統計力学A XI

2020/12/22

§ 統計力学Aの構成

Ⅰ. ボルツマン公式，等重率原理　・自由粒子模型

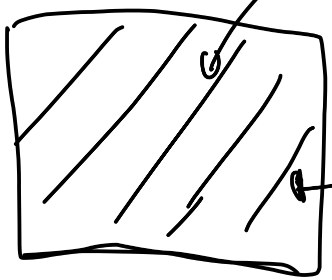
Ⅱ. 分配関数，カノニカル分布　・2原子分子模型

Ⅲ. 熱力学との関係，等価なアンサンブル　・理想ゴム模型

Ⅳ. 統計力学の応用

§ 統計学の役割

現象



物質

測定
（熱力学）

どうやって？
- 探索チャレンジ
- 知見からの推測

✓ 新奇な性質（発見!!）

統計学

機構？

応用・発展
制御

§ 困難

マクロ　$\boxed{\text{熱力学}}$　“新奇現象”？

↓

ミクロ　$\boxed{\text{力学}}$ → 記述は??

そもそも、原子・分子スケールですら、
原子核/電子、クォーク et al ・・・
からみると マクロ で・・・

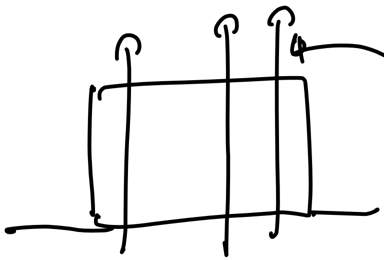
§ 今日の目標

1. 統計力学の"有効な使い方"を学ぶ
（役に立つ）

2. 統計力学の"発展的な使い方"を学ぶ
（役に立つ）

~Intermission~

§例：磁性体



T

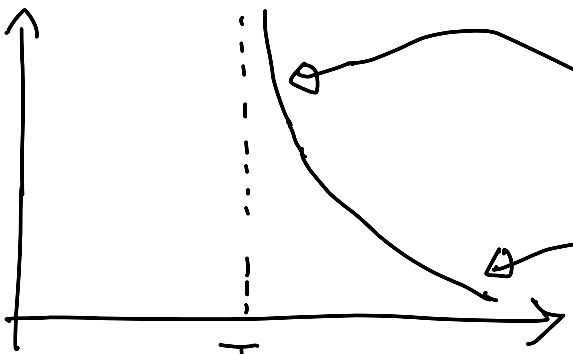
✓ 外部磁場の大きさ h

✓ 磁化 $M=M(T,h)$ ← 測定可能

帯磁率 $\chi(T) \equiv \left.\dfrac{\partial M(T,h)}{\partial h}\right|_{h=0}$

例: $\chi(T)$

観測されたとせよ。



T_c T

$\chi(T) \simeq \dfrac{1}{(T-T_c)^{\gamma}}$

$\chi(T) \propto \dfrac{1}{T}$ (キュリー則)

問：どのような条件で、どのように生じる？

§ ミクロへ・・・

磁化："描像"：物質の中に「磁気的な分極」(〜磁石)
が生じる

⇓

各原子の「磁気モーメント」の集まり

⇓

スピン，電荷の運動 ・・・

? ? ?

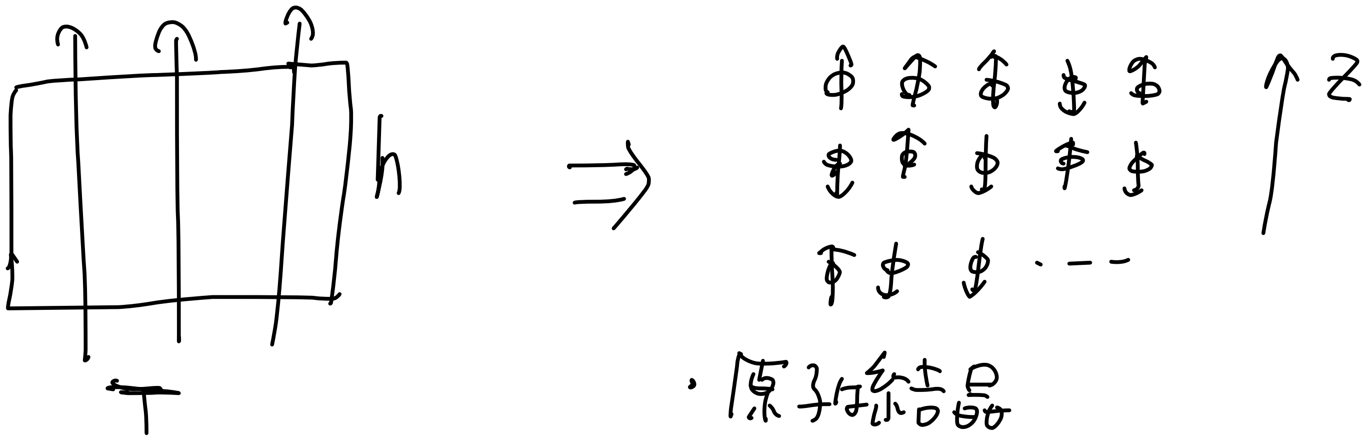
⟹ "量子電磁気学"

§ 有効模型

▷ 問に答えるために、"ミクロな記述"を

おおらかに考える ―

例:



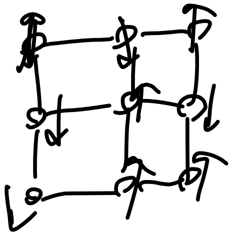
異方的な系

・原子な結晶

・各原子に磁気モーメント μ or $\vec{\mu}$ とする

(等方な場合 μ)

§ 具体例



- 原子：d次元正方格子（格子点に原子がある）
- 各格子点に磁気モーメント μ または $-\mu$　$(\mu>0)$
- 外部磁場 h に対して エネルギー $-\mu h$ または μh
- 隣接磁気モーメントは そろった方がエネルギー低

$$\Lambda = \{ i \mid i = (i_{x_1}, i_{x_2}, \ldots, i_{x_d}) \in [0, L]^d \}$$

$\sigma_i \in \{+1, -1\}$　（「スピン」とよぶ）

$\sigma = (\sigma_i)_{i\in\Lambda}$　（スピン配置）

$$H(\sigma) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \mu h \sum_{i\in\Lambda} \sigma_i$$

$(J>0)$

$\langle i,j \rangle$：隣接対

- 磁気モーメント $\mu\sigma_i$
- 磁場との相互作用エネルギー $-\mu\sigma_i h$

§ モデル

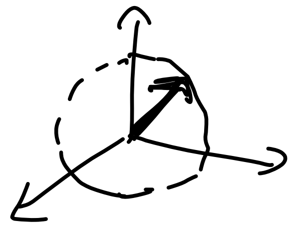
・イジングモデル

$$H(\sigma) = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j - \mu h\sum_{i\in\Lambda}\sigma_i$$

$\langle i,j\rangle$：隣接対

・ハイゼンベルグモデル

$\vec{\sigma}$: 3次元ベクトル　$|\vec{\sigma}|=1$



$$\sigma = (\vec{\sigma}_i)_{i\in\Lambda}$$

$$H(\sigma) = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\vec{\sigma}_i\cdot\vec{\sigma}_j - \mu\vec{h}\cdot\sum_{i\in\Lambda}\vec{\sigma}_i$$

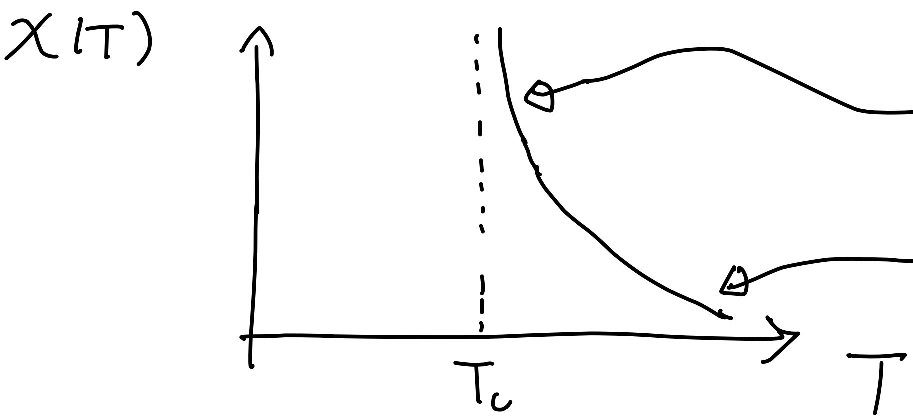
⋮

etc　etc

これらは"仮説的モデル"でそれ自身に根拠があるわけではない。

§ 問題設定

現象



$$\chi(T) \simeq \frac{1}{(T-T_c)^\gamma}$$

$$\chi(T) \propto \frac{1}{T}$$

- 説明できるのか？
- 予言できるのか？

有効モデル

$$H(\sigma) = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j - \mu h\sum_{i\in\Lambda}\sigma_i$$

etc ・・・

~ Intermission ~

§ 統計力学：公式

$$Z(\beta,h) = \sum_{\sigma} e^{-\beta H_h(\sigma)}$$

- カノニカル分布

$$P^{c}_{T,h}(\sigma) = \frac{1}{Z(\beta,h)} e^{-\beta H_h(\sigma)}$$

$$H_h(\sigma) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - \mu h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i$$

- 磁化

$$M = \mu \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i$$

$$\langle M \rangle^{c}_{\beta,h} = \frac{1}{Z(\beta,h)} \sum_{\sigma} \boxed{\sum_{i \in \Lambda} \mu \sigma_i} \, e^{+\beta J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + \beta h \boxed{\mu \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i}}$$

$$= \frac{1}{Z(\beta,h)} k_B T \frac{\partial}{\partial h} \underbrace{\boxed{\sum_{\sigma} e^{\beta J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + \beta \mu h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i}}}_{= Z(\beta,h)}$$

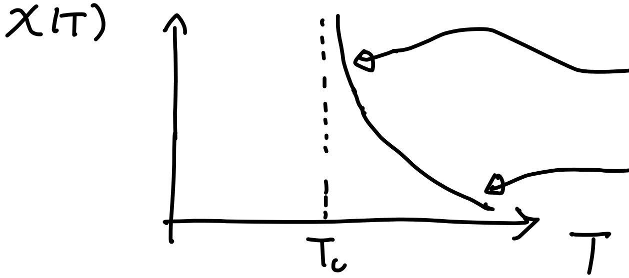
$$= k_B T \frac{\partial}{\partial h} \log Z(\beta,h)$$

//

§分配関数

$$Z(\beta, h) = \sum_{\sigma} e^{\beta J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + \beta h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i}$$

〜 この計算をめぐる諸々のドラマは次回 〜



$\chi(T) \simeq \dfrac{1}{(T-T_c)^{\gamma}}$

$\chi(T) \propto \dfrac{1}{T}$ (キュリー則)　※ここに焦点をあてる

高温極限：　相互作用エネルギー J に比べて

何に比べて

$$\beta J \ll 1$$

$$\Rightarrow Z(\beta, h) = \sum_{\sigma} e^{\beta h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i}$$

§ 分配関数の計算

$$Z(\beta, h) = \sum_{\sigma} e^{\beta h \mu \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i}$$

$$= \sum_{\sigma} \prod_{i} e^{\beta h \mu \sigma_i}$$

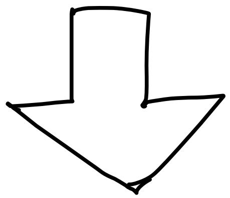
$$\left(= \sum_{\sigma} e^{\beta\mu\sigma_1} e^{\beta\mu\sigma_2} \cdots \right.$$

$$\left. = \left(\sum_{\sigma_1} e^{\beta\mu\sigma_1}\right)\left(\sum_{\sigma_2} e^{\beta\mu\sigma_2}\right) \cdots \right)$$

$$= \prod_{i} \sum_{\sigma_i} e^{\beta\mu h}$$

$$= \prod_{i} \left(e^{\beta\mu h} + e^{-\beta\mu h}\right)$$

$$= \left(e^{\beta\mu h} + e^{-\beta\mu h}\right)^N$$



§ キュリー則

$$\langle M\rangle^{c}_{\beta,h} = k_B T \frac{\partial}{\partial h}\log Z(\beta,h)$$

$$= k_B T N \frac{\partial}{\partial h}\log\left(e^{\beta\mu h}+e^{-\beta\mu h}\right)$$

$$= k_B T N (\beta\mu)\frac{e^{\beta\mu h}-e^{-\beta\mu h}}{e^{\beta\mu h}+e^{\beta\mu h}} = \mu N \tanh(\beta\mu h)$$

$$\chi(T) = \left.\frac{\partial \langle M\rangle^{c}_{\beta,h}}{\partial h}\right|_{h=0} = \mu N(\beta\mu)$$

$$= \frac{\mu^2 N}{k_B T}$$

キュリー則

「キュリー則とは　磁気モーメント間の相互作用エネルギーよりも高温になったときに、普遍的に観測される現象である」という知見を得た。

~ Intermission ~

§ まとめ

- ▷ 統計力学における "有効モデル" という考え方
- ▷ 磁性体に対する "有効モデル" の例
- ▷ キュリー則 の 説明
- ▷ "有効モデル" の力強さ は次回

⟹ 熱力学を越えた世界へ・・・.