

と表せることを示せ．

問題 2-12 Maxwell の速度分布：

理想気体について以下の問いに答えよ．

1. 理想気体について，マクスウエルの速度分布を求めよ．
2. また，平均速度と温度の関係を求めよ．
3. 酸素分子を理想気体とみなしたとき， $20^{\circ}\text{C}$  における平均速度を求めよ．
4. それは妥当な値か？

問題 2-13 カノニカル分布の別の導出方法：

1. ほぼ独立とみなせる 2 つの系がある．系 1 において，エネルギー  $E_1^l$  のミクロな状態  $l$  が実現する確率を  $P_1(E_1^l)$  として，系 2 がエネルギー  $E_2^m$  のミクロな状態  $E_2^m$  が実現する確率を  $P_2(E_2^m)$  とする．2 つはほぼ独立であることから，合体系の確率は，

$$P_{1+2}(E^{lm}) = P_1(E_1^l)P_2(E_2^m)$$

と表される．これは独立な事象の確率は積で与えられるとする確率論の性質である．ただし， $E^{lm} = E_1^l + E_2^m$  である．この性質から  $\beta, C$  を定数として，

$$P_1(E_1^l) = Ce^{-\beta E_1^l}$$

が成り立つことを示せ．(ヒント：両辺の  $E_1^l, E_2^m$  での微分の式を比較せよ．)

2. 上のカノニカル分布の規格化定数，すなわち分配関数，特に係数  $\beta$  の意味について考える．
  - (a) ミクロな状態を指標  $l$  として，系 1 がエネルギー  $E$  をとる状態数を  $W(E)$  とする．このとき，

$$Z = \sum_l \exp(-\beta E_l) = \sum_E W(E) \exp(-\beta E)$$

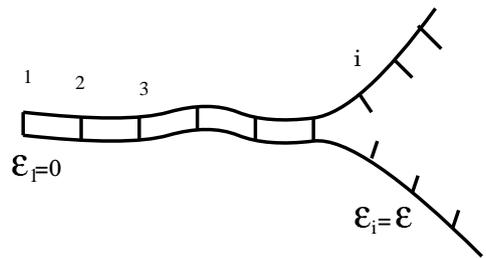
と書けることを説明せよ．

- (b) 系 1 のエネルギーが  $E$  である確率を  $W(E)$  を用いて表せ．また，尤もらしい  $E$  を値とその条件を求めよ．
- (c) 熱力学との対応関係を議論せよ．

### 3 統計力学の基本的な応用例

問題 3-1 Kittel の Zipper 問題：

ジッパーを思い浮かべて欲しい．各ジッパーが開いているときにエネルギーを  $\epsilon$  だけ損する状況を考える．それぞれに変数  $\epsilon_i$  を置くと，それらの取り得る値は， $0, \epsilon$  である．この系の統計力学的性質を議論せよ．



問題 3-2 重力中の理想気体：

質量  $m$  の粒子  $N$  個の古典理想気体が，一様重力下の地面に立てられた底面積  $A$  の無限に高い円筒中に入っている．温度  $T$  の熱平衡状態にあるとして，以下の問いに答えよ．

1. まず，系のエネルギーは，円筒の容器の底を基準 ( $z = 0$ ) として，

$$E = \sum_i^N \left( \frac{p_{ix}^2 + p_{iy}^2 + p_{iz}^2}{2m} + mgz_i \right) \quad (0.1)$$

で与えられる．ここで， $p_{ix}, p_{iy}, p_{iz}$  は  $i$  番目の粒子の運動量であり， $z_i$  はその高さを表している．また，重力加速度は  $g$  とした．この系の分配関数を求めよ．但し，各粒子は区別できないことに注意せよ．必要ならば，ガウス積分の公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-x^2) = \sqrt{\pi}$$

を用いてもよい．

2.  $N$  が十分大きいとして，ヘルムホルツ自由エネルギーを求めよ．Stirling の公式  $\ln N! \simeq N \ln N$  を用いてもよい．
3. 粒子の存在する高さの期待値を求めよ．
4. 速度分布は理想気体からどのような変化を受けるか？ またその理由は？
5. 自由エネルギーからこの系のエネルギーと比熱を求めよ．
6. この比熱を (重力のない) 単原子理想気体の比熱と比較して，その理由を考察せよ．

問題 3-3 古典調和振動子系のカノニカル分布での取り扱い：

$N$  個の相互作用しない質量  $m$ ，角振動数  $\omega$  の調和振動子系がある．各振動子は 1 つの振動自由度しか持っていないとする<sup>2</sup>．ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}(\{x_i\}, \{p_i\}) = \sum_{i=1}^N \left( \frac{p_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x_i^2 \right) \quad (0.2)$$

<sup>2</sup>一次元格子状に並んだ振動子系で，縦波しか無い状況を考える．

1. 分配関数  $Z(T)$  を温度  $T$  の関数として求めよ .
2. 内部エネルギー (エネルギーの期待値) , 比熱 , エントロピーを温度  $T$  の関数で導き , グラフで概略を示せ .
3. エネルギー等分配則を導け . すなわち ,

$$\left\langle \frac{p_i^2}{2m} \right\rangle = \text{これこれ} \quad (0.3)$$

$$\left\langle \frac{m\omega^2 x_i^2}{2} \right\rangle = \text{これこれ} \quad (0.4)$$

を調べよ .

4. (ちょっと難しい) . ハミルトニアンに非調和項  $V(\{x_i\})$  ,

$$V(\{x_i\}) = C_1 x_i^3 + C_2 x_i^4 \quad (0.5)$$

を加えたときに , 比熱に対する非調和項<sup>3</sup>の補正を温度  $T$  に比例する項まで調べよ .

5. また , このときの位置の期待値を求めよ . このことから熱膨張に関して考察せよ .

#### 問題 3-4 3 状態模型<sup>+</sup> $\alpha$ :

$N$  個の格子点に値が  $\mu m(m = -1, 0, 1)$  をとる磁気モーメントがある . この系に磁場  $H$  をかけたときのハミルトニアンは ,

$$\mathcal{H}(\{m_i\}) = -\mu H \sum_{i=1}^N m_i \quad (0.6)$$

で与えられているとする .

1. この系の温度  $T$  での分配関数  $Z(T)$  を求め , 内部エネルギー (エネルギーの期待値) , 比熱を温度  $T$  の関数で導き , グラフで概略を示せ .
2. また平均磁化  $M = \langle \sum_i m_i \rangle$  を  $H$  の関数として求め , 概略を示せ . 何が起きているかを説明せよ .
3. 帯磁率  $\chi_0 = \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_{H=0}$  を求め , 温度変化の概略を示せ .
4. (ちょっと難しい) . 各磁気モーメントが一般的の磁気量子数  $m_i = -J, -J + 1, \dots, J - 1, J$  と  $2J + 1$  とおりの値をとるときに , 同様な解析を行い , 比較してみよう .

#### 問題 3-5 量子力学的調和振動子 :

$N$  個の独立な質量  $m$  , 角振動数  $\omega$  の量子力学的な調和振動子系を考える . 量子力

<sup>3</sup>係数  $C_1, C_2$  を小さいとして扱ってよいとする .

学的な調和振動子のエネルギーは,  $n$  を非負の整数として,  $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$  で与えられる. 全エネルギーは,

$$E = \sum_i \hbar\omega \left( n_i + \frac{1}{2} \right)$$

と表される. 全系のミクロな状態は整数の組  $\{n_i\}$  によって指定される.

1. 全系の分配関数を求めよ.
2. エネルギーの期待値が,

$$\langle E \rangle = N\hbar\omega \left( \bar{n} + \frac{1}{2} \right)$$

で表されることを示せ. ただし,

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$$

である.

3. 系のヘルムホルツの自由エネルギーおよびエントロピーを求めよ.
4. 系の比熱を計算し, その温度依存性をグラフに描いてみよう.
5. エネルギーや比熱, エントロピーの結果を古典的調和振動子の系と比較して, その違いを議論せよ.

問題 3-6 2原子分子の理想気体:

2原子分子の回転運動を古典的に考える. 回転角  $\theta, \phi$  ( $0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \phi \leq 2\pi$ ) とこれに共役な運動量を  $p_\theta, p_\phi$  とすると, 回転の運動エネルギー  $E_{\text{rot}}$  は, 慣性モーメント  $I$  を用いて,

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2I} \left( p_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2 \theta} p_\phi^2 \right)$$

と表される. 重心の運動エネルギーは, 分子の質量を  $m$  として,  $E_{\text{trans}} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$  となる. この系の分配関数, エネルギー, 比熱を計算せよ.

問題 3-7 イジング模型の平均場近似:

$N$  個のイジングスピンからなる強磁性模型

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (J > 0)$$

を平均場近似を用いて考える.  $S_i$  は  $\pm 1$  の値を取るとし, 和は最近接格子点の対についてとるものとし, その個数は  $z$  であるとする.

1. 平均場近似ではスピン変数を平均値  $m$  とそこからのずれで置き換える. ずれが大きくないとした近似の範囲で, 上のエネルギーが次のように近似されることを示せ.

$$H_{\text{MFA}} = \frac{JNzm^2}{2} - Jzm \sum_i S_i$$