統計力学演習　期末試験

2012 年 9 月 25 日

問題 1 [統計力学の基礎]　2 点 ×7 = 14 点

(1-1)〜(1-6) は、下にある選択肢の中から選んで記号で答えて下さい。

♣ 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 [(1-1)] が、微視的には [(1-2)]。

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

♣ 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 [(1-3)] である。この状態数を W とすると、この系の [(1-4)] 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

♣ 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 はボルツマン因子 [(1-5)] に比例する。ここで、β は逆温度 $\beta = 1/(k_B T)$ である。

全ての状態に対するボルツマン因子の [(1-6)] を分配関数といい、これを計算することが統計力学の主題となる。

(a)$E_n^{-\beta}$　(b)$\beta \log E_n$　(c)$e^{\beta E_n}$　(d)$e^{-\beta E_n}$
(e) 和　(f) 積

(1-7) 温度 T で熱平衡にある系を考える。この系は、エネルギーが E_1, E_2 であるような 2 状態のみをとるとする。分配関数 Z を計算せよ。

問題 2 [小正準分布による 2 準位系の計算]　3 点 $\times 4 = 12$ 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。

(2-1) N 個の磁性原子のうち上向きスピンの数が $N_\uparrow$ であるとき、磁性体の全エネルギー E を求めよ。

(2-2) N 個の磁性原子のうち、上向きスピンの数が $N_\uparrow$ となるような微視的状態数 W を求めよ。

(2-3) ボルツマンの公式 $S = k_B \log W$ から、エントロピー S を計算せよ。その際、スターリングの公式 $\log N! = N \log N - N$ を用いよ。

(2-4) 熱力学の公式 $1/T = \partial S/\partial E$ を用いて、温度 T の関数として磁性体のエネルギー $E = E(T)$ を計算せよ。

問題 3 [正準分布による 2 準位系の計算]　3 点 $\times 4 = 12$ 点

問題 2 と同じ系を、正準分布で取り扱う。

(3-1) 分配関数 Z を計算せよ。

(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、問題 (2-4) の結果と一致することを確かめよ。

(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。

問題 4 [独立な量子調和振動子モデルによる固体の比熱計算]　3 点 $\times 2 = 6$ 点

N 個の原子からなる固体の比熱を計算する。同一の角振動数 ω で振動する独立な量子調和振動子 $3N$ 個の集まりで固体原子の熱振動をモデル化する。一つの調和振動子の分配関数を z とすると、固体全体の分配関数は $Z = z^{3N}$ となる。

(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 $E_0 = \hbar\omega/2, E_1 = 3\hbar\omega/2, E_2 = 5\hbar\omega/2, \cdots$ をとる。一つの調和振動子の分配関数 z を計算せよ。

(4-2) 固体の分配関数 Z を計算せよ。

$\boxed{\textbf{問題 5}}$ [ボース分布関数・フェルミ分布関数]　4 点 ×2 = 8 点

同種粒子からなる理想量子気体の状態は、占有数の組 $(n_1, n_2, n_3, \cdots)$ によって一意に指定される。よって、大分配関数 Z_G を考えると、系の状態に関する和は占有数 $(n_1, n_2, n_3, \cdots)$ に関する和になり、

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

と書ける。

(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、$\displaystyle\sum_{n_j} = \sum_{n_j=0}^{\infty}$ 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 $\displaystyle\sum_{n_j} = \sum_{n_j=0}^{1}$ 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 $f_j = \langle n_j \rangle$ とすると、

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

と大分配関数の対数微分で表される。こ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。

問題 6　3 点 ×3 = 9 点

体積 V の箱に閉じ込められ、温度 T で熱平衡にある気体を考える。気体は N 個の単原子分子からなるとする。

正準分布における系のエネルギー期待値 $\langle E\rangle$ からの揺らぎ $E-\langle E\rangle$ を考える。これの平均値そのもの $\langle E-\langle E\rangle\rangle$ は正負打ち消し合ってゼロになってしまうので、２乗の平均値

$$\delta E = \langle (E-\langle E\rangle)^2\rangle \tag{7}$$

をエネルギーの揺らぎと定義する。

(6-1)

$$\delta E = \langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2 \tag{8}$$

を示せ。

(6-2) エネルギーの揺らぎが比熱 C を用いて

$$\delta E = k_B T^2 C \tag{9}$$

と表されることを示せ。

(6-3) 系の分配関数 Z は、気体の分子数、体積、温度の関数 $Z(N,V,T)$ とみなすことができる。

$$\log Z = N\left(\frac{\partial \log Z}{\partial N}\right)_{V,T} + V\left(\frac{\partial \log Z}{\partial V}\right)_{N,T} \tag{10}$$

を示せ。ただし、分配関数 Z の系のコピーを x 個集めた系の分配関数は、Z^x で与えられることを用いてよい。