統計力学AⅠ

20/10/06

自己紹介

1982. 京都大学理学部 入学

1991 京都大学 博士(理学)

京都大学 助手

1994 東京大学 助教授(准教授)

2009 東京大学 教授

2012 京都大学 教授

〜 現在に至る

専門分野

統計物理

・ダイナミクス

統計物理

自然現象

構成要素の視点から

基本法則の

探索

現象の系統的整理から

(平衡)統計力学

多数の原子/分子からなる
系が平衡状態にあるときの現象

構成要素の視点から ⇔ 現象の系統的整理から

古典力学・量子力学 ↔ (平衡)統計力学 ↔ 熱力学

~ Intermission ~

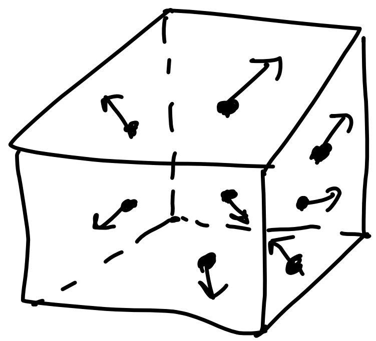
古典力学 1

例: 箱の中に閉じ込められた相互作用する N 個の質点

i 番目の質点の位置 $\mathbf{r}_i$ 運動量 $\mathbf{p}_i$

力学状態 $\Gamma \equiv (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \cdots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1 \cdots \mathbf{p}_N) \in \mathbb{R}^{6N}$

m: 質量

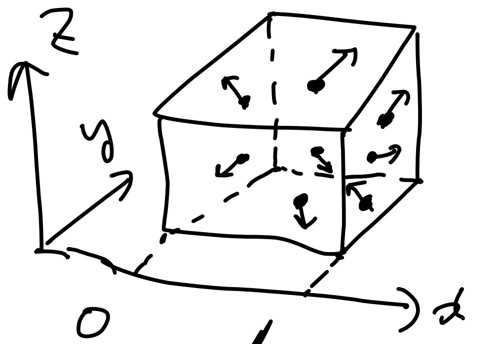


運動方程式

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{r}}_i = \dfrac{\mathbf{p}_i}{m} \\ \dot{\mathbf{p}}_i = -\dfrac{\partial V_{tot}(\mathbf{r}_1, \cdots \mathbf{r}_N)}{\partial \mathbf{r}_i} \end{cases}$$

保存力

$V_{tot}(\mathbf{r}_1, \cdots, \mathbf{r}_N)$
全ポテンシャルエネルギー



古典力学 2

運動方程式

$$\begin{cases} \dot{\mathbb{r}}_i = \dfrac{\mathbb{p}_i}{m} \\ \dot{\mathbb{p}}_i = -\dfrac{\partial V_{tot}(\mathbb{r}_1, \ldots, \mathbb{r}_N)}{\partial \mathbb{r}_i} \end{cases}$$

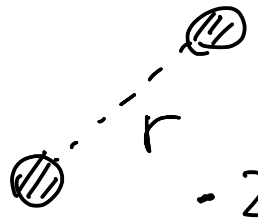
$V_{tot}(\mathbb{r}_1, \ldots, \mathbb{r}_N)$

ポテンシャルエネルギー

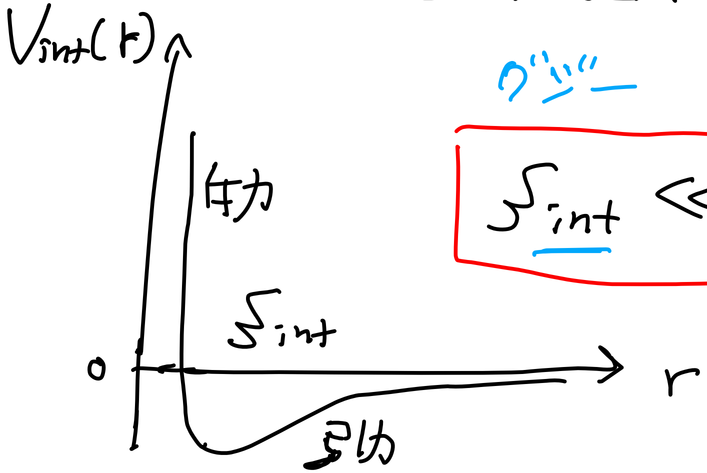
L 例

例

$$\boxed{V_{tot}(\mathbb{r}_1, \ldots, \mathbb{r}_N) = \sum_{i<j} V_{int}(|\mathbb{r}_i - \mathbb{r}_j|) + \sum_i V_{wall}(\mathbb{r}_i)}$$



・2体相互作用

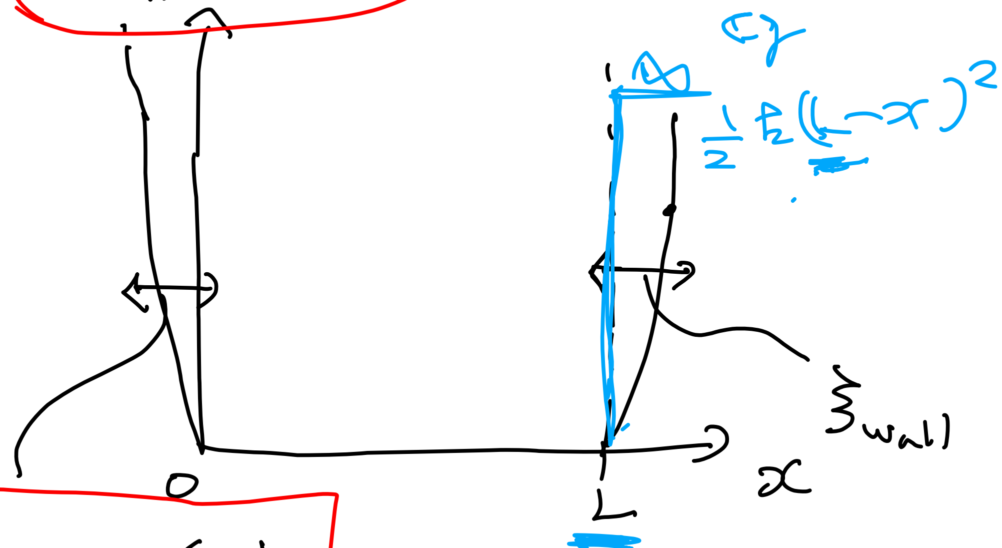


グッー

$$\boxed{\xi_{int} \ll L}$$

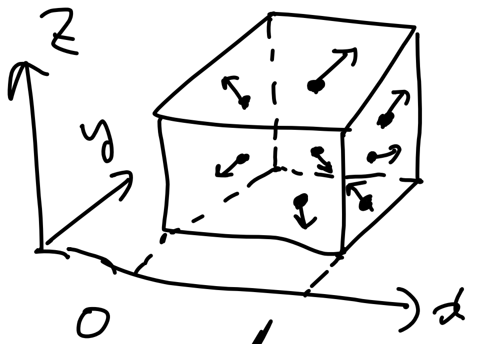
$V_{wall}(x, y, z)$

$V_{wall}(x, y, z; L)$



$$\boxed{\xi_{wall} \ll L}$$

古典力学3



L 仮り

$V_{tot}(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N)$
ポテンシャル エネルギー

運動方程式

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{r}}_i = \dfrac{\mathbf{p}_i}{m} \\ \dot{\mathbf{p}}_i = -\dfrac{\partial V_{tot}(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N)}{\partial \mathbf{r}_i} \end{cases}$$

$$\boxed{V_{tot}(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i<j} V_{int}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) + \sum_i V_{wall}(\mathbf{r}_i)}$$

ハミルトニアン

$$H(\Gamma) = \sum_{i=1}^{N} \frac{|\mathbf{p}_i|^2}{2m} + V_{tot}(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N)$$

運動方程式

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{r}}_i = \dfrac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} \\ \dot{\mathbf{p}}_i = -\dfrac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} \end{cases}$$

解 $\Gamma(t) = (\mathbf{r}_1(t), \ldots, \mathbf{r}_N(t), \mathbf{p}_1(t), \ldots, \mathbf{p}_N(t))$

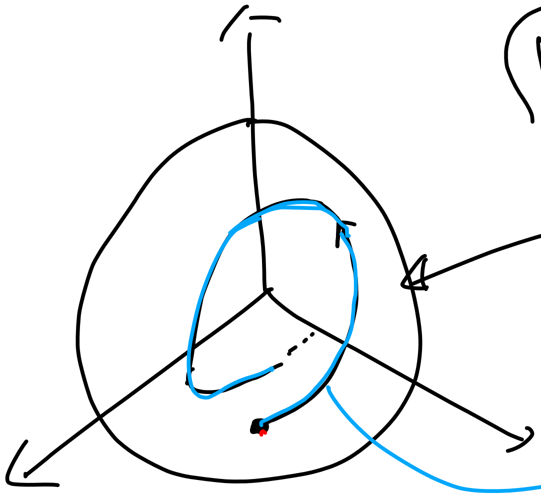
"動画"

$H(\Gamma(t)) = E$ (定数)

時間に依存しない

確認して下さい

古典力学4



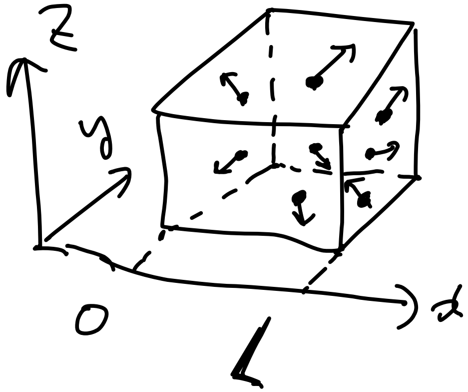
Γ：6N次元空間

H(Γ)=E：エネルギー面
6N−1次元空間

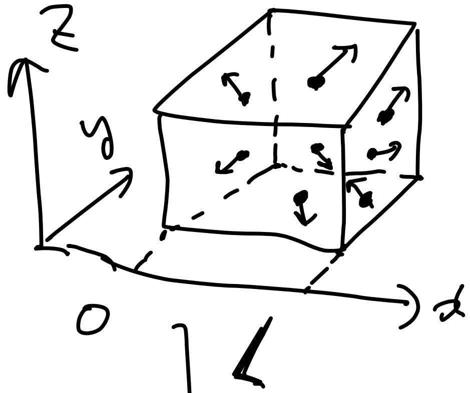
運動方程式の解

"動画" ⟹ 軌道

"静止画" ⟹ 点



古典力学のまとめ



・力学状態　$\Gamma = (\mathbf{r}_1, \dots \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1 \dots \mathbf{p}_N)$

・ハミルトニアン

$$H(\Gamma)$$

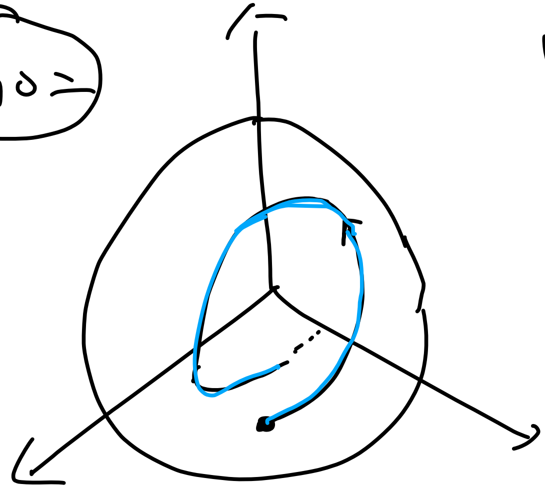
$[\,H(\Gamma; L)$ パラメータ依存性 $]$

セミコロン

・エネルギー面

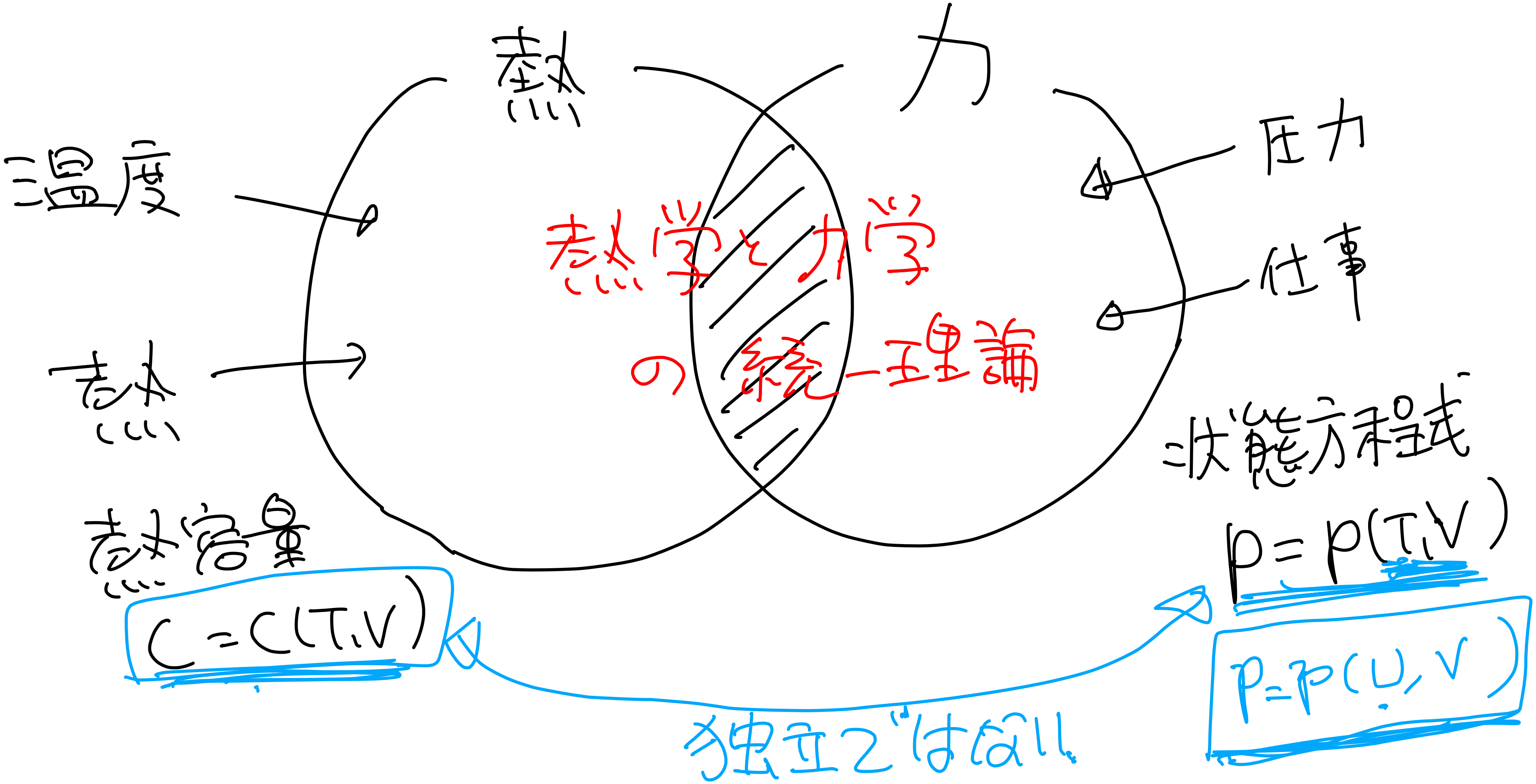
$$H(\Gamma) = E$$

$\Gamma \in \mathbb{R}^{6N}$



~ Intermission ~

熱力学 1.



熱力学2

例：

$$\frac{\partial C(T,V)}{\partial V} = T\frac{\partial^2 P(T,V)}{\partial T^2}$$

$$\left(\frac{\partial C}{\partial V}\right)_T = T\frac{\partial^2 S(T,V)}{\partial V\partial T}$$

$$= -T\frac{\partial}{\partial T}\frac{\partial F(T,V)}{\partial V\partial T}$$

$$= T\frac{\partial^2 P(T,V)}{\partial T^2}$$

例：
- ✓ 熱容量
- ✓ 断熱曲線
- ✓ 断熱自由膨張の温度変化

⇒ 状態方程式！

レポート!!
（成績評価に関係はない）

熱力学3

- 内部エネルギー U 物質の内部に蓄えられるエネルギー
- エントロピー S 物質の内部の乱雑さをあらわす量
- 自由エネルギー F 等温環境下で自由に出し入れできるエネルギー

状態方程式
熱容量
⋮

$\Longleftrightarrow$ $S(U,V)$ 完全な熱力学関数 ← 統一理論の表現

$U(T,V)$, $S(T,V)$ 不完全

熱力学4

基本関係式

$$dU = TdS - pdV$$

$$\Longleftrightarrow \quad U = U(S, V), \quad T = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_V, \quad p = -\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_S$$

$$\Updownarrow$$

$$dS = \frac{1}{T}dU + \frac{p}{T}dV \qquad \frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial U}\right)_V, \quad \frac{p}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_U$$

$$\Updownarrow$$

$$F = U - TS$$

$$dF = -SdT - pdV \qquad \cdots\cdots$$

熱力学のまとめ

・熱力学状態 (U, V) [or (T, V) etc...]

・エントロピー $S(U, V)$ [or $F(T, V)$ etc...]

$\Downarrow$

全ての熱力学的性質

~Intermission~

統計力学とは

$H(\Gamma)$

つなぐ

$S(U,V)$

・力学状態　$\Gamma = (\mathbf{r}_1, \ldots \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1 \cdots \mathbf{p}_N)$

・ハミルトニアン

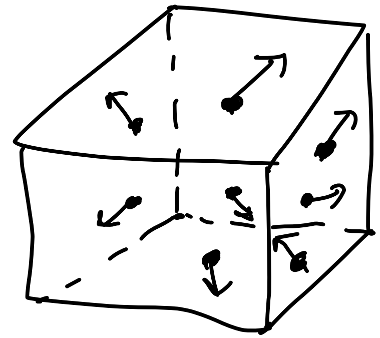
$H(\Gamma)$

$\left[H(\Gamma; L) \right]$ パラメータ依存性

・エネルギー面

$H(\Gamma) = E$

???



・熱力学状態　(U, V)

・エントロピー　$S(U,V)$

参考書

- 田崎晴明，「統計力学 I, II」
  — 量子力学に基づくので，講義の「補助」には使えない
- 高橋康「統計力学入門」（在庫なし …）
- 久保亮五 他「大学演習 熱学・統計力学」
  — 豊富な問題 …
- ランダウ-リフシッツ「統計物理学」

成績評価

- 成績評価に関係するレポート課題 3回の評価にもとづいて点数化

- 成績評価に関係しないレポートはほぼ毎回出す。

→ コメント＆返却

今回、熱力学の問題