統計力学中間試験　　　　　　　　　　　　　　　2001 Nov. 26

注意　途中の式を書いていないものは採点しない。

1. 二準位系についてカノニカル分布(正準分布)を用いて以下の問いに答えよ。

(ア) 二準位のエネルギーを$\pm e$ とするとき、一粒子の分配関数を書け

(イ) 一粒子あたりのヘルムホルツエネルギーF を求めよ。　ヒント—$e^{-bF} = \sum_i e^{-b e_i}$

(ウ) 一粒子あたりのエントロピーを求めよ。さらに、絶対零度及び高温の極限で、エントロピーはどのような値に近づくかをそれぞれ調べよ。

(エ) 一粒子あたりの内部エネルギー $E \equiv \langle E \rangle$ を求め、絶対零度で F と一致することを示せ。

(オ) 一粒子あたりの比熱 C を求めよ。ヒント—内部エネルギーを温度で微分。

(カ) 一粒子あたりの内部エネルギーの二乗 E^2 を求め、エネルギーのばらつき(ゆらぎ)

$\left\langle \left[E - \langle E \rangle \right]^2 \right\rangle = \left\langle E^2 - 2E\langle E \rangle + \langle E \rangle^2 \right\rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ を計算しC と比較せよ。(講義範囲外)

ヒント:$E^2 = \sum_i e_i^2 e^{-bE_i} \Big/ Z$ を使えば良い。

2. 三次元の箱の中の自由粒子(スピン½)について以下の問いに答えよ。

但し、箱の一辺の長さはL とし、$V \equiv L^3$　とする。

(ア) 周期境界条件を用いて、運動量の取り得る値を求めよ。

(イ) 状態密度を求めよ。(片スピン分か両スピン分か明記せよ)

ヒント:$\frac{2V}{(2p)^3}\int d\vec{k}$ をde の積分に変数変換したときの係数が状態密度である。

(ウ) 絶対零度での化学ポテンシャルを平均粒子数N を用いて表せ。

ヒント:片スピン分の状態密度について$N = 2\int_0^\infty D(e)\, f(e)\, de$　である。

(エ) 絶対零度での内部エネルギーをN で表せ。

(オ) 絶対零度での圧力をN で表せ。

ヒント:$E = E(S,V)$であるから、V で微分すればよい。符号は$p > 0$ からわかる筈。

略解－1

(ア) $Z = e^{+be} + e^{-be} = e^{+e/k_\mathrm{B}T} + e^{-e/k_\mathrm{B}T}$

(イ) $F = -k_\mathrm{B}T \log Z = -k_\mathrm{B}T \log\left(e^{+be} + e^{-be}\right)$

(ウ) $S = -\dfrac{\partial F}{\partial T} = k_\mathrm{B} \log Z + k_\mathrm{B}T \dfrac{1}{Z}\dfrac{\partial Z}{\partial T} = k_\mathrm{B} \log\left(e^{+be} + e^{-be}\right) + k_\mathrm{B}T \dfrac{e^{+be} - e^{-be}}{e^{+be} + e^{-be}} e \dfrac{\partial b}{\partial T}$

$= k_\mathrm{B} \log\left(e^{+be} + e^{-be}\right) - \dfrac{e \tanh(be)}{T} = k_\mathrm{B} \log\left(e^{+e/k_\mathrm{B}T} + e^{-e/k_\mathrm{B}T}\right) - \dfrac{e \tanh\left(+e/k_\mathrm{B}T\right)}{T}$

$T \to \infty$ で、$S \sim k_\mathrm{B} \log(2) - \dfrac{e}{T}\tanh(0) \sim k_\mathrm{B} \log(2)$

(エ) $E = F + TS = -e \tanh(be)$

あるいは、$E = \dfrac{(-e)e^{be} + (e)e^{-be}}{Z} = -e \tanh(be)$

(オ) $C = \dfrac{\partial E}{\partial T} = \dfrac{-e^2}{\cosh^2(be)}\dfrac{\partial b}{\partial T} = \dfrac{e^2/k_\mathrm{B}T^2}{\cosh^2(be)} = \dfrac{e^2/k_\mathrm{B}T^2}{\cosh^2(e/k_\mathrm{B}T)}$

(カ) $E^2 = \dfrac{(-e)^2 e^{+b/e} + (+e)^2 e^{-b/e}}{Z} = e^2$ であるから、エネルギーのゆらぎは、

$\left\langle dE^2 \right\rangle = \left\langle E^2 \right\rangle - \left\langle E \right\rangle^2 = e^2\left(1 - \tanh^2\right) = \dfrac{e^2}{\cosh^2(be)} = k_\mathrm{B}T^2C$　となる。

略解－2

(ア) $y(x, y, z) = Ce^{ik_x x}e^{ik_y y}e^{ik_z z}$ で、$y(0,0,0) = y(L,0,0)$ などより、$k_a = \dfrac{2p}{L}n_a \quad (a = x, y, z)$

(イ) $\dfrac{2V}{(2p)^3}\displaystyle\int \cdots dk^3 = \dfrac{2V}{(2p)^3}\int k^2 \underbrace{d\cos q\, dy}_{積分} dk = \dfrac{2V}{(2p)^3}\int k^2 4p \dfrac{dk}{de} de$

$= \dfrac{8p V}{8p^3}\displaystyle\int k^2 \left(\dfrac{\hbar^2 k}{m}\right)^{-1} de = \dfrac{V}{p^2}\int \dfrac{mk}{\hbar^2} de = \dfrac{V}{p^2}\int \dfrac{m}{\hbar^2}\sqrt{\dfrac{2me}{\hbar^2}} de = \dfrac{\sqrt{2}Vm^{3/2}}{p^2\hbar^3}\int \cdots \sqrt{e}\, de$

よって、$D(e) = \dfrac{\sqrt{2}\,Vm^{3/2}}{p^2\hbar^3}$　(両スピン分)

(ウ) $N=\int_0^{\infty} D(e)\,f(e)\,de=\int_0^{m_0} D(e)\,de=\dfrac{\sqrt{2}\,Vm^{3/2}}{p^2\hbar^3}\int_0^{m_0}\sqrt{e}\;de=\dfrac{\sqrt{2}\,Vm^{3/2}}{p^2\hbar^3}\dfrac{2}{3}m_0^{3/2}$

$$\frac{N}{V}=\frac{1}{3p^2}\left(\frac{2mm_0}{\hbar}\right)^{3/2}$$

$$\therefore k_{\mathrm{F}}=\sqrt{\frac{2mm_0}{\hbar}}=\left(3p^2\,N/V\right)^{1/3} \text{ より、 } m_0=\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{3p^2N}{V}\right)^{2/3}$$

(エ) $E=\int_0^{\infty} D(e)\,f(e)\,e\,de=\int_0^{m_0} D(e)e\,de=\dfrac{\sqrt{2}\,Vm^{3/2}}{p^2\hbar^3}\int_0^{m_0} e^{3/2}\,de=\dfrac{\sqrt{2}\,Vm^{3/2}}{p^2\hbar^3}\dfrac{2}{5}m_0^{5/2}$

$$=\frac{3N}{2}\frac{2}{5}m_0=N\frac{3}{5}m_0$$

(オ) $p=-\dfrac{\partial E}{\partial V}=-N\dfrac{3}{5}\dfrac{\partial m_0}{\partial V}=-N\dfrac{3}{5}\dfrac{\partial m_0}{\partial V}$

$$=-N\frac{3\hbar}{10m}\left(-\frac{2}{3}\right)\frac{\left(3p^2N\right)^{2/3}}{V^{5/3}}=\frac{2N}{5V}\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{3p^2N}{V}\right)^{2/3}=\frac{2N}{5V}e_{\mathrm{F}}$$