

2. カノニカル分布の取扱いで，平均場近似での分配関数を求めよ．また，その“自由エネルギー”を， J, z, m, T, k_B を用いて表せ．但し，温度は T ，ボルツマン定数を k_B とした．
3. スピンの平均値 m の満たすべき方程式を導け．また，その方程式は，自由エネルギーが m の関数として極値を持つ条件と同じであることを示せ．
4. その方程式について，高温では $m = 0$ の解しかなく，低温では複数の解が存在することを説明せよ．また，その境界の温度 (転移温度) を求めよ．
5. 絶対零度近傍での， m の温度依存性を求めよ．
6. 転移温度近傍での m の温度依存性を求めよ．
7. 磁化率の温度依存性を求めて，グラフを描け．
8. エネルギー，比熱の温度依存性を求めよ．
9. エントロピーの温度依存性を求めよ．

問題 3-8 磁場中イジングモデル：

前問のイジング模型に，一様な磁場 H を導入した場合のエネルギーは，

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i \quad (J > 0)$$

である．

1. 前問と同様に，平均場近似で取扱い，スピンの平均値 m の決定方程式を求めよ．
2. 平均値 m の関数として，“自由エネルギー”の概略を示し，磁場 H を正から負に変化させたときに，その自由エネルギーを最小にする m がどのように変化するかを定性的に説明せよ．
3. 1. の決定方程式を数値的に解け．

問題 3-9 一次元格子上のイジングモデル：⁴

一次元の格子上にあるイジングモデルは正確に解ける問題である．ここでは転送行列の方法を用いて，解いてみる．エネルギーは，

$$E = -J \sum_i S_i S_{i+1} - H \sum_i S_i \quad (J > 0)$$

で与えられている．イジングスピン $S_i = \pm 1$ であり， i は一次元の格子点を表す指標である．一次元であることから，格子点 i のスピン S_i は格子点 $i-1$ と $i+1$ のみと相互作用している．全スピン数は N として，周期的境界条件を課すことにする．つまり， $S_1 = S_{N+1}$ とする．以下の問いに答えよ．

⁴ちょっと難しいかも

1. この問題の分配関数は，

$$\begin{aligned} Z(T) &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \exp(-\beta E(S_1, S_2, \dots, S_N)) \\ &= \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} W(S_1, S_2) W(S_2, S_3) \cdots W(S_N, S_1), \end{aligned} \quad (3.7)$$

ただし，

$$W(S, S') = \exp\left(\beta J S S' + \frac{\beta H}{2}(S + S')\right) \quad (3.8)$$

で表されることを示せ．

2. $W(S, S')$ を 2 行 2 列の行列 $\mathbf{W}$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \exp(\beta J + \beta H) & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp(\beta J - \beta H) \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

とみなすと，分配関数が，

$$Z(T) = \text{Tr} \mathbf{W}^N \quad (3.10)$$

となることを示せ．

3. 行列 $\mathbf{W}$ の固有値を $\lambda_+, \lambda_- (\lambda_+ > \lambda_-)$ とすると， N が十分大きいときには，分配関数は，

$$Z(T) = \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N\right) \simeq \lambda_+^N \quad (3.11)$$

となることを示し，その固有値を求めよ．

4. 自由エネルギーを求めて，エネルギー，磁化の期待値を求めよ．

5. 線形帯磁率 $\left.\frac{\partial M}{\partial H}\right|_{H=0}$ を求めよ．この問題は相転移しないことを議論せよ．

問題 3-10 全連結型イジングモデル：⁵

一次元格子上のイジング模型は上でみたように，相転移を示さない．そこで，この問題では，自分以外の全てのスピンと相互作用する問題を考える．エネルギー関数は，

$$E = -\frac{J}{N} \left(\sum_i S_i\right)^2 - H \sum_i S_i \quad (J > 0)$$

とする．

1. この模型が全連結であることを示し，相互作用が J/N であることによって，エネルギーが示量的であることを議論せよ．

⁵ ちょっと難しい？

2. 次の公式を示せ．

$$\exp(\tilde{N}A^2) = \frac{\tilde{N}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dm \exp(-\tilde{N}m^2 + 2m\tilde{N}A)$$

3. 上の式を用いて，分配関数 $Z(T)$ が次の形になることを示し，関数 $f(m)$ を求めよ．

$$Z(T) = \left(\frac{N\beta J}{2\pi} \right)^{1/2} \int dm \exp(-Nf(m))$$

4. N が十分大きいときに，上の積分は $f(m)$ の最小値で置き換えて良い． $f(m)$ の最小値を与える条件式を導け．

5. 前問の条件式は，平均場近似での自己無撞着方程式と同じ性質を持っている．温度が低温で相転移することを説明せよ．

問題 3-11 グランドカノニカル分布：

温度 T ，体積 V ，化学ポテンシャル μ のグランドカノニカル分布を考える．

1. あるミクロな状態 j (エネルギー E_j ，粒子数 N_j) が実現する確率 P_j は，

$$P_j = \frac{1}{\Xi} \exp\left(-\frac{E_j - \mu N_j}{k_B T}\right)$$

となることを説明せよ．ここで， k_B はボルツマン定数であり，規格化因子 Ξ は大分配関数である．

2. グランドポテンシャル $A = -k_B T \log \Xi$ が示量的，すなわち， $A(T, \alpha V, \mu) = \alpha A(T, V, \mu)$ であることを用いて，圧力 P について $PV = -A$ が成り立つことを示せ．

3. 系の平均粒子数を $\langle N \rangle$ ，その平均粒子密度を $\rho (= \frac{\langle N \rangle}{V})$ とすると，

$$\langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle = \frac{\langle N \rangle k_B T}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial \mu} \right)_T$$

が成り立つことを示せ．

4. マクロな系では，粒子数のゆらぎが小さいことを上の関係式を用いて説明せよ．

問題 3-12 理想気体のグランドカノニカル分布の取扱い：

体積 V の容器に入った N 個の古典的理想気体を考える．温度 T および化学ポテンシャル μ の熱浴と粒子浴が接しているとする．

1. 大分配関数を Ξ を求めよ．

2. グランドポテンシャル A を求めよ．

3. 粒子数 $\langle N \rangle$ と化学ポテンシャルの関係を求めよ．
4. 状態方程式を求めよ．
5. エントロピーを求めよ．

問題 3-13 重力中の理想気体のグランドカノニカル分布での取扱い：

質量 m の理想気体が重力ポテンシャル (重力加速度 g) 中に温度 T の平衡状態にある．この問題は以前にカノニカル分布による取扱いで考察した．ここでは，グランドカノニカル分布を用いて考察してみる．高さ z と $z + dz$ の間の体積 V の箱を考える．その中では，重力ポテンシャルは mgz の一定値と考えてよい．平衡状態ではそれぞれの高さ (のうすかわ) で化学ポテンシャルがつりあっていると考ええる．以下の問に答えよ．

1. 高さ z にある N 個の理想気体について，その分配関数を求めよ．
2. そこでの化学ポテンシャルを求めよ．
3. 平衡条件から，圧力の高さ z 依存性を求めよ．