2007年度統計力学II 宿題13 (7月4日出題) 解答

担当 吉森 明

[問題1.] 教科書P173の(11.28)の様な(ランダウ)自由エネルギーを考えたとき、温度T_cでのMのとびを求めなさい。また、$T>T_c$と$T<T_c$での比熱を計算しなさい。

[解答](実際の解答にはここまで計算を丁寧に書かなくて良い。)

(ランダウ)自由エネルギーは、最小が平衡の値なので、最小を求めるためにまず極値を求める。極値は$A(M,T)$の1階微分が0だから、教科書p173(11.29)式で

$$\frac{\partial A}{\partial M} = M[a(T-T_0) - bM^2 + cM^4] = 0 \tag{1}$$

したがって、極値は、

$$M = 0 \tag{2}$$

$$a(T-T_0) - bM^2 + cM^4 = 0 \tag{3}$$

のどちらかを満たす。

(3)式が解を持つかどうか調べるために、$X=M^2$として、

$$f(X) = a(T-T_0) - bX + cX^2 \tag{4}$$

を考える。$f(X)=0$が解を持つのは、判別式Dを計算すれば分かる。

$$D = b^2 - 4ac(T-T_0) \tag{5}$$

$D<0$、あるいは、

$$T > T_1 \equiv T_0 + \frac{b^2}{4ac} \tag{6}$$

の時、$f(X)=0$は解を持たない。したがって、(3)式も解を持たない。また、$f(X)>0$も示せる。

$D > 0$ の時は、$f(X) = 0$ の解は 2 つあって、それぞれ

$$X_1 = \frac{b + \sqrt{D}}{2c} \tag{7}$$

$$X_2 = \frac{b - \sqrt{D}}{2c} \tag{8}$$

とすると、X_2 の符号によって、(3) 式の解の個数が変わる。

1. $X_2 > 0$ **の時:** (3) 式の解は、$\pm\sqrt{X_1}$ と $\pm\sqrt{X_2}$ の 4 つある。$X_2 > 0$ になるためには、$b > \sqrt{D} = \sqrt{b^2 - 4ac(T - T_0)}$ だから、$T > T_0$ の時に相当する。
2. $X_2 < 0$ **の時:** $X = M^2$ なので、X_2 に対応する (3) 式の解は無い。したがって、解は $\pm\sqrt{X_1}$ の 2 つしかない。$X_2 < 0$ となるのは、$T < T_0$ の時。

結局、(11.28) で与えられる $A(M,T)$ のグラフの形は、次の 3 通りが考えられる。

① $T \geq T_1$ の時: $A' \equiv \partial A(M,T)/\partial M$ とすると、増減表は

M	$-\infty$		0		∞
A'	$-\infty$	$-$	0	$+$	∞
$A(M,T)$	∞	減少	極小	増加	∞

つまり、$M = 0$ で、$A(0,T) = A_0(T)$ が最小。

② $T_1 > T \geq T_0$ の時: $A(M,T)$ は偶関数なので、増減表を $M \geq 0$ で書くと、

M	0		$\sqrt{X_2}$		$\sqrt{X_1}$		∞
A'	0	$+$	0	$-$	0	$+$	∞
$A(M,T)$	極小	増加	極大	減少	極小	増加	∞

この場合は極小が $M = 0$ と $M = \sqrt{X_1}$ の 2 つあり、$A(0,T)$ と $A(\sqrt{X_1},T)$ の大小で最小が決まる。 付録で示したように、この大小は $T = T_c$ で入れ

替わる。つまり、$A(M,T)$ が最小になる M は、

$$T > T_c \text{の時} \qquad M = 0 \tag{9}$$

$$T < T_c \text{の時} \qquad M = \sqrt{X_1} = \sqrt{\frac{b+\sqrt{D}}{2c}} \tag{10}$$

したがって、$T = T_c$ の M のとび ΔM は、

$$\Delta M = \sqrt{\frac{b+\sqrt{D}}{2c}} = \sqrt{\frac{b+\sqrt{b^2-4ac(T_c-T_0)}}{2c}} \tag{11}$$

③ $T_0 > T$ の時: 増減表は、

M	0		$\sqrt{X_1}$		∞
A'	0	$-$	0	$+$	∞
$A(M,T)$	極大	減少	極小	増加	∞

つまり最小は、$M = \sqrt{X_1}$ となる。

比熱は、最小の M を代入した $A(M,T)$ から計算できる。最小の M を $M^* = M^*(T)$ とすると、まずエントロピーを計算して、

$$S(T) = -\frac{dA(M^*(T),T)}{dT} \tag{12}$$

合成関数の微分法を使って

$$= -\left\{\frac{\partial A(M^*(T),T)}{\partial M}\right\}_T \frac{dM^*(T)}{dT} - \left\{\frac{\partial A(M^*(T),T)}{\partial T}\right\}_{M^*} \tag{13}$$

ところが、$M = M^*$ は (1) 式を満たすので、

$$\left\{\frac{\partial A(M^*(T),T)}{\partial M}\right\}_T = 0 \tag{14}$$

したがって、(13) 式は

$$S(T) = -\left\{ \frac{\partial A(M^*(T), T)}{\partial T} \right\}_{M^*} \tag{15}$$

教科書 (11.28) 式を代入して

$$= -\frac{\partial A_0(T)}{\partial T} - \frac{a}{2} M^{*2} \tag{16}$$

T_c の前後で

$$= \begin{cases} -\dfrac{\partial A_0(T)}{\partial T} & T > T_c \\ -\dfrac{\partial A_0(T)}{\partial T} - \dfrac{a}{2} X_1 & T < T_c \end{cases} \tag{17}$$

エントロピーは、$T = T_c$ で不連続にジャンプする事が分かる。

比熱は、

$$C_H = T\frac{dS(T)}{\partial T} = \begin{cases} -T\dfrac{\partial^2 A_0(T)}{\partial T^2} & T > T_c \\ -T\dfrac{\partial^2 A_0(T)}{\partial T^2} - T\dfrac{a}{2}\dfrac{dX_1}{dT} & T < T_c \end{cases} \tag{18}$$

ここで、X_1 の温度微分は、(7) 式から計算できて、

$$\frac{dX_1}{dT} = \frac{d}{dT}\frac{b + \sqrt{D}}{2c} = \frac{d}{dT}\frac{b + \sqrt{b^2 - 4ac(T - T_0)}}{2c} \tag{19}$$

$$= -\frac{a}{\sqrt{b^2 - 4ac(T - T_0)}} \tag{20}$$

[問題 2.] P.186 演習問題 [5]

[解答] 教科書 P224 演習問題解答を参照の事。

[付録] [問題 1.] の T_c の計算

2 ページで説明したように、$T_1 > T \geq T_0$ の時、極小が 2 つあって、その時の $A(M,T)$ の値が等しい温度が T_c になる。それぞれの極小について $A(M,T)$ を計算すると、

$$A(0,T) = A_0(T) \tag{21}$$

$$A(\sqrt{X_1},T) = A_0(T) + \frac{a}{2}(T-T_0)X_1 - \frac{b}{4}X_1^2 + \frac{c}{6}X_1^3 \tag{22}$$

$a(T-T_0) - bX_1 + cX_1^2 = 0$ なので、これの両辺に $X_1/6$ をかけると、

$$\frac{a}{6}(T-T_0)X_1 - \frac{b}{6}X_1^2 + \frac{c}{6}X_1^3 = 0 \tag{23}$$

(23) 式を $cX_1^3/6$ について解いて、(22) 式に代入すると、

$$A(\sqrt{X_1},T) = A_0(T) + \frac{a}{3}(T-T_0)X_1 - \frac{b}{12}X_1^2 \tag{24}$$

$$= A_0(T) + X_1\left\{\frac{a}{3}(T-T_0) - \frac{b}{12}X_1\right\} \tag{25}$$

つまり、$T = T_c$ では、

$$\frac{a}{3}(T_c - T_0) = \frac{b}{12}X_1 \tag{26}$$

(7) 式を代入すると、

$$= \frac{b}{12}\frac{b+\sqrt{D}}{2c} \tag{27}$$

$$\frac{8ac}{b}(T_c - T_0) = b + \sqrt{D} \tag{28}$$

$$\left\{\frac{8ac}{b}(T_c - T_0) - b\right\}^2 = D \tag{29}$$

(5) 式を代入すると、

$$\left\{\frac{8ac}{b}(T_c - T_0) - b\right\}^2 = b^2 - 4ac(T - T_0) \tag{30}$$

$$\frac{64a^2c^2}{b^2}(T_c - T_0) - 16ac = -4ac \tag{31}$$

$$\frac{64a^2c^2}{b^2}(T_c - T_0) = 12ac \tag{32}$$

$$T_c = T_0 + \frac{3b^2}{16ac} \tag{33}$$