

試験問題		試験日	曜日	時限	担当者
科目名	熱学・統計力学 2	2007年7月	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。

1. ハミルトニアン (エネルギー) \hat{H} をもつ一般のマクロな量子系のカノニカル分布について考える。エネルギーの期待値 $\langle \hat{H} \rangle_\beta$ とゆらぎ $\sigma_\beta[\hat{H}]$ が分配関数 $Z(\beta)$ を使って、それぞれ、

$$\langle \hat{H} \rangle_\beta = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z(\beta), \quad \sigma_\beta[\hat{H}] = \sqrt{\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \log Z(\beta)} \quad (1)$$

と書けることを示せ。

また、系の体積 V が大きく分配関数が (単位体積あたりの) 自由エネルギー $f(\beta)$ によって

$$Z(\beta) = \exp[-\beta V f(\beta)] \quad (2)$$

と書けるとき、エネルギー密度 $\hat{\epsilon} = \hat{H}/V$ の期待値とゆらぎを $f(\beta)$ と V で表せ。

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

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

とする。 J は、交換相互作用定数である。 $\mu_0 > 0$ 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。 J が正の場合と負の場合に分けて、 $T \rightarrow 0$ 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 $V(\mathbf{r})$ 中の質量 m の粒子 N 個からなる理想気体の分配関数は、

$$Z(\beta) = \frac{1}{N!} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3N/2} \left\{ \int d^3\mathbf{r} e^{-\beta V(\mathbf{r})} \right\}^N \quad (4)$$

である。

x, y, z を三次元の直交座標とし、 $0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq L, h_0 \leq z \leq h_1$ で指定される箱の中に閉じこめられた、質量 m の粒子 N 個からなる理想気体を考える。粒子には、

$$V(x, y, z) = mgz \quad (5)$$

というポテンシャルで表される外力（つまり、一様な重力）が働いている。この系が逆温度 β の平衡状態にある。

(a) 分配関数 $Z(\beta)$ を求め、対応する自由エネルギー $F(\beta; L, h_0, h_1)$ を求めよ。

(b) 容器の底面と上面での圧力は、それぞれ、

$$p_0 = \frac{1}{L^2} \frac{\partial F(\beta; L, h_0, h_1)}{\partial h_0}, \quad p_1 = -\frac{1}{L^2} \frac{\partial F(\beta; L, h_0, h_1)}{\partial h_1} \quad (6)$$

と書ける。この事実を熱力学の立場から説明せよ。

(c) p_0, p_1 を求めよ。

(d) 二つの圧力の差を求め、その意味を述べよ。