統計力学A/2017年度試験 /担当 佐々

2018/01/30 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_{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。

問題I. 古典力学に従う N 粒子系に対して、i 番目の粒子の位置を $\boldsymbol{r}_i$, 運動量を $\boldsymbol{p}_i$ と書き、そのミクロな力学状態を $\Gamma = (\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N, \boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \cdots, \boldsymbol{p}_N)$ と記す。この系のハミルトニアンを $H(\Gamma)$ と書く。N 個の粒子は一辺 L の立方体の「理想的な箱」に閉じ込められており、外から孤立していると考えてよい。つまり、$\boldsymbol{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ に対して領域 $0 \le x_i, y_i, z_i \le L$ の外では $H(\Gamma) = \infty$ であり、粒子はニュートンの運動方程式に従う。この系の保存量は $H(\Gamma)$ しかないとする。以下の問に答えよ。ただし、空欄がある場合には、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。また、それぞれの項目において設問がある場合には、それに答えよ。

(i) 保存量 $H(\Gamma)$ 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。その確率分布を $P_E^{\mathrm{mc}}(\Gamma)$ と記すと、$P_E^{\mathrm{mc}}(\Gamma) = \boxed{\text{(a)}}$ と書ける。これは $\boxed{\text{(b)}}$ の原理とよばれる。

(ii) エネルギー一定面 $H(\Gamma) = E$ に囲まれる領域の相空間体積を $\Omega(E, V)$ とする。$V = L^3$ は箱の体積である。相空間体積 $\Omega(E, V)$ と前問 $\boxed{\text{(a)}}$ の表現の関係を議論せよ。

(iii) 平衡状態における巨視的物理量の確定値は、$P_E^{\mathrm{mc}}(\Gamma)$ によるその物理量の期待値によって計算される。特に、エントロピー $S(E, V)$ を $\Omega(E, V)$ によって $\boxed{\text{(c)}}$ と定義することにより、熱力学の基本関係式 $dE = \boxed{\text{(d)}}\, dS - \boxed{\text{(e)}}\, dV$ を導出することができる。

(iv) 前問の $\boxed{\text{(e)}}$ を導出せよ。

(v) 例題として希薄気体を考えよう。希薄気体の場合でも、粒子間相互作用が変わるわけではなく、例えば、二つの粒子が近づいたときには強い斥力が働く。それにも関わらず、希薄気体では、粒子間相互作用を無視してよい。その理由を述べよ。

(vi) 粒子間相互作用が無視できるとき、$H(\Gamma) = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{p}_i^2/(2m)$ である。V/N, E/N を一定に保ったまま、N, E, V が十分大きくとったときの $\Omega(E, V)$ の漸近形は

$$\frac{\Omega(E, V)}{N!} = \mathrm{e}^{N\omega\left(\frac{E}{N}, \frac{V}{N}\right) + o(N)} \tag{1}$$

とかける。$\omega(E/N, V/N)$ を計算すると $\boxed{\text{(g)}}$ となる。この結果から、T と p を $(E/N, V/N)$ の関数として得ることができる。$u = E/N$, $v = V/N$ とし、T, p を (u, v) の関数として具体的に計算すると、T は $\boxed{\text{(h)}}$、p は $\boxed{\text{(i)}}$ になる。

(vii) 考えている系が孤立系でなく、温度 T の熱浴と接している場合の力学状態 Γ は、カノニカル分布

$$P_\beta^{\mathrm{c}}(\Gamma) = \frac{1}{Z(T, V)} e^{-\beta H(\Gamma)} \tag{2}$$

にしたがってサンプルした力学状態と区別がつかない。このときの規格化因子 $Z(T, V)$ を使って、自由エネルギー $F(T, V)$ を $\boxed{\text{(j)}}$ と定義することにより、熱力学の基本関係式 $dF = \boxed{\text{(k)}}\, dT - \boxed{\text{(e)}}\, dV$ を導出することができる。空欄 $\boxed{\text{(k)}}$ に適切な文字をいれ、導出せよ。

(viii) 粒子間相互作用が無視できるとき、$F(T, V)$ を計算せよ。

II しばしば、ゴムの模型として長さ a の剛体棒が x 軸上に一次元的に N 個つながった模型が考えられる。各棒は x 軸の正の方向にのびるか、負の方向に折り畳むかしかなく、例えば、k 個の棒が折りたたむなら、端から端の長さ X は $(N-2k)a$ となる。（黒板の図参照）以下の問いに答えよ。

(i) 長さ $X \geq 0$ を与えたとき、切片のとりうる状態の総数 $W(X)$ を求めよ。各棒がとりうる状態は、「そのままのびる」か「逆向きに折りたたむ」かの二つしかないことに注意せよ。

(ii) ボルツマンの公式を使って、長さが X のときのエントロピー $S(X)$ を考える。エントロピーは X について減少関数であることを示せ。

(iii) 実際の実験では、ゴムを断熱環境において自然長からのばすとゴムの温度が上昇することが知られている。この模型における $S(X)$ の振る舞いからこの実験事実を説明することは可能だろうか。可能ならば説明せよ。可能でないなら理由を述べよ。

III N 個のスピン $\sigma_i, (i=1,2,\cdots,N)$, がある。$\sigma_i = 1$ または $\sigma_i = -1$ である。各々のスピンに対して、i に依存する磁場 h_i が作用するときのハミルトニアンを

$$H(\sigma_i; \boldsymbol{h}) = -\mu \sum_i h_i \sigma_i \tag{3}$$

と書く。ここで、μ は磁気モーメントであり、$\boldsymbol{h} = (h_i)_{i=1}^N$ である。スピン配置 $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_i)_{i=1}^N$ が温度 T のカノニカル分布

$$P(\boldsymbol{\sigma}; \boldsymbol{h}) = \frac{1}{Z} e^{\beta\mu \sum_i h_i \sigma_i} \tag{4}$$

に従うとする。このカノニカル分布における A の期待値を $\langle A \rangle_{\beta,\boldsymbol{h}}$ と記す。また、自由エネルギーを

$$F(T, \boldsymbol{h}) = -k_{\mathrm{B}} T \log Z(T, \boldsymbol{h}) \tag{5}$$

と定義する。以下の問に答えよ。

(i) 磁場が一様、すなわち、$h_i = h$ とする。

$$\chi = \frac{\partial \langle \mu \sum_i \sigma_i \rangle_{\beta,\boldsymbol{h}}}{\partial h} \tag{6}$$

を求めよ。

(ii) エントロピー $S(E, \boldsymbol{h})$ を

$$S(E, \boldsymbol{h}) = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} \delta(E, H(\boldsymbol{\sigma}; \boldsymbol{h})) \tag{7}$$

と定義する。ここで、$\delta(x,y)$ は、$x=y$ のとき 1 の値をとり、$x \neq y$ のとき 0 の値をとる。このとき、$S(E, \boldsymbol{h})$ と $F(T, \boldsymbol{h})$ の関係を議論せよ。($h_i = h$ を仮定してもよい。)

磁場 h_i がサイト i 毎に独立に確率分布 $P(h_i) = \exp(-h_i)\theta(h_i)$ に従うとする。ここで、$\theta(x)$ は $x>0$ に対して $\theta(x) = 1$、$x<0$ に対して $\theta(x) = 0$ となる関数である。与えられた磁場配置 $\boldsymbol{h}$ に依存する量 $A(\boldsymbol{h})$ に対して、ランダム磁場に関して平均した量を $\overline{A}$ と記す。具体的には

$$\overline{A} = \sum_{h_1, h_2, \cdots, h_N} \left[\prod_i P(h_i) \right] A(\boldsymbol{h}) \tag{8}$$

である。以下の問に答えよ。

(iii)$\log \overline{Z(T)}$ を計算し、温度 T の関数としての特異性について議論せよ。

(iv) $\overline{F(T)}$ を

$$\overline{F(T)} = -k_{\mathrm{B}} T \overline{\log Z(T)} \tag{9}$$

と定義する。$\overline{F(T)}$ と $\log \overline{Z(T)}$ の関係に着目するなどして、$\overline{F(T)}$ の特異性を議論せよ。