統計力学演習問題 (10)

[1] 気体分子 1 個を吸着し得る吸着点 N 個をもつ吸着面がある。吸着された分子は自由な状態に比べてエネルギーが ε_0 だけ低い。今、この吸着面が、温度 T と化学ポテンシャル μ を持つ気体と接触している。温度は十分高く、気体の量子効果は無視できるものとする。

(a) グランドカノニカル分布を用いて、吸着分子に対する大分配関数 Z_{G} を求めよ。

(b) 吸着された平均分子数 n を求めよ。

(c) 単原子分子からなる古典理想気体の化学ポテンシャル μ を、温度 T、圧力 P の関数として求めよ。これを用いて、この単原子分子気体と接している吸着面の被覆比 $\dfrac{n}{N}$ を、T と P の関数として表せ。

[2] 絶縁体結晶の格子点に，大きさ μ を持つ古典的磁気モーメント $\boldsymbol{m_j}$ が局在しており，隣接格子点の磁気モーメントと相互作用している。一様な磁束密度 $\boldsymbol{B}$ がかかっている場合，この系のハミルトニアンは，

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{\boldsymbol{j}}\sum_{\boldsymbol{\delta}} \boldsymbol{m_j}\cdot\boldsymbol{m_{j+\delta}} - \sum_{\boldsymbol{j}} \boldsymbol{m_j}\cdot\boldsymbol{B} \tag{1}$$

で与えられる。ここで J は隣接モーメント間の相互作用定数、$\boldsymbol{j}$ は格子点の位置ベクトル、また $\boldsymbol{\delta}$ は隣接格子をつなぐベクトルである。格子点 $\boldsymbol{j}$ と隣接ベクトル $\boldsymbol{\delta}$ の総数をそれぞれ N と d で表す。以下では $J>0$ の強磁性的相互作用の場合を考えると，(1) 式の第一項は，隣接モーメントが同じ方向を向いた場合にエネルギーが下がることになる。従って，低温において，自発磁化

$$\boldsymbol{M} \equiv \sum_{\boldsymbol{j}} \langle \boldsymbol{m_j} \rangle \tag{2}$$

の出現が予想される。さらに，各磁気モーメントは同等であることから，$\langle \boldsymbol{m_j} \rangle$ は格子点の位置 $\boldsymbol{j}$ に依らず一定で，

$$\langle \boldsymbol{m_j} \rangle = \boldsymbol{M}/N \tag{3}$$

と書けるであろう。

(a) (1) の右辺第一項で，各磁気モーメント $\boldsymbol{m_j}$ を，平均値 (3) とそこからのずれの和として，

$$\boldsymbol{m_j} = \langle \boldsymbol{m_j} \rangle + \Delta\boldsymbol{m_j}, \qquad \Delta\boldsymbol{m_j} \equiv \boldsymbol{m_j} - \langle \boldsymbol{m_j} \rangle$$

と表し，$\Delta\boldsymbol{m_j}$ に関する二次の項を無視する「平均場近似」を採用する。すると，(1) が,

$$H \approx -\sum_{\boldsymbol{j}} \boldsymbol{m_j}\cdot\boldsymbol{B}_{\mathrm{eff}} + \frac{Jd}{2N}M^2, \qquad \boldsymbol{B}_{\mathrm{eff}} \equiv \boldsymbol{B} + \frac{Jd}{N}\boldsymbol{M} \tag{4}$$

と近似できることを示せ。

(b) 平均場近似 (4) を用いて，温度 T における分配関数 Z を求めよ。

(c) 自由エネルギー F の表式を求めよ。

(d) F を磁化 M について最小化することにより，熱平衡磁化 M を決める式が

$$M = N\mu L(\beta\mu B_{\mathrm{eff}}) \tag{5}$$

で与えられることを示せ。ただし，$\beta \equiv 1/kT$ および $L(x) \equiv \coth x - 1/x$ である。

(e) $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{0}$ の場合について，強磁性に転移する温度 T_{c} を求めよ。