

東北大天文学専攻H17年、物理問題[2]

update: 2017 Aug. 05, author: Sho K. NAKAMURA

[1] エネルギー平均値、ゆらぎの算出

分配関数が $Z = \sum e^{-\beta E_j}$ で与えられるとき、エネルギーが E_j である確率は

$$P_j = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_j} \quad (1)$$

$$\langle E \rangle = \sum_j E_j P_j = \frac{1}{Z} \sum_j E_j e^{-\beta E_j} = -\frac{1}{Z} \sum_j \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta E_j} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_j e^{-\beta E_j} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \quad (2)$$

ゆらぎは $\langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ と書ける。

$$\langle E^2 \rangle = \sum_j E_j^2 P_j = \frac{1}{Z} \sum_j E_j^2 e^{-\beta E_j} = \frac{1}{Z} \sum_j \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} e^{-\beta E_j} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \sum_j e^{-\beta E_j} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \quad (3)$$

より

$$\therefore \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \frac{1}{Z^2} \left(\frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 = \frac{\partial}{\partial \beta} \left\{ \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right\} = \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z \quad (4)$$

[2] 磁気モーメント N 個の系の状態和

一様な磁場 H と平行な向きするとき $E_- = -\mu_m H$ 、反平行な向きするとき $E_+ = \mu_m H$ のエネルギー状態である。よって1粒子状態和は

$$z_1 = \sum_j e^{-\beta E_j} = e^{\beta \mu_m H} + e^{-\beta \mu_m H} = 2 \cosh(\beta \mu_m H) \quad (5)$$

ゆえに N 粒子状態和は

$$Z_N = \prod_{j=1}^N z_j = (z_1)^N = 2^N \cosh^N(\beta \mu_m H) \quad (6)$$

[3] 磁気モーメント N 個の系のエネルギー平均値、ゆらぎ計算

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \left[\ln \left\{ 2^N \cosh^N(\beta \mu_m H) \right\} \right] = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left[\ln(2^N) + \ln \left\{ \cosh^N(\beta \mu_m H) \right\} \right] = -N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \{ \cosh(\beta \mu_m H) \} \\ &= -N \mu_m H \tanh(\beta \mu_m H) \underset{\beta \mu_m H \ll 1}{\simeq} -N \beta \mu_m^2 H^2 \end{aligned} \quad (7)$$

$$\langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = N \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln \{ \cosh(\beta \mu_m H) \} = N \mu_m H \frac{\partial}{\partial \beta} \tanh(\beta \mu_m H) = \frac{N \mu_m^2 H^2}{\cosh^2(\beta \mu_m H)} \underset{\beta \mu_m H \ll 1}{\simeq} N \mu_m^2 H^2 \quad (8)$$

[4] 縮退度

問題設定より $N_+ = (N + n)/2, N_- = (N - n)/2$ と書けるので

$$W_N(n) = {}_N C_{N_+} = \frac{N!}{N_+!(N - N_+)!} = \frac{N!}{(\frac{1}{2}(N + n))!(\frac{1}{2}(N - n))!} \quad (9)$$

[5] $\ln W_N$ の最大値とその近傍での展開

n の定義より、組み合わせ $W_N(n)$ が最大となるのは、 $N_+ = N_-$ のとき。すなわち $n = n_0 = 0$ のときである。

$$\therefore \ln W_N(n) \simeq \ln W_N(n_0) + \frac{1}{2} \frac{d^2}{dn^2} \ln W_N(n) \Big|_{n_0} (n - n_0)^2 \quad (10)$$

$$\frac{d}{dn} \ln W_N(n) = \frac{d}{dn} \left[-\ln \left\{ \frac{1}{2}(N + n) \right\}! - \ln \left\{ \frac{1}{2}(N - n) \right\}! \right] \quad (11)$$

近似式 $d \ln x! / dx \simeq \ln x$ より

$$\begin{aligned} \frac{d}{dn} \ln W_N(n) &\simeq -\frac{1}{2} \ln \left\{ \frac{1}{2}(N + n) \right\} + \frac{1}{2} \ln \left\{ \frac{1}{2}(N - n) \right\} \\ \Rightarrow \frac{d^2}{dn^2} \left[-\frac{1}{2} \ln \left\{ \frac{1}{2}(N + n) \right\} + \frac{1}{2} \ln \left\{ \frac{1}{2}(N - n) \right\} \right] &= -\frac{1}{2} \frac{2}{N + n} \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{2}{N - n} \frac{-1}{2} = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{N + n} + \frac{1}{N - n} \right) \end{aligned} \quad (12)$$

よって、 $(n - n_0)^2$ の係数は

$$b = -\frac{1}{2N} \quad (13)$$

である。

[6] エントロピーから求める分布関数、エネルギー平均値、ゆらぎ

系が $[n, n + dn]$ の状態にある確率は

$$f(n)dn = C W_N(n) e^{-\beta E_n} dn \quad (14)$$

と表現できる。ここで C は規格化定数である。前問の答えより

$$\ln W_N \simeq \ln W_N(0) - \frac{1}{2N}n^2 = \ln W_N(0)e^{-n^2/2N} \implies W_N = W_N(0)e^{-n^2/2N} \quad (15)$$

系のエネルギー $E_n = -n\mu_m H$ より

$$f(n)dn = CW_N(0)e^{-\frac{n^2}{2N}}e^{\beta n\mu_m H}dn = C_1 e^{-\frac{n^2}{2N} + \beta n\mu_m H}dn = C_1 e^{-\frac{1}{2N}(n - N\beta\mu_m H)^2} e^{\frac{N^2\beta^2\mu_m^2 H^2}{2N}} = C_2 e^{-\frac{1}{2N}(n - N\beta\mu_m H)^2} \quad (16)$$

規格化定数を求めるためにガウス積分を用いる。

$$C_2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2N}(n - N\beta\mu_m H)^2} = C_2 \sqrt{\frac{\pi}{1/(2N)}} = \sqrt{2N\pi}C_2 = 1 \implies C_2 = \frac{1}{\sqrt{2N\pi}} \quad (17)$$

$$\therefore f(n) = \frac{1}{\sqrt{2N\pi}} e^{-\frac{1}{2N}(n - N\beta\mu_m H)^2} \quad (18)$$

この分布関数より

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} E_n f(n)dn = \frac{-\mu_m H}{\sqrt{2N\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} n e^{-\frac{1}{2N}(n - N\beta\mu_m H)^2} dn \quad (19)$$

$n - N\beta\mu_m H = x$ とおくと

$$\langle E \rangle = \frac{-\mu_m H}{\sqrt{2N\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (x + N\beta\mu_m H) e^{-\frac{x^2}{2N}} dx = \frac{-\mu_m H}{\sqrt{2N\pi}} N\beta\mu_m H \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2N}} dx = \frac{-\mu_m H}{\sqrt{2N\pi}} N\beta\mu_m H \sqrt{\frac{\pi}{1/(2N)}} = -N\beta\mu_m^2 H^2 \quad (20)$$

となり、これは分配関数から求めた結果と一致する。

$$\langle E^2 \rangle = \frac{\mu_m^2 H^2}{\sqrt{2N\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} n^2 e^{-\frac{1}{2N}(n - N\beta\mu_m H)^2} dn \quad (21)$$

同様に $n - N\beta\mu_m H = x$ とおくと

$$\begin{aligned} \langle E^2 \rangle &= \frac{\mu_m^2 H^2}{\sqrt{2N\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (x - N\beta\mu_m H)^2 e^{-\frac{x^2}{2N}} dx = \frac{\mu_m^2 H^2}{\sqrt{2N\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (x^2 - 2N\beta\mu_m Hx + N^2\beta^2\mu_m^2 H^2) e^{-\frac{x^2}{2N}} dx \\ &= \frac{\mu_m^2 H^2}{\sqrt{2N\pi}} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{1/(2N)^2}} + N^2\beta^2\mu_m^2 H^2 \sqrt{\frac{\pi}{1/(2N)}} \right) = \mu_m^2 H^2 (N + N^2\beta^2\mu_m^2 H^2) \end{aligned} \quad (22)$$

$$\therefore \langle \Delta E^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = N\mu_m^2 H^2 \quad (23)$$

となり、こちらも分配関数から求めたものと一致する。