物理学演習 B [発展コース] 問題 解答例

担当 栗本 (krmt@sci.u-toyama.ac.jp)

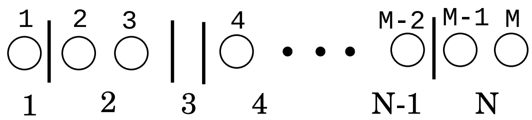
ミクロカノニカル分布とその応用

1.

(a) M 個の玉と $N-1$ 個の仕切りを並べる場合の数を考える．全部で $M+N-1$ 個のものを並べる場合の数は $(M+N-1)!$．そのうち M 個の玉は同じもので区別できないとすると $M!$ の重複がある．同様に $N-1$ 個の仕切りも区別できないとすると $(N-1)!$ の重複がある．重複する分を割って

$$W_M = \frac{(M+N-1)!}{M!(N-1)!}$$

通りの並べ方があることになる．この玉を $\hbar\omega$ 分のエネルギーとみなし，下図のように仕切りの順番に N 個の調和振動子へエネルギーを配分していくと考える．それぞれの調和振動子には $\hbar\omega/2$ だけの零点振動のエネルギーがあるので，全エネルギーは $M\hbar\omega + \dfrac{N}{2}\hbar\omega$ となっている．よって，求める場合の数は上で求めた W_M と一致する．



(b) (a) で求めた場合の数と統計力学的エントロピーの定義から

$$\begin{aligned}
S &= k\ln W_M = k\ln\left(\frac{(M+N-1)!}{M!(N-1)!}\right) \\
&= k[\ln(M+N-1)! - \ln M! - \ln(N-1)!] \\
&\simeq k[(M+N-1)\{\ln(M+N-1)-1\} - M\{\ln M - 1\} - (N-1)\{\ln(N-1)-1\} \\
&= k[(M+N-1)\ln(M+N-1) - M\ln M - (N-1)\ln(N-1)]
\end{aligned}$$

(c) $U = M\hbar\omega + \dfrac{N}{2}\hbar\omega$ から $\dfrac{dM}{dU} = \dfrac{1}{\hbar\omega}$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{T} &= \frac{\partial S}{\partial U} = \frac{\partial S}{\partial M}\frac{dM}{dU} \\
&\simeq k[\ln(M+N-1)+1-\ln M - 1]\frac{1}{\hbar\omega} \simeq \frac{k}{\hbar\omega}\ln\left(1+\frac{N}{M}\right) \\
e^{\hbar\omega/kT} &= 1+\frac{N}{M} \\
\frac{M}{N} &= \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT}-1}
\end{aligned}$$

ただし，$M+N \gg 1$ より $M+N-1$ で -1 を無視した．

$$\frac{M}{N} = \frac{U}{N\hbar\omega} - \frac{1}{2}$$

より

$$\begin{aligned}
\frac{U}{N\hbar\omega} - \frac{1}{2} &= \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT}-1} \\
U &= \frac{N\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT}-1} + \frac{N\hbar\omega}{2}
\end{aligned}$$

2.

(a) N 個の粒子から N_+ 選ぶ場合の数 W は $W = {}_N C_{N_+} = \dfrac{N!}{N_+!(N-N_+)!}$ で与えられる．これより

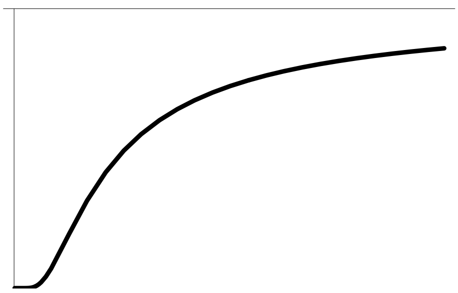
$$
\begin{aligned}
S &= k\ln W = k\ln\left(\frac{N!}{N_+!(N-N_+)!}\right) = k[\ln N! - \ln N_+! - \ln(N-N_+)!] \\
&\simeq k[N\ln N - N_+\ln N_+ - (N-N_+)\ln(N-N_+)]
\end{aligned}
$$

(b) 全エネルギー E は $E = \epsilon N_+ - \epsilon(N-N_+)$ なので，

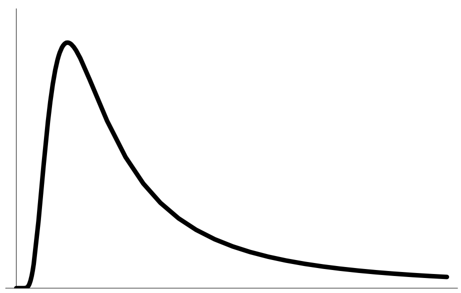
$$
\begin{aligned}
\frac{1}{T} &= \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{\partial S}{\partial N_+}\frac{dN_+}{dE} = k[-\ln N_+ - 1 + \ln(N-N_+) + 1]\frac{1}{2\epsilon} \\
\frac{2\epsilon}{kT} &= \ln\left(\frac{N}{N_+} - 1\right) \\
N+ &= \frac{N}{e^{2\epsilon/kT}+1} \\
E &= 2\epsilon N_+ - \epsilon N = \frac{2\epsilon N}{e^{2\epsilon/kT}+1} - \epsilon N = \epsilon N\left(\frac{1-e^{2\epsilon/kT}}{1+e^{2\epsilon/kT}}\right) \\
&= = -\epsilon N\left(\frac{e^{\epsilon/kT}-e^{-\epsilon/kT}}{e^{\epsilon/kT}+e^{-\epsilon/kT}}\right) = -\epsilon N\tanh(\frac{\epsilon}{kT})
\end{aligned}
$$

(c)

$$
\frac{dE}{dT} = -\epsilon N\frac{1}{\cosh^2(\epsilon/kT)}\frac{d}{dT}(\frac{\epsilon}{kT}) = \frac{\epsilon^2 N}{kT^2}\frac{1}{\cosh^2(\epsilon/kT)}
$$



エネルギーのグラフの概形



比熱のグラフの概形

(横軸は $\dfrac{kT}{\epsilon}$)

3. (a) 理想気体では粒子間の相互作用による位置エネルギーは無視できるので，個々の粒子のエネルギーは $\dfrac{\vec{p}_i^2}{2m}$ で与えられ，全系のエネルギーはその総和である．よって求める条件は

$$
\sum_{i=1}^{N}\frac{\vec{p}_i^2}{2m} \leq E
$$

(b) 求める位相空間の体積を D とすると，空間部分の積分は一粒子につき V で与えられているので

$$
D = \int\dots\int_{\sum_{i=1}^{N}\frac{\vec{p}_i^2}{2m}\leq E} d^3\vec{p}_1\dots d^3\vec{p}_N d^3\vec{x}_1\dots d^3\vec{x}_N = V^N\int\dots\int_{\sum_{i=1}^{N}\frac{\vec{p}_i^2}{2m}\leq E} d^3\vec{p}_1\dots d^3\vec{p}_N
$$

運動量部分の積分は半径 $\sqrt{2mE}$ の $3N$ 次元球の体積である．これを求めるために，半径 r の n 次元球の体積を $C_n r^n$ とおき，

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2)} dx_1 \dots dx_n$$

を計算する．直交座標のままで計算すると

$$I = \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x_1^2} dx_1 \right) \dots \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x_n^2} dx_n \right) = \pi^{n/2}$$

一方，球座標を用いて I を計算すると，n 次元球の表面積は $nC_n r^{n-1}$ となることから

$$\begin{aligned} I &= \int_0^{\infty} e^{-r^2} nC_n r^{n-1} dr = nC_n \int_0^{\infty} e^{-t} r^{n-1} \frac{1}{2r} dt \quad (t = r^2) \\ &= \frac{nC_n}{2} \int_0^{\infty} e^{-t} t^{(n/2)-1} dt = C_n \frac{n}{2} \Gamma(\frac{n}{2}) = C_n \Gamma(\frac{n}{2}+1) \end{aligned}$$

両者を比較して

$$C_n = \frac{\pi^{n/2}}{\Gamma(\frac{n}{2}+1)} \ .$$

これから

$$D = V^N C_{3N} (2mE)^{3N/2} = \frac{V^N \pi^{3N/2} (2mE)^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)}$$

(c) (b) の結果より

$$\Omega_0 = \frac{\pi^{3N/2}}{h^{3N} N!} \frac{V^N (2mE)^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)}$$

(d)

$$\begin{aligned} \frac{d\Omega_0}{dE} &= \frac{d}{dE} \left(\frac{\pi^{3N/2}}{h^{3N} N!} \frac{V^N (2mE)^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)} \right) = \frac{V^N \pi^{3N/2}}{h^{3N} N!} \frac{(3N/2) 2m (2mE)^{3N/2-1}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)} \\ &= \frac{3N}{2E} \frac{\pi^{3N/2} V^N}{h^{3N} N!} \frac{(2mE)^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)} = \frac{3N}{2E} \Omega_0 \end{aligned}$$

(e)

$$\ln \Omega_0 - \ln(\Omega \Delta E) = \ln \left(\frac{3N \Delta E}{2E} \right) = \ln \frac{3}{2} + \ln N + \ln \left(\frac{\Delta E}{E} \right)$$

$\ln \Omega_0$ は $O(N)$ の量なので，非常に大きな N に対し

$$|\frac{1}{N} \ln \left(\frac{\Delta E}{E} \right)| \ll 1$$

ならば，$\ln \Omega_0 \simeq \ln(\Omega \Delta E)$ と見なせる．

(f)

$$\begin{aligned} S &= k \ln(\Omega \Delta E) \simeq k \ln(\Omega_0) = k \ln \left(\frac{\pi^{3N/2}}{h^{3N} N!} \frac{V^N (2mE)^{3N/2}}{\Gamma(\frac{3N}{2}+1)} \right) = k \ln \left(\frac{\pi^{3N/2} V^N (2mE)^{3N/2}}{h^{3N} N! (3N/2)!} \right) \\ &= k \{ N \ln V + \frac{3N}{2} \ln(2mE) - 3N \ln h - N(\ln N - 1) - \frac{3N}{2} (\ln \frac{3N}{2} - 1) + \frac{3N}{2} \ln \pi \} \\ &= Nk \ln V + \frac{3}{2} Nk \ln(2mE) + (\text{定数}) \end{aligned}$$

また

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial E} = \frac{3}{2} Nk \frac{1}{E} \quad \text{より} \quad E = \frac{3}{2} NkT$$

熱力学での結果と比較して $Nk = nR$ (n はモル数)，$\dfrac{3}{2} Nk = nC_v$ を得る．