

2025年度 物理工学基礎演習 (統計力学第一)

第4回 問題

担当: 水田 郁 (mizuta@qi.t.u-tokyo.ac.jp, 工学部 9 号館 325 号室)

提出日: 6/16 13:00 (前半クラス), 6/9 13:00 (後半クラス)

I 古典調和振動子

ハミルトニアンが

$$H(\{q_i\}, \{p_i\}) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q_i^2 \right) \quad (18)$$

で与えられる N 個の独立な古典調和振動子の系を考える。系は逆温度 β のカノニカル分布に従うとして以下の問いに答えよ。

(1) 分配関数

$$Z(\beta) = \frac{1}{h^N} \int \prod_{i=1}^N (dq_i dp_i) e^{-\beta H(\{q_i\}, \{p_i\})} \quad (19)$$

を計算せよ。また、エネルギー期待値 $\langle E \rangle$, 比熱 $C(T)$ を計算せよ。

(2) 運動エネルギーの期待値 $\langle \frac{p_i^2}{2m} \rangle$, 位置エネルギーの期待値 $\langle \frac{1}{2} m \omega^2 q_i^2 \rangle$ を計算し、エネルギー等分配則が成立することを示せ。

II 量子調和振動子

II-1

N 個の独立な量子調和振動子系のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{q}_i^2 \right) = \sum_{i=1}^N \hbar \omega \left(\hat{n}_i + \frac{1}{2} \right) \quad (20)$$

で与えられる。系は逆温度 β のカノニカル分布に従うとして以下の問いに答えよ。

(1) 分配関数 $Z(\beta)$, エネルギー期待値 $\langle E \rangle$, 比熱 $C(T)$ を計算せよ。また、比熱 $C(T)$ の温度依存性のグラフの概形を示し、古典調和振動子の場合の結果と比較せよ。

(2) 運動エネルギーの期待値 $\langle \frac{\hat{p}_i^2}{2m} \rangle$, 位置エネルギーの期待値 $\langle \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{q}_i^2 \rangle$ を計算し、エネルギー等分配則が成立するかどうかを確かめよ。

II-2

ハミルトニアンが

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=0}^N \frac{1}{2} m \omega^2 (\hat{q}_{i+1} - \hat{q}_i)^2 \quad (21)$$

で与えられる N 個の結合した 1 次元調和振動子系を考える。ただし、境界条件は固定端として $\hat{q}_0 = \hat{q}_{N+1} = 0$ と定める。系は逆温度 β のカノニカル分布に従うとして以下の問いに答えよ。[* 発展問題] はレポートで解く必要はないが、解いて提出した場合には満点を超過して評価をつける。

(1) ハミルトニアンのエネルギー固有値が

$$\sum_{k=1}^N \hbar \omega_k \left(n_k + \frac{1}{2} \right), \quad n_k = 0, 1, 2, \dots, \quad (22)$$

で与えられることを示せ。ここで、 ω_k は固有振動数で

$$\omega_k = 2\omega \sin \frac{\pi k}{2(N+1)}, \quad k = 1, 2, \dots, N \quad (23)$$

で与えられる。

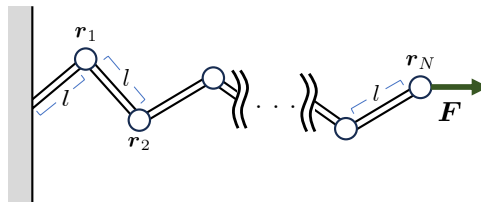
(2) N が十分大きく波数 $\pi k/(N+1)$ が連続的な値を取るとみなせるとする。このとき、比熱 $C(T)$ の高温領域 ($\beta \hbar \omega \ll 1$) と低温領域 ($\beta \hbar \omega \gg 1$) での漸近形を求めよ。また、その結果を独立な古典調和振動子系・量子調和振動子系の比熱と比較せよ。

(3) [* 発展問題] N : 奇数とする。サイト $i_* = (N+1)/2$ における変位の分散 $\langle (\hat{q}_{i_*})^2 \rangle$ が熱力学極限 $N \rightarrow \infty$ で発散することを示せ。

(原子・イオンからなる固体を連成量子調和振動子系でモデル化したものを Debye 模型と呼ぶ。本設問では問題の簡潔さのために 1 次元連成振動子系を計算したが、本設問の結果により中心付近の原子・イオンは安定位置にとどまらず統計力学的に不安定である。)

(4) [* 発展問題] 2 次元, 3 次元の結合した量子調和振動子系においても (3) の内容を議論し、連成振動子系が統計力学的に安定かどうか調べよ。

III ゴム弾性



図のように、一方の端は固定されもう一方の端は力 F が印加されたような鎖状の高分子系を考える。分子の個数を N , 各分子の位置を $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ と書き、各分子間の距離は l で固定されてい

るものとする。このとき、系のハミルトニアンは

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - Fx_N \quad (24)$$

である。

(1) 逆温度 β における分配関数

$$Z(\beta) = \int \prod_{i=1}^N (\mathrm{d}\mathbf{r}_i \mathrm{d}\mathbf{p}_i) e^{-\beta H} \quad (25)$$

を求めよ。ただし、位相空間にわたる積分は分子間距離が l であるという条件

$$|\mathbf{r}_1| = l, \quad |\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i| = l \quad (i = 1, 2, \dots, N-1) \quad (26)$$

を満たす領域に関して取るものとする。

(2) 逆温度 β における鎖状高分子の長さの期待値 $X(\beta) = \langle x_N \rangle$ を求めよ。また、 $\beta Fl \ll 1$ の領域で $F \sim CX(\beta)$ となることを導出し、その比例係数 C を求めよ。

IV ビリアル定理

ハミルトニアン

$$H(\{\mathbf{p}_i\}, \{\mathbf{q}_i\}) = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\{\mathbf{q}_i\}), \quad V(\{\mathbf{q}_i\}) = V_{\text{int}}(\{\mathbf{q}_i\}) + V_{\text{wall}}(\{\mathbf{q}_i\}) \quad (27)$$

で記述される体積 V の 3 次元の箱に閉じ込められた粒子数 N の古典的粒子の集まりを考える。ただし、 $V_{\text{int}}(\{\mathbf{q}_i\})$, $V_{\text{wall}}(\{\mathbf{q}_i\})$ はそれぞれ粒子間の相互作用, 箱の壁面から受ける力によるポテンシャルである。系が逆温度 β の熱平衡状態にあるとき、以下の問に答えよ。

(1) 箱の壁面において $V_{\text{wall}}(\{\mathbf{q}_i\}) \rightarrow \infty$ であるとする。このとき、

$$\frac{1}{2} \left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i \cdot \frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}_i} \right\rangle = \frac{3}{2} N \beta^{-1} \quad (28)$$

であることを示せ (ビリアル定理)。

(2) 粒子集団が壁面の微小面積 $\mathrm{d}S$ から受ける力 $\mathrm{d}\mathbf{f}$ は壁面の法線方向 \mathbf{n} に平行で

$$\mathrm{d}\mathbf{f} = -P \mathrm{d}S \mathbf{n} \quad (29)$$

であるとする (P : 圧力)。このとき、

$$\left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i \cdot \frac{\partial V_{\text{wall}}}{\partial \mathbf{q}_i} \right\rangle = 3PV \quad (30)$$

であることを示せ。

(3) 粒子間の相互作用が粒子間距離に関して冪乗則に従い

$$V_{\text{int}}(\{\mathbf{q}_i\}) = \sum_{i,j;i \neq j} \frac{U}{|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|^\nu}, \quad \nu > 3 \quad (31)$$

で与えられるとする。このとき、エネルギー期待値

$$\langle E \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} \right\rangle + \langle V_{\text{int}}(\{\mathbf{q}_i\}) \rangle \quad (32)$$

を $PV, N\beta^{-1}, \nu$ を用いて表せ。