2025年度 物理工学基礎演習 (統計力学第一) 第2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; 5/12 13:00 (前半クラス), 5/8 13:00 (後半クラス)

以降の設問では、十分大きな自然数 n に対する Stirling の公式

$$\ln n! \sim n \ln n - n$$

を適宜用いて良い。

I 古典調和振動子

振動数 ω を持つ N 個の独立な 1 次元調和振動子を古典的に取り扱うことを考える。それぞれの座標と運動量を x_i, p_i とすると系の Hamiltonian は

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^{N} \frac{m\omega^2 x_i^2}{2}$$

と書ける。以下の設問に答えよ。

(1) この系が $H \leq E$ を満たす位相空間上の体積 $\Omega_0(E)$ を求めよ。ただし、n 次元単位球の体積が $\pi^{n/2}/\Gamma(n/2+1)$ となることは用いて良い。

(2) 適当な正の定数 δ を用いて、この系が $E - N\delta \leq H \leq E$ を満たす位相空間上の体積を $W_0(E,\delta)$ と書く。$\Omega_0(E)$ と $W_0(E,\delta)$ を比較し、どのような場合にこの差が無視できるかを考えよ。

(3) この系の統計力学エントロピー $S(E) = k_B \ln \Omega(E)$ ($\Omega(E) = \Omega_0(E)/h^N$) を求め、これを用いて系の温度 $T(E)$ と比熱 $C(T)$ を求めよ。ただし、N は十分大きいものとする。

(4) 一般に、統計熱力学的に正常な系では ϵ $(= E/N)$ について単調増加な微分可能関数 $\sigma(\epsilon) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln \Omega(E)$ が存在する。この物理的意味を述べよ。また、この $\sigma(\epsilon)$ の単調増加性より $\sigma(\epsilon - \delta) < \sigma(\epsilon)$ $(0 < \delta < \epsilon)$ を仮定すると、一般的に $\lim_{N\to\infty} \frac{W_0(E,\delta)}{\Omega_0(E)} = 1$ が成立することを示し、この意味を簡潔に説明せよ。

II 量子調和振動子

周波数 ω を持つ N 個の独立な 1 次元調和振動子を量子的に取り扱うことを考える。それぞれのエネルギー準位は $\varepsilon_i = \hbar\omega(n_i + 1/2)$ (n_i は非負の整数) で与えられ、この系の Hamiltonian は

$$H = \sum_{i=1}^{N} \hbar\omega \left(n_i + \frac{1}{2} \right)$$

と書ける。以下の設問に答えよ。

(1) この系が全エネルギー $H = E$ を持つ熱力学的重率 $W(E)$ を求めよ。ただし、$N_E \equiv (E - N\hbar\omega/2)/(\hbar\omega)$ が非負の整数であるとする。

(2) N が十分大きく、なおかつ、エネルギー E がゼロ点エネルギーの総和 $N\hbar\omega/2$ よりも十分大きい場合を考える。このとき、この系の統計力学的エントロピー $S(E) = k_B \ln W(E)$ を求めよ。

(3) この系の温度とエネルギーの関係式 $E(T)$ および比熱 $C(T)$ を求め、それぞれの概形を描け。また、エネルギーが連続的な値を取る古典の結果と比較し、どのような条件で一致するかを調べよ。

III　古典理想気体の混合

図のように、体積 V_1 の箱中の粒子数 N_1, エネルギー E_1 の単原子理想気体 1 (質量 m_1) と体積 V_2 の箱中の粒子数 N_2, エネルギー E_2 の単原子理想気体 2 (質量 m_2) を用意する。外からの熱の出入りを断ったまま仕切りの壁を取り去り、体積 $V_1 + V_2$ の箱中で 2 種の気体を混合させることを考える。気体間には十分弱い相互作用があり長時間でエネルギーのやりとりがあるものとして、混合前後の熱平衡状態に関して以下の問いに答えよ。

(1) **混合前の**理想気体 1 のエントロピー S_1, 温度 T_1, 圧力 p_1 を求めよ。

以降は仕切りを外して長時間経過し混合した後の熱平衡状態を考える。

(2) 理想気体 1 がエネルギー E を持つ確率は、エネルギーには依存しない定数 C を用いて次のように書けることを示せ。

$$P(E) = CE^{\frac{3}{2}N_1}(E_1 + E_2 - E)^{\frac{3}{2}N_2}$$

(3) 理想気体 1 のもつ平均エネルギー $\langle E \rangle$ が

$$\langle E \rangle \sim \frac{N_1}{N_1 + N_2}(E_1 + E_2) \tag{7}$$

で与えられることを示せ。また、エネルギー密度の揺らぎ $\left\langle \left(\frac{E - \langle E \rangle}{N_1} \right)^2 \right\rangle$ を計算し、それが熱力学極限で十分小さくなることを示せ。計算の過程でベータ関数に関する公式

$$\int_0^1 x^n (1-x)^m \mathrm{d}x = \frac{n!m!}{(n+m+1)!}$$

は用いて良い。

(4) 混合後の理想気体 1, 2 の持つエネルギーがそれぞれ $\langle E \rangle, E_1 + E_2 - \langle E \rangle$ であるとして、混合による系全体のエントロピーの変化量 ΔS を計算せよ。また $\Delta S \geq 0$ であることを示せ。

(5) 理想気体 1, 2 が同種粒子であった場合、混合によるエントロピーの変化量 ΔS がどのようになるか議論せよ。

IV　二準位モデル

各々は $\pm\varepsilon$ の 2 つのエネルギー状態しか取りえないような N ($\gg 1$) 個の独立な粒子からある系を考える。

(1) この系の全エネルギーが E である熱力学的重率 $W(E)$ を求めよ。

(2) この系の統計力学的エントロピー $S(E) = k_B \ln W(E)$ を求め、$S(E)$ の概形を描け。

(3) この系の温度 $T(E)$ を求め、$E < 0$ の領域での比熱 $C(T)$ を求めよ。