2023年度 物理工学基礎演習 (統計力学第一)
第6回 問題

担当; 水田 郁 (mizuta@qi.t.u-tokyo.ac.jp, 工学部9号館325号室)
提出日; 7/10 13:00 (前半クラス), 7/3 13:00 (後半クラス)

I 自由スピン系

N 個の独立なスピンからなる系に、一様磁場を加えた状況を考える。系の Hamiltonian は以下で与えられる。

$$H = g\mu_B \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{H}.$$

ここで、g, μ_B, $\boldsymbol{S}_i$, $\boldsymbol{H}$ はそれぞれ g 因子、Bohr 磁子、($\hbar$ を単位とした) スピン角運動量および外部磁場を指す。以下では、$\boldsymbol{H}$ は z 軸方向に平行であるとする。

(1) スピン角運動量 $\boldsymbol{S}_i$ を大きさ S の古典的ベクトル $\boldsymbol{S}_i = S(\sin\theta_i \cos\phi_i, \sin\theta_i \sin\phi_i, \cos\theta_i)$ とみなし、$H(\{\phi_i, \theta_i\}) = g\mu_B SH \sum_i \cos\theta_i$ と書こう。このとき、系の磁気モーメント $\boldsymbol{\mu} = -g\mu_B \sum_i \boldsymbol{S}_i$ の z 成分期待値を計算せよ。

(2) スピン角運動量の量子化軸を $\boldsymbol{H}$ の方向に取ると、系の Hamiltonian は $H(\{S_i^z\}) = g\mu_B H \sum_i S_i^z$ と書ける。ただし、S_i^z の取りうる値は $-S, -S+1, \ldots, S$ である。このとき、系の磁気モーメントの z 成分期待値を計算せよ。

(3) (2) で求めた磁気モーメントの期待値について、$g\mu_B S =$ 一定 としたまま $S \to \infty$ としたときの極限値を求めよ。また、(1) での古典スピンに対する結果とも簡単に比較せよ。

II 真性半導体

状態密度 $D(\epsilon)$ が以下で与えられる理想 Fermi 気体を考える。

$$D(\epsilon) = \begin{cases} A(\epsilon - \Delta)^{d/2-1} & (\Delta \leq \epsilon), \\ 0 & (0 < \epsilon < \Delta), \\ B(-\epsilon)^{d/2-1} & (\epsilon \leq 0). \end{cases}$$

ここで、A, B は適当な定数であり、d は系の次元を表す。また絶対零度においては、$\epsilon \leq 0$ の状態は全て埋まり $\epsilon \geq \Delta$ の状態は完全に空であるとする。

(1) 系が十分低温であるとき、化学ポテンシャル μ を逆温度 β の関数として求めよ。

(2) $d = 2$ および $d = 3$ の場合において、十分低温で励起される電子数および比熱を求めよ。

III 無限レンジ Ising 模型

(∗ 修正: Hamiltonian の符号をマイナスに)

N 個のスピンからなり、全てのスピン対が距離によらず等しく相互作用を持つような Ising 模型 (無限レンジ Ising 模型) を考える。その Hamiltonian は以下で与えられる。

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

ここで、$J > 0$ は相互作用の大きさ、$i, j \in \{1, 2, \ldots, N\}$ はサイトを表し、和 $\sum_{\langle i,j \rangle}$ は全てのスピン対に関して取るものとする。また、スピン σ_i, σ_j は ± 1 の値を取る。以下の問いに答えよ。

(1) この系の分配関数が以下のように書かれることを示せ (Hint: Gauss 積分公式を用いよ)。

$$Z = \sqrt{\frac{\beta J N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}m \, \exp\left(-N \frac{\beta J m^2}{2} + N \ln(2 \cosh(\beta J m)) \right).$$

(2) 上の積分値を評価するため、被積分関数の指数部分を与える

$$g(m) = \frac{\beta J m^2}{2} - \ln(2 \cosh(\beta J m))$$

を考えよう。$g(m)$ のグラフの概形を描き、$g(m)$ が最大となる点 m^* を決定する方程式を求めよ。また、$m^* \neq 0$ がその解となるような逆温度 β の範囲を求め、平均場近似の結果と比較せよ。

(3) $\beta \neq \beta_c$ の場合を考える。関数 $g(m)$ を $m = m^*$ 周りで 2 次まで展開したもので近似するとき、分配関数 Z および 1 スピンあたりの自由エネルギー f を計算せよ。

IV　自由な 2 量子スピン系

以下の Hamiltonian で記述される量子スピン模型を考える。

$$H = -J \sum_{i=1}^{N/2} \boldsymbol{S}_{2i-1} \cdot \boldsymbol{S}_{2i}.$$

すなわち、相互作用し合う $N/2$ 個のスピン対が独立に存在しているような系を考える。ただし、スピン $\boldsymbol{S}_i$ は $S = 1/2$ $(\hbar = 1)$ の量子力学的なスピン演算子であるとする。

(1) 一つのスピン対のみがある系 $(N = 2)$ でのエネルギー固有値と対応するエネルギー固有状態を書き下せ。

(2) 全系の分配関数 Z を求めよ。また、低温極限での比熱 C とエントロピー S を $J > 0$ と $J < 0$ の場合のそれぞれについて求め、その結果を比較せよ。