

統計力学演習問題解答 (9)

[1]

(a) 分配関数 Z は

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\nu} e^{-\beta E_{\nu}} \\ &= \sum_{\{m_{jz}\}} e^{\beta \sum_{k=1}^N m_{kz} B} \\ &= \left(\sum_{m=-\mu, \mu} e^{\beta m B} \right)^N \\ &= 2^N \cosh^N \left(\frac{\mu B}{kT} \right) \end{aligned}$$

と計算できる. したがって

$$F = -kT \ln Z = -NkT \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\mu B}{kT} \right) \right]$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = Nk \ln \left[2 \cosh \left(\frac{\mu B}{kT} \right) \right] - Nk \left(\frac{\mu B}{kT} \right) \tanh \left(\frac{\mu B}{kT} \right)$$

となる. 高温極限 $\mu B/kT \rightarrow 0$ では, $S \rightarrow Nk \ln 2$ となる. また, 熱容量 C は

$$C = T \frac{\partial S}{\partial T} = Nk \left(\frac{\mu B}{kT} \right)^2 \frac{1}{\cosh^2 \left(\frac{\mu B}{kT} \right)}$$

と計算できる.

(b) (a) で求めた分配関数を用いて

$$M = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial B} \ln Z = N\mu \tanh \left(\frac{\mu B}{kT} \right)$$

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{N\mu^2}{kT} \frac{1}{\cosh^2 \left(\frac{\mu B}{kT} \right)}$$

と計算できる. $\mu B/kT \rightarrow 0$ の極限で, $\cosh \left(\frac{\mu B}{kT} \right) \rightarrow 1$ なので

$$\chi \rightarrow \frac{N\mu^2}{kT} \propto \frac{1}{T}$$

である.

(c)

$$\begin{aligned} \overline{(M - \bar{M})^2} &= \overline{M^2} - \bar{M}^2 \\ &= \frac{1}{Z} \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 Z}{\partial B^2} - \left(\frac{1}{Z} \frac{1}{\beta} \frac{\partial Z}{\partial B} \right)^2 \\ &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial B} \left(\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial B} \ln Z \right) \\ &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial M}{\partial B} = kT \chi \end{aligned}$$

[2]

[A]

(a)

$$\begin{aligned} Z &= \prod_{j=1}^{3N} \int \frac{dx_j dp_j}{2\pi\hbar} e^{-\beta \sum_{k=1}^{3N} \left(\frac{p_k^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x_k^2 \right)} \\ &= \left[\frac{1}{2\pi\hbar} \int dx \int dp e^{-\beta \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right)} \right]^{3N} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3N/2} \left(\frac{2\pi}{\beta m\omega^2} \right)^{3N/2} = \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right)^{3N} \end{aligned}$$

したがって

$$\begin{aligned} F &= -kT \ln Z = -3NkT \ln \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right) \\ S &= -\frac{\partial F}{\partial T} = 3Nk \left[\ln \left(\frac{kT}{\hbar\omega} \right) + 1 \right] \\ U &= TS + F = 3NkT \end{aligned}$$

と計算できる.

(b) (a) の結果から

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = 3Nk$$

[B]

(c) 分配関数 Z は

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\nu} e^{-\beta E_{\nu}} \\ &= \sum_{\{n_i\}} e^{-\beta \sum_{j=1}^{3N} \hbar\omega \left(n_j + \frac{1}{2} \right)} \\ &= \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)} \right]^{3N} \\ &= \left(\frac{e^{-\beta \hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta \hbar\omega}} \right)^{3N} \\ &= \frac{1}{2^{3N} \sinh^{3N}(\beta \hbar\omega/2)} \end{aligned}$$

となる. したがって, 内部エネルギー U と熱容量 C は

$$\begin{aligned} U &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -3N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left[\frac{1}{2 \sinh(\beta \hbar\omega/2)} \right] \\ &= \frac{3}{2} N \hbar\omega \coth \left(\frac{\hbar\omega}{2kT} \right) \\ C &= \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{3}{4} Nk \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right)^2 \frac{1}{\sinh^2(\hbar\omega/2kT)} \end{aligned}$$

と計算できる.

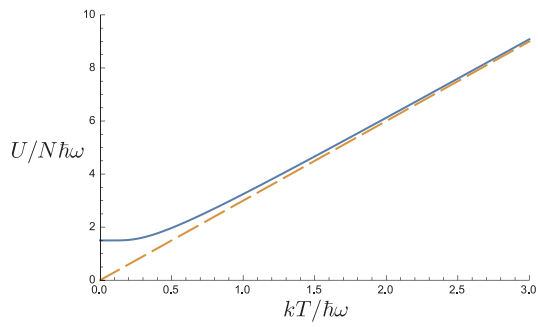


図 1: U の温度依存性

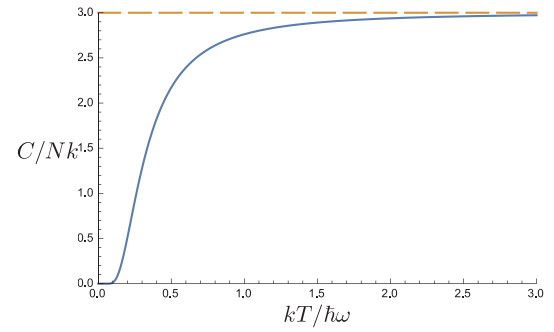


図 2: C の温度依存性

実線は量子力学的結果, 破線は古典力学的結果を表す。

- (d) (c) の結果から, $\hbar\omega/kT \rightarrow 0$ の高温極限をとると, $U \rightarrow 3NkT$ かつ $C \rightarrow 3Nk$ となり, 古典極限と一致する。