統計力学演習問題 (6)

[1] 質量 m の単原子分子 N ($\gg 1$) 個からなる理想気体が体積 V の容器に入っており，一定のエネルギー U を持ち、外界から孤立している。この系の古典的ハミルトニアンは，$\mathbf{p}_j$ を粒子 j ($=1,2,\cdots,N$) の運動量として，

$$H = \sum_{j=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_j^2}{2m} \tag{1}$$

で与えられる。また、エネルギーが U 以下の状態数 $W_0(U)$ は，

$$W_0(U) = \frac{1}{N!}\prod_{j=1}^{N}\int \frac{\mathrm{d}^3 r_j \mathrm{d}^3 p_j}{(2\pi\hbar)^3}\theta(U-H), \qquad \theta(x) \equiv \begin{cases} 1 & : x \geq 0 \\ 0 & : x < 0 \end{cases} \tag{2}$$

と表せる。ただし、$\mathbf{r}_j$ は粒子 j の位置ベクトル，$\hbar = 1.055 \times 10^{-34}$J·s は Planck 定数である。

(a) ハミルトニアン (1) に対する状態数 $W_0(U)$ の表式を、(U,V,N) の関数として簡潔に表せ。

(b) 「エネルギーが U の状態数 $W(U)$」を，$\Delta U/U \sim N^{-1}$ と選んだエネルギー幅 ΔU を用いて，$W(U) \equiv W_0'(U)\Delta U$ と定義する。この系のエントロピーの表式を求めよ。

(c) 系の絶対温度 T の表式を求めよ。

(d) 系の圧力 p の表式を、T を用いて表せ。

(e) 系の化学ポテンシャル μ の表式を求めよ。

(f) 理想気体の準静的断熱過程において，Poisson の式 $PV^\gamma =$ 一定 が成立することを示し、γ の値を求めよ。

[2] N 個の原子からなり温度 T に保たれている単原子結晶固体を考える。すべての原子が結晶格子の格子点上に位置しているときは完全結晶であるが、ある原子が格子間位置に移動すると格子欠陥ができ不完全結晶となる。原子の存在可能な格子間位置は全部で N 個あるとし、格子間位置にいる原子のエネルギーは通常の位置の原子より ϵ だけ大きいとする。

(a) 格子欠陥が n 個ある場合の数 $W(n)$ を求めよ。

(b) $1 \ll n \ll N$ を仮定するとき、格子欠陥の数の平均は $\bar{n} = Ne^{-\epsilon/2k_BT}$ で与えられることを示せ。

[3] 下端に重さ w のおもりがついた細長いゴムが上からつるされており、温度 T に保たれている。このゴムに対する簡単な模型として、N 個の要素が連なった 1 次元鎖を考える。各要素は長さが a で、鉛直方向に対し平行または反平行の 2 つの向きだけをとることが可能である。要素の運動エネルギー、重さ、要素間の相互作用は無視できるものとする。

(a) この系 (ゴム＋おもり) に対する分配関数を求めよ。

(b) ゴムの上端から下端までの距離の平均値 x を求めよ。

(c) Hook の法則 $w = Kx$ (K:ばね定数) はどのようなとき成立するか。