

統計力学演習問題解答 (7)

[1]

(a) 規格化条件から

$$\begin{aligned}
 1 &= C \prod_{k=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dx_k e^{-\beta H} \\
 &= C \prod_{k=1, k \neq j}^N \int_{-\infty}^{\infty} dx_k \int_{-\infty}^{\infty} x_j e^{-\beta H} \\
 &= C \prod_{k=1, k \neq j}^N \int_{-\infty}^{\infty} dx_k \times \left([x_j e^{-\beta H}]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx_j \left(-\beta \frac{\partial H}{\partial x_j} \right) x_j e^{-\beta H} \right) \\
 &= C \beta \prod_{k=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} dx_k x_j \frac{\partial H}{\partial x_j} e^{-\beta H} = \beta \left\langle x_j \frac{\partial H}{\partial x_j} \right\rangle
 \end{aligned}$$

したがって

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

(b) Hamiltonian は $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}\kappa x^2$ であるので, (a) の結果から

$$\langle K \rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2} p \frac{\partial H}{\partial p} \right\rangle = \frac{1}{2} kT$$

$$\langle V \rangle = \left\langle \frac{1}{2} \kappa x^2 \right\rangle = \left\langle \frac{1}{2} x \frac{\partial H}{\partial x} \right\rangle = \frac{1}{2} kT$$

[2]

(a) この系の Hamiltonian は

$$H = \sum_{j=1}^N \left(\frac{p_j^2}{2m} + mgz_j \right)$$

で与えられるので, 分配関数 Z は

$$\begin{aligned}
 Z &= \frac{1}{N!} \prod_{j=1}^N \int \frac{d^3 r_j d^3 p_j}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\beta H} \\
 &= \frac{1}{N!} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}} A^N \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3N/2} \left(\int_0^L dz e^{-\beta mgz} \right)^N \\
 &= \frac{(AL)^N}{N!} \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3N/2} \left(\frac{1 - e^{-mgL/kT}}{mgL/kT} \right)^N
 \end{aligned}$$

ここで, Stirling の公式を用いて

$$\ln Z \approx N \left(\ln \frac{AL}{N} + \frac{3}{2} \ln \frac{mkT}{2\pi\hbar^2} + 1 + \ln \frac{1 - e^{-mgL/kT}}{mgL/kT} \right)$$

となる。以上から

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = \frac{5}{2}NkT - NkT \frac{mgL}{kT} \frac{e^{-mgL/kT}}{1 - e^{-mgL/kT}}$$

$$C_V = \frac{dE}{dT} = \frac{5}{2}Nk - Nk \left(\frac{mgL}{kT} \right)^2 \frac{e^{-mgL/kT}}{(1 - e^{-mgL/kT})^2}$$

(b) 高さ z での粒子数密度 $n(z) = \sum_{j=1}^N \delta(z - z_j)/A$ の平均は,

$$\bar{n}(z) = \frac{1}{Z} \frac{1}{N!} \prod_{j=1}^N \int \frac{d^3r_j d^3p_j}{(2\pi\hbar)^3} n(z) e^{-\beta H}$$

$$= \frac{N}{AL} \frac{mgL}{kT} \frac{e^{-mgz/kT}}{1 - e^{-mgL/kT}}$$

と与えられる。また、高さ z の位置において高さの幅 dz の微小区間 (体積 Adz) では理想気体の状態方程式が成立しているので

$$p(z)(Adz) = \bar{n}(z)(Adz)kT \longrightarrow p(z) = \bar{n}(z)kT = \frac{NkT}{AL} \frac{mgL}{kT} \frac{e^{-mgz/kT}}{1 - e^{-mgL/kT}}$$

と計算できる。

(c) $mgL/kT \rightarrow 0$ のとき $e^{-mgL/kT} \approx 1 - mgL/kT$, また, $mgL/kT \rightarrow \infty$ のとき $1 - e^{-mgL/kT} \approx 1$ とし, 微小量の最低次までの近似を施すと

$$C_V \longrightarrow \begin{cases} \frac{3}{2}Nk & (mgL/kT \rightarrow 0) \\ \frac{5}{2}Nk & (mgL/kT \rightarrow \infty) \end{cases}$$

$$p(z) \longrightarrow \begin{cases} \frac{NkT}{AL} & (mgL/kT \rightarrow 0) \\ \frac{NkT}{AL} \frac{mgL}{kT} e^{-mgz/kT} & (mgL/kT \rightarrow \infty) \end{cases}$$

[3]

(a) この系の Hamiltonian は $H = \sum_{j=1}^N cp_j$ であるので, 分配関数 Z は

$$Z = \frac{1}{N!} \prod_{j=1}^N \int \frac{d^3r_j d^3p_j}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\beta H}$$

$$= \frac{1}{N!} \left[\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty 4\pi p^2 e^{-\beta cp} dp \right]^N$$

$$= \frac{1}{N!} \left[\frac{4\pi V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{(\beta c)^3} \Gamma(3) \right]^N$$

$$= \frac{1}{N!} \left[\frac{V}{\pi^2} \left(\frac{kT}{\hbar c} \right)^3 \right]^N$$

となる。

(b) (a) の結果から

$$\begin{aligned} F &= -\frac{1}{\beta} \ln Z \\ &= -NkT \left\{ \ln \frac{V}{N} - \ln \left[\pi^2 \left(\frac{\hbar c}{kT} \right)^3 \right] + 1 \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} U &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \\ &= -N \frac{\partial}{\partial \beta} \left\{ \ln \frac{V}{N} - \ln \left[\pi^2 \left(\frac{\hbar c}{kT} \right)^3 \right] + 1 \right\} \\ &= \frac{3N}{\beta} = 3NkT \end{aligned}$$

$$C_V = \frac{dU}{dT} = 3Nk$$

と計算できる.