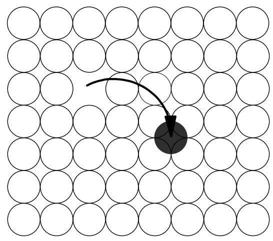
平成 30 年度 統計力学期末テスト

以下の問題で，k_{B}，T はそれぞれボルツマン定数と温度であり，$\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$ である．

[問題 1] 以下の空欄 (1)〜(5) に当てはまる語句または数式を下の選択肢 (ア)〜(セ) から選べ．
小正準集合は先見的等確率の原理が成り立つ集合である．小正準集合がとる微視的状態の総数を重率と呼び，これを W とすると小正準集合でのエントロピー S は，$\boxed{\quad (1) \quad}$ で与えられる．正準集合は小正準集合に対して $\boxed{\quad (2) \quad}$ のやり取りを許した集合である．ヘルムホルツの自由エネルギー F は正準集合の分配関数 Z_N を用いて，$F = \boxed{\quad (3) \quad}$ で与えられる．大正準集合は正準集合に対して，さらに $\boxed{\quad (4) \quad}$ のやり取りを許した集合である．熱力学第 3 法則によれば，絶対零度でのエントロピーは $\boxed{\quad (5) \quad}$ である．
(ア) $k_{\mathrm{B}} \log W$ (イ) $k_{\mathrm{B}}T \log W$ (ウ) $-k_{\mathrm{B}} \log W$ (エ) $-k_{\mathrm{B}}T \log W$ (オ) 体積 (カ) エネルギー (キ) 粒子
(ク) $k_{\mathrm{B}} \log Z_N$ (ケ) $k_{\mathrm{B}}T \log Z_N$ (コ) $-k_{\mathrm{B}} \log Z_N$ (サ) $-k_{\mathrm{B}}T \log Z_N$ (シ) 0 (ス) 1 (セ) ∞

[問題 2] N 個の原子が規則正しく並んで結晶を作っていたとする．右図のように，ある原子が格子点から格子間隙に移ってできる点欠陥を Frenkel 型格子欠陥とよぶ．今 N 個の原子のうち n 個が格子間隙に移ることで格子欠陥ができたとして，この時の格子欠陥の数 n と温度の関係を以下の手順で求める．簡単のため，原子の移れる格子間隙の数も N 個であり，$1 << n << N$ とする．また 1 つの原子を格子点から格子間隙に移すのに必要なエネルギーを ε とする．従って n 個の格子欠陥があるときの内部エネルギー E は $n\varepsilon$ である．



(1) N 個の格子点から n 個の原子が N 個の格子間隙に移る場合の数 W_n が $W_n = ({}_N C_n)^2$ で与えられることを示せ．

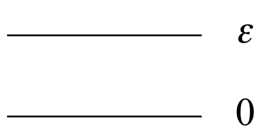
(2) スターリングの公式 $(\log x! \simeq x \log x - x, \quad x \gg 1)$ を用いて，この系のエントロピー S を求めよ．

(3) ヘルムホルツの自由エネルギー F ($= E - TS$) を求めよ．

(4) 平衡状態では $\dfrac{\partial F}{\partial n} = 0$ が成り立つことから，格子欠陥の数 n を温度 T の関数として求めよ．

(5) 上で求めた関数のグラフの概形を示し，高温の極限 $(T \to \infty)$ で格子欠陥の数はどうなるか述べよ．

[問題 3] 右図のように，N 個の粒子がそれぞれ独立にエネルギー 0 の状態と ε の状態をとれる 2 準位系を考える．以下の問いに答えよ．



(1) 1 粒子の分配関数 Z_1 を求めよ．

(2) 全系のエネルギー E が $n\varepsilon$ となる場合の数 W_n を求めよ．

(3) (2) で求めた場合の数 W_n を用いると，正準集合の分配関数 Z_N が $Z_N = \displaystyle\sum_{n=0}^{N} W_n e^{-\beta n \varepsilon}$ で与えられることから Z_N を計算し，$Z_N = (Z_1)^N$ となることを示せ．
(ヒント: 2 項定理 $(a+b)^N = \displaystyle\sum_{n=0}^{N} {}_N C_n a^{N-n} b^n$ を用いる．)

(4) 全系の平均のエネルギーは $\langle E \rangle = \dfrac{1}{Z_N} \displaystyle\sum_{n=0}^{N} W_n n\varepsilon e^{-\beta n \varepsilon}$ で与えられることから，正準集合の分配関数 $Z_N \left(= \displaystyle\sum_{n=0}^{N} W_n e^{-\beta n \varepsilon} \right)$ を用いて $\langle E \rangle = -\dfrac{\partial}{\partial \beta} \log Z_N$ により計算できることを示せ．

(5) (3) の結果と (4) の関係から，この系の平均のエネルギー $\langle E \rangle$ を具体的に計算せよ．

[問題４] １粒子がとれる量子状態 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,

$$N = \sum_k n_k \qquad \text{(式 1)}$$

で与えられる．この時，大正準集合の分配関数 Ξ は，化学ポテンシャル μ を用いて，

$$\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta N \mu} Z_N = \prod_k \sum_{n_k=0}^{M} e^{\beta(\mu - \epsilon_k) n_k} \qquad \text{(式 2)}$$

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．これ以降はボーズ粒子について考えることにする．以下の問いに答えよ．

(1) ボーズ粒子の場合，１つの準位に入りうる最大の粒子数 M はいくつか答えよ．

(2) (1) の事実と (式 2) からボーズ粒子の場合の分配関数を計算せよ．答えのみは不可．

(3) 平均の粒子数は $\bar{N} = k_{\mathrm{B}} T \dfrac{\partial}{\partial \mu} \log \Xi$ で与えられることから，平均の粒子数を計算せよ．答えのみは不可．

(4) (3) の結果を (式 1) と比較することで，k 番目の準位の平均の占有粒子数 $\bar{n}_k$ を求めよ．これをボーズ分布関数と呼ぶ．

(5) ϵ_k を連続変数と見た時，(4) で求めたボーズ分布関数の絶対零度と有限温度でのグラフの概形を描け．

(6) (5) で描いた絶対零度でのボーズ分布関数の物理的な意味を説明せよ．