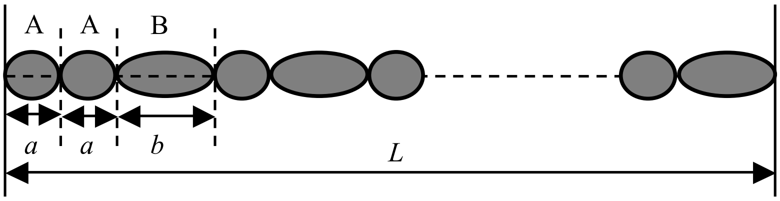
平成２４年度・統計力学試験問題

[問題１]　A 相，B 相の２つの安定相を持つ分子が N 個一直線上につながって長さ L の高分子を形成しているとする．この分子は A 相ではエネルギーは 0 で長さは a であり，B 相ではエネルギーはε（＞０）で長さは b であるとする（下図参照）．また隣接する分子の間に相互作用は無いものとする．



このとき，

(1) 全エネルギーE が $n\varepsilon$の時に，この高分子が取れる状態の数 W_n を求めよ．

(2) そのときのエントロピーS を求めよ．
　（ヒント：　必要であれば，スターリングの公式：$\log x! \cong x\log x - x$を用いよ．）

(3) 統計力学的温度の定義$\left(\dfrac{\partial S}{\partial E}\right) = \dfrac{1}{T}$を用いて，エネルギー$E$ を温度の関数として求めよ．

　(ヒント：　今の場合，$\dfrac{\partial}{\partial E} = \dfrac{1}{\varepsilon}\dfrac{\partial}{\partial n}$ である．)

(4) (3)の結果から温度 T におけるこの高分子の長さ L を求めよ．

(5) 絶対零度（$T \to 0$）の極限での長さ L を求めよ．また，その物理的解釈を述べよ．
　(ヒント：A 相，B 相それぞれの分子数は絶対零度でどうなるか，またなぜそうなるか考えよ．)

(6) 高温（$T \to \infty$）の極限での長さ L を求めよ．また，その物理的解釈を述べよ．

[問題 2] N 個の量子状態を取り得る系を考える．i 番目の量子状態のエネルギーが E_i で，これが実現する確率を p_i とすると，この系のエントロピーは，$S = -k_B \sum_{i=1}^{N} p_i \log p_i$ で与えられる．以下の問いに答えよ．

(1) p_i の総和は 1 であるという条件($\sum_{i=1}^{N} p_i = 1$)のもとで，エントロピーを最大にする p_j は，αを未定係数としたラグランジアン，$L = S - k_B\alpha\left(\sum_{i=1}^{N} p_i - 1\right)$が極値を取る条件，$\dfrac{\partial L}{\partial p_j} = \dfrac{\partial L}{\partial \alpha} = 0$ より，

　$p_j = 1/N$と求まる事を示せ.

(2) $p_j = 1/N$が成り立つとき，エントロピーは$S = k_B \log N$ で与えられる事を示せ.

(3) p_i の総和は 1 であるという条件($\sum_{i=1}^{N} p_i - 1 = 0$)とエネルギーの平均値が$\langle E \rangle$であるという条件($\sum_{i=1}^{N} p_i E_i - \langle E \rangle = 0$)のもとで，エントロピーを最大にする p_j は，αとβを未定係数としたラグランジアン，$L = S - k_B\alpha\left(\sum_{i=1}^{N} p_i - 1\right) - k_B\beta\left(\sum_{i=1}^{N} p_i E_i - \langle E \rangle\right)$が極値を取る条件，$\dfrac{\partial L}{\partial p_j} = \dfrac{\partial L}{\partial \alpha} = \dfrac{\partial L}{\partial \beta} = 0$

より，$p_j = \dfrac{1}{Z_N}\exp\left[-\beta E_j\right]$と求まる事を示せ．但し，$Z_N = \sum_{i=1}^{N}\exp\left[-\beta E_i\right]$である．また，$\beta$は未定のままで良い．

[問題３] 全ての粒子は，フェルミ統計に従うフェルミ粒子か，ボーズ統計に従うボーズ粒子に分けられる．今１種類の粒子からなる系について大正準集合の方法を用いて，それぞれの統計に従う粒子の分布関数を求めることを考える．

(1) 以下の文章の１から６の空欄に当てはまる式もしくは数字を書きなさい．
量子状態kに対応したエネルギー準位をε_k，その準位を占める粒子数をn_kとすると全粒子数は，

$$N = \sum_k n_k \tag{1}$$

で与えられる．この時，大正準集合の分配関数は，化学ポテンシャルμを用いて，

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta N\mu} Z_N = \prod_k \sum_{n_k=0}^{M} e^{\beta(\mu-\varepsilon_k)n_k} \tag{2}$$

で与えられる．ここでMは１つの準位に入りうる最大の粒子数である．以下ではフェルミ統計とボーズ統計に分けて考える．
フェルミ粒子の場合は，$M = \boxed{\ 1\ }$ で，(2)式の最後の項のn_kについての和は具体的に計算できて，$\Xi = \prod_k \boxed{\ 2\ }$ となる．平均の粒子数$\overline{N}$は$\overline{N} = k_B T\dfrac{\partial}{\partial\mu}\log\Xi$で与えられるから，フェルミ粒子の場合は，$\overline{N} = \sum_k \boxed{\ 3\ }$ となる．これと(1)式を比較するとフェルミ粒子の場合，k番目のエネルギー準位に存在する平均の粒子数$\overline{n}_k$は，

$$\overline{n}_k = \boxed{\ 3\ } \tag{3}$$

で与えられることが解る．これをフェルミ分布関数と呼ぶ．
ボーズ粒子の場合，$M = \boxed{\ 4\ }$ で，やはり(2)式の最後の項のn_kについての和は具体的に計算できて，$\Xi = \prod_k \boxed{\ 5\ }$ となる．フェルミ粒子の場合と同様にして平均の全粒子数$\overline{N}$を計算すると，$\overline{N} = \sum_k \boxed{\ 6\ }$ となる．これと(1)式を比較するとボーズ粒子の場合，k番目のエネルギー準位に存在する平均の粒子数$\overline{n}_k$は，

$$\overline{n}_k = \boxed{\ 6\ } \tag{4}$$

で与えられる．これをボーズ分布関数と呼ぶ．

(2) 上で求めたフェルミ分布関数をエネルギーの関数としてみた時のグラフの概形を，絶対零度($T = 0$)及び有限温度($0 < T << \mu/k_B$)の場合について書きなさい．