統計力学A Ⅷ

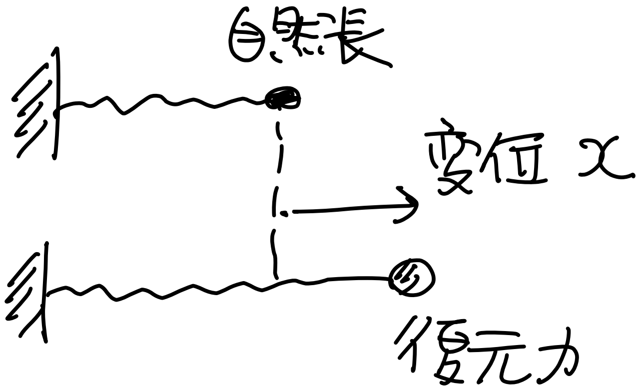
2020/12/01

今回のテーマ

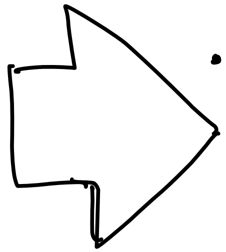
- ばねの熱力学
  - ▷ 熱力学の復習
  - ▷ エントロピー弾性 と エネルギー弾性
  - ▷ エントロピー力
- 統計力学としての問題設定
  - ▷ 具体的設定

~ Intermission ~

§ ばねの熱力学



- $k(T)$ を決めよ.
- 熱力学現象を議論せよ.



フックの法則: $f = -k(T)\,x$

熱容量(変位固定)

$$C \equiv \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_x = C_0 \quad (\text{定数})$$

§ ばねの自由エネルギー

$$F(T,x) - F(T,0) = -\int_0^x f(T,x')\,dx'$$

$$= k(T)\int_0^x x'\,dx' = \frac{k(T)}{2}x^2$$

高校物理の
'位置エネルギー'

$k(T) > 0$

$dF = -S\,dT - f\,dx$

$\Downarrow$

$$S(T,x) - S(T,0) = -\frac{1}{2}k'(T)x^2$$

$C(T,x) = C_0$

$C = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_x$

$\Downarrow$

$$C(T,x) - C(T,0) = -\frac{T}{2}k''(T)x^2 \quad = 0$$

$$k''(T) = 0$$

$$\Longrightarrow k(T) = k_0 + k_1 T$$

k_0, k_1 は定数

§ ばねの内部エネルギー

$$F(T, x) - F(T, 0) = \frac{1}{2}(k_0 + k_1 T)x^2$$

$$S(T, x) - S(T, 0) = -\frac{1}{2}k_1 x^2 \quad \leftarrow \quad \underline{F = U - TS}$$

$$\Rightarrow U(T, x) - U(T, 0) = \frac{1}{2}k_0 x^2 \quad \leftarrow \quad C_0 = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_x$$

$$\underline{U(T, x) = C_0 T + \frac{1}{2}k_0 x^2} \quad //$$

§ ばねのエントロピー

$$T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_x = C_0 \Rightarrow S(T, x) - S(T_*, x) = C_0 \log\frac{T}{T_*}$$

$$S(T, x) = S(T, 0) - \frac{1}{2}k_1 x^2$$
$$= S(T_*, 0) + C_0 \log\frac{T}{T_*} - \frac{1}{2}k_1 x^2$$
$$= \text{const} + C_0 \log T - \frac{1}{2}k_1 x^2$$

//

$$= \int_{T_*}^{T} dT \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_x = \int_{T_*}^{T} dT \frac{C_0}{T} = C_0 \log T \Big|_{T_*}^{T}$$

~ Intermission ~

§ ばねを急に伸ばしたときの温度変化

何に比べて"急に" ⇒ 周囲の環境(空気)と熱交換するより速く

⟺ 断熱環境

断熱準静的過程とみなす。

$$\Rightarrow \quad (T_0, 0) \xrightarrow{\text{aq}} (T(x), x)$$

$$\Longleftrightarrow \quad S(T_0, 0) = S(T(x), x)$$

$T(x)$ の決定

§ 計算

$$S(T, x) = C_0 \log T - \frac{1}{2} k_1 x^2 + \mathrm{const}$$

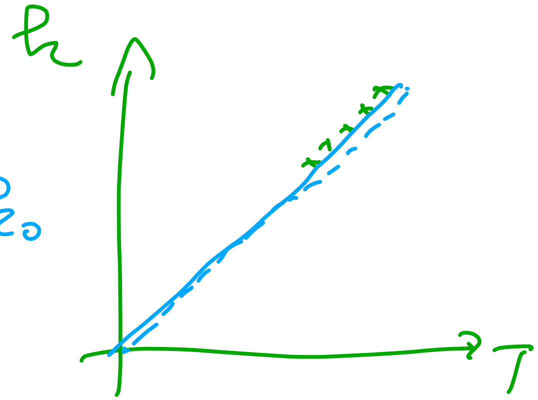
$$S(T_0, 0) = S(T(x), x)$$

$$\Longleftrightarrow \quad C_0 \log T_0 = C_0 \log T(x) - \frac{1}{2} k_1 x^2$$

$$T(x) = T_0 e^{\frac{k_1}{2C_0} x^2}$$

$$k(T) = k_0 + k_1 T > 0$$

§ 実験



ゴム

$k_0 \ll k_1 T$

$k_0 \simeq 0$

$$\Delta F = \frac{1}{2} k x^2$$

$$\Delta U = 0$$

$$\Delta S = -\frac{k_1}{2} x^2$$

$$T(x) = T_0 e^{\frac{k_1}{2C} x^2}$$

エントロピー弾性

金属

$k_1 T \ll k_0$

$k_1 \simeq 0$

$$\Delta F = \frac{1}{2} k x^2$$

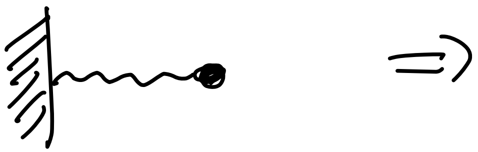
$$\Delta U = \frac{1}{2} k x^2$$

$$\Delta S = 0$$

$$T(x) = T_0$$

エネルギー弾性

§ゴムの描像？

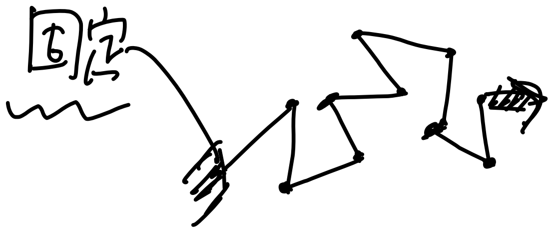


ミクロなバネがつながっているなら，
（原子スケール）
引っ張るとエネルギーが溜まる $\underline{\Delta U > 0}$

- マクロに引っ張っても $\Delta U = 0$
- 復元力が働く $f > 0$

？？？

§ 力の創発



・自由に回転できる剛体棒

・マクロに伸ばしても、$\Delta U = 0$

・復元力は働く

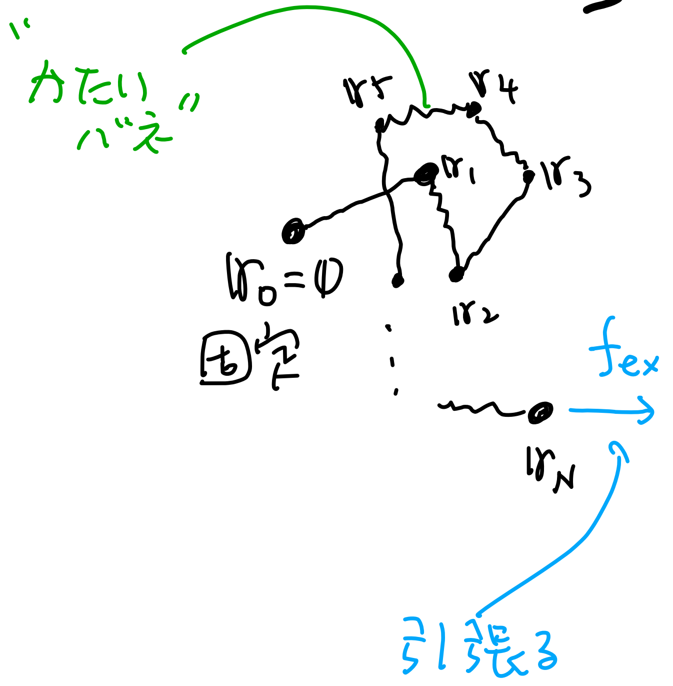
エントロピーが増大する方向に力が働く

エントロピー力!!

⇒ 統計力学へ

~ Intermission ~

§ 設定



$$\Gamma = (r_1, r_2, \cdots, r_N, p_1, \cdots, p_N)$$

$$H(\Gamma; f_{ex}, N) = \sum_{i=1}^{N} \frac{|p_i|^2}{2m} + \sum_{i=1}^{N} \frac{K}{2}\left(|r_i - r_{i-1}| - a\right)^2 - f_{ex} x_N$$

- $\beta K a^2 \gg 1 \quad ; \beta = \frac{1}{k_B T}$

$$r_i = (x_i, y_i, z_i)$$

$$X \equiv \langle x_N \rangle^{c}_{\beta, f_{ex}} = \int d\Gamma \, x_N \, \rho^{c}_{\beta, f_{ex}}(\Gamma)$$

マクロな変位

$$\rho^{c}_{\beta, f_{ex}}(\Gamma) \equiv \frac{1}{Z(\beta, f_{ex}, N)} e^{-\beta H(\Gamma; f_{ex}, N)}$$

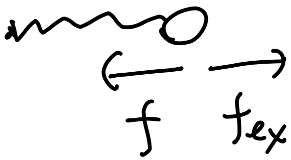
§ 計算すべきこと

$$X \equiv \frac{1}{k_{macro}} f_{ex} + o(f_{ex}\beta a)$$

マクロなバネ定数 k_{macro} を求める。

cf: 復元力 $f = -k_{macro} X$

$$(f + f_{ex} = 0)$$



結果　$k_{macro} = k_1 T$!!

→ 来週！

~ Intermission ~

§ まとめ

- ばねの熱力学

  エントロピー弾性 vs エネルギー弾性

  (ゴム)　(金属)

- エントロピー力を微視的力学から考える設定

  「力の創発」という現象

  統計学のダイゴミ…．

レポート

- 運動方程式を計算機を使って解くことにより、
  マクロなばね定数 k_{macro} を計算せよ。