2026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 (工学部 9 号館 325 号室)
提出日; 5/11 13:00 (前半クラス), 5/7 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。また粒子数 N は十分大きいとして、解答における主要項に対して $\mathcal{O}(1/N)$ の大きさの項は無視して良い。

I 調和振動子

振動数 ω を持つ N 個の独立な 1 次元調和振動子の系を考える。系はエネルギー E 近傍のエネルギーを持つミクロカノニカル分布に従うとして以下の問いに答えよ。

I-1 古典調和振動子

古典調和振動子系の Hamiltonian は、それぞれの粒子の座標と運動量を x_i, p_i とすると次で与えられる:

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

(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) この系のエントロピー $S(E) = k_B \ln \Omega(E)$ $(\Omega(E) = \Omega_0(E)/h^N)$ を求めよ。また、これを用いて系の温度 $T(E)$ と比熱 $C(T)$ を求めよ。

(3) 前設問 (2) のエントロピーの計算に用いた状態数 $\Omega(E)$ は、エネルギー E 以下のものであり正確にはミクロカノニカル分布に対するものではない。エネルギー殻 $E - N\delta \sim E$ $(\delta > 0)$ にある状態数を議論し、$S(E) = k_B \ln \Omega(E)$ が正しいエントロピーを与えていることを説明せよ。

I-2 量子調和振動子

量子調和振動子系の Hamiltonian は次で与えられる:

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

ただし、$\hat{n}_i$ は $0, 1, 2, \cdots$ を固有値にもつ数演算子である。

(1) 全エネルギーが E となる状態数 $W(E)$、およびこの系のエントロピー $S(E) = k_B \ln W(E)$ を求めよ。ただし、$N_E \equiv (E - N\hbar\omega/2)/(\hbar\omega)$ が十分大きな非負の整数であるとして良い。

(2) 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、古典調和振動子の結果と比較し、どのような条件で一致するかを調べよ。

II　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 $(\gg 1)$ 個の独立な粒子系を考える。

(1) この系の全エネルギーが E である状態数 $W(E)$ を求め、エントロピー $S(E) = k_B \log W(E)$ を計算せよ。

(2) $E \geq 0$ において、この系の温度 $T(E)$, 比熱 $C(T)$ を計算せよ。また、熱力学的に正常な系では $E \geq 0$ が要求されるが、 $E < 0$ ではどのような問題が生じるか簡単に議論せよ。

(3) ある一つの粒子に着目したとき、それがエネルギー $+\varepsilon$ を取る確率 p_+ を N, E, ε を用いて表せ。また、(2) で得た温度 $T(E)$ の表式を用いて確率 p_+ の温度依存性を求めよ。

III　古典理想気体

体積 V の箱に入った N 粒子からなる古典理想気体を考える。Hamiltonian は

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m}$$

で与えられる。

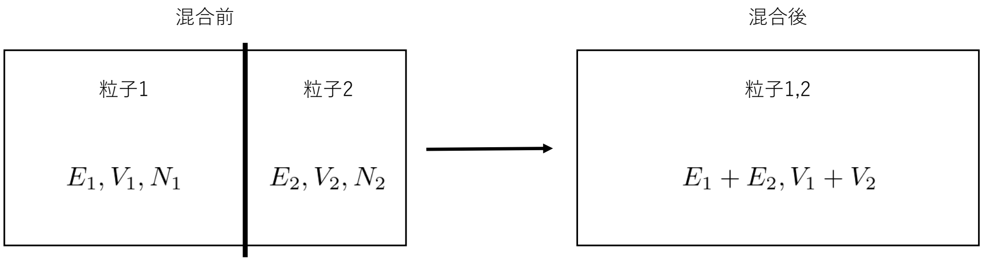
(1) エネルギーが E 以下となる位相空間の体積 $\Omega_0(E)$ を求めよ。

(2) N が十分大きい極限で $\bar{S}(E) = k_B \ln\bigl(\Omega_0(E)/h^{3N}\bigr)$ 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 $S(E)$ を求めよ。

(3) 温度 T を求めよ。また、状態方程式 $pV = Nk_BT$ (p: 圧力) が成立していることを示せ。

IV　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、混合後の熱平衡状態に関して以下の問いに答えよ。なお、適宜問題 III の結果を用いて良い。



(1) 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。

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

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

$$\langle E \rangle \sim \frac{N_1}{N_1 + N_2}(E_1 + E_2) \tag{9}$$

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。

(3) 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。

(4) 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。