

2024年度 理工工学基礎演習 (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; 5/13 13:00 (前半クラス), 5/7 13:00 (後半クラス)

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。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 $H \leq E$ 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 $\epsilon (= E/N)$ について単調増加な微分可能関数 $\sigma(\epsilon) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \Omega(E)$ 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 $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{W_0(E, \delta)}{\Omega_0(E)} = 1$ 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、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

III-1

体積 V の箱に入った N 個の分子からなる古典理想気体を考える。

- (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 $\bar{S}(E) = k_B \ln(\Omega_0(E)/h^{3N})$ 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。

III-2

$N_1 (\gg 1)$ 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。

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。
- (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。