

問題 T-III

ゴム弾性をもっとも簡単に説明する 1 次元鎖状分子模型を考察する。図のように、鉛直線上で折れ曲がることのできる N 個の要素でできた鎖状分子があり、各々の要素は長さ a で上下いずれかの向きを自由にとれるものとする。また、鎖状分子の一端 P は原点に固定されている。他端 Q の座標を x 、伸ばし切ったときの鎖状分子の全長を $L = Na$ として以下の問に答えよ。ただし Boltzmann 定数を k_B とし、鎖状分子の質量は無視してよい。

1. Q を $x = ma$ に固定した場合を考える (m は整数)。

1-1 鎖状分子の可能な配位数 $W(N, m)$ を求めよ。

1-2 $N \gg 1, m \gg 1$ としてエントロピー $S(x)$ を求めよ。必要なら Stirling の公式 $\log M! \simeq M \log M - M, (M \gg 1)$ を用いてよい。

1-3 温度 T, x および Q にかかる力 X の間の関係、すなわち状態方程式を求めよ。

1-4 Young 率 ϵ は $\epsilon = \frac{\partial X}{\partial \log x}$ で与えられる。この鎖状分子の Young 率を求めよ。また $\frac{x}{L} \ll 1$ における "バネ定数" k はいくらか。

2. Q に質量 M のおもりを取り付け、このおもりと鎖状分子をひとつの系と考える。したがって Q を一定の外力 $Y = Mg$ で下向きに引いている場合とみなすことができる。P から数えて k 番めの要素が下向きのとき $\sigma_k = +1$ 、上向きのとき $\sigma_k = -1$ となるような ising 変数 σ_k を導入すれば、この系の全エネルギー E はおもりの位置エネルギーであるから、 x, E はそれぞれ、

$$x = a \sum_{k=1}^N \sigma_k, \quad E = -Ya \sum_{k=1}^N \sigma_k$$

とかくことができる。

2-1 温度 T の熱浴と熱接触させたときの自由エネルギー $F(T, Y)$ を求めよ。

2-2 平均の Q の位置 $\bar{x}(T, Y) = \langle x \rangle$ を求めよ。

2-3 全エネルギーの平均値 $\bar{E}(T, Y) = \langle E \rangle$ と 1-2 で求めた $S(x)$ を用いると、 $F(T, Y)$ が

$$F(T, Y) = \bar{E}(T, Y) - TS(\bar{x}(T, Y))$$

と表されることを示せ。

2-4 外力に対する \bar{x} の応答 $\chi = \frac{\partial \bar{x}}{\partial Y}$ と \bar{x} の分散 $\overline{\Delta x^2} = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$ のあいだに $\chi = \frac{\overline{\Delta x^2}}{k_B T}$ の関係が成立することを示し、 Y 一定での χ の温度依存正の概略を図示せよ。