

練習問題 16 「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_θ, p_ϕ とすると, 回転の運動エネルギー E_{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.

練習問題 17 「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 ± 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.

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

2. カノニカル分布の取扱いで, 平均場近似での分配関数を求めよ. また, その“自由エネルギー”を, J, z, m, T, k_B を用いて表せ. 但し, 温度は T , ボルツマン定数を k_B とした.
3. スピンの平均値 m の満たすべき方程式を導け. また, その方程式は, 自由エネルギーが m の関数として極値を持つ条件と同じであることを示せ.
4. その方程式について, 高温では $m = 0$ の解しかなく, 低温では複数の解が存在することを説明せよ. また, その境界の温度 (転移温度) を求めよ.
5. 絶対零度近傍での, m の温度依存性を求めよ.
6. 転移温度近傍での m の温度依存性を求めよ.
7. 磁化率の温度依存性を求めて, グラフを描け.
8. エネルギー, 比熱の温度依存性を求めよ.
9. エントロピーの温度依存性を求めよ.

練習問題 18 「磁場中イジングモデル」: 前問のイジング模型に、一様な磁場 H を導入した場合のエネルギーは、

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

である。

1. 前問と同様に、平均場近似で取扱い、スピンの平均値 m の決定方程式を求めよ。
2. 平均値 m の関数として、“自由エネルギー”の概略を示し、磁場 H を正から負に変化させたときに、その自由エネルギーを最小にする m がどのように変化するかを定性的に説明せよ。
3. 1. の決定方程式を数値的に解け。

練習問題 19 「グランドカノニカル分布」: 温度 T 、体積 V 、化学ポテンシャル μ のグランドカノニカル分布を考える。

1. あるミクロな状態 j (エネルギー E_j , 粒子数 N_j) が実現する確率 P_j は、

$$P_j = \frac{1}{\Xi} \exp \left(-\frac{E_j - \mu N_j}{k_B T} \right)$$

となることを説明せよ。ここで、 k_B はボルツマン定数であり、規格化因子 Ξ は大分配関数である。

2. グランドポテンシャル $A = -k_B T \log \Xi$ が示量的、すなわち、 $A(T, \alpha V, \mu) = \alpha A(T, V, \mu)$ であることを用いて、圧力 P について $PV = -A$ が成り立つことを示せ。
3. 系の平均粒子数を $\langle N \rangle$ 、その平均粒子密度を $\rho (= \frac{\langle N \rangle}{V})$ とすると、

$$\langle (N - \langle N \rangle)^2 \rangle = \frac{\langle N \rangle k_B T}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial \mu} \right)_T$$

が成り立つことを示せ。

4. マクロな系では、粒子数のゆらぎが小さいことを上の関係式を用いて説明せよ。

練習問題 20 「理想気体のグランドカノニカル分布の取扱い」：体積 V の容器に入った N 個の古典的理想気体を考える．温度 T および化学ポテンシャル μ の熱浴と粒子浴が接しているとする．

1. 大分配関数を Ξ を求めよ．
2. グランドポテンシャル A を求めよ．
3. 粒子数 $\langle N \rangle$ と化学ポテンシャルの関係を求めよ．
4. 状態方程式を求めよ．
5. エントロピーを求めよ．

練習問題 21 「重力中の理想気体のグランドカノニカル分布での取扱い」：質量 m の理想気体が重力ポテンシャル (重力加速度 g) 中に温度 T の平衡状態にある．この問題は以前にカノニカル分布による取扱いで考察した．ここでは，グランドカノニカル分布を用いて考察してみる．高さ z と $z + dz$ の間の体積 V の箱を考える．その中では，重力ポテンシャルは mgz の一定値と考えてよい．平衡状態ではそれぞれの高さ (のうすかわ) で化学ポテンシャルがつりあっていると考ええる．以下の問に答えよ．

1. 高さ z にある N 個の理想気体について，その分配関数を求めよ．
2. そこでの化学ポテンシャルを求めよ．
3. 平衡条件から，圧力の高さ z 依存性を求めよ．