2004年度統計力学II 宿題7 (5月31日出題、6月1日提出)
解答

担当 吉森 明

[問題 1.] 次は何次相転移か?
①外部磁場Hが0で高温から低温にするとある温度(T_c)で磁化Mがあらわれる。
② $T < T_c$でHを正から負に変えるとMの向きが急に変る。
(図略)
(ヒント) 自由エネルギーGは、$G = G(T, H)$: TとHの関数。

$$M = -\frac{\partial G}{\partial H} \tag{1}$$

[解答] ① ヒントより、磁化Mは、自由エネルギーの微係数になっている。図からMは、T_cで折れ曲がっているので、Mの温度微分が不連続になっているのがわかる。したがって、不連続なのは、2次の微係数なので、2次相転移。
②図からHをかえると、Mが不連続に変っているのがわかる。Mは、自由エネルギーの1次微分なので、1次相転移。

[問題 2.(余裕があれば)] 教科書P145演習問題[7]

[解答] (1) 1粒子のハミルトニアンは、

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) - \mu_B \hat{\sigma} H \tag{2}$$

ただし、$\hat{\sigma}$は、スピンのz成分の演算子を表す。固有関数$\phi_E(x, y, z, \sigma)$は、粒子の位置の自由度を表す変数x, y, zの他に、スピンの

自由度を表すσも含む。この時、固有値は、$k=\sqrt{k_x^2+k_y^2+k_z^2}$として、

$$\begin{aligned}
\epsilon_n &= \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} - \mu_B \sigma H && (3)\\
\mathbf{k} &= \frac{2\pi}{L}\mathbf{n} && (4)\\
n_x, n_y, n_z &= 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, && \\
\sigma &= \pm 1 && (5)
\end{aligned}$$

つまり、固有状態は、位置と関係している3つの量子数n_x, n_y, n_zだけでなく、スピンの量子数σの全部で4つの整数で指定される。これは、波数k_x, k_y, k_zの3次元空間の1点では状態が表せないことを示している。

そこで、波数空間を2つ用意して、それぞれ$\sigma=1$と$\sigma=-1$の状態に対応させることを考える。そうすれば、$2\pi/L$の間隔で並ぶ点1つが1つの固有状態を表すことができる。この時、状態数$\Sigma(\epsilon)$は、2つの波数空間の球内の点の数の和になる。その球の半径は、2つの波数空間で違っていて$\sqrt{2m(\epsilon+\mu_B H)/\hbar^2}$と$\sqrt{2m(\epsilon-\mu_B H)/\hbar^2}$となる。$V=L^3$だから、

$$\begin{aligned}
\Sigma(\epsilon) &= \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\left\{\frac{2m(\epsilon+\mu_B H)}{\hbar^2}\right\}^{3/2} \\
&\quad + \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\left\{\frac{2m(\epsilon-\mu_B H)}{\hbar^2}\right\}^{3/2} && (6)
\end{aligned}$$

各固有状態に1個ずつ粒子をつめていくので、$\Sigma(\epsilon_H)=N$として、さらに、$\delta=\mu_B H/\epsilon_F$とすれば、

$$\begin{aligned}
N &= \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\left\{\frac{2m(\epsilon_H+\epsilon_F\delta)}{\hbar^2}\right\}^{3/2} \\
&\quad + \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\left\{\frac{2m(\epsilon_H-\epsilon_F\delta)}{\hbar^2}\right\}^{3/2} && (7)
\end{aligned}$$

$\epsilon_H = \epsilon_F + \epsilon_1\delta + \epsilon_2\delta^2 + \cdots$と展開して代入すると、

$$\begin{aligned} N &= \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\left\{\frac{2m(\epsilon_F + \epsilon_1\delta + \epsilon_2\delta^2 + \epsilon_F\delta + \cdots)}{\hbar^2}\right\}^{3/2} \\ &\quad + \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\left\{\frac{2m(\epsilon_F + \epsilon_1\delta + \epsilon_2\delta^2 - \epsilon_F\delta + \cdots)}{\hbar^2}\right\}^{3/2} \end{aligned} \tag{8}$$

さらに、δは小さいので、

$$\left\{\frac{2m(\epsilon_F + \epsilon_1\delta + \epsilon_2\delta^2 + \epsilon_F\delta + \cdots)}{\hbar^2}\right\}^{3/2}$$

$$= \left\{\frac{2m}{\hbar^2}\right\}^{3/2} (\epsilon_F + \epsilon_1\delta + \epsilon_2\delta^2 + \epsilon_F\delta + \cdots)^{3/2} \tag{9}$$

$$= \left\{\frac{2m\epsilon_F}{\hbar^2}\right\}^{3/2} \left(1 + \frac{\epsilon_1}{\epsilon_F}\delta + \frac{\epsilon_2}{\epsilon_F}\delta^2 + \delta + \cdots\right)^{3/2} \tag{10}$$

$$= \left\{\frac{2m\epsilon_F}{\hbar^2}\right\}^{3/2} \left\{1 + \left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_F} + 1\right)\delta + \frac{\epsilon_2}{\epsilon_F}\delta^2 + \cdots\right\}^{3/2} \tag{11}$$

$$\begin{aligned} &= \left\{\frac{2m\epsilon_F}{\hbar^2}\right\}^{3/2} \left\{1 + \frac{3}{2}\left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_F} + 1\right)\delta + \frac{3}{2}\frac{\epsilon_2}{\epsilon_F}\delta^2 \right. \\ &\qquad \left. + \frac{3}{8}\left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_F} + 1\right)^2 \delta^2 + \cdots\right\} \end{aligned} \tag{12}$$

同様に

$$\begin{aligned} &\left\{\frac{2m(\epsilon_F + \epsilon_1\delta + \epsilon_2\delta^2 - \epsilon_F\delta + \cdots)}{\hbar^2}\right\}^{3/2} \\ &= \left\{\frac{2m\epsilon_F}{\hbar^2}\right\}^{3/2} \left\{1 + \frac{3}{2}\left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_F} - 1\right)\delta + \frac{3}{2}\frac{\epsilon_2}{\epsilon_F}\delta^2 \right. \\ &\qquad \left. + \frac{3}{8}\left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_F} - 1\right)^2 \delta^2 + \cdots\right\} \end{aligned} \tag{13}$$

したがって、

$$
\begin{aligned}
N &= \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\left\{\frac{2m\epsilon_F}{\hbar^2}\right\}^{3/2}\left\{1+\frac{3}{2}\left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_F}+1\right)\delta+\frac{3}{2}\frac{\epsilon_2}{\epsilon_F}\delta^2\right. \\
&\quad \left.+\frac{3}{8}\left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_F}+1\right)^2\delta^2+\cdots\right\} \\
&\quad +\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\left\{\frac{2m\epsilon_F}{\hbar^2}\right\}^{3/2}\left\{1+\frac{3}{2}\left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_F}-1\right)\delta+\frac{3}{2}\frac{\epsilon_2}{\epsilon_F}\delta^2\right. \\
&\quad \left.+\frac{3}{8}\left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_F}-1\right)^2\delta^2+\cdots\right\} \qquad (14)
\end{aligned}
$$

$N=2\{4\pi V/3(2\pi)^3\}\{2m\epsilon_F/\hbar^2\}^{3/2}$ だから、

$$
\begin{aligned}
0 &= \frac{N}{2}\left\{3\frac{\epsilon_1}{\epsilon_F}\delta+3\frac{\epsilon_2}{\epsilon_F}\delta^2\right. \\
&\quad \left.+\frac{3}{8}\left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_F}+1\right)^2\delta^2+\frac{3}{8}\left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_F}-1\right)^2\delta^2+\cdots\right\} \qquad (15)
\end{aligned}
$$

上の式は、δについての恒等式なので、δのべきの係数が0でなければならない。

$$
3\frac{\epsilon_1}{\epsilon_F} = 0 \qquad (16)
$$

$$
3\frac{\epsilon_2}{\epsilon_F}+\frac{3}{8}\left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_F}+1\right)^2+\frac{3}{8}\left(\frac{\epsilon_1}{\epsilon_F}-1\right)^2 = 0 \qquad (17)
$$

(16) 式から$\epsilon_1=0$を (17) 式に代入すると、

$$
3\frac{\epsilon_2}{\epsilon_F}+\frac{3}{4} = 0 \qquad (18)
$$

$$
\epsilon_2 = -\frac{\epsilon_F}{4} \qquad (19)
$$

(2) N_+は、$\sigma=1$の波数空間に詰まっている粒子の数、N_-は、$\sigma=-1$の波数空間に詰まっている粒子の数なので、

$$
N_+ = \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\left\{\frac{2m(\epsilon_H+\epsilon_F\delta)}{\hbar^2}\right\}^{3/2} \qquad (20)
$$

$$N_- = \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\left\{\frac{2m(\epsilon_H - \epsilon_F\delta)}{\hbar^2}\right\}^{3/2} \tag{21}$$

$M = \mu_B(N_+ - N_-)$ だから、

$$\begin{aligned} M &= \mu_B\left(\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\left\{\frac{2m(\epsilon_H + \epsilon_F\delta)}{\hbar^2}\right\}^{3/2}\right. \\ &\quad \left. -\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\left\{\frac{2m(\epsilon_H - \epsilon_F\delta)}{\hbar^2}\right\}^{3/2}\right) \qquad (22) \\ &= \mu_B\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\left\{\frac{2m}{\hbar^2}\right\}^{3/2}((\epsilon_H + \epsilon_F\delta)^{3/2} \\ &\quad - (\epsilon_H - \epsilon_F\delta)^{3/2}) \qquad (23) \end{aligned}$$

常時性磁化率は粒子数一定で定義されるから、

$$\begin{aligned} \frac{\partial M}{\partial H} &= \mu_B\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\left\{\frac{2m}{\hbar^2}\right\}^{3/2}\left\{\frac{3}{2}\left(\frac{\partial\epsilon_H}{\partial H} + \epsilon_F\frac{\partial\delta}{\partial H}\right)(\epsilon_H + \epsilon_F\delta)^{1/2}\right. \\ &\quad \left. -\frac{3}{2}\left(\frac{\partial\epsilon_H}{\partial H} - \epsilon_F\frac{\partial\delta}{\partial H}\right)(\epsilon_H - \epsilon_F\delta)^{1/2}\right\} \qquad (24) \end{aligned}$$

$H = 0$ にすると、

$$\begin{aligned} \left.\frac{\partial M}{\partial H}\right|_{H=0} &= \mu_B\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\left\{\frac{2m}{\hbar^2}\right\}^{3/2}\left\{\frac{3}{2}\left(\epsilon_F\frac{\partial\delta}{\partial H}\right)\epsilon_F^{1/2}\right. \\ &\quad \left. -\frac{3}{2}\left(-\epsilon_F\frac{\partial\delta}{\partial H}\right)\epsilon_F^{1/2}\right\} \qquad (25) \\ &= \mu_B\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{3}\left\{\frac{2m}{\hbar^2}\right\}^{3/2}\left\{3\left(\epsilon_F\frac{\partial\delta}{\partial H}\right)\epsilon_F^{1/2}\right\} \qquad (26) \end{aligned}$$

$N = 2\{4\pi V/3(2\pi)^3\}\{2m\epsilon_F/\hbar^2\}^{3/2}$ を使って、

$$\left.\frac{\partial M}{\partial H}\right|_{H=0} = \mu_B N\left\{\frac{3}{2}\left(\frac{\partial\delta}{\partial H}\right)\right\} = \frac{3}{2}\mu_B N\frac{\mu_B}{\epsilon_F} \tag{27}$$