2010 年度統計力学 II 宿題 12 (7 月 8 日出題、7 月 15 日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] ハミルトニアンが $H = \sum_{i=1}^{N} \tilde{\mu}\sigma_i h$ の相互作用のないイジングモデルの分配関数を求めなさい。ただし、$\sigma_i = \pm 1$ で h は磁場、$\tilde{\mu}$ は比例係数で、温度を T とする。

ヒント: $N = 1$ の時は、$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \exp[-\beta H]$

[解答](実際の解答にはここまで計算を丁寧に書かなくて良い。)
相互作用がないので、独立と考えられる。したがって、1 粒子の分配関数を Z_1 とすると、N 粒子系の分布関数 Z は、

$$Z = Z_1^N \tag{1}$$

ここで、粒子は固定されているので $N!$ で割らなくて良い。ヒントから Z_1 は、

$$Z_1 = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \exp[-\beta H] \tag{2}$$

H を代入して

$$= \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \exp[-\beta\tilde{\mu}\sigma_1 h] \tag{3}$$

$$= \exp[-\beta\tilde{\mu}h] + \exp[\beta\tilde{\mu}h] \tag{4}$$

$$= 2\cosh\beta\tilde{\mu}h \tag{5}$$

(1) 式に代入すると、

$$Z = (2\cosh\beta\tilde{\mu}h)^N \tag{6}$$

[問題 2.] 2 原子分子は極座標で

$$H = \frac{1}{2I}\left(p_\theta^2 + \frac{p_\phi^2}{\sin^2\theta}\right) \tag{7}$$

(1 分子あたり) で表される。古典論で分配関数を計算せよ。

[解答] 分子 1 個の回転を表す分配関数は、古典系の場合、

$$Z_T = \int \frac{d\mathbf{r}d\mathbf{p}}{h^3} \exp[-\beta H(\mathbf{r}, \mathbf{p})] \tag{8}$$

ここで、2 個の核の位置を $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ とすると、$\mathbf{r}$ は、$\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ で定義される相対座標と、$\mathbf{p}$ はそれと共役な運動量を表す。また、2 個の原子核は区別できるとしている。

普通の xyz 座標 $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ から一般化座標 $\{q_l, p_l; l = 1, 2, 3\}$ の変数変換を考える。

$$q_l = q_l(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \tag{9}$$

$$p_l = p_l(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \tag{10}$$

解析力学から $\{q_l, p_l\}$ が正準変数であれば、

$$d\mathbf{r}d\mathbf{p} = \prod_l^3 dq_l dp_l \tag{11}$$

だから、(8) 式は、

$$Z_T = \int \frac{\prod_l^3 dq_l dp_l}{h^3} \exp[-\beta H(\{q_l, p_l\})] \tag{12}$$

と書き換えられる。

今の場合、$\{q_l, p_l\} = \{r, \theta, \phi, p_r, p_\theta, p_\phi\}$ だが、r, p_r は回転には寄与しないので、除くと、r, p_r を除いた回転だけの分配関数 Z を考える。問題のハミルトニアンを代入すると、

$$Z = \int \frac{d\theta d\phi dp_\theta dp_\phi}{h^2} \exp[-\frac{\beta}{2I}\left(p_\theta^2 + \frac{p_\phi^2}{\sin^2\theta}\right)] \tag{13}$$

p_θ と p_ϕ は、ガウス関数なので、積分できて

$$= \int \frac{d\theta d\phi}{h^2} \sqrt{2\pi I k_\mathrm{B} T} \sqrt{2\pi I k_\mathrm{B} T} \sin\theta \tag{14}$$

被積分関数は、ϕ によらないので、

$$= \int \frac{2\pi d\theta}{h^2} \sqrt{2\pi I k_{\mathrm{B}} T} \sqrt{2\pi I k_{\mathrm{B}} T} \sin\theta \tag{15}$$

θ の積分範囲は 0 から π なので、

$$= \frac{2\pi}{h^2} \sqrt{2\pi I k_{\mathrm{B}} T} \sqrt{2\pi I k_{\mathrm{B}} T} \times 2 \tag{16}$$

$$= \frac{8\pi^2 I k_{\mathrm{B}} T}{h^2} \tag{17}$$

これから比熱が k_{B} となることも容易に分る。