

統計力学I 第2回レポート (2018/7/5 出題)

1. 二つずつのスピンの相互作用する系

二つずつのスピンの相互作用するモデルを考えよう。 $2N$ 個のスピンの系を考え、各々のスピン変数を $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{2N}$ とする。これらはそれぞれ $\sigma_i = \pm 1$ という値をとる。この系が外部磁場 H のもとにあるときのエネルギーを

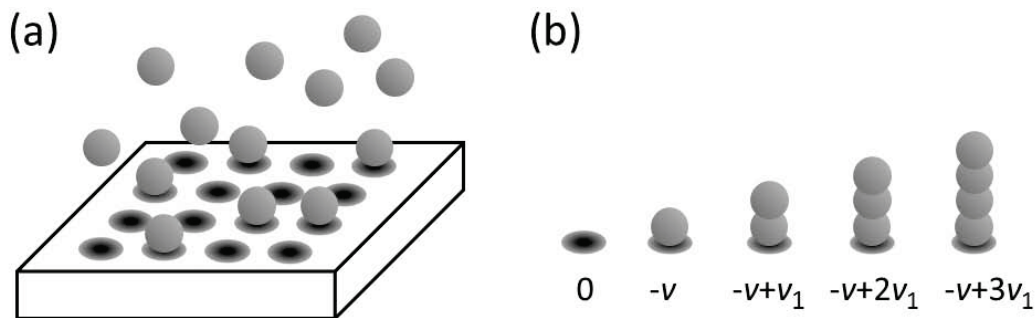
$$E(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{2N}) = J \sum_{j=1}^N \sigma_{2j-1} \sigma_{2j} - \mu_0 H \sum_{j=1}^{2N} \sigma_j \quad (1)$$

とする。 $J > 0$ はペアになったスピンを逆に向けようとする相互作用の強さ、 μ_0 はスピンの磁気モーメントである。この系が逆温度 β の平衡状態にあるとする。

1. まず $N = 1$ (つまりスピンの数が二つ) の場合に、系がとりうる (ミクロな) 状態を列挙し、それらのエネルギーを求めよ。またそれをもとに分配関数を求めよ。
2. 上の結果をもとに一般の N の場合についての分配関数を求めよ。
3. $H = 0$ のときのスピン一つあたりのエネルギーの期待値を求めよ。
4. 磁化 $\hat{m} := \frac{\mu_0}{2N} \sum_{j=1}^{2N} \sigma_j$ の期待値 $\langle \hat{m} \rangle_{\beta, H}$ を求めよ。
5. $H = 0$ のときの磁化率 $\chi(\beta) := \left. \frac{\partial}{\partial H} \langle \hat{m} \rangle_{\beta, H} \right|_{H=0}$ を求めよ。また高温 ($\beta J \ll 1$) と低温 ($\beta J \gg 1$) での $\chi(\beta)$ の振る舞いを説明せよ。

2. 表面吸着

固体表面における気体分子の化学吸着のモデルとして、下図 (a) のように N_s 個の吸着サイトが並んでいる場合を考える。各吸着サイトは、気体分子をひとつまでしか吸着することができず、吸着サイトが空のときのエネルギーは 0、吸着しているときのエネルギーは $-v$ (< 0) であるとする。



固体表面と周りの気体は同じ一定の温度に保たれており、気体の圧力も一定とする。この系をグランドカノニカル分布で取り扱うことを考える。周りの気体の逆温度を β 、化学ポテンシャルを μ とし、以下の問いに答えよ。

1. 各吸着サイトは独立である（相互作用のない）場合を考える。このとき、一般の N_s について、全系の大分配関数 $\Xi(\beta, \mu)$ を求めよ。
2. 表面の被覆率 $\Theta(\beta, \mu) = \langle \hat{N} \rangle / N_s$ を求めよ。ただし $\langle \hat{N} \rangle$ は、表面に吸着している気体分子の総数の期待値を表す。
3. 周りの気体を理想気体として扱った場合、 $e^{\beta\mu}$ は圧力 P に比例している。このことを導いてから、被覆率 $\Theta(\beta, \mu)$ を圧力 P の関数として表し、Langmuir の吸着等温式を導け。（ P の関数としてどのように振る舞うか、図示してみよう。）

次に上のモデルの拡張である、BET(Brunauer-Emmett-Teller) 理論について考察する。このモデルでは、各吸着サイトに気体分子はいくらでも吸着することができる。ただし、分子間力のため、吸着サイトに n 個の分子が吸着しているときのエネルギーは $-v + (n-1)v_1$ となる（図 (b) を参照せよ）。

4. 各吸着サイトは独立であるとして、全系の大分配関数を求めよ。また、この場合の被覆率 $\Theta(\beta, \mu)$ を求めよ。（ $c = \exp[\beta(v + v_1)]$, $z = \exp[-\beta(v_1 - \mu)]$ を用いて、適宜結果を整理してよい。）
5. 3. と同様に、周りの気体を理想気体として扱い、被覆率 $\Theta(\beta, \mu)$ を圧力 P の関数として表せ。また、上で導入した c の大きさにより、吸着等温線の振る舞いがどのように変化するかを図を用いて説明せよ。

3. 調和ポテンシャル中の粒子系

1 次元的な調和ポテンシャルに閉じ込められた、質量 m の点粒子の量子力学を考える。この系の（一粒子）ハミルトニアンは、

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}^2 + m^2\omega^2\hat{x}^2) \quad (2)$$

で与えられる。ただし、 \hat{x} , \hat{p} は位置と運動量の演算子である。

1. 一粒子エネルギー固有値を全て求めよ（Schrödinger 方程式を解く必要はない）。
2. 上の結果を用いて、一粒子の場合の分配関数を求めよ（逆温度 β の熱浴と平衡にあるとする）。
3. 一粒子の場合の比熱を求め、高温 ($\beta\hbar\omega \ll 1$)・低温 ($\beta\hbar\omega \gg 1$) での振る舞いを議論せよ。

同じ調和ポテンシャル中に N 個の質量 m の同種粒子がある場合を、量子力学的に扱う。粒子には他に外力は働かず、粒子間の相互作用もないとする。

4. 粒子がボゾンの場合に、基底状態のエネルギーと第一励起状態のエネルギーを求めよ。(一粒子固有エネルギーではなく、全系のエネルギーである点に注意)
5. 粒子がフェルミオンの場合に、基底状態のエネルギーと第一励起状態のエネルギーを求めよ。またこの場合のフェルミエネルギーを求めよ。(簡単のため、ここではフェルミオンの内部自由度、例えばスピン自由度、を無視する。一粒子固有エネルギーではなく、全系のエネルギーである点に注意)

上の系が、逆温度 β 、化学ポテンシャル μ を持つ大きな系と接して平衡にある場合を考察する。

6. 粒子がボゾンである場合、フェルミオンである場合それぞれについて、系の全エネルギーを表す式を書け。(和や積分を具体的に評価する必要はない。ボーズおよびフェルミ分布関数を導く必要はない。また調和振動子系には定まった体積がなく、単位体積あたりの一粒子状態密度 $\nu(\epsilon)$ が定義できない点に注意せよ。)