演習問題 2

問題 1. 磁場 $\vec{B}=(B_x,B_y,B_z)$ 中の電子のハミルトニアンは $H=-\mu_B\vec{S}\cdot\vec{B}$, $\vec{S}=\frac{1}{2}\vec{\sigma}$、$\sigma$ ：パウリ行列、$\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$, $\sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$, $\sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$ で与えられる。

そこで B_z 方向に z 軸をとった時、

(a) σ_z を対角化する表示 $(|\uparrow\rangle,|\downarrow\rangle)$ でハミルトニアンの固有値、固有状態を求めよ。またこの固有状態の完全性を示せ。

(b) この表示でカノニカル集団の密度行列 $\rho=\frac{1}{Z}e^{-\beta H}$, $(Z=\mathrm{Tr}\ e^{-\beta H})$ を書き下せ。

(c) この表示で $\langle\sigma_z\rangle=\mathrm{Tr}\ \rho\sigma_z$ を求めよ。

(d) σ_x を対角化する表示 $(|\tilde{\uparrow}\rangle,|\tilde{\downarrow}\rangle)$ で固有状態を書き直せ。

(e) この表示でカノニカル集団の密度行列 $\rho=\frac{1}{Z}e^{-\beta H}$, $(Z=\mathrm{Tr}\ e^{-\beta H})$ を書き下せ。

(f) この表示で $\langle\sigma_z\rangle=\mathrm{Tr}\ \rho\sigma_z$ を求めよ。

問題 2. N 個の原子が結晶中の格子点に周期的にならんでいる状態から n 個が表面へ移動し欠陥ができると考える。このとき結晶中から表面へ原子を移動するのに必要なエネルギーを ϵ_1 としたとき以下の問に答えよ。ただし $1<<n<<N$、とし系の温度は T とする。なおスターリングの公式 $\ln x!=x\ln x-x$ は用いてよい。

(a) 結晶とその表面にある $N+n$ 個の原子が存在可能な場所のうち N 個原子で埋まっていることを用いてエントロピーを評価せよ。

(b) ヘルムホルツの自由エネルギーを表面の原子数の割合 $x=n/N$ の関数として求めよ。

(c) $n=Ne^{-\epsilon/kT}$ を導け。

問題 3. 一般のスピン S の自由な磁気モーメントを持つ系のハミルトニアンは $H=-g\mu_B\vec{S}\cdot\vec{B}$ と与えられる。この系において座標軸を z 軸を磁場の方向に

とった場合、一つの磁気モーメントのエネルギー固有値は $E_j = -g\mu_B jB$、$j = -S, -S+1, \cdots, S-1, S$、エネルギー固有状態は S_z の固有状態 $|j\rangle$、$S_z|j\rangle = j|j\rangle$ となる (g はいわゆる g ファクター)。このような磁気モーメントが独立して N 個ある時、

(a) 系をカノニカル集団として扱い分配関数 $Z = \mathrm{Tr}\ e^{-\beta H}$ を求めよ。

(b) 分配関数の磁場による対数微分を考え、z 方向の全磁化 $M = g\mu_B \sum_{i=1}^{N} \langle S_z^i \rangle$ を求めよ。ただし Brillouin 関数

$$\begin{aligned} B_S(x) &= \frac{d}{dx}\ln\frac{\sinh(\frac{2S+1}{2S}x)}{\sinh\frac{x}{2S}} \\ &= \frac{2S+1}{2S}\coth\frac{2S+1}{2S}x - \frac{1}{2S}\coth\frac{x}{2S} \end{aligned} \tag{1}$$

とする。

(c) $x << 1$ で $B_S(x) \approx \frac{S+1}{3S}x,$ を導き $g\mu_B S << k_B T$ の場合の磁化率 $\chi = \frac{dM}{dB}$ を求めよ。

(d) 古典極限 $S \to \infty$ を議論せよ？

問題 4. (a) x, y, z の間にある関数関係があるとき

$$\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y = -1$$

を示せ。

(b) ギッブスの自由エネルギー $G(T, N, p)$ の全微分を計算し、

$$\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$$

を示せ。

(c) 等積比熱 $C_v = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V$、等圧比熱 $C_p = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p$ の間の以下の関係式を導け。

$$C_p - C_v = -T\frac{\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p^2}{\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T}$$