統計力学演習解答 (6)

[1]

(a)

$$
\begin{aligned}
W_0(U) &= \frac{1}{N!}\left[\prod_{j=1}^{N}\int\frac{d^3x_j d^3p_j}{(2\pi\hbar)^3}\right]\theta\left(U-\sum_{i=1}^{N}\frac{\boldsymbol{p}_i{}^2}{2m}\right)\\
&= \frac{1}{N!}\left[\prod_{j=1}^{N}\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int_V d^3x_j\int_{-\infty}^{\infty}d^3p_j\right]\theta\left(U-\sum_{i=1}^{N}\frac{\boldsymbol{p}_i{}^2}{2m}\right)\\
&= \frac{V^N}{N!\,(2\pi\hbar)^{3N}}\underline{\left[\prod_{j=1}^{3N}\int_{-\infty}^{\infty}dp_j\right]\theta\left(U-\sum_{i=1}^{3N}\frac{p_i{}^2}{2m}\right)}
\end{aligned}
$$

ただし、第 2 行と第 3 行の間で p_j のインデックスを置き換えている。いま、下線部の積分は半径 $\sqrt{2mU}$ の $3N$ 次元球の体積にあたる。半径 r の N 次元球の体積 $V_N(r)$ は

$$
V_N(r) = \frac{\pi^{N/2}}{\Gamma(N/2+1)}r^N
$$

で表される（証明略）ので、

$$
\begin{aligned}
W_0(U) &= \frac{V^N}{N!\,(2\pi\hbar)^{3N}}\frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma(3N/2+1)}(2mU)^{3N/2}\\
&= \frac{V^N}{N!\,\Gamma(3N/2+1)}\left(\frac{mU}{2\pi\hbar^2}\right)^{3N/2} \qquad \text{(答)}
\end{aligned}
$$

なお、Stirling の公式を用いれば、

$$
W_0(U) \approx \frac{1}{\sqrt{6\pi N}}\left[\frac{V\mathrm{e}^{5/2}}{N}\left(\frac{mU}{3\pi\hbar^2 N}\right)^{3/2}\right]^N \qquad \text{(答)}
$$

(b) $W_0(U) \propto U^{3N/2}$ であるので、$W(U) \equiv W_0'(U)\Delta U = W_0(U)\dfrac{3}{2}N\dfrac{\Delta U}{U}$ となり、

$$
\begin{aligned}
S &= k\ln W(U)\\
&= k\ln W_0(U) + k\ln\frac{3}{2}N\frac{\Delta U}{U}\\
&= k\ln\frac{1}{\sqrt{6\pi N}}\left[\frac{V\mathrm{e}^{5/2}}{N}\left(\frac{mU}{3\pi\hbar^2 N}\right)^{3/2}\right]^N + O(\ln N^0)
\end{aligned}
$$

$\ln N$ までのオーダーの項を無視すれば、

$$
S \approx Nk\left(\frac{3}{2}\ln\frac{mU}{3\pi\hbar^2 N} + \ln\frac{V}{N} + \frac{5}{2}\right) \qquad \text{(答)}
$$

(c)

$$T = \left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)^{-1} = \left[Nk\frac{3}{2}\frac{1}{U}\right]^{-1} = \frac{2U}{3Nk} \qquad \text{(答)}$$

(d)

$$p = T\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right) = TNk\frac{1}{V} = \frac{NkT}{V} = \frac{2U}{3V} \qquad \text{(答)}$$

(e)

$$\mu = -T\left(\frac{\partial S}{\partial N}\right) = -\frac{2U}{3N}\left(\frac{3}{2}\ln\frac{mU}{3\pi\hbar^2 N} + \ln\frac{V}{N}\right) \qquad \text{(答)}$$

(f) 準静的断熱過程では S が一定であるので、(b) の結果から $U^{3/2}V$ が一定であることがわかる。したがって、(c)(d) の結果を用いて

$$p^{\frac{3}{2}}V^{\frac{5}{2}} = \text{const.} \longrightarrow pV^{\frac{5}{3}} \qquad \text{(答)}$$

となり、$\gamma = 5/3$ とわかる。

[2]

(a) N 個の原子から n 個を選び、N 個の格子間位置から n 個を選ぶので、

$$W(n) = \left(\frac{N!}{(N-n)!n!}\right)^2 \qquad \text{(答)}$$

(b) エントロピー S は

$$\begin{aligned} S &= k\ln W(n) \\ &= 2k\ln\frac{N!}{(N-n)!n!} \\ &\approx 2k\left[N\ln\frac{N}{N-n} + n\ln\frac{N-n}{n}\right] \end{aligned}$$

$E = \epsilon n$ であることから、平衡状態において

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E}\right) = \frac{1}{\epsilon}\left(\frac{\partial S}{\partial n}\right)$$

とすることができる。ここでの n は粒子数密度の平均値 $\bar{n}$ に置き換えることができるので、

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{T} &= \frac{1}{\epsilon}\left(\frac{\partial S}{\partial n}\right)_{n\to\bar{n}} \\
&= \frac{2k}{\epsilon}\frac{\partial}{\partial\bar{n}}\left[N\ln N - N\ln(N-\bar{n}) + \bar{n}\ln(N-\bar{n}) - \bar{n}\ln\bar{n}\right] \\
&= \frac{2k}{\epsilon}\left(\frac{N}{N-\bar{n}} + \ln(N-\bar{n}) - \frac{\bar{n}}{N-\bar{n}} - \ln\bar{n} - 1\right) \\
&= \frac{2k}{\epsilon}\ln\frac{N-\bar{n}}{\bar{n}}
\end{aligned}
$$

$1 \ll n \ll N$ であるから、$N-\bar{n}\approx N$ とすれば、

$$\bar{n} \approx N\mathrm{e}^{-\frac{\epsilon}{2kT}} \qquad \text{(答)}$$

[3]

(a) N 個の要素に i $(1\geq i\geq N)$ と番号をつけると x_j を $+a$ または $-a$ として、位置エネルギー E は $x=0$ を基準として $E=-w(x_1+x_2+\cdots+x_N)$ とできる。（鉛直下向きを正ととった。）したがって、分配関数 Z は

$$
\begin{aligned}
Z &= \sum_{x_1}\sum_{x_2}\cdots\sum_{x_N}\mathrm{e}^{\beta w x_1}\cdots\mathrm{e}^{\beta w x_N} \\
&= \left[\sum_{x=\pm a}\mathrm{e}^{\beta w x}\right]^N \\
&= \left(\mathrm{e}^{\beta w a} + \mathrm{e}^{-\beta w a}\right)^N
\end{aligned}
\qquad \text{(答)}
$$

(b) $\bar{x}=\bar{x}_1+\cdots+\bar{x}_N=N\bar{x}_1$ とできるので、$\bar{x}_1$ を求める。

$$
\begin{aligned}
\bar{x}_1 &= \frac{\sum_{x_1=\pm a}x_1\mathrm{e}^{\beta w x_1}}{\sum_{x_1=\pm a}\mathrm{e}^{\beta w x_1}} \\
&= \frac{a\mathrm{e}^{\beta w a} - a\mathrm{e}^{-\beta w a}}{\mathrm{e}^{\beta w a}+\mathrm{e}^{-\beta w a}} \\
&= a\tanh(\beta w a)
\end{aligned}
$$

したがって、

$$\bar{x} = aN\tanh(\beta w a) \qquad \text{(答)}$$

(c) (b) の結果から、$\bar{x}$ が w に比例するためには、$\tanh(\beta w a)$ が w に比例する必要がある。$\tanh(\beta w a)$ を Taylor 展開すると、

$$\tanh(\beta w a) = \beta w a - \frac{1}{3}(\beta w a)^3 + \cdots$$

であることから、求める条件は

$$\beta wa \ll 1 \ \longrightarrow\ wa \ll kT \qquad \text{(答)}$$