ。

3. 高温で、量子的に求めた分配関数  $Z$  が、古典的な分配関数に一致する事を確かめよ。
4. このような量子的な振動子  $N$  個からなる系を考える (以下ではすべて量子的な分配関数を用いよ)。それぞれの振動子はお互いに独立であるとして、その分配関数  $Z_N$  を求めよ。
5. この系の内部エネルギー  $U$  を求めよ。内部エネルギーは

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z_N$$

で与えられる。

6. この系の比熱  $C = (\partial U / \partial T)_N$  を求めよ。

### 2.2 格子比熱

固体中の原子はそれらの平衡点のまわりで振動する。この振動の固有モードを調和振動子とみなして、格子振動による比熱 (定積) を計算しよう。固有角振動数が  $\omega$  から  $\omega + d\omega$  の間にある固有振動のモード数  $g(\omega)d\omega$  を

$$\begin{aligned} g(\omega) &= \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_t^3} \right) \omega^2 \equiv \frac{9N}{\omega_D^3} \omega^2 & \omega \leq \omega_D \\ g(\omega) &= 0 & \omega > \omega_D \end{aligned}$$

と仮定したとき (Debye 近似)、以下の問に答えよ。ただし、ここで、 $c_l$ 、 $c_t$  はそれぞれ縦波、横波の速度であり、 $\omega_D$  は Debye 振動数と呼ばれ、

$$\int g(\omega)d\omega = 3N(\text{自由度の数})$$

できまる量である。

1. 角振動数  $\omega_j$  を持つ調和振動子の分配関数  $Z_j$  を求めよ。
2. お互いに独立な振動子の集まりの分配関数  $Z$  は、それぞれの分配関数の積で表される。 $(Z = \prod_i Z_i)$  したがって、この系の自由エネルギー  $F$  は、

$$F = -k_B T \sum_i \log Z_i$$

と表される。この和を  $g(\omega)$  を用いて積分に直し、 $F$  を  $g(\omega)$  を用いた積分の形で表せ。

3. この系の内部エネルギー  $U$  を求めよ。ただし、

$$U = -T^2 \left[ \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{F}{T} \right) \right]_{V,N}$$

である。

4. 定積比熱  $C_V = (\partial U / \partial T)_{V,N}$  を求めよ。
5. 比熱  $C_V$  の高温と低温での温度依存性を調べよ。

### 3 フェルミ粒子

#### 3.1 フェルミ分布関数

理想的なフェルミ粒子を考えよう。そこで、状態  $1, 2, 3, \dots, l, \dots$  とそれに対応するエネルギー  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \dots, \varepsilon_l, \dots$ 、および、粒子数  $n_1, n_2, n_3, \dots, n_l, \dots$  を考える。パウリ原理から、1つの状態には1個の粒子しか入れないので、粒子数  $n_l$  は  $n_l = 1$  または、 $n_l = 0$  の値しかとらない。このとき、全粒子数  $N$  および 全エネルギー  $E$  は  $N = \sum_l n_l$ 、および  $E = \sum_l n_l \varepsilon_l$  で与えられる。

1. この系の分配関数  $Z_N$  は、

$$Z_N = \sum_{\{n_l\}} \exp(-\beta \sum_l n_l \varepsilon_l)$$

である ( $\beta = (k_B T)^{-1}$ )。ここでの和  $\sum'$  は全粒子数  $N$  を固定した制限つきの和である。この分配関数  $Z_N$  を用いると、大分配関数  $\Xi(\beta, \mu)$  は、

$$\Xi(\beta, \mu) = \sum_{N=0}^{\infty} \exp(\beta \mu N) Z_N$$

で定義される。この大分配関数を求めよ。

2. 状態  $j$  における平均の粒子数  $\langle n_j \rangle$

$$\langle n_j \rangle = \sum_N \sum_{\{n_l\}} n_j \exp(-\beta E + \beta \mu N) / \Xi$$

を求め、そのエネルギー  $\varepsilon_j$  の関数として図示せよ。

ここで導入した  $\mu$  は化学ポテンシャルと呼ばれ、 $N = \sum_j \langle n_j \rangle$  から決まる量である。

#### 3.2 自由電子の状態密度

1.  $x = 0$  から  $x = L$  に配置された長さ  $L$  の線上に存在する1次元の電子系を考える。自由電子 (ポテンシャルエネルギー  $V = 0$ ) の時間に依存しない部分の波動関数  $\phi(x)$  を求めよ。
2. 境界条件として、 $\phi(x = 0) = \phi(x = L)$  を課するとき (周期的境界条件)、波数  $k$  の満たす条件が

$$k = \frac{2\pi n}{L} \quad (n = \text{整数})$$

となることを示せ。

3. 電子はパウリの排他則を満たすので、絶対零度では、そのエネルギーの小さなものから占有される。電子が  $N$  個あり、最高のエネルギーを有する電子の波数を  $k_F$  とし、かつスピンの自由度 (1状態に入れる電子数が2倍となる) を考慮したとき、 $N$  と  $k_F$  の関係を求めよ。
4. 自由電子のエネルギー  $\epsilon$  は

$$\epsilon = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}$$

で与えられることから、

$$N = \frac{2L}{\pi} \sqrt{\frac{2m\epsilon_F}{\hbar^2}}$$

がなりたつことを示した後、 $\epsilon_F$  を  $\epsilon_F + d\epsilon_F$  へ変化させたとき増加する粒子数を  $dN$  とすると、

$$D(\epsilon_F) = \frac{dN}{d\epsilon_F}$$

で定義される状態密度を求めよ。

5. 2次元自由電子系の状態密度がエネルギー  $\epsilon_F$  に依らず一定であることを示せ。

6. 3次元の場合、状態密度が

$$D(\epsilon_F) = \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{\epsilon_F}$$

で与えられることを示せ。

### 3.3 電子比熱

体積  $V$  の中に閉じ込められた3次元理想 Fermi 気体 (スピン  $1/2$ ) を考える。一粒子の運動量が  $p$  から  $p + dp$  の間にある状態数はスピン自由度を考慮すると、

$$2 \cdot V \frac{4\pi p^2 dp}{h^3}$$

で与えられる。

1. 一粒子の状態密度  $D(\epsilon)$  を求めよ。ただし、

$$\epsilon = \frac{p^2}{2m}$$

であり、 $D(\epsilon)$  は次式を満たすことに注意せよ。

$$D(\epsilon)d\epsilon = 2V \frac{4\pi p^2 dp}{h^3}$$

2. 全粒子数  $N$  は、Fermi 分布関数

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1}$$

を用いて

$$N = \int_0^\infty D(\epsilon)f(\epsilon)d\epsilon$$

で与えられる。この表式から絶対零度 ( $T = 0$ ) での化学ポテンシャル  $\mu_0$  を求めよ。

3. さて、今度は有限温度のときの化学ポテンシャルを求めよう。低温 ( $k_B T \ll 1$ ) では、

$$\int_0^\infty f(\epsilon)D(\epsilon)d\epsilon = \int_0^\mu D(\epsilon)d\epsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 D'(\mu) + \dots \quad (1)$$

と展開できることを用い、有限温度の化学ポテンシャル  $\mu(T)$  を  $(k_B T)$  の2次まで求めよ。

4. エネルギー  $E$

$$E = \int \varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$$

についても、展開 (1) を応用して、同じく  $(k_B T)^2$  まで展開すると、

$$E = \int_0^{\mu_0} \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 D(\mu_0) + \dots$$

と展開できることを示せ。

5. 上のエネルギーの表式を用い、比熱  $C_V = (\partial E / \partial T)_V$  を求めよ。

## 4 Bose 統計

### 4.1 Fermi 統計と Bose 統計

Fermi 粒子の分布関数をグランドカノニカル分布の方法を用いて求める。一粒子の状態、そのエネルギー、およびその状態にある粒子数をそれぞれ  $l, \varepsilon_l$ , および  $n_l$  で表すとすると ( $l = 1, 2, 3, \dots$ ), Fermi 粒子の場合は、パウリの原理から  $n_l = 1$  または  $n_l = 0$  である。系全体の全粒子数  $N$  は  $N = \sum_l n_l$ 、全エネルギーは  $E = \sum_l \varepsilon_l n_l$  で与えられる。

この場合の大状態和  $\Xi$  は化学ポテンシャルを  $\mu$  とすると、

$$\begin{aligned}\Xi(\mu, \beta) &= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n_l\}: \sum_l n_l = N} \exp(-\beta \sum_l \varepsilon_l n_l) \exp(\beta \mu N) \\ &= \sum_{\{n_l\}} \exp(-\beta \sum_l (\varepsilon_l - \mu) n_l)\end{aligned}$$

となる。ここで、全粒子数に関する和をとったことにより、 $\{n_l\}$  に関する制限  $\sum_l n_l = N$  が無くなっていることに注意しよう。このおかげで、大分配関数は容易に計算できる。まず、指数関数の肩にある  $l$  に関する和を降ろして、積の形に直すと、

$$\Xi(\mu, \beta) = \sum_{\{n_l\}} \prod_l \exp(-\beta(\varepsilon_l - \mu)n_l).$$

和と積の順番を入れ換えると、

$$\Xi(\mu, \beta) = \prod_l \sum_{n_l=1,0} \exp(-\beta(\varepsilon_l - \mu)n_l)$$

であるから、

$$\Xi(\mu, \beta) = \prod_l (1 + \exp(-\beta(\varepsilon_l - \mu)))$$

となる。

状態  $k$  の平均の粒子数を  $\langle n_k \rangle$  とすると、

$$\begin{aligned}\langle n_k \rangle &= \sum_N \sum_{\{n_l\}: \sum_l n_l = N} n_k \exp(-\beta \sum_l (\varepsilon_l - \mu) n_l) / \Xi(\mu, \beta) \\ &= -\frac{\partial}{\beta \partial \varepsilon_k} \log \Xi(\mu, \beta)\end{aligned}$$

より、

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{\exp(\beta(\varepsilon_k - \mu)) + 1}$$

となる。化学ポテンシャル  $\mu$  は粒子の数密度  $\rho = \langle N \rangle / V$  を与えると、

$$\rho = \frac{1}{V} \sum_l \frac{1}{\exp(\beta(\varepsilon_l - \mu)) + 1}$$

から決定される。

さて、以上を参考にして、Bose 粒子の場合を考えよう。Bose 粒子は同じ状態に何個でも入れるから、 $n_l$  は  $0, 1, 2, \dots, \infty$  の値をとるところが、Fermi 粒子と違う点である。

1. Bose 粒子の場合、大分配関数  $\Xi(\mu, \beta)$  を求めよ。
2. Bose 粒子の場合の、状態  $k$  の平均の粒子数  $\langle n_k \rangle$  を求めよ。



## 4.2 Bose-Einstein 凝縮

理想 Bose 粒子を考え、高密度で何が起こるか考えてみよう。Bose 粒子の場合、化学ポテンシャル  $\mu (\leq 0)$  を決める式は、熱力学的極限を考えて、和を積分に直すと

$$\rho = \frac{1}{V} \sum_l \langle n_l \rangle = 2\pi \left( \frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}}{\exp(\beta(\varepsilon - \mu)) - 1} d\varepsilon \quad (2)$$

で与えられる。ただし、スピン自由度は無視し、エネルギー  $\varepsilon$  は

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$$

である。

1. (2) の右辺を  $h(T, \mu)$  とおくと、

$$\rho = h(T, \mu), \quad h(T, \mu) \equiv 2\pi \left( \frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}}{\exp(\beta(\varepsilon - \mu)) - 1} d\varepsilon \quad (3)$$

となり、これを逆に解くことにより、化学ポテンシャル  $\mu$  が温度  $T$  と粒子数密度  $\rho$  の関数として求まる ( $\mu = \mu(T, \rho)$ )。ボーズ粒子の場合、粒子数の平均値が負にならないという物理的な要請から  $\mu \leq 0$  でなければならない。すると、 $h(T, \mu) \leq h(T, 0)$  が成り立つから、 $h(T, 0)$  がある温度  $T$  における粒子数密度の上限を与えていることがわかる。ここで、 $h(T, 0)$  を求めよ。ただし、

$$\int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{\exp(x) - 1} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \zeta(3/2)$$

を用いてよい。

2. 前問の結果から、粒子数密度  $\rho$  を固定し、温度を下げていくと、粒子数密度の上限は温度とともに減少することがわかる。一般に、上限  $h(T, 0)$  が  $\rho$  よりも大きければ、(3) を満たす負の  $\mu$  が存在する。高温 ( $\beta \ll 1$ ) の極限では、このようにして求まる化学ポテンシャル  $\mu$  が

$$\mu(T) = k_B T \left\{ \ln(\rho \lambda_T^3) - \frac{\rho}{2\sqrt{2}} \lambda_T^3 + \dots \right\}, \quad \lambda_T \equiv \left( \frac{h^2}{2\pi m k_B T} \right)^{1/2}$$

と展開できることを示せ。

3. さて、温度が

$$\rho = h(T_c, 0)$$

で決まる臨界温度  $T_c$  より低くなったらどうなるだろうか? このとき、臨界点で化学ポテンシャル  $\mu$  は  $\mu = 0$  となるが、 $\mu = 0$  のときは、エネルギー  $\varepsilon = 0$  の平均の粒子数  $\langle n_{\varepsilon=0} \rangle$  が発散していることに注意しなければならない。 $\mu = 0$  の場合、エネルギーゼロ ( $\varepsilon = 0$ ) の状態の粒子数はマクロな量になりうるのである。したがって、 $\varepsilon = 0$  の寄与は積分とは別に取り扱わねばならず、その寄与を  $\rho_0$  とすると  $T \leq T_c$  では、(2) は

$$\rho = \rho_0 + h(T, 0)$$

としなければならない。そして、 $T < T_c$  では化学ポテンシャルは常に  $\mu = 0$  となる。つまり、 $\varepsilon > 0$  の状態に入り切らない分が  $\varepsilon = 0$  の状態に吸収されるのである。この  $\rho_0$  が現れるということは、エネルギーがゼロという1つの状態にマクロな数の粒子がたまっていることを意味し、Bose-Einstein 凝縮と呼ばれる。この Bose-Einstein 凝縮の臨界温度  $T_c$  を粒子数密度の関数として求めよ。また、数密度  $\rho = 2.3 \times 10^{22} \text{cm}^{-3}$  をもつ  $^4\text{He}$  の臨界温度  $T_c$  はどのくらいの値になるか求めよ ( $\zeta(3/2) \approx 2.612$  を用いよ)

4.  $T < T_c$  での比熱

$$C_V = \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_{V,N}$$

の振舞い、および、高温極限 ( $\beta \ll 1$ ) での比熱の値を求めよ。

5. 1次元、および2次元では、このような Bose-Einstein 凝縮は起こらないことを示せ。

## 5 2原子分子の比熱

2原子分子の比熱について考えてみよう。2原子分子の場合、分子の内の回転や振動といった自由度も分配関数に寄与し、比熱などの振る舞いにその自由度が現れてくる。

### 5.1 回転自由度の古典的取り扱い

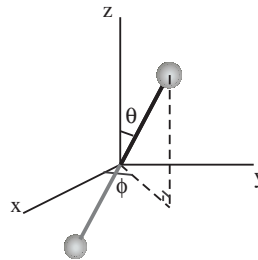
2原子分子の回転運動の分配関数古典極限（高温極限）で計算してみよう。2原子分子の回転運動のエネルギー  $E_{\text{rot}}$  は、古典力学では、その重心を通り、結合軸に垂直な軸のまわりの慣性モーメントを  $I$  とすると、

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2I} p_{\theta}^2 + \frac{1}{2I \sin^2 \theta} p_{\phi}^2$$

で与えられる。ここで、 $\theta, \phi$  は分子の配置を記述する図に示されたような角度であり、 $p_{\theta}, p_{\phi}$  はそれと正準共役な運動量である。また、慣性モーメント  $I$  は2原子分子の原子間距離を  $2r$  とし、原子の質量を  $m$  とすれば、 $I = 2mr^2$  となる。したがって、回転運動の分配関数  $Z_{\text{rot}}$

$$Z_{\text{rot}} = \frac{1}{h^2} \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{\infty} dp_{\theta} \int_{-\infty}^{\infty} dp_{\phi} \exp(-\beta E_{\text{rot}})$$

で与えられる。



1. 上の積分を実行し、

$$Z_{\text{rot}} = \frac{2Ik_B T}{h^2}$$

となることを示せ。

2. 対応するエントロピー  $S_{\text{rot}}$  および比熱  $C_{\text{rot}}$  を求めよ。（ヒント：

$$C_{\text{rot}} = T \frac{\partial S_{\text{rot}}}{\partial T}, \quad S_{\text{rot}} = -\frac{\partial F_{\text{rot}}}{\partial T}, \quad F_{\text{rot}} = -k_B T \ln Z_{\text{rot}}$$

である。）

### 5.2 回転自由度の量子的取り扱い

さて、今度は回転自由度を量子的に取り扱おう。2原子分子の場合、回転のエネルギーは角運動量  $J$  を用いて

$$E_{\text{rot}} = \frac{J^2}{2I}$$

と書ける。

1. 角運動量の大きさが  $j$  のとき、上の回転エネルギーの値はいくつになるか？
2. そのときの状態の縮重はいくつか？
3. 回転の部分の分配関数が

$$Z_{\text{rot}}^{QM} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp(-\beta l(l+1) \hbar^2 / (2I))$$

で与えられることを示せ。<sup>2</sup>

4. 上の表式は、

$$Z_{\text{rot}}^{QM} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp(-l(l+1) \frac{\Theta_{\text{rot}}}{T}), \quad \Theta_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2Ik_B}$$

と表すことができる。この  $\Theta_{\text{rot}}$  を回転運動の特性温度という。水素分子の場合の  $\Theta_{\text{rot}}$  を評価せよ。ただし、水素分子の共有結合の原子間距離は  $0.741 \text{ \AA}$  とせよ。

5. 高温極限では、上の和が積分で置き換えられることを用いて、具体的に分配関数  $Z_{\text{rot}}^{QM}$  を求めよ。

### 5.3 振動の自由度

さて、2原子分子には回転の他に振動の自由度も存在する。ここでは、振動の振幅が小さいとして調和振動子で近似し、振動のエネルギー準位が

$$E_v(n) = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_v, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

で与えられるとしよう。( $\omega_v$  は物質によって異なる)

1. 振動部分の分配関数  $Z_v$

$$Z_v = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta E_v(n))$$

を求めよ。

2. 振動部分の比熱への寄与  $C_v$

$$C_v = -T \frac{\partial^2 F_v}{\partial T^2}, \quad F_v = -k_B T \ln Z_v$$

を計算し、高温極限での値を求めよ。

水素分子の場合、振動の特性温度  $\Theta_v = \hbar \omega_v / k_B$  は  $6000 \text{ K}$  程度であることが知られているが、このため、室温では振動の自由度はほとんど励起されず、比熱への寄与は無視してよい。

---

<sup>2</sup>正確にはこの式は2つの原子が異種原子の場合には正しいが、同種原子 ( $\text{H}_2$  など) の場合には原子のスピン対称性を考慮する必要がある。このため、例えば水素分子の場合、水素原子はスピン  $1/2$  であるから、波動関数はスピン自由度も含めて粒子の交換に関して反対称でなければならず、原子のスピンが singlet (パラ水素) の場合、 $l = \text{even}$ 、また、triplet (オルソ水素) の場合  $l = \text{odd}$  しかとることができない。

## 6 量子統計と古典統計

### 6.1 量子統計と古典統計の関係

量子統計では、粒子がフェルミ粒子かボーズ粒子かによって分布関数が

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{\exp(\beta(\varepsilon - \mu)) \pm 1}$$

となる。ここで、 $\varepsilon$  はエネルギーを表し、+ はフェルミ粒子の場合、- はボーズ粒子の場合である。これらのいずれの場合も、

$$\exp(-\mu\beta) \gg 1$$

なる場合には、

$$f(\varepsilon) \propto \exp(-\beta\varepsilon)$$

となり、古典的なボルツマン統計に帰着する。したがって、このような極限では粒子の量子統計性が効かなくなる。

そこで、どのような場合に上のような条件が満たされるのか考えてみよう。簡単のため、粒子間の相互作用はないと仮定する。

1. 全粒子数を  $N$  とすると、化学ポテンシャル  $\mu$  は

$$N = \sum_i f(\varepsilon_i)$$

によって決定される。ここで、 $\exp(-\mu\beta) \gg 1$  であると仮定すると、上の式は

$$N = \sum_i \exp(-\beta\varepsilon_i + \beta\mu) = \exp(\beta\mu) \sum_i \exp(-\beta\varepsilon_i)$$

となる。右辺の和は積分に直すと

$$\sum_i \exp(-\beta\varepsilon_i) = \int_0^\infty D(\varepsilon) \exp(-\beta\varepsilon) d\varepsilon$$

と書き表すことができる。これは、自由粒子 1 個の分配関数に他ならないが、状態密度が

$$D(\varepsilon) = V \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \varepsilon^{1/2}$$

と与えられることを用い、この積分の値を求め、化学ポテンシャルが

$$\exp(\beta\mu) = \frac{N}{V} \left( \frac{2\pi mk_B T}{h^2} \right)^{-3/2}$$

によって決定されることを示せ。

2. 仮定： $\exp(-\mu\beta) \gg 1$  が満たされるためには、系の温度と数密度との間に、どのような関係がなければならないか？
3. 粒子の平均間隔  $r$  はおよそ

$$r \sim \left( \frac{N}{V} \right)^{-1/3}$$

と与えられる。また、熱的なドブロイ波長  $\lambda_D$  は

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{3}{2} k_B T$$

なる運動量  $p$  を用いて、 $\lambda_D = h/p$  で定義される。前問の関係をこの  $\lambda_D$  と  $r$  で表すとどうなるか？

## 6.2 理想フェルミ気体

液体ヘリウム  ${}^3\text{He}$  を構成する  ${}^3\text{He}$  原子はフェルミ粒子である。絶対零度での液体  ${}^3\text{He}$  が理想フェルミ気体 (スピン  $1/2$ ) だと仮定して、以下の量を求めよ。ただし、絶対零度で 1 モルの液体ヘリウムの占める体積は  $36.8\text{cm}^3$  であるとする。

1. フェルミ波数 ( $\varepsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / (2m)$ )
2. フェルミエネルギー ( $\varepsilon_F$ )
3. フェルミ温度 ( $T_F = \varepsilon_F / k_B$ )

## 6.3 有効質量

液体  ${}^3\text{He}$  の低温における定積モル比熱  $C_v$  は、 $C_v = 24.1T [\text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})]$  と測定されている。以前導いたように、理想フェルミ気体の定積比熱は低温で

$$C_v = \gamma T, \quad \gamma = \frac{k_B^2 m k_F}{3\hbar^2} V$$

となる。ここで、系の体積を  $V$ 、フェルミ波数を  $k_F$  とした。液体  ${}^3\text{He}$  をスピン  $1/2$  の理想フェルミ気体とみなしたとき、以下の問に答えよ。

1. 絶対零度付近で 1 モルの液体  ${}^3\text{He}$  が占める体積が  $36.8\text{cm}^3$  であることを用い、係数  $\gamma$  の理論値を計算せよ。ただし、 ${}^3\text{He}$  原子の質量  $m$  は  $m = 4.98 \times 10^{-27}\text{kg}$  であるとせよ。
2. 上の計算では、理論的な  $\gamma$  の値と測定値がずれてしまうことが分かる。これを解決するために、原子の質量は、原子間相互作用の影響で原子 1 個の場合の質量よりも有効的に重くなっており、ある有効質量  $m^*$  を持つと考える考え方がある。測定結果を再現するためには、有効質量  $m^*$  は原子の質量  $m$  の何倍にとらなければならないか?

## 6.4 行列の計算 (復習)

$n \times n$  の行列  $A$  の  $i, j$  成分  $(A)_{i,j}$  を  $a_{i,j}$  といった具合に書くようにする。すると、交換関係  $[A, B]$  は

$$[A, B] = AB - BA$$

で定義される。また、行列  $A$  のトレース ( $\text{Tr } A$ ) は、

$$\text{Tr } A = \sum_{i=1}^n a_{i,i}$$

で定義される。

1.  $X, Y, Z$  を任意の  $n \times n$  行列とするとき、

$$[X, [Y, Z]] + [Z, [X, Y]] + [Y, [Z, X]]$$

を計算せよ。

2. 3つの  $n \times n$  行列  $A, B, H$  に対して、

$$[A, H] = 0, \quad [B, H] = 0$$

が成り立っているとき、 $[[A, B], H]$  を計算せよ。

3.  $A, B$  を任意の  $n \times n$  行列とするとき、

$$\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$$

を示せ。

4.  $A, L$  を  $n \times n$  の行列、 $x$  を絶対値の小さな実数のパラメータとするとき、

$$e^{xL} A e^{-xL}$$

が

$$e^{xL} A e^{-xL} = A + x[L, A] + \frac{x^2}{2!}[L, [L, A]] + \frac{x^3}{3!}[L, [L, [L, A]]] + \dots$$

と展開できることを示せ。ただし、行列  $X$  の指数関数  $\exp(X)$  は

$$e^X = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} X^n$$

で定義される。

5.

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

のとき、

$$\exp(-i\phi\sigma_y) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}$$

となることを示せ。

6. 行列  $A(x)$  が

$$A(x) = \begin{pmatrix} \cos x & \sin x \\ -\sin x & \cos x \end{pmatrix}$$

で定義されるとき、

$$A(x)A(y) = A(x+y)$$

を示し、 $A(x)$  の逆行列を求めよ。

7. 行列  $B$  が

$$B = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}$$

で与えられるとき、

$$\exp(xB)$$

を求めよ。ここで、 $x$  は実数である。

8.  $n \times n$  の行列  $X, Y$  が

$$[[X, Y], X] = 0, \quad [[X, Y], Y] = 0$$

を満たすとき、

$$e^X e^Y = e^{X+Y+\frac{1}{2}[X,Y]}$$

が成り立つことを示せ。



## 7 自由電子の性質

### 7.1 磁性 (パウリのスピン常磁性)

一般に金属は低温で、温度によらない常磁性を示す。このことを調べるために、自由電子とそのスピンによる磁場中でのゼーマン (Zeeman) 効果のみを取り入れよう。このとき、電子のエネルギー  $\varepsilon$  は

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} + \sigma\mu_B H, \quad \mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e c}$$

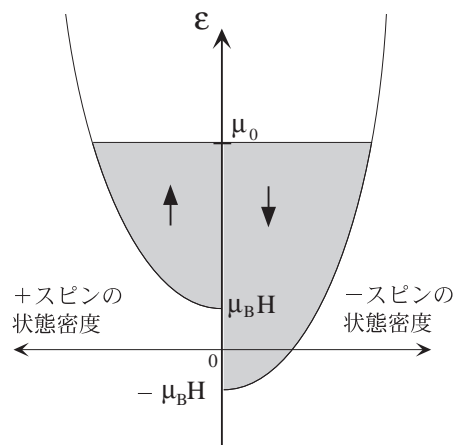
となる。ここで、 $\sigma = \pm 1$  は電子のスピン状態を表し、スピンの磁場と平行のとき  $\sigma = +1$ 、反平行のとき  $\sigma = -1$  をとる。1 電子の磁気モーメントは  $\mu_e = -\mu_B\sigma$  で与えられるとして、以下の問題を考えよう。

1. 絶対零度では、電子はある化学ポテンシャル  $\mu_0$  より低いエネルギー状態に図のようにつまっている。ここで、スピンの平行なものと反平行なものとで、 $2\mu_B H$  のエネルギー差があることに注意しよう。このときのスピンの磁場に平行な電子の数  $N_+$  と反平行な電子の数  $N_-$  が、それぞれ

$$N_+ = V \frac{4\pi}{3h^3} (2m_e(\mu_0 - \mu_B H))^{3/2}$$

$$N_- = V \frac{4\pi}{3h^3} (2m_e(\mu_0 + \mu_B H))^{3/2}$$

で与えられることを示せ。



2. 全粒子数を  $N$  とすると、化学ポテンシャル  $\mu_0(H)$  は

$$N = N_+ + N_-$$

から決定されるが、 $\mu_0(H)$  が磁場に関して偶関数であることを示せ。

3. 電子による全磁気モーメント  $M = -\mu_B(N_+ - N_-)$  を磁場について

$$M = \chi H + \dots$$

と展開したときの一次の係数  $\chi$  が、

$$\chi = \frac{3}{2}\mu_B^2 \frac{N}{\mu_0(H=0)}$$

と表せることを示せ。

4. 金属カリウム ( $^{19}\text{K}$ ) の密度は  $0.8621[\text{g}/\text{cm}^3]$  である。各カリウム原子から  $4s$  電子が一個でるとして、1 グラムあたりの磁化率  $\chi[\text{emu}/\text{g}]$  の値を評価せよ。

## 7.2 自由電子気体の圧力

金属の体積弾性率は自由電子からの寄与が大きい。以下で、自由電子の体積弾性率を絶対零度で考えてみよう。

1. 絶対零度での自由電子気体のエネルギー  $E$  が、粒子数  $N$ 、フェルミエネルギー  $\varepsilon_F$  を用いて、

$$E = \frac{3}{5} N \varepsilon_F$$

と書けることを示せ。(ヒント：絶対零度では、状態密度  $D(\varepsilon)$ )

$$D(\varepsilon) = V \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \varepsilon^{1/2}$$

を用いて  $E$ 、および  $N$  は、

$$E = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon, \quad N = \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon) d\varepsilon$$

で与えられる。)

2. 絶対零度での自由電子気体の圧力  $P$ 、体積  $V$ 、エネルギー  $E$  の関係は

$$PV = \frac{2}{3} E$$

となることを示せ。

3. 絶対零度での自由電子気体の体積弾性率  $B$

$$B = -V \frac{\partial P}{\partial V}$$

は、

$$B = \frac{5}{3} P = \frac{10E}{9V}$$

で与えられることを示せ。

4. 金属カリウムにおける自由電子の体積弾性率への寄与を求めよ。ただし、カリウムの電子数密度  $n$ 、フェルミエネルギー  $\varepsilon_F$  は、それぞれ  $n = 1.40 \times 10^{22}[\text{cm}^{-3}]$ 、 $\varepsilon_F = 2.12[\text{eV}]$  とせよ。

## 7.3 ファインマンの定理

ハミルトニアン  $H(\text{エルミート})$  があるパラメータ  $g$  の関数である場合を考えよう。この場合、その固有値  $E$  や固有関数  $\psi$  もパラメータ  $g$  の関数になる。つまり、シュレーディンガー方程式は

$$H(g) |\psi(g)\rangle = E(g) |\psi(g)\rangle$$

となる。

1. このとき、

$$\frac{\partial E(g)}{\partial g} = \left\langle \psi(g) \left| \frac{\partial H(g)}{\partial g} \right| \psi(g) \right\rangle$$

が成り立つことを証明せよ。

2. このような場合は、分配関数  $Z(g) = \sum_i \exp(-\beta E_i(g))$  も同様に  $g$  の関数となる。

$$\frac{\partial \ln Z(g)}{\partial g} = -\beta \left\langle \frac{\partial H(g)}{\partial g} \right\rangle$$

が成り立つことを示せ。ただし、ここの右辺の  $\langle \dots \rangle$  は熱力学的平均

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr} A \exp(-\beta H)}{Z}$$

を表す。

3. 具体的に 1 次元の調和振動子の系を考えよう。ハミルトニアンは

$$H(\omega) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

で与えられる。このハミルトニアンは  $\omega$  の関数になっているから、上のパラメータ  $g$  として、 $\omega$  を考えることができる。

$$\frac{\partial \ln Z(\omega)}{\partial \omega}$$

および

$$\frac{\partial H(\omega)}{\partial \omega}$$

をそれぞれ計算し、前問で示した等式をもちいて  $\langle x^2 \rangle$  を求めよ。

## 8 天体の統計力学

### 8.1 中性子星

宇宙には、中性子星と呼ばれる非常に密度の高い星が存在する。このような高密度な天体にもフェルミ統計が応用されている。以下の問に答えよ。

1. 太陽の半径は、 $7 \times 10^8$  [m]、また、質量は  $2 \times 10^{33}$  [g] である。太陽がすべて水素からできていると仮定して、電子の総数  $N$ 、および電子の密度  $n$  [cm<sup>-3</sup>] を求めよ。
2. 白色矮星とは、太陽程度の質量を持つが、半径が地球程度しかない高密度の星である。高温で青白く光り、小さいので、このように呼ばれる。太陽と同じ質量を持ち、半径が  $2 \times 10^9$  [cm] の白色矮星の内部の電子のフェルミエネルギー  $\varepsilon_F$  を推定せよ。白色矮星の温度はだいたい  $1 \sim 2$  万度ぐらいであると考えられている。求めたフェルミエネルギーに対応するフェルミ温度 ( $T_F = \varepsilon_F/k_B$ ) がこれよりも十分高いことを確認せよ。
3. 電子のエネルギー  $\varepsilon$  が電子の静止質量エネルギー  $mc^2$  よりも大きい場合には、相対論的取り扱いが必要になる。相対論的極限では、電子のエネルギーは運動量  $p$  と光速  $c$  を用いて

$$\varepsilon = pc$$

で与えられる。したがって、状態密度  $D(\varepsilon)$  はスピン自由度を含めて、

$$D(\varepsilon) = V \frac{8\pi\varepsilon^2}{h^3c^3}$$

で与えられる。考えている温度がフェルミ温度よりも十分小さく、全粒子数  $N$  が、

$$N \approx \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon) d\varepsilon$$

で与えられるとしよう。このとき、フェルミエネルギー  $\varepsilon_F$  は

$$\varepsilon_F \approx 3\hbar cn^{1/3}$$

と表されることを示せ。ただし、ここで  $n$  は電子の数密度である。

4. 中性子星とは、白色矮星よりももっと小さく、半径がおよそ 10 キロメートル程度まで潰れた状態の星をいう。このような半径では、質量密度が  $10^{12}$  [g/cm<sup>3</sup>] 程度になり、電子が陽子に吸収されて、星の内部は中性子のガスになっていると考えられているのでこのように呼ばれる。太陽と同じ質量が、半径 10 キロメートルの体積に閉じこめられているとすると、電子のフェルミエネルギーが (相対論的に計算すると)  $10^8$  [eV] のオーダーに達することを示せ。(電子の静止エネルギーはおよそ 0.5 [MeV] であるからフェルミエネルギーの方が大きい。)
5.  $\beta^-$  崩壊、 $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}$  は約 0.8 [MeV] の発熱過程であるとする。太陽と同じ質量、半径 10 キロメートルの中性子星が、はじめ、すべて中性子でできていたとして、 $\beta^-$  崩壊により陽子  $p$  と電子  $e^-$  ができてくる過程を考える。平衡状態に達したときの中性子  $n$  と陽子  $p$  の数の比を推定せよ。(中性子星の温度は約 1 億程度と考えられている。)

## 8.2 白色矮星の安定性

前述のように、白色矮星においては、電子は完全に縮退している（絶対零度の状態にある）と考えてもよいことがわかる。そこで、単純な模型を考えて、白色矮星の安定性を議論しよう。半径  $R$ 、質量  $M$  の球状の白色矮星を考え、簡単のため、密度は場所によらず一定 ( $\rho = M/((4\pi/3)R^3)$ ) としよう。

1. このような白色矮星の重力エネルギー  $U_g$  は万有引力定数を  $G$  とすると

$$U_g = -\frac{3}{5} \frac{GM^2}{R}$$

で与えられることを示せ。

2. 白色矮星はすべてヘリウム He からなり、そのヘリウムは全てイオン化されているとしよう。つまり、陽子 2 個、中性子 2 個に対して電子が 2 個存在し、電子は自由電子として振舞う。陽子 1 個の質量を  $M_p$  とすると、電子の質量や、陽子と中性子の質量差は、これに比べ十分小さいことから、白色矮星中の電子の総数  $N_e$  は

$$N_e = 2M/(4M_p) = 0.5M/M_p$$

と見積もることができる。(しばしば、電子 1 個当たりの核子数を  $\mu_e$  と表記し、 $N_e = M/(\mu_e M_p)$  と書く。今の場合、 $\mu_e = 2$  である。) したがって、白色矮星では  $N_e$  個の電子が半径  $R$  の球の中に閉じ込められていることになる。このときの電子のエネルギー  $U_e$  を電子の質量  $m_e$ 、 $\hbar$ 、 $N_e$ 、 $R$  を用いて表せ。(電子は非相対論的に扱って良い。)

3. 全エネルギー  $U = U_e + U_g$  が最小となる半径  $R_{\min}$  を求めよ。
4. 白色矮星の 1 つであるシリウス B の質量は太陽の 1.06 倍である。シリウス B の半径を前問の結果を用いて推定せよ。<sup>1</sup>

## 8.3 白色矮星の臨界質量

星の質量が大きく、収縮が進んで、電子に対しても相対論的極限を適用しなければならない場合を考えよう。簡単のため、前問と同様に密度一定の近似のもとで議論を進めよう。

1. 相対論的極限 ( $\varepsilon \approx pc$ ) における電子のエネルギー

$$U_e \approx \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon$$

を求めよ。エネルギーは半径  $R$  の何乗に比例しているか？質量  $M$  に対してはどうか？

2. 全エネルギー  $U = U_e + U_g$  を考えると、 $U_e$  と  $U_g$  とで半径  $R$  に対しての依存性が同じになるため、前問のような最小値が存在せず、質量が重く、重力エネルギーの方が大きいと、電子のエネルギーでは重力崩壊を止めることができず、収縮を続けてしまう。そのような限界の質量  $M_{\text{cr}}$  は

$$U_e = |U_g|$$

より見積もることができる。 $M_{\text{cr}}$  を求めよ (太陽質量の何倍になるか?)。<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ちなみに、観測などから実際には太陽の半径の 0.01 倍程度と考えられている。

<sup>2</sup>このような臨界質量のことをチャンドラセカールの臨界質量と呼ぶ。

## 9 磁性体の模型

磁性体のモデルとして、最も簡単なモデルとして、イジング模型がある。通常、原子は磁気モーメント  $\mu_0$  を持つが、簡単のため、磁気モーメントは、上向き (+) か、下向き (-) かのいずれかしかとらないとする。このような簡単化されたスピンを Ising(イジング) スピンと呼ぶ。各々のイジングスピンの状態は  $\pm 1$  の値をとる変数  $\sigma_i$ 、( $i = 1, \dots, N$ ,  $N =$  原子数) で指定される。結晶中で、隣り合うスピン間には相互作用が存在し、エネルギーが、スピンの平行のとき  $-J$ 、反平行のとき  $J$  であるとする。すると、ハミルトニアンは

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

と表される。ここで、 $\sum_{\langle i,j \rangle}$  は隣り合うスピンの組についての和を表している。磁場  $H$  の効果も取り入れると、ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \mu_0 H \sum_i \sigma_i$$

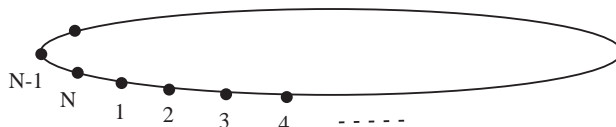
となる。以下では  $J > 0$  の場合を考える。

### 9.1 1次元 Ising 模型

とくに、1次元の場合には、分配関数を厳密に計算することができる。1次元の場合には系のハミルトニアンは、格子点(サイト)の数を  $N$ 、磁気モーメントの大きさを  $\mu_B$  とすると

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - \mu_B H \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad \sigma_i = \pm 1$$

と表される。ここで、第一項は Ising スピン間の相互作用を表し、以下では強磁性的な相互作用  $J > 0$  を考える。第二項は磁場  $H$  とのゼーマン効果を表す。境界条件としては、周期的境界条件 ( $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ ) をとる(図参照)。



1. この系の分配関数  $Z_N$  は

$$Z_N = \text{Tr} T^N$$

と表せることを示せ。ただし、ここで、 $T$  は

$$T = \begin{pmatrix} e^{K+h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-h} \end{pmatrix}, \quad K = \beta J, \quad h = \beta \mu_B H \quad (4)$$

で与えられる 2 行 2 列の行列(転送行列)である。

2. この転送行列  $T$  の固有値を求めることにより、熱力学的極限 ( $N \rightarrow \infty$ ) での 1 サイト当たりの自由エネルギー

$$f = -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N$$

を求めよ。

3. ゼロ磁場 ( $H = 0$ ) での、熱力学的極限での1サイト当たりのエネルギー  $E$  を求め、温度の関数として図示せよ。
4. 同じく、ゼロ磁場 ( $H = 0$ ) の場合の比熱  $C_V = (\partial E / \partial T)_{V,N}$  の温度依存性を求め、図示せよ。
5. 一サイト当たりの磁化の大きさ

$$m = \left\langle \frac{\mu_B}{N} \sum_i \sigma_i \right\rangle = \frac{\mu_B}{N} \frac{\partial}{\partial h} \ln Z_N$$

を求めよ。

6. 磁場が弱い極限 ( $H \ll 1$ ) では、上で求めた磁化の大きさは

$$m = \chi_0 H$$

となることを示し、係数  $\chi_0$  を求め、その温度依存性を図示せよ。

7. 熱力学的極限 ( $N \rightarrow \infty$ ) で、ゼロ磁場での相関関数  $\langle \sigma_1 \sigma_m \rangle$  が、

$$\langle \sigma_1 \sigma_m \rangle = e^{-(m-1)/\xi}$$

の形に書けることを示し、 $\xi$ (相関長) を求め、その温度依存性を図示せよ。

## 9.2 平均場理論 (近似)

イジング模型を用いて、平均場近似 (分子場近似) を考えよう。格子としては  $d$  次元の単純立方格子を考える。ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \mu_B H \sum_i \sigma_i, \quad \sigma_i = \pm 1$$

で与えられる。ここで、 $\sum_{\langle i,j \rangle}$  は隣り合った格子点  $i, j$  についての和を表している。

1. まず、イジングスピン  $\sigma_i$  をその平均値  $\langle \sigma \rangle = m$  とそれからのずれ  $\sigma_i - m$  とに分けて考え、ずれが小さいとしてその2次の項を無視すると、

$$\sigma_i \sigma_j = ((\sigma_i - m) + m)((\sigma_j - m) + m) \approx m(\sigma_i + \sigma_j) - m^2$$

と近似することができる。この近似のもとで、ハミルトニアンは格子点の数を  $N$  とすると

$$\mathcal{H} = \frac{JzN}{2} m^2 - h_{\text{eff}} \sum_i \sigma_i$$

と書き表せることを示し (以下ではこのハミルトニアンを  $\mathcal{H}_{\text{MF}}$  と書く)、このときの有効場 (分子場)  $h_{\text{eff}}$  を求めよ。ただし、 $z$  は最近接格子点の数を表し、今の場合  $z = 2d$  である。

2. 平均場近似のハミルトニアン  $\mathcal{H}_{\text{MF}}$  を用い、磁化の平均値  $\langle \sigma_i \rangle$  を求め、それが  $m$  に等しくなければいけないという条件 (自己無撞着条件) から  $m$  に対する方程式をたてると

$$m = \tanh(zKm + h), \quad K = \beta J, \quad h = \beta \mu_B H \quad (5)$$

となることを示せ。また、 $H = 0$  の場合に、この方程式が  $m = 0$  以外の解 ( $m \neq 0$ , 自発磁化) を持ち始める温度  $T_c$  を求めよ。

3. 平均場近似での格子点当たりの自由エネルギー

$$f = F/N = -\frac{k_B T}{N} \ln Z_{MF}, \quad Z_{MF} = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(-\beta \mathcal{H}_{MF})$$

を求めよ。ゼロ磁場 ( $H = 0$ ) のとき、自由エネルギー  $f$  は  $m$  の関数として  $T > T_c$  および  $T < T_c$  の場合にそれぞれどのようなようになるか、その概形を書け。

4. 自由エネルギーが極値をとる点は、

$$\frac{\partial f}{\partial m} = 0$$

から求まるが、この条件と、先に求めた自己無撞着条件 (5) が一致することを確認せよ。

5. 高温側 ( $T > T_c$ ) から転移温度に近付いたとき、平均場近似では、帯磁率

$$\chi = \left. \frac{\partial m}{\partial H} \right|_{H=0}$$

が、 $(T - T_c)^{-1}$  に比例して発散することを示せ (Curie-Weiss)。

6. 平均場近似では、転移点 ( $T = T_c$ ) で、

$$m \propto H^{1/3}$$

となることを示せ。

7. ゼロ磁場 ( $H = 0$ ) の場合、低温側  $T < T_c$  での自発磁化  $m$  は転移点  $T_c$  に近づくにつれて、

$$m \propto (T_c - T)^{1/2}$$

のように消失することを示せ。

### 9.3 ランダウの現象論

二次相転移の場合、磁化といった秩序パラメータが転移点で連続的にゼロから有限の値を持つようになる。こうした対称性の破れを記述する現象論として、ランダウ (Landau) の現象論がある。自由エネルギー  $F$  を秩序パラメータ  $M$  で展開することを考えよう。秩序パラメータに共役な外場を  $H$  と書くと、

$$F = F_0 + AM^2 + BM^4 + \dots - HM$$

と展開できると考えられる。磁性体の場合ならば、 $M$  は磁化であり、 $H$  は磁場である。外場がないときには、対称性から自由エネルギーは秩序パラメータの偶関数であるとする。

上の展開の  $M$  の6次以上の項を無視し、外場がない場合

$$F = F_0 + AM^2 + BM^4$$

を考える。一般に係数  $A, B$  は温度の関数である。安定性を考え、 $B(T) > 0$  としておく。

1. 自由エネルギー  $F(M)$  が、 $T > T_c$  で  $M = 0$  に極小をもち、かつ  $T < T_c$  で  $M = 0$  に極大を持つためには、係数  $A$  はどのような条件を満たさなければならないか?



2. 以上のような条件を満たすもっとも簡単な場合として、

$$F(T, M) = F_0(T) + a(T - T_c)M^2 + bM^4$$

を考えよう。簡単のため、 $a, b$  は温度によらない正の定数としよう。このとき、 $T > T_c$  と、 $T < T_c$  において  $F$  は  $M$  の関数としてどのように振舞うか、その概形を書け。

3. 平衡状態は自由エネルギーが極小をとる条件

$$\frac{\partial F}{\partial M} = 0$$

から与えられる。 $T < T_c$  での  $M$  を求め、その温度依存性図示せよ。

4. エントロピー  $S = -(\partial F / \partial T)$  を求めよ。 $(\partial F_0 / \partial T)$  を用いて表せ。また、転移温度  $T_c$  以下では、 $M$  も温度依存性を持つことに注意せよ。)

5. 比熱

$$C = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)$$

を求め、 $T = T_c$  で跳びを示すことを示せ。

## 10 揺らぎと応答

磁場中のイジング模型のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \mu_0 H \sum_i \sigma_i$$

で与えられる。ここで、 $H$  は磁場を表し、 $\sigma_i = \pm 1$  である。

1. このとき、磁化  $M = \sum_i \sigma_i$  に対し、

$$\langle M \rangle = \frac{k_B T}{\mu_0} \frac{\partial}{\partial H} \log Z$$

が成り立つことを示せ。

2. また、帯磁率  $\chi = (\partial \langle M \rangle / \partial H)|_{H=0}$  に対し、

$$\chi = \frac{\mu_0}{k_B T} \{ \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \}$$

が成り立つことを示せ。

3. 同様に、エネルギーの期待値  $E = \langle \mathcal{H} \rangle$  が

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

で与えられることを示せ。

4. また、比熱  $C = \partial E / \partial T$  に対して

$$C = \frac{1}{k_B T^2} \{ \langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2 \}$$

が成り立つことを示せ。