

## 統計力学1 第6回練習問題

ミクロカノニカル分布は、全系のエネルギーを固定しそれを制約条件とした上で、エントロピーを最大化する事で求める事が出来た。ここでは、希薄極限を取った際にミクロなエネルギー状態からこの分布を表現するとどのように表されるかを見ていきたい。

ある箱の中の  $N$  粒子の気体原子を考える。1つの粒子が取りうるエネルギー準位が  $L$  個あり、準位  $l$  のエネルギーを  $E_l$  とし、準位  $l$  の状態が  $M_l$  個あり、準位  $l$  にいる粒子が  $N_l$  個とする。系全体のエネルギーの和を  $E$  とすると、以下の条件を満たす。

$$\sum_{l=1}^L N_l = N, \quad \sum_{l=1}^L N_l E_l = E \quad (1)$$

全粒子の状態は  $\{N_l\}_{l=1}^L$  で特定できるので、その状態をとる確率を  $p(\{N_l\}_{l=1}^L) = p_n$  とすると、エントロピー  $S = -k_B \sum_n p_n \log p_n$  を条件式 (1) の下で最大化するように分布が決定されるとして分布を求めてみよう。

1. 希薄極限  $1 \ll N_l \ll M_l$  が各準位  $l$  に対して成立するとする。この時、準位  $l$  において、同じ状態に2つ以上粒子がいる状態の数は、同じ状態に高々1つの粒子がいる状態の数に対して  $N_l/M_l \ll 1$  のオーダーになるので、これを無視することになると、状態の数はどのように表せるかを書け。またその結果を用いてエントロピーを書き表せ。
2. Lagrange の未定乗数法を用いてこの問題を考えたい。未定乗数  $\alpha, \beta$  を用いて、最大化すべき Lagrange 関数を書け。
3. Lagrange の未定乗数法を用いて、 $\alpha, \beta, N_l/N$  を求めよ。
4. 3次元の  $L \times L \times L$  の立方体の中に閉じ込められた1粒子の状態密度・エネルギーを計算し、その値を用いて  $\alpha, \beta$  を書き表した後に、希薄極限におけるエントロピーの表式に代入し、結果を書け。
5. 問4の結果から希薄極限のエントロピーが負の値となる条件を書け。実際問題としてエントロピーは正の値をとるので、これは理論が破綻した結果である。どのような条件でどの近似が破綻するために起きる問題であるのかを考察せよ。