統計力学 A/2014 年度試験 /担当 佐々

2015/01/28 10:30-12:00 実施 教科書・ノート持ち込み不可

以下の問題 I, II, III に答えよ。問題全体に渡って、k_{B} をボルツマン定数とする。また、$\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$ によって β と T は常に関係しているとする。N は十分に大きな数とする。

I. 体積 $V = L^3$ の立方体に質量 m の質点を N 個入れる。i 番目の粒子の位置を $\boldsymbol{r}_i$, 運動量を $\boldsymbol{p}_i$ と書く。二つの粒子間には強い短距離斥力が働くが、その相互作用が無視できる状況 を考える。すなわち、ミクロな力学状態 $\Gamma = (\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N, \boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \cdots, \boldsymbol{p}_N)$ に対して、$H(\Gamma) = \sum_{i=1}^N \boldsymbol{p}_i^2/(2m)$ であり、$\boldsymbol{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ に対して領域 $0 \le x_i, y_i, z_i \le L$ の外では $H(\Gamma) = \infty$ とする。この系が温度 T の平衡状態にあるとし、カノニカル分布

$$P^{\mathrm{c}}(\Gamma) = \frac{1}{Z(T,V)} \mathrm{e}^{-\beta H(\Gamma)} \tag{1}$$

に従うとする。以下の問いに答えよ。

(i)$Z(T,V)$ を計算せよ。

(ii) 問 (i) の結果にもとづいて、この系のヘルムホルツの自由エネルギー $F(T,V)$ を求めよ。

(iii) 問 (ii) の結果にもとづいて、この系のエントロピー $S(T,V)$ を求めよ。

(iv) 問 (ii) の結果にもとづいて、この系の圧力 $P(T,V)$ を求めよ。

(v) 問 (iii) の結果にもとづいて、この系の定積熱容量 $C(T,V)$ を求めよ。

(vi) 一般に、全ての気体と液体について $\partial C(T,V)/\partial V$ は圧力 P の (T,V) 依存性 (つまり、$P(T,V)$ の関数形) から決定される。この決定式を書け。

(vii) 冒頭の下線部で記された部分、「二つの粒子間には強い短距離斥力が働くにも関わらず、その相互作用が無視できる状況」とはどういう状況か。その状況を説明するとともに、そのときに強い短距離斥力が無視できる理由を述べよ。

II N 個の質点がばねで連結した模型を考える。ミクロな力学状態 $\Gamma = (\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N, \boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \cdots, \boldsymbol{p}_N)$ に対して、考える模型のハミルトニアンを

$$H(\Gamma) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N \boldsymbol{p}_i^2 + \frac{k_0}{2} \sum_{i=1}^N (|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_{i-1}| - a)^2 \tag{2}$$

とする。ただし、$\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{0}$ は力学座標ではなく、ひとつの端が原点に固定されていることを表す。a は正の実数で隣接粒子対をつなぐばねの自然長をあらわす。k_0 はばね定数である。以下の問いに答えよ。

(i) このハミルトニアンに対して、力学状態の時間変化はニュートンの運動方程式（ハミルトンの運動方程式）であらわされるとする。ハミルトニアンの値が時間変化しないことを示せ。

(ii) $H(\Gamma) = 0$ となる Γ の例を挙げよ。

(iii) エネルギーがある閾値より十分に大きい場合、運動方程式の解は複雑な運動を記述する。このとき、等重率の原理によれば、十分に時間がたったときの力学状態 Γ でのマクロな物理量の値は、ある確率密度に従って選ばれる Γ での値とほぼ確実に等しいと考えられる。この確率密度を具体的に書け。

(iv) 与えられた β, a の値に対して、$\beta k_0 a^2 \gg 1$ を満たすように k_0 を選ぶとき、ある理想極限として、$|\boldsymbol{r}_{i+1} - \boldsymbol{r}_i| = a$ という拘束条件を満たす系とみなすことができる。この連結ばねの固定されていない端

$\boldsymbol{r}_N = (x_N, y_N, z_N)$ について、(鋭いポテンシャル等により) $x_N = X$ に拘束されている場合の平衡状態で、N 番目の粒子に働く x 方向の力を f と書く。系全体のマクロな自然長を A, 系全体のマクロなばね定数を K として、X がマクロな自然長 a の近くの場合に、

$$f = -K(X - A) \tag{3}$$

と書く。無次元定数 A/a の値を書け。結果だけ書いてよい。

(v) 前問において、K の T 依存性について知っていることを述べよ。

(vi) K を計算せよ。

III N 個のスピン $\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_i)_{i=1}^N$ からなる系を考える。σ_i は -1 もしくは 1 をとる変数とし、(無次元化された) 磁化密度 m を

$$m(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \tag{4}$$

と定義する。スピン間の相互作用が無視できる状況を考え、一様磁場 h 下でのハミルトニアンが $H(\boldsymbol{\sigma}) = -hNm(\boldsymbol{\sigma})$ として与えられるとする。磁場 h, 温度 T の平衡状態においてスピン配置 $\boldsymbol{\sigma}$ が実現する確率がカノニカル分布

$$P^{\mathrm{c}}(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{Z(T,h)}e^{-\beta H(\sigma)} \tag{5}$$

で与えられると仮定する。以下の問いに答えよ。

(i) 磁化密度の期待値 $\langle m\rangle = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} P^{\mathrm{c}}(\boldsymbol{\sigma})m(\boldsymbol{\sigma})$ を計算せよ。

(ii) 自由エネルギー密度 $g(T,h)$ を

$$g(T,h) \equiv -\frac{1}{N}k_{\mathrm{B}}T\log Z(T,h) \tag{6}$$

と定義する。$g(T,h)$ を計算せよ。

(iii) スピン配置 $\boldsymbol{\sigma}$ は全部で 2^N 通りある。そのうち、磁化密度が m になる場合の数を $W(m)$ を書く。(注：mN は整数であり、同じ記号を使っているが $m(\boldsymbol{\sigma})$ とは異なる。) N が十分に大きいとき、N に依存しない関数 $I(m)$ を使って、その漸近形が

$$W(m) \simeq e^{NI(m)} \tag{7}$$

と書けることを示し、具体的に $I(m)$ を計算せよ。

(iv) 熱力学に従って、エントロピー密度 $s(T,h)$ を

$$S(T,h) \equiv -\left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_h. \tag{8}$$

と定義する。このとき、s を g, m, T, h の加減乗除によってあらわせ。(ヒント：$Z(T,h) = \tilde{Z}(h/T)$ というように分配関数 $Z(T,h)$ がある 1 変数関数 $\tilde{Z}$ を使って書けることに注意すると見通しがよくなる。)

(v) (iii) で定義された $I(m)$ と (iv) で定義された $S(T,h)$ の関係について議論せよ。