2023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; 5/8 13:00 (前半クラス), 5/1 13:00 (後半クラス)

I 調和振動子

I.1 古典的取り扱い

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。

- (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。

I.2 量子的扱い

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。十分大きな自然数 n に対する Stirling の公式 $\ln n! \sim n \ln n - n$ を用いて良い。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、エネルギーが連続的に分布しているとみなせる場合を考える。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。これらの結果を古典的取り扱いで求めた結果と比較し、どのような条件で一致するかを調べよ。

II 古典理想気体

体積 V の箱に入った N 個の分子からなる古典理想期待を考える。

- (1) この系がエネルギー E 以下を持つ位相空間上の体積 $\Omega_0(E)$ を求めよ。
- (2) N が十分大きい極限で $\bar{S}(E) = k_B \ln \left(\Omega_0(E)/h^N\right)$ を計算せよ。また、 $\bar{S}(E)$ が系のエントロピーとして適切でない理由を述べ、正しいエントロピーを求めよ。

 N_1 ($\gg 1$) 個の分子からなりエネルギー E_1 を持つ古典理想気体 1 と N_2 ($\gg 1$) 個の分子からなりエネルギー E_2 を持つ古典理想気体 2 が入った箱を接触させる。気体同士は長時間ではエネルギーのやり取りを行い、接触前と比べてエネルギーの分配は変化できるとする。

(1) このとき、理想気体 1 がエネルギー E を持つ確率は、定数 C を用いて次のように書けることを示せ。

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

(2) 理想気体 1 のもつ平均エネルギー $\langle E \rangle$ とその揺らぎ $\langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle$ を計算せよ。ただし、ベータ関数に関する公式

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

は用いて良い。

(3) 平衡状態における理想気体 1.2 の温度をそれぞれ計算し、それらが一致することを示せ。

III 二順位モデル

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。
- (4) この系は E > 0 の領域で統計熱力学的に正常でないが、この理由を簡単に説明せよ。また、このような状態 (反転分布状態と呼ぶ) の実現方法や応用技術について調べ、簡単に説明せよ。

IV ゴム弾性

 $n \ (\gg 1)$ 個の要素からなる一次元鎖がある。鎖の存在する空間も一次元であり、各関節は自由に折れ曲がることができるとする。それぞれの要素の長さをlとし、鎖の両端間の距離をLとする。

- (1) L の関数として、エントロピー S(L) を求めよ。
- (2) この鎖が温度 T の熱浴に接している場合にこの鎖の両端間を L に保つために必要な力

$$X = -T\left(\frac{\partial S}{\partial L}\right)$$

を計算し、 $L \ll nl$ の時、これが L に対して線形に増加することを示せ。