

試験問題		試験日	曜日	時限	担当者
科目名	熱学・統計力学 2	2006年7月19日	水	1	田崎

答えだけではなく、考え方の筋道を簡潔に書くこと。2007年3月を過ぎたら、答案を予告なく処分することがある。

0. レポートの提出状況を書け。レポートは、返却済みのものも新規のものも、今日的答案にはさんで提出すること。

1. 二つの独立な部分からなる量子系のカノニカル分布の基本的な性質を示そう。

二つの量子系（系1、系2と呼ぶ）がある。系1のエネルギー固有状態は $i = 1, 2, \dots, \Omega_1$ と指定され、対応するエネルギー固有値は $E_i^{(1)}$ である。系2のエネルギー固有状態は $j = 1, 2, \dots, \Omega_2$ と指定され、対応するエネルギー固有値は $E_j^{(2)}$ である。系1、系2それぞれを単独にあつかった場合の、分配関数を $Z_1(\beta)$, $Z_2(\beta)$ 、カノニカル分布の確率を $p_i^{(1)}$, $p_j^{(2)}$ 、さらに、エントロピーを

$$S_1(\beta) = -k \sum_i p_i^{(1)} \log p_i^{(1)}, \quad S_2(\beta) = -k \sum_j p_j^{(2)} \log p_j^{(2)} \quad (1)$$

とする。

二つの系をあわせて一つの量子系とみなす。全系のエネルギー固有状態は (i, j) と指定され、対応するエネルギー固有値は $E_{(i,j)} := E_i^{(1)} + E_j^{(2)}$ とする。つまり、二つの部分系のあいだに相互作用がない。このとき、全系の分配関数 $Z(\beta)$ 、カノニカル分布の確率 $p_{(i,j)}$ 、そして、エントロピー

$$S(\beta) = -k \sum_{(i,j)} p_{(i,j)} \log p_{(i,j)} \quad (2)$$

を、上の系1、系2についての量を用いて表せ。

2. 三つずつのスピンの組になって相互作用し合っている系を考える。スピンの総数 N は3の倍数とする。エネルギー固有状態は、スピン変数 $\sigma_i = \pm 1$ を集めた組 $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ で指定される。系に一樣な外部磁場 H がかかっているときの、エネルギー固有状態 σ のエネルギー固有値を

$$E_\sigma = J \sum_{i=1}^{N/3} \sigma_{3i-2} \sigma_{3i-1} \sigma_{3i} - \mu_0 H \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (3)$$

とする。交換相互作用定数は $J > 0$ とする。 $\mu_0 > 0$ は磁気モーメント。

この系の逆温度 β での平衡状態を調べたい。

- (a) まず、スピン三つの系について、エネルギー固有値と対応するエネルギー固有状態を求めよ。
- (b) この結果をもとに全系の分配関数を求めよ。
- (c) 磁化の期待値 $m(\beta, h) = \langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mu_0 \sigma_i \rangle_\beta$ を求めよ。
- (d) ゼロ磁場での磁化率 $\chi(\beta) = \partial m(\beta, h) / \partial h|_{h=0}$ を求めよ。 $T \rightarrow 0$ と $T \rightarrow \infty$ での磁化率のふるまいを議論せよ。

3. ポテンシャル $V(x, y, z)$ からの力を受ける質量 m の粒子 N 個からなる理想気体が逆温度 β の平衡にあるとする。この系を記述する分配関数は、 x, y, z を三次元のデカルト座標として、

$$Z(\beta) = \frac{1}{N!} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3N/2} \left\{ \int dx dy dz e^{-\beta V(x,y,z)} \right\}^N \quad (4)$$

と表される。子が存在する範囲 ((4) での積分範囲) は $0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq L, 0 \leq z$ とする。

今、ポテンシャルは、 U, h, α を正の定数として

$$V(x, y, z) = \begin{cases} -U, & 0 \leq z \leq h, \\ \alpha(z - h) & z > h \end{cases} \quad (5)$$

とする。

- (a) 分配関数 $Z(\beta)$ を求め、自由エネルギー $F(\beta)$ を求めよ。
- (b) この系の熱容量 (全エネルギーの期待値を温度で微分したもの) を求めよ。高温と低温での熱容量のふるまいを議論せよ。その際、何をもって高温・低温と呼ぶかもはっきりさせること。