問題2 2準位系のボルツマン統計と温度

1　表2・表3：エントロピー $S(E)$ のプロット

図1に，$x = E/E_0 = M/N$，$s = S/N$ の数値計算（$N = 20, 50, 100$）と，Stirling 近似 $s_{\mathrm{approx}}(x) = -[x \ln x + (1-x) \ln(1-x)]$ を示す。N を大きくするほど数値結果は極限曲線に近づ

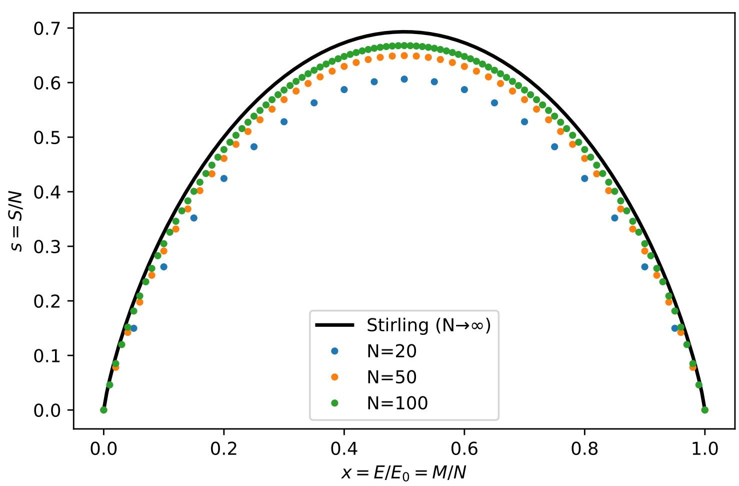

Figure 1: エントロピー $s = S/N$ と Stirling 近似の比較

2　表4・表5：温度の数値計算と理論値の比較

図2に，有限差分 $T(M) \approx (S(M+1) - S(M-1))/(E(M+1) - E(M-1))$ で求めた温度と，Stirling 近似から得られる $T_{\mathrm{th}}(x) = [\ln((1-x)/x)]^{-1}$ を示す。N が大きいほど数値の温度は理論曲線に沿う。

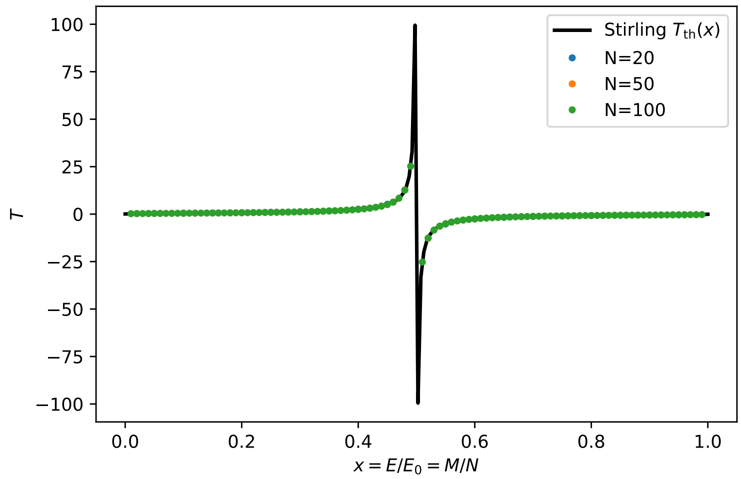

Figure 2: 温度 T の数値計算と Stirling 理論値の比較

3　表6 考察

エントロピーが最大値をとるエネルギー

$x = E/E_0 = M/N$ に対して $s(x) = S/N$ は $x = 1/2$（すなわち $E = E_0/2$，$M = N/2$）で最大となる。

　理由：状態数は $W(M) = \binom{N}{M}$ であり，$M = N/2$ のとき「半分が励起・半分が基底」の組み合
近似でも $s(x) = -[x \ln x + (1-x)\ln(1-x)]$ を x で微分すると $x = 1/2$ で $ds/dx = 0$ となり最大である。

エントロピー最大付近での温度の符号

$1/T = (\partial S/\partial E)_N$ であり，$x = 1/2$ では $\partial S/\partial E = 0$ となるので，T は正の無限大に発散する（「無限大温度」）。したがって，最大付近では T は非常に大きな正の値であり，x が $1/2$ をわずかに超えると $dS/dE < 0$ となるため **負の温度** が現れる。すなわち，エントロピー最大の「少し上」のエネルギー側で温度

本問題で負の温度が現れる理由と正・負の温度の大小

本系ではエネルギー準位が 0 と ε の2つしかなく，E を増やすと励起粒子数 M が増え，状態数 $W(M) = \binom{N}{M}$ は $M = N/2$ までは増加し，それ以降は減少する。よって $E > E_0/2$ の領域では $dS/dE < 0$ となり，$T = (\partial E/\partial S)_N < 0$ と定義されるため負の温度が許され

　熱力学では「熱が高温から低温へ流れる」という性質から，**負の温度は正のいかなる温度より**
$T < 0$ の状態は $T \to +0$ より熱力学的には「上」にあり，$T \to -\infty$ が最も「低温」側の負温度である。

実際の自然現象で負の温度が少ない理由

通常の系ではエネルギーに上界がなく，E を増やすと状態数（密度）は単調に増大し，$dS/dE > 0$ なので $T > 0$ に限られる。本問題のように **エネルギーに上限がある有限準位系**（$E \leq E_0 = N\varepsilon$）では，$E$ が大きい領域で状態数が減るため $dS/dE < 0$ となり負の温度が定義できる。実