統計力学A/2016年度試験 /担当 佐々

2017/01/31 10:30-11:50 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、$k_{\rm B}$ をボルツマン定数とする。また、$\beta = 1/(k_{\rm B}T)$ 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。

問題I. 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

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

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、(i)-(iii) の空欄を埋めたものを解答用紙に書け。空欄の記号と答えの組み合わせが分かるように解答を作成すること。答えだけでよい。(iv) については、解答を文章で記せ。

(i) 他方の端 $\boldsymbol{r}_N$ を $L\boldsymbol{e}_x = (L, 0, 0)$ に固定する。このハミルトニアンに対応する運動方程式を解く。$H(\Gamma)$ は保存するので、その値を E に決める。系が平衡状態にあると考えられるとき、力学状態 Γ は、「ある確率分布」にしたがってサンプルした力学状態と区別がつかない。これは $\boxed{\text{(a)}}$ の原理とよばれる。その確率分布を $P_E^{\rm mc}(\Gamma)$ と記すと、物理量 $A(\Gamma)$ の期待値は $\langle A\rangle_{E,L}^{\rm mc}$、は、

$$\langle A\rangle_{E,L}^{\rm mc} = \int d\Gamma\, P_E^{\rm mc}(\Gamma) A(\Gamma) \tag{2}$$

と書ける。デルタ関数 $\delta(H(\Gamma) - E)$ および $\delta(\boldsymbol{r}_N - L\boldsymbol{e}_x)\delta(\boldsymbol{p}_N)$ を使って、$P_E^{\rm mc}(\Gamma) = \boxed{\text{(b)}}$ と書ける。ここで、規格化定数を $\Sigma(E,L)$ とした。エネルギー一定面 $H(\Gamma) = E$ に囲まれる相空間の体積を $\Omega(E,L)$ とすると、$\Sigma(E,L)$ は $\Omega(E,L)$ から $\boxed{\text{(c)}}$ と求まる。

(ii) エントロピー $S(E,L)$ を $\Omega(E,L)$ によって $\boxed{\text{(d)}}$ と定義する。この模型の固定された N 番目の粒子に働く力を f とする。温度 T を熱接触で等しくなる物理量で理想気体の場合に絶対温度と等しくなるように選んだものとする。このとき、熱力学の基本関係式 $dS = \boxed{\text{(e)}}\, dE + \boxed{\text{(f)}}\, dL$ を導出することができる。

(iii) 実際に $S(E,L)$ を計算するのは簡単ではない。そこで、N 番目の粒子を固定するのをやめ、その粒子に対して一定外力 $f^{\rm ex}$ を x 軸に沿って加える。$f^{\rm ex} \geq 0$ とする。この系のハミルトニアンを $\tilde{H}(\Gamma)$ とかく。$\tilde{H}(\Gamma)$ は $H(\Gamma)$、$\boldsymbol{r}_N$ の x 座標である x_N、$f^{\rm ex}$ を使って、$\tilde{H}(\Gamma) = H(\Gamma) + \boxed{\text{(g)}}$ と書ける。逆温度 β の熱浴と接しているときの Γ の分布として

$$P_{\beta, f^{\rm ex}}^{\rm c}(\Gamma) = \frac{1}{Z(T, f^{\rm ex})}\boxed{\text{(h)}} \tag{3}$$

を仮定することで温度 T の平衡状態における物理量を求めることができる。ここで、$Z(T, f^{\rm ex})$ は規格化因子であり、

$$G(T, f^{\rm ex}) \equiv -k_{\rm B}T \log Z(T, f^{\rm ex}) \tag{4}$$

とすると、x_N の期待値 $X(T, f^{\rm ex})$ を使って、熱力学の基本関係式 $dG = \boxed{\text{(i)}}\, dT + \boxed{\text{(j)}}\, df^{\rm ex}$ を導出することができる。(配点目安：４０点)

(iv)　この問題で $X(T, f^{\rm ex})$ を計算することの学問的意義は何か。統計力学、あるいは、自然科学としての位置づけを議論せよ。(配点目安：５点)

問題 II.　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

$$m(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \tag{5}$$

と定義する。温度 T, 磁場 h での磁化密度の平衡状態の値を $m_*(T,h)$ と記す。スピン間の相互作用が無視できる状況を考え、$H(\boldsymbol{\sigma}) = -hNm(\boldsymbol{\sigma})$ と与えられるとして、帯磁率

$$\chi = \left.\frac{\partial m_*(T,h)}{\partial h}\right|_{h=0} \tag{6}$$

を計算せよ。(配点目安１０点)

問題 III. 半径 R の球殻の中に質量 m の質点が N 個入っている。粒子間の相互作用が無視できる状況を考える。質点にとって球殻は「硬い」極限にあると考え、質点に対するポテンシャルエネルギーが球殻の外では無限になっているとする。このとき、以下の問いに答えよ。

(i) 球殻が固定されており、N 個の質点が温度 T の平衡状態にあるとする。$N \gg 1$ とするとき、ミクロカノニカル分布、または、カノニカル分布から出発し、エントロピー S、内部エネルギー E、圧力 p、定積熱容量 C を (T,R,N) の関数として、$S(T,R,N)$、$E(T,R,N)$, $p(T,R,N)$, $C(T,R,N)$ を具体的に計算せよ。何をどのように計算したかが分かるように解答を書くこと。（配点目安４０点）

(ii) 体積 V の箱に閉じ込められた $\tilde{N}$ 個の球殻が運動方程式に従って運動する場合を考える。ひとつの球殻の質量を M とし、球殻と球殻は剛体的に衝突するものとする。すわなち、瞬間的に衝突し、完全弾性衝突によって速度を変えるものとする。$\tilde{N}$　個の球殻は、$\tilde{N} \gg 1, \quad V \gg R^3\tilde{N}$ とする。また、各々の球殻は、内に閉じ込められた N 個の粒子の「壁」として相互作用しており、内部の粒子の運動に影響を受ける。系全体が平衡状態にあるとき、球殻の中の粒子の個数 N を巨視的な熱力学測定によって決めることは可能だろうか。可能であるなら、何と何を測定して、その結果からどのように決めるのか明示的にのべ、その手続きの根拠を議論せよ。もし不可能ならその根拠をのべよ。ただし、$\tilde{N}$ は直接測定できないものとする。なた、M や m は分からないものとする。（別の実験から測定できるのだが）ボルツマン定数も分からないものとする。（配点目安５点）