統計力学演習　期末試験

2011 年 9 月 27 日

$\boxed{\text{問題 1}}$　[統計力学の基礎]　　2 点 $\times 8 = 16$ 点

♣ [(1-1)] な物理量とは、気体の体積や圧力、温度などの、我々が制御できて測定可能なものであるのに対し、[(1-2)] な物理量とは、箱に閉じ込められた気体分子ひとつが壁に及ぼす力や、分子ひとつが 1 秒間に何回他の分子と衝突するか、など、我々には制御不能で、実験的に直接測定することもできないものを言う。

熱力学は、[(1-3)] な物理量の間に成り立つ法則を現象論的に調べるものであるのに対し、統計力学は、[(1-4)] な物理法則から理論を構築して、熱力学の関係式を再現しようと試みるものである。

(a) 巨視的　　(b) 微視的

♣ 体積 V の箱に閉じ込められ、温度 T で熱平衡に達している気体を考える。この気体は、巨視的には [(1-5)] が、微視的には [(1-6)]。

(a) ただ一つの状態をとっている
(b) たくさんの異なる状態の間で揺らいでいる

♣ 上で述べた、たくさんの異なる状態を実験的に区別することは [(1-7)] である。この状態数を W とすると、この系の [(1-8)] はボルツマンの公式 $S = k_B \log W$ で与えられる。

(a) 可能　　(b) 不可能
(c) 分配関数　　(d) エントロピー　　(e) ヘルムホルツの自由エネルギー

$\boxed{\text{問題 2}}$ [正準分布の原理] 5 点 $\times 2 = 10$ 点

温度 T で熱平衡にある系を考える。系の取りうる全ての微視的状態に $n = 1, 2, 3, \cdots$ と通し番号をつけ、そのときの系のエネルギーを $E_1, E_2, E_3, \cdots$ とする。

(2-1) 正準分布によると、エネルギーが E_n であるような状態 n をとる確率 p_n は $e^{-\beta E_n}$ に比例する。ここで、β は逆温度 $\beta = 1/(k_B T)$ である。このとき、$p_n = \dfrac{1}{Z} e^{-\beta E_n}$ を示せ。ここで、Z は分配関数 (状態和) $Z = \displaystyle\sum_n e^{-\beta E_n}$ である。

(2-2) 系のエネルギー期待値 E は、$E = \displaystyle\sum_n p_n E_n$ と計算される。これは分配関数 Z を使って、$E = -\dfrac{\partial}{\partial \beta} \log Z$ と書けることを示せ。

$\boxed{\text{問題 3}}$ [正準分布による 2 準位系の計算] 5 点 $\times 4 = 20$ 点

N 個の磁性原子からなる磁性体を考える。各磁性原子は上向きスピン、下向きスピンの 2 状態をとるとし、その磁気モーメントを μ とする。磁性体には磁場 H がかかっていて、各原子はスピンが上向きの時は $-\mu H$、下向きの時は μH のエネルギーを持つ。

(3-1) 分配関数 Z を計算せよ。(原子間に相互作用がないので、原子ひとつの分配関数を z とすると、全体の分配関数は $Z = z^N$ となる。)

(3-2) 公式 $F = -\dfrac{1}{\beta} \log Z$ により、ヘルムホルツの自由エネルギー F を計算せよ。

(3-3) ギブス・ヘルムホルツの式 $E = \dfrac{\partial}{\partial \beta}(\beta F)$ によりエネルギー E を計算し、
$E = -N\mu H \tanh \beta \mu H$ を示せ。ただし、$\cosh x = (e^x + e^{-x})/2$, $\sinh x = (e^x - e^{-x})/2$, $\tanh x = \sinh x / \cosh x$ である。

(3-4) 絶対零度における磁性体のエネルギー $E(T \to 0)$ と、温度無限大におけるエネルギー $E(T \to \infty)$ を求め、その物理的意味を述べよ。ただし、$H > 0$, $\mu > 0$ とする。

$\boxed{\text{問題 4}}$ [量子調和振動子の分配関数] 5 点 $\times 1 = 5$ 点

(4-1) 量子力学によると、調和振動子は離散化されたエネルギー準位
$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad (n = 0, 1, 2, \cdots)$ をとる。一つの調和振動子の分配関数 z を計算せよ。

$\boxed{\text{問題 5}}$ [ボース・フェルミ分布] 5 点 $\times 3 = 15$ 点

同種粒子からなる理想量子気体を考える。化学ポテンシャルを μ とする。1 粒子の場合のエネルギー固有状態を $j = 1, 2, 3, \cdots$ とし、状態 j のエネルギー固有値を e_j とする。j 番目の状態をとる粒子数を n_j とする。
この系の状態は占有数の組 $(n_1, n_2, n_3, \cdots)$ によって一意に指定される。系が状態 $(n_1, n_2, \cdots)$ をとる確率を $p(n_1, n_2, \cdots)$ とすると、$p(n_1, n_2, \cdots) = \dfrac{1}{Z_G}\prod_{j=1}^{\infty} e^{-\beta(e_j-\mu)n_j}$ と書ける。ここで、Z_G は大分配関数

$$Z_G = \sum_{(n_1,n_2,\cdots)} \prod_{j=1}^{\infty} e^{-\beta(e_j-\mu)n_j} \tag{1}$$

である。

(5-1) ボソンは一つの状態 j を占める粒子数に制限はないので、$\sum_{n_j} = \sum_{n_j=0}^{\infty}$ となり、フェルミオンは一つの状態 j をふたつの粒子が占めることはできないので $\sum_{n_j} = \sum_{n_j=0}^{1}$ となる。各占有数 $n_1, n_2, \cdots$ に関する和を独立に実行することにより、

$$Z_G = \prod_{j=1}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{-\beta(e_j-\mu)}} \qquad \text{ボソン} \tag{2}$$

$$Z_G = \prod_{j=1}^{\infty} \left(1 + e^{-\beta(e_j-\mu)}\right) \qquad \text{フェルミオン} \tag{3}$$

を示せ。

(5-2) 状態 j を占める粒子数の平均値を $f_j = \langle n_j \rangle = \sum_{(n_1,n_2,\cdots)} p(n_1, n_2, \cdots) n_j$ とする。これは大分配関数の微分として

$$f_j = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial e_j} \log Z_G \tag{4}$$

と書けることを示せ。

(5-3) 上の式を計算することにより、

$$f_j = \frac{1}{e^{\beta(e_j-\mu)} - 1} \qquad \text{ボース分布関数} \tag{5}$$

$$f_j = \frac{1}{e^{\beta(e_j-\mu)} + 1} \qquad \text{フェルミ分布関数} \tag{6}$$

を示せ。

$\boxed{\text{問題 6}}$　　5 点 $\times 2 = 10$ 点

温度 T で熱平衡にある系を考える。系の取りうる全ての微視的状態に $n = 1, 2, 3, \cdots$ と通し番号をつけ、そのときの系のエネルギーを $E_1, E_2, E_3, \cdots$ とする。
正準分布によると、エネルギーが E_n であるような状態 n をとる確率 p_n は $p_n = \dfrac{1}{Z} e^{-\beta E_n}$ と書ける。ここで、Z は分配関数 (状態和) $Z = \displaystyle\sum_n e^{-\beta E_n}$ である。

系のエネルギー期待値 $\langle E \rangle$ は、$\langle E \rangle = \displaystyle\sum_n p_n E_n$ と書ける。

(6-1) 任意の物理量 A の期待値 $\langle A \rangle$ は、$\langle A \rangle = \displaystyle\sum_n p_n A_n$ で計算される。ここで、A_n は状態 n において物理量 A がとる値である。関係式

$$-\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial \beta} = \langle EA \rangle - \langle E \rangle \langle A \rangle \tag{7}$$

が成り立つことを示せ。

(6-2) 系のエントロピー S は確率 p_n を用いて

$$S = -k_B \sum_n p_n \log p_n \tag{8}$$

と表されることを示せ。(熱力学の関係式 $F = \langle E \rangle - TS$ および統計力学の公式 $F = -\dfrac{1}{\beta} \log Z$ を用いよ)