2024年度 物理工学基礎演習 (統計力学第一)
第4回 問題

担当; 水田 郁 (mizuta@qi.t.u-tokyo.ac.jp, 工学部 9 号館 325 号室)
提出日; 6/10 13:00 (前半クラス), 6/3 13:00 (後半クラス)

I　古典調和振動子

ハミルトニアンが

$$H(\{q_i\},\{p_i\}) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q_i^2 \right) \tag{19}$$

で与えられる N 個の独立な古典調和振動子の系を考える。系は逆温度 β のカノニカル分布に従うとして以下の問いに答えよ。

(1) 分配関数

$$Z(\beta) = \frac{1}{h^N} \int \prod_{i=1}^{N} (\mathrm{d}q_i \mathrm{d}p_i)\, e^{-\beta H(\{q_i\},\{p_i\})} \tag{20}$$

を計算せよ。また、エネルギー期待値 $\langle E \rangle$, 比熱 $C(T)$ を計算せよ。

(2) 運動エネルギーの期待値 $\langle \frac{p_i^2}{2m} \rangle$, 位置エネルギーの期待値 $\langle \frac{1}{2} m\omega^2 q_i^2 \rangle$ を計算し、エネルギー等分配則が成立することを示せ。

II　量子調和振動子

II-1

N 個の独立な量子調和振動子系のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{q}_i^2 \right) = \sum_{i=1}^{N} \hbar\omega \left(\hat{n}_i + \frac{1}{2} \right) \tag{21}$$

で与えられる。系は逆温度 β のカノニカル分布に従うとして以下の問いに答えよ。

(1) 分配関数 $Z(\beta)$, エネルギー期待値 $\langle E \rangle$, 比熱 $C(T)$ を計算せよ。また、比熱 $C(T)$ の温度依存性のグラフの概形を示し、古典調和振動子の場合の結果と比較せよ。

(2) 運動エネルギーの期待値 $\langle \frac{\hat{p}_i^2}{2m} \rangle$, 位置エネルギーの期待値 $\langle \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{q}_i^2 \rangle$ を計算し、エネルギー等分配則が成立するかどうかを確かめよ。

II-2

ハミルトニアンが

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=0}^{N} \frac{1}{2} m\omega^2 (\hat{q}_{i+1} - \hat{q}_i)^2 \tag{22}$$

で与えられる N 個の結合した 1 次元調和振動子系を考える。ただし、境界条件は固定端として $\hat{q}_0 = \hat{q}_{N+1} = 0$ と定める。系は逆温度 β のカノニカル分布に従うとして以下の問いに答えよ。[* 発展問題] はレポートで解く必要はないが、解いて提出した場合には満点を超えて評価をつける。

(1) ハミルトニアンのエネルギー固有値が

$$\sum_{k=1}^{N} \hbar\omega_k \left(n_k + \frac{1}{2} \right), \quad n_k = 0, 1, 2, \ldots, \tag{23}$$

で与えられることを示せ。ここで、 ω_k は固有振動数で

$$\omega_k = 2\omega \sin \frac{\pi k}{2(N+1)}, \quad k = 1, 2, \ldots, N \tag{24}$$

で与えられる。

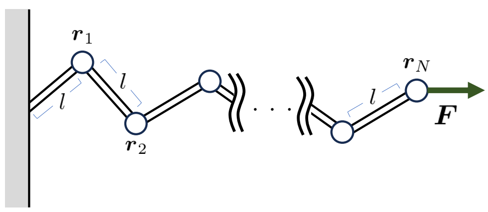
(2) N が十分大きく波数 $\pi k/(N+1)$ が連続的な値を取るとみなせるとする。このとき、比熱 $C(T)$ の高温領域 $(\beta\hbar\omega \ll 1)$ と低温領域 $(\beta\hbar\omega \gg 1)$ での漸近形を求めよ。また、その結果を独立な古典調和振動子系・量子調和振動子系の比熱と比較せよ。

(3) [* 発展問題] N: 奇数とする。サイト $i_* = (N+1)/2$ における変位の分散 $\langle (\hat{q}_{i_*})^2 \rangle$ が熱力学極限 $N \to \infty$ で発散することを示せ。

(原子・イオンからなる固体を連成量子調和振動子系でモデル化したものを Debye 模型と呼ぶ。本設問では問題の簡潔さのために 1 次元連成振動子系を計算したが、本設問の結果により中心付近の原子・イオンは安定位置にとどまらず統計力学的に不安定である。)

(4) [* 発展問題] 2 次元,3 次元の結合した量子調和振動子系においても (3) の内容を議論し、連成振動子系が統計力学的に安定かどうか調べよ。

III　ゴム弾性



図のように、一方の端は固定されもう一方の端は力 F が印加されたような鎖状の高分子系を考える。分子の個数を N, 各分子の位置を $\boldsymbol{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ と書き、各分子間の距離は l で固定されてい

るものとする。このとき、系のハミルトニアンは

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m} - F x_N \tag{25}$$

である。

(1) 逆温度 β における分配関数

$$Z(\beta) = \int \prod_{i=1}^{N} (\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i \mathrm{d}\boldsymbol{p}_i) e^{-\beta H} \tag{26}$$

を求めよ。ただし、位相空間にわたる積分は分子間距離が l であるという条件

$$|\boldsymbol{r}_1| = l, \quad |\boldsymbol{r}_{i+1} - \boldsymbol{r}_i| = l \quad (i = 1, 2, \ldots, N-1) \tag{27}$$

を満たす領域に関して取るものとする。

(2) 逆温度 β における鎖状高分子の長さの期待値 $X(\beta) = \langle x_N \rangle$ を求めよ。また、$\beta F l \ll 1$ の領域で $F \sim C X(\beta)$ となることを導出し、その比例係数 C を求めよ。

IV　相互作用する 1 次元スピン系

強磁性的な相互作用を持つ L サイトの 1 次元スピン系 (Ising 模型) を考える。この系の状態は L 個のスピン変数の配位 $\{\sigma_i\}$ $(\sigma_i = \pm 1)$ で指定され、 Hamiltonian は以下で与えられる。

$$H(\{\sigma_i\}) = -\sum_{i=1}^{L} \left(J\sigma_i\sigma_{i+1} + \mu_0 H \frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2} \right).$$

ただし、$J > 0$ とし、周期境界条件 $\sigma_{L+1} = \sigma_1$ を課す。

(1) 添字 $\sigma, \sigma' = \pm 1$ を持つ 2×2 行列 $\hat{T}$ を

$$[\hat{T}]_{\sigma,\sigma'} = \exp\left(\beta J \sigma\sigma' + \beta\mu_0 H \frac{\sigma + \sigma'}{2} \right)$$

で定める (転送行列と呼ばれる)。この時、分配関数

$$Z_L(\beta, H) = \sum_{\sigma_1,\ldots,\sigma_L = \pm 1} e^{-\beta H(\{\sigma_i\})}$$

は、 $Z_L(\beta, H) = \mathrm{Tr}\left[\hat{T}^L\right]$ と表せることを示せ。

(2) (1) の結果に従って、分配関数 $Z_L(\beta, H)$ を具体的に求めよ。また、熱力学極限における自由エネルギー密度

$$f(\beta, H) = \lim_{L\to\infty} \frac{1}{L} \left(-\frac{1}{\beta} \ln Z_L(\beta, H) \right)$$

を計算せよ。

(3) 磁化の期待値 $m(\beta, H) = -\frac{\partial f(\beta,H)}{\partial H}$ およびゼロ磁場極限での磁化率 $\chi(\beta) = \left.\frac{\partial m(\beta,H)}{\partial H}\right|_{H=0}$ を計算し、有限温度において $m(\beta, 0) = 0$ であることを示せ。また $T \to 0$ における $\chi(\beta)$ の発散の程度を相互作用がないスピン系と比較せよ。