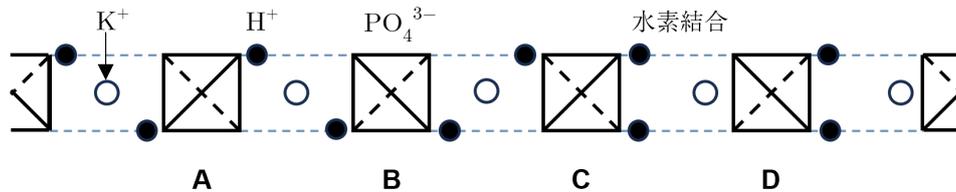


物理学 B

【全1ページ】

リン酸二水素カリウム KH_2PO_4 は、リン酸イオン PO_4^{3-} が水素結合でつながれた構造を持つ固体である。下図に示すような KH_2PO_4 を単純化したモデルを考えよう。



図において、カリウムイオン K^+ は白丸で表され、リン酸イオン PO_4^{3-} は四面体（ \boxtimes ）で表されている。一次元に並んだ PO_4^{3-} は2個の水素結合（破線）によって互いに結合している。黒丸で表された水素イオン H^+ は水素結合の中心から左右いずれかに偏った位置にあり、 PO_4^{3-} に2個の水素イオンが付くことでリン酸基 H_2PO_4^- を形成する。

この系の全エネルギーは、次のように決められたリン酸基のエネルギーの合計で与えられるものとする：

- 図中の D のように、同じ側に2個の水素イオンを持つリン酸基のエネルギーは0
- A, B のように、異なる側に2個の水素イオンを持つリン酸基のエネルギーは $\varepsilon (> 0)$
- C のように3個の水素イオンを持つ場合や、4個、1個、0個の水素イオンを持つ場合のエネルギーは ∞

以下では、 N 個の PO_4^{3-} から成る系が温度 T の熱平衡状態にあるとする。ただし、端の効果をなくすために周期的境界条件を考える。以下の設問に答えなさい。

(1) 熱平衡にある系のエネルギー期待値 $\langle E \rangle$ が分配関数 Z を用いて $\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z$ と表されることを示しなさい。ただし、 β はボルツマン定数 k_B を用いて $\beta = (k_B T)^{-1}$ と表される量である。

(2) 系の分配関数 Z として正しいものを次から選びなさい。

$$Z = 2 + 2^N e^{-\beta N \varepsilon}, \quad Z = 2 + 2N e^{-\beta \varepsilon}, \quad Z = 2^N + 2 e^{-\beta N \varepsilon}$$

(3) (2) で選んだ分配関数を正しいと考える物理的理由を説明しなさい。

(4) (1) と (2) の結果を用いて、図に示した系のエネルギー期待値を求めなさい。

(5) N が十分大きな極限を考えると、ある温度 T_c において系のエネルギー期待値が不連続になることを示しなさい。また、 T_c を ε と k_B を用いて表しなさい。

(6) (5) で見られた不連続性の物理的意味を説明しなさい。