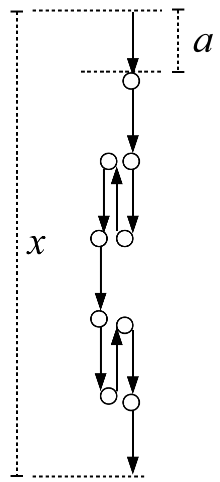
統計力学　1

伸び縮みするゴムの構造を単純化した次のような1次元上の簡単なモデルを考える．図のように，各分子は一個の矢印として表され，○印の部分を介して接続している．個々の分子の向きは互いに独立で二つの正反対の方向を自由に取り得るとする．分子の総数を n ($n \gg 1$), 分子の鎖全体の両端の距離を x，一個の分子の長さを a，絶対温度を T，ボルツマン定数を k で表す．○印の部分の大きさは無視してよい．x の値が最大値 x_{max} をとるとき，すべての分子が同じ向きとなっており，$x_{max} = na$ である．このとき，以下の問に答えよ．



(1) 鎖全体の両端の距離 x が与えられたとき，この鎖を構成する矢印の配列方法の総数 W と，対応するエントロピー S を x, a, n を用いて表せ．

(2) 分子の鎖全体が温度一定の熱平衡状態にあるとき，鎖全体の両端の距離 x を一定に保つ張力 K は $K = \left(\dfrac{\partial F}{\partial x}\right)_T$ で与えられる．ここで，F はヘルムホルツの自由エネルギーである．内部エネルギーが個々の分子の向きの配列に依存しないとして，K を k, T, n, a, x を用いて表せ．

(3) x/x_{max} が小さいときのゴムの弾性定数（$K = px$ における p) を求めよ．また，温度の上昇に伴う弾性定数の変化について，物理的な理由とともに説明せよ．

統計力学　2

系のハミルトニアンが

$$H = -J \sum_{(i,j)} S_i S_j, \quad (J > 0)$$

で与えられるイジングモデルを考える．ここで，$\sum_{(i,j)}$ は隣接するスピンの組についての和を表す．また，S_i はスピンの状態を表す 2 値変数であり，$S_i = 1$ がスピン上向き，$S_i = -1$ がスピン下向きの状態を表す．$\beta = \dfrac{1}{kT}$(k はボルツマン定数，T は絶対温度) として，以下の問に答えよ．なお，必要に応じて近似式 $\tanh x \simeq x - \frac{1}{3}x^3 (|x| \ll 1)$ を用いてもよい．

(1) あるスピン S_0 に着目し，それに隣接する n 個 $(n \geq 2)$ のスピンを熱平衡状態での値 $m = \langle S_i \rangle (i \neq 0)$ で置き換える平均場近似を考える．この近似のもとで，スピン S_0 の熱平衡状態での値 $\langle S_0 \rangle$ を求めよ．

(2) 平均場近似により m の満たすべき方程式を求め, 相転移を起こす臨界温度 T_c を求めよ．

(3) 臨界温度 T_c より僅かに小さい温度 T では $m \propto (T_c - T)^\gamma$ となることを示し，γ を求めよ．ただし，臨界温度付近では m は十分小さいと考えてよい．

統計力学　3

次の各問のそれぞれに答えよ.

問 1 多数の粒子から成り立つ体系を考える. この体系の粒子数は一定である. この体系と同じ構造を持つ体系を多数準備する. 体系間には極めて弱い相互作用があり, 互いにエネルギーのやりとりを行っている. 体系全体と外界との間にはエネルギーのやりとりはなく, 体系全体のエネルギーは保存される. 体系の総数を M とする. 個々の体系は $E_1, E_2, \cdots, E_L$ $(E_1 < E_2 < \cdots < E_L)$ という離散的なエネルギーのいずれかの値を持つとし, E_i というエネルギーの値を持つ体系の数を $M_i(\gg 1)$ $(i = 1, \cdots, L)$ とする. L は 1 より大きな正の整数とする. このとき, 以下の問に答えよ.

(1) M 個のものを M_1 個, M_2 個, $\cdots$, M_L 個に分ける配置の総数を W とする. $(M_1, M_2, \cdots, M_L)$ の組が実現する確率は W に比例すると考える.

$$\sum_{i=1}^{L} M_i = M, \qquad \sum_{i=1}^{L} E_i M_i = E_0$$

という拘束条件のもとで, W が最大となる条件から, $M_i = \mathrm{e}^{-\alpha-\beta E_i}$ と表せることを示せ. α, β は上記の二つの拘束条件に対応する Lagrange の未定乗数で, E_0 は一定値である.

(2) エネルギーが E_i である体系を見出す確率を p_i とし, p_i を E_j $(j = 1, \cdots, i, \cdots, L)$ と β を用いて表せ.

(3) 分配関数 Z を $Z \equiv \sum_{i=1}^{L} \exp(-\beta E_i)$ で定義し, エネルギーの期待値と 2 次モーメントを, それぞれ, $\langle E \rangle = \sum_{i=1}^{L} E_i p_i$, $\langle E^2 \rangle = \sum_{i=1}^{L} E_i^2 p_i$ とする. $\dfrac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}$ を $\langle E \rangle$ と $\langle E^2 \rangle$ を用いて表し, $\dfrac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}$ が常に正となることを示せ.

問 2 結晶の格子比熱に関する Einstein 模型について説明せよ. また, 結晶の定積比熱の高温での温度依存性について説明せよ. Einstein 模型では定積比熱の低温での温度依存性を説明できないが, その理由を述べよ.

問 3 Bose-Einstein 分布, Planck の輻射公式, Stefan-Boltzmann の法則のそれぞれについて簡単に説明し, 相互の関係を述べよ.

統計力学4

質量 m の同種粒子 N 個からなる理想気体が体積 V の箱の中に閉じ込められている．プランク定数を h，ボルツマン定数を k とし，N と V は十分大きいとする．この系の状態数 Ω は，不確定性原理による補正因子 $q(h,N)$，同種粒子の不可弁別性による補正因子 $d(N)$ を用いて，

$$\Omega = \frac{\Omega_0}{q(h,N)d(N)}$$

と表されているとする．ここで，Ω_0 は，$\mathcal{H}$ をハミルトニアンとして，位相空間における等エネルギー超曲面 $\mathcal{H}=E$ で囲まれる領域の体積である．このとき，以下の各問に答えよ．

(1) $q(h,N)$ を h と N を用いて表せ．

(2) 同種粒子の不可弁別性について説明し，$d(N)$ を N を用いて表せ．

(3) Ω_0 は以下のように与えられることを示せ．

$$\Omega_0 = \frac{V^N(2\pi mE)^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)}$$

ここで，$\Gamma(x)=\int_0^\infty \mathrm{e}^{-y}y^{x-1}dy$ である．

(4) 統計力学的エントロピー S は近似的に $S \approx k\log\Omega$ で与えられる．この近似のもとで，S を E,N,V を用いて表せ．

(5) $\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{V,N}$ は V と N を一定にしたときの S の E による微分を表すとして，

$$\theta = \frac{1}{\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{V,N}}$$

を求め，θ の物理的意味を述べよ．

(6) $\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{E,N}$ は E と N を一定にしたときの S の V による微分を表すとして，

$$\Pi = \theta\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_{E,N}$$

を求め，Π の物理的意味を述べよ．

(7) θ と Π との関係式を求めよ．また，示量性状態量と示強性状態量について説明し，求めた関係式に現れる状態量を示量性状態量と示強性状態量に分類せよ．

統計力学5

エネルギー ϵ と運動量 $\boldsymbol{p}=(p_x,p_y,p_z)$ の間の関係が $\epsilon=cp$, $(p=|\boldsymbol{p}|)$ で与えられる粒子 N 個からなる理想気体が，体積 V の容器の中で熱平衡状態にある．ここで，c は速度の次元を持つ正定数である．このとき，1粒子の分配関数は

$$\zeta=\frac{V}{h^3}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\beta cp}dp_xdp_ydp_z$$

であり，全体の分配関数は

$$Z=\frac{\zeta^N}{N!}$$

である．ただし，$\beta=\dfrac{1}{kT}$ であり，k はボルツマン定数，T は絶対温度，h はプランク定数である．また，カノニカル分布による全エネルギー E の平均，二乗平均を，それぞれ，$\langle E\rangle$, $\langle E^2\rangle$ で表す．このとき，以下の各問に答えよ．

(1) ζ を V, h, c, β を用いて表せ．

(2) 定積熱容量 C_V を求めよ．

(3) $\dfrac{\langle E^2\rangle-\langle E\rangle^2}{\langle E\rangle^2}$ を求めよ．

(4) 1粒子の分配関数 ζ を，$\zeta=V\displaystyle\int_0^{\infty}\tilde{\zeta}(\beta,\epsilon)d\epsilon$ とエネルギーについての積分の形に書きかえるとする．このとき，平均エネルギー密度 $u(\beta,\epsilon)$ は

$$u=-\frac{\partial\tilde{\zeta}}{\partial\beta}$$

で与えられる．$u(\beta,\epsilon)$ を h, c, β, ϵ で表せ．

(5) 前問 (4) の結果とヴィーン (Wien) の輻射法則との関連を説明せよ．

統計力学6

格子振動による結晶の定積熱容量を考える．ボルツマン定数を k，プランク定数を h，$\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$ として，以下の各問に答えよ．

(1) 1種類の原子から構成される結晶を考え，その原子の数を N，原子1個の質量を m とする．各原子は独立に振動し，その角振動数 ω はすべて同一であると仮定したアインシュタイン模型を考える．各原子は3次元的な振動を行うので，角振動数 ω をもつ独立な $3N$ 個の1次元調和振動子で格子振動を表し，1次元調和振動子のエネルギー固有値は離散的な値 $\left(n + \dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, \cdots)$ をとるとする．結晶は絶対温度 T の熱平衡状態にあるとして，この結晶の定積熱容量 C_V を求めよ．

(2) 前問(1)で求めた定積熱容量 C_V についての，$kT \gg \hbar\omega$ を満たす高温での温度依存性と $kT \ll \hbar\omega$ を満たす低温での温度依存性についてそれぞれ述べよ．更に，固体の定積熱容量についての実験結果と合わないのは高温側か低温側か理由を付して述べよ．

(3) 固体の定積熱容量についての実験結果をより正しく再現するデバイ模型とデバイ温度 Θ について説明せよ．

(4) 前問(3)のデバイ模型に基づいた格子振動による結晶の定積熱容量 C_V の，$T \gg \Theta$ を満たす高温での温度依存性と $T \ll \Theta$ を満たす低温での温度依存性を述べよ．

統計力学7

N 個の独立な粒子からなる系があり，N は十分大きいとする．各粒子は $-\varepsilon_0, \varepsilon_0$ の2つのエネルギー状態しかとりえないとし，$-\varepsilon_0, \varepsilon_0$ というエネルギー状態をとる粒子の個数を，それぞれ，N_- 個, N_+ 個とする．この系の全エネルギーを E とし，1粒子あたりの平均エネルギー をε とする．ここで，ボルツマン定数を k，統計力学的エントロピー（ボルツマンのエントロピー）を S とし，統計力学的温度 T を

$$\frac{1}{T} = \frac{dS}{dE}$$

で定義する．この系をミクロカノニカル集団として扱い，以下の各問に答えよ．

(1) この系の1粒子あたりの平均エネルギーが ε となる確率 $P(\varepsilon, N)$ が $P(\varepsilon, N) \sim \exp\Big[-N\phi(\varepsilon)\Big]$ の形になることを示し，$\phi(\varepsilon)$ を求めよ．ただし，$\phi(\varepsilon)$ は N に依存せず，ε のみに依存する関数である．

(2) ε の最も確からしい値を $\overline{\varepsilon}$ とおく．このとき，$\overline{\varepsilon}, \phi(\overline{\varepsilon}), \phi'(\overline{\varepsilon})$ を求めよ．ただし，$\phi'(\varepsilon) = \dfrac{d\phi(\varepsilon)}{d\varepsilon}$ である．

(3) $\phi(-\varepsilon_0), \phi'(-\varepsilon_0), \phi(\varepsilon_0), \phi'(\varepsilon_0)$ を求め，$\phi(\varepsilon)$ のグラフを描け．

(4) S と $\phi(\varepsilon)$ の関係を求めよ．

(5) T と $\phi'(\varepsilon)$ の関係を求めよ．

(6) $T < 0$ となる ε の範囲を求めよ．また，その範囲で $T < 0$ であることの物理的な意味を説明せよ．

(7) $T > 0$ の範囲で，ε を ε_0, k, T を用いて表し，更に，横軸を kT/ε_0, 縦軸を $\varepsilon/\varepsilon_0$ としたグラフを描け．

(8) $T > 0$ の範囲で，比熱 $c = \dfrac{d\varepsilon}{dT}$ を ε_0, k, T を用いて表し，更に，横軸を kT/ε_0, 縦軸を c/k としたグラフを描け．