統計力学演習解答 (3)

[1]

(a)

$$
\begin{aligned}
U \equiv \langle E \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dp_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} dp_z N \frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2m} \frac{1}{(2\pi mkT)^{3/2}} \exp\left(-\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2mkT}\right) \\
&= \frac{N}{(2\pi mkT)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x \frac{p_x^2}{2m} \exp\left(-\frac{p_x^2}{2mkT}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \exp\left(-\frac{p_y^2}{2mkT}\right) \\
&\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \exp\left(-\frac{p_z^2}{2mkT}\right) + (x \longleftrightarrow y) + (x \longleftrightarrow z) \\
&= 3N \frac{1}{2m} \frac{1}{(2\pi mkT)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x p_x^2 \exp\left(-\frac{p_x^2}{2mkT}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \exp\left(-\frac{p_y^2}{2mkT}\right) \\
&\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \exp\left(-\frac{p_z^2}{2mkT}\right) \\
&= 3N \frac{1}{2m} \frac{1}{(2\pi mkT)^{3/2}} \times (2\pi)^{1/2} (mkT)^{3/2} \times (2\pi mkT)^{1/2} \times (2\pi mkT)^{1/2} \\
&= \frac{3}{2} NkT
\end{aligned}
$$

ここで，$(x \longleftrightarrow y)$ は添字の x と y を入れ替えた項を表し，第 1 項と同じ寄与をする．また，４番目の等号は p_x 項に部分積分，p_y, p_z の項に Gauss 積分を行った．

(b) $C = \dfrac{\partial U}{\partial T} = \dfrac{3}{2} Nk$

[2]

(a)

$$
x^2 + y^2 = r^2 \cos^2\theta + r^2 \sin^2\theta = r^2
$$

$$
dxdy = \left| \det \begin{bmatrix} \dfrac{\partial x}{\partial r} & \dfrac{\partial y}{\partial r} \\ \dfrac{\partial x}{\partial \theta} & \dfrac{\partial y}{\partial \theta} \end{bmatrix} \right| drd\theta = \left| \det \begin{bmatrix} \cos\theta & -r\sin\theta \\ \sin\theta & r\cos\theta \end{bmatrix} \right| drd\theta = rdrd\theta
$$

(b) (a) の結果から

$$
\begin{aligned}
I^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \mathrm{e}^{-x^2-y^2} \\
&= \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} drr\mathrm{e}^{-r^2} \\
&= 2\pi \left[-\frac{1}{2} \mathrm{e}^{-r^2} \right]_0^{\infty} = \pi
\end{aligned}
$$

この結果から，$I = \sqrt{\pi}$ を得る．

[3]

(a) $\Gamma(N+1)$ の表式について部分積分を実行する．

$$\begin{aligned}\Gamma(N+1) &= \int_0^\infty \mathrm{e}^{-t} t^N dt \\ &= \left[-\mathrm{e}^{-t} t^N\right]_0^\infty + N\int_0^\infty \mathrm{e}^{-t} t^{N-1} dt = N\Gamma(N)\end{aligned}$$

よって，$\Gamma(N+1) = N\Gamma(N) = \cdots = N \cdot (N-1) \cdots 2 \cdot 1\Gamma(1)$ となる．$\Gamma(1)$ は

$$\Gamma(1) = \int_0^\infty e^{-t} dt = \left[-e^{-t}\right]_0^\infty = 1$$

であるから，$\Gamma(N+1) = N!$ が示せた．

(b) t についての一階微分と二階微分 $f'(t) = -1 + N/t$，$f''(t) = -N/t^2 < 0 \quad (t \geq 0)$ から $t = t_0 = N$ で $f(t)$ が最大値を取る．

(c) $N \gg 1$ の場合において

$$f(t) \approx f(t_0) + \frac{f''(t_0)}{2!}(t-t_0)^2 = -N + N\ln N - \frac{1}{2N}(t-N)^2$$

と近似し，積分の下限を $-\infty$ として $t \in (-\infty, \infty)$ で積分する．

$$\begin{aligned}\Gamma(N+1) &\approx \int_0^\infty \exp[-N + N\ln N] \exp\left[-\frac{1}{2N}(t-N)^2\right] dt \\ &\approx \int_{-\infty}^\infty \exp[-N + N\ln N] \exp\left[-\frac{1}{2N}(t-N)^2\right] dt \\ &= (N/\mathrm{e})^N \int_{-\infty}^\infty \exp\left[-\frac{1}{2N}(t-N)^2\right] dt \\ &= (2\pi N)^{1/2} (N/\mathrm{e})^N\end{aligned}$$

最後の等号は，Gauss 積分を行った．
ここで，積分の下限が $-\infty$ で置き換えることができるのは，$t < 0$ の領域において係数を除いた被積分関数は，$N \gg 1$ から

$$\exp\left[-\frac{1}{2N}(t-N)^2\right] < \mathrm{e}^{-N/2} \ll 1$$

であるため，積分にほとんど寄与をしないためである。

(d) $\tilde{\Gamma}(N+1) = (2\pi N)^{1/2}(N/\mathrm{e})^N$ とおくと，

$N = 5$ のとき

$$\begin{aligned}N! &= 120 \\ \tilde{\Gamma}(N+1) &= 118.019167957590079985239103792 \\ |N! - \tilde{\Gamma}(N+1)| &= 1.98083204240992001476089620 8 \text{（絶対誤差）} \\ \frac{|N! - \tilde{\Gamma}(N+1)|}{N!} &= 0.0165069336867493334563408017 34 \text{（相対誤差）}\end{aligned}$$

$N = 10$ のとき

$$\begin{aligned} N! &= 3628800 \\ \tilde{\Gamma}(N+1) &= 3598695.6187410359216231759328 3 \\ |N! - \tilde{\Gamma}(N+1)| &= 30104.381258964078376824067 17 \text{（絶対誤差）} \\ \frac{|N! - \tilde{\Gamma}(N+1)|}{N!} &= 0.0082959604439385136620436693 04 \text{（相対誤差）} \end{aligned}$$

$N = 20$ のとき

$$\begin{aligned} N! &= 2.43290200817664 \times 10^{18} \\ \tilde{\Gamma}(N+1) &= 2.422786846761133393683907538 96 \times 10^{18} \\ |N! - \tilde{\Gamma}(N+1)| &= 1.011516141550660631609246104 \times 10^{16} \text{（絶対誤差）} \\ \frac{|N! - \tilde{\Gamma}(N+1)|}{N!} &= 0.004157652622880402734571160213 \text{（相対誤差）} \end{aligned}$$

と計算できる．