

# 統計力学I 演習問題IV

(\*) : 復習問題

1.  $N$  個の質量  $m$ 、慣性モーメント  $I$  の 2 原子分子 (第 1 回の問題 7 を参照) が体積  $V$  の箱の中に閉じこめられて温度  $T$  の熱平衡状態にある。この系について次の間に答えよ。また、分子は古典力学に従うと考えてよいとする

(a) 分配関数  $Z$  が

$$Z = \frac{(4\pi V)^N}{N!} \left( \frac{2\pi m k_B T}{h^2} \right)^{3N/2} \left( \frac{2\pi I k_B T}{h^2} \right)^N$$

で与えられることを示せ。

(b) 自由エネルギー  $F$ 、内部エネルギー  $U$ 、圧力  $p$ 、エントロピー  $S$ 、定積熱容量  $C_V$  を求めよ。

2. (\*)  $N$  個の原子からなる結晶において、それぞれの原子はエネルギー  $0$  と  $\epsilon (> 0)$  の二つの状態をとり得るとする。このとき

(a) カノニカル分布の考え方で、この系の分配関数  $Z$  を求めよ。また、熱容量  $C$  を求め、温度  $T$  の関数として概略を図示せよ。

(b) ミクロカノニカル分布の考え方で、この系のエントロピー  $S$  を全エネルギー  $E$  の関数として求めよ。これから、温度  $T$  と全エネルギー  $E$  の関係を求め、上の結果と一致することを確かめよ。

3.  $N$  個の原子からなる結晶において、それぞれの原子はエネルギー  $0$ 、 $\epsilon (> 0)$  の状態をとり得るが、エネルギー  $\epsilon$  の状態は 1 原子あたり  $g$  個あるとする ( $g$  をこの状態の縮退度という)。エネルギー  $0$  の状態は 1 原子あたり 1 個しかないとする。このとき、カノニカル分布の考え方で分配関数  $Z$ 、熱容量  $C$  を求め、 $C$  を温度  $T$  の関数として概略を図示せよ。特に、 $g$  が変わると  $C$  の振る舞いがどのように変わるかを図中に示せ。

4.  $N$  個の原子からなる結晶において、それぞれの原子はエネルギー  $0$ 、 $\epsilon_1$ 、 $\epsilon_2 (0 < \epsilon_1 < \epsilon_2)$  の三つの状態をとり得るとする。このとき、カノニカル分布の考え方で分配関数  $Z$ 、熱容量  $C$  を求め、 $C$  を温度  $T$  の関数として概略を図示せよ。特に、 $\epsilon_1 \ll \epsilon_2$  の場合や、 $\epsilon_1 \simeq \epsilon_2$  の場合にどんな特徴が現れるか考察せよ。

5.  $N$  個の 2 準位系からなる系を考える。 $i$  番目の 2 準位系のエネルギー準位を  $0$  と  $\epsilon_i (> 0)$  とし、ボルツマン定数を  $k_B$  とする。 $\epsilon_i$  が次のような確率分布  $P(\epsilon)$  で分布している場合を考える。

$$P(\epsilon) = \begin{cases} 1/E_0 & \text{for } 0 < \epsilon < E_0 \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases}$$

ここで  $\epsilon_i$  が  $\epsilon$  と  $\epsilon + d\epsilon$  の間にある確率を  $P(\epsilon)d\epsilon$  とする。

(a) 熱容量  $C$  が次のように与えられることを示せ。 ( $\epsilon$  と  $\epsilon + d\epsilon$  の間の  $\epsilon_i$  を持つ 2 準位系の数は  $NP(\epsilon)d\epsilon$  であることに注意せよ)

$$C = \frac{Nk_B^2 T}{E_0} \int_0^{E_0/k_B T} \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} dx$$

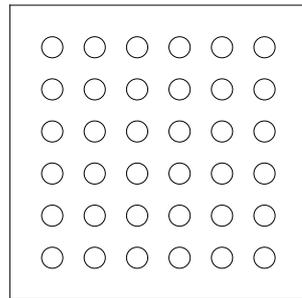
(b) 低温 ( $k_B T \ll E_0$ )、高温 ( $k_B T \gg E_0$ ) それぞれの場合の熱容量  $C$  の近似式を求めよ。ただし、

$$\int_0^\infty \frac{x^2 e^x}{(e^x + 1)^2} dx = \zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}$$

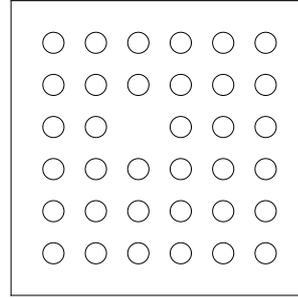
( $\zeta(z)$  は Riemann のツェータ関数) を使ってよい。

(c)  $C$  の温度依存性の概略を図示せよ。

6. 完全結晶ではすべての格子点上に原子があるが、欠陥として原子の抜けた格子点（空格子点）があると、そこに原子がある場合に比べ  $w$  だけエネルギーが高いとする。このような格子欠陥を Schottky 型の格子欠陥と呼ぶ。原子の総数を  $N$ 、空格子点の数を  $n$  として次の間に答えよ。



完全結晶

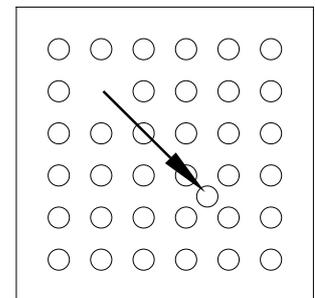


Schottky型欠陥

- (a) 系全体のエネルギー  $E(n)$  を求めよ。ただし、原子の熱運動のエネルギーは考えなくてよい。また、格子点を原子が占めている状態のエネルギーを 0 とする。
- (b) 状態数  $W(n)$  を求めよ。（ $N + n$  個の格子点に  $N$  個の原子をばらまく場合の数を考えればよい。）
- (c) 十分低温で、 $n$  の期待値が  $\langle n \rangle \simeq N \exp\left(-\frac{w}{k_B T}\right)$  となることを示せ。ただし、 $1 \ll n \ll N$  とする。
7. 結晶の格子点上に並んでいる原子が、格子点の間隙の位置（格子間隙）に移動すると  $w$  だけのエネルギーを要するとする。このような格子欠陥を Frenkel 型の格子欠陥と呼ぶ。完全結晶の状態での結晶の格子点の数を  $N$ 、原子が入り得る格子間隙の数を  $N'$  として次の間に答えよ。

- (a) 格子間隙に移った原子の数が  $n$  個の時の系全体のエネルギー  $E(n)$  を求めよ。ただし、原子の熱運動のエネルギーは考えなくてよい。また、完全結晶の状態をエネルギーの基準にとる。

- (b) 格子間隙に移った原子の数が  $n$  個の時の状態数  $W(n)$  を求めよ。（ $N$  個の格子点に  $N - n$  個の原子をばらまき、 $N'$  個の格子間隙に  $n$  個の原子をばらまく場合の数を考えればよい。）



Frenkel型欠陥

- (c) 十分低温で、 $n$  の期待値が  $\langle n \rangle \simeq \sqrt{NN'} \exp\left(-\frac{w}{2k_B T}\right)$  となることを示せ。ただし、 $1 \ll n \ll N, N'$  とする。
8. (\*) 大きさ  $S = 1/2$  のスピン角運動量  $S$  をもつ  $N$  個の磁性原子からなる系を考える。各原子は  $-g\mu_B S$  の磁気モーメントを持つとする。スピン間の相互作用を無視するとき次の間に答えよ。
- (a) この系の分配関数  $Z$ 、自由エネルギー  $F$ 、エントロピー  $S$  を求めよ。
- (b) 断熱消磁の原理について説明せよ。
- (c) 磁化の磁場方向の成分の期待値  $M$  を求め、磁場  $H$  の関数として概略を図示せよ。
- (d) 帯磁率  $\chi$  を求め、温度  $T$  の関数として概略を図示せよ。また、 $\chi$  そのものではなく、どのような量をプロットをすれば温度依存性がより分かりやすくなるか。