統計力学演習問題 (7)

[1] ハミルトニアンが $H = H(x_1, x_2, \cdots, x_N)$ と表される場合を考える。ここで x_j $(j = 1, 2, \cdots, N)$ は一般化座標もしくは一般化運動量を表し、$|x_j| \to \infty$ のとき十分速く $H \to \infty$ となるものとする。

(a) 次式が成立することを示せ。

$$\left\langle x_j \frac{\partial H}{\partial x_j} \right\rangle = kT. \tag{1}$$

ただし $\langle \cdots \rangle$ は、古典カノニカル分布 $\mathcal{C}\mathrm{e}^{-\beta H}$ ($\mathcal{C}$ は規格化定数； $\beta \equiv 1/kT$) による期待値

$$\langle A \rangle \equiv \mathcal{C} \left(\prod_{k=1}^{N} \int_{-\infty}^{\infty} dx_k \right) A \mathrm{e}^{-\beta H} \tag{2}$$

を表す。

ヒント：規格化条件 $\mathcal{C} \left(\prod_{k=1}^{N} \int_{-\infty}^{\infty} dx_k \right) \mathrm{e}^{-\beta H} = 1$ の左辺を x_j について部分積分してみよ。

(b) 一次元調和振動子のハミルトニアン $H = H(x, p)$ は

$$H = K + V, \quad K \equiv \frac{p^2}{2m}, \quad V \equiv \frac{1}{2}\kappa x^2, \tag{3}$$

と表される。(a) の結果を用いて次式を証明せよ。

$$\langle K \rangle = \langle V \rangle = \frac{1}{2}kT. \tag{4}$$

[2] 質量 m の単原子分子 N 個からなる理想気体が断面積 A、高さ L の円筒容器中で重力場の影響を受け、温度 T の平衡状態にある。

(a) 分配関数 Z、平均エネルギー E、定積熱容量 C_V を計算せよ。

(b) 容器の底面から高さ z の位置での粒子数密度 $n(z)$ を求めよ。また、それを利用して、圧力 P を z の関数として表せ。

(c) $\frac{mgL}{k_B T} \to 0$ および $\to \infty$ の極限での C_V、P を求めよ。

[3] 古典統計力学に従う粒子 N 個からなる理想気体が，体積 V の容器に閉じ込められ，温度 T の熱浴と熱平衡状態にある。各粒子のエネルギー ε は，運動量の大きさ $p = |\boldsymbol{p}|$ に比例し，$\varepsilon = cp$ で与えられる。ただし c は正定数である。

(a) 分配関数 Z を求めよ。

(b) 自由エネルギー F、内部エネルギー U、および定積熱容量 C_V の表式を求めよ。