統計力学A/2015年度試験 /担当 佐々

2016/01/26 10:30-11:50 実施 教科書・ノート持ち込み不可

以下の問題I, II, IIIに答えよ。問題全体に渡って、k_{B}をボルツマン定数とする。また、$\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$によって$\beta$と$T$は常に関係しているとする。$N$は十分に大きな数とする。

問題I. 古典力学に従うN粒子系に対して、i番目の粒子の位置を$\boldsymbol{r}_i$, 運動量を$\boldsymbol{p}_i$と書き、そのミクロな力学状態を$\Gamma = (\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N, \boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \cdots, \boldsymbol{p}_N)$と記す。この系のハミルトニアンを$H(\Gamma)$と書く。$N$個の粒子は一辺$L$の立方体の「理想的な箱」に閉じ込められており、外から孤立していると考えてよいとする。つまり、$\boldsymbol{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$に対して領域$0 \le x_i, y_i, z_i \le L$の外では$H(\Gamma) = \infty$であり、粒子はニュートンの運動方程式に従う。この系の保存量は$H(\Gamma)$しかないとする。以下の空欄を埋めたものを解答用紙に書け。どの空欄の記号と答えの組み合わせが分かるように解答を作成すること。答えだけでよい。

(i) 保存量$H(\Gamma)$の値をEに決める。系が平衡状態にあると考えられるとき、力学状態Γは、「ある確率分布」にしたがってサンプルした力学状態と区別がつかない。これは$\boxed{\text{(a)}}$の原理とよばれる。その確率分布を$P_E^{\mathrm{mc}}(\Gamma)$と記すと、デルタ関数$\delta(H(\Gamma) - E)$を使って、$P_E^{\mathrm{mc}}(\Gamma) = \boxed{\text{(b)}}$と書ける。ここで、規格化定数を$\Sigma(E, V)$とした。$V$は箱の体積である。つまり、$V = L^3$である。エネルギー一定面$H(\Gamma) = E$に囲まれる領域の体積を$\Omega(E, V)$とすると、$\Sigma(E, V)$は$\Omega(E, V)$から$\boxed{\text{(c)}}$と求まる。

(ii) 平衡状態における巨視的物理量の確定値は、$P_E^{\mathrm{mc}}(\Gamma)$によるその物理量の期待値によって計算される。特に、エントロピー$S(E, V)$を$\Omega(E, V)$によって$\boxed{\text{(d)}}$と定義することにより、熱力学の基本関係式$dE = \boxed{\text{(e)}}dS - \boxed{\text{(f)}}dV$を導出することができる。ここで、温度$T$は熱接触で等しくなる物理量で理想気体の場合に絶対温度と等しくなるように選ばれたものであり、圧力pは体積を変えるときのエネルギー変化を通じてミクロな力学から定義されたものである。

(iii) 例題として希薄気体で粒子間相互作用が無視できる場合を考えよう。つまり、$H(\Gamma) = \sum_{i=1}^N \boldsymbol{p}_i^2/(2m)$である。$V/N$, E/Nを一定に保ったまま、N, E, Vが十分大きくとったときの$\Omega(E, V)$の漸近形は

$$\frac{\Omega(E, V)}{N!} = \mathrm{e}^{N\omega\left(\frac{E}{N}, \frac{V}{N}\right) + o(N)} \tag{1}$$

とかける。$\omega(E/N, V/N)$を計算すると$\boxed{\text{(g)}}$となる。この結果から、Tとpを$(E/N, V/N)$の関数として得ることができる。$u = E/N$, $v = V/N$とし、T, pを(u, v)の関数として具体的に計算すると、Tは$\boxed{\text{(h)}}$、pは$\boxed{\text{(i)}}$になる。

問題II. N個の質点がばねで連結した模型を考える。ミクロな力学状態$\Gamma = (q, p)$で$q = (\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$, $p = (\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \cdots, \boldsymbol{p}_N)$に対して、考える模型のハミルトニアンを

$$H_0(\Gamma) = \frac{1}{2m}\sum_{i=1}^N |\boldsymbol{p}_i|^2 + \frac{k_0}{2}\sum_{i=1}^N (|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_{i-1}| - a)^2 \tag{2}$$

とする。ただし、$\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{0}$は力学座標ではなく、ひとつの端が原点に固定されていることを表す。aは正の実数で隣接粒子対をつなぐばねの自然長をあらわす。k_0はばね定数である。また、この系に対して、止めていない端に一定外力fをx軸に沿って加える。$f \ge 0$とする。この場合のハミルトニアンを

$$H_f(\Gamma) = H_0(\Gamma) - f x_N \tag{3}$$

と書く。x_Nは$\boldsymbol{r}_N$のx座標である。このときΓの分布として

$$P_{\beta,f}^{\mathrm{c}}(\Gamma) = \frac{1}{\Xi(T, f)}\mathrm{e}^{-\beta H_f(\Gamma)} \tag{4}$$

を仮定することで温度Tの平衡状態における物理量を求めることができる。特に、熱力学量については、

$$G(T, f) \equiv -k_{\mathrm{B}}T \log \Xi(T, f) \tag{5}$$

から全てを決定できる。以下の問いに答えよ。

(i) x_N の期待値 $X(T,f)$ を $G(T,f)$ を使って表わせ。結果だけでなく導出過程も記すこと。

(ii)$\Sigma(\tilde{E},f)\equiv\int d\Gamma\delta(H_f(\Gamma)-\tilde{E})$ と定義すると、エントロピーは $S(\tilde{E},f)=k_{\mathrm{B}}\log\Sigma(\tilde{E},f)$ と計算されることが分かる。エントロピー $S(\tilde{E},f)$ と $G(T,f)$ の関係を説明せよ。結果だけでなく導出過程も記すこと。

(iii)$\Xi(T,f)=\int d\Gamma\mathrm{e}^{-\beta H_f(\Gamma)}$ とかけるが、p に関する積分と q に関する積分

$$\Xi(T,f)=\Xi_{\mathrm{kin}}(T)\Xi_{\mathrm{con}}(T,f) \tag{6}$$

に分けることができる。具体的に

$$\Xi_{\mathrm{kin}}(T)=\int dp\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{2m}\sum_{i=1}^{N}|\boldsymbol{p}_i|^2} \tag{7}$$

である。$\Xi_{\mathrm{kin}}(T)$ を求めよ。結果だけでよい。

(iv) 「硬いバネ」を表す極限 $\beta k_0 a^2\gg 1$ を先に考えて、$|\boldsymbol{r}_{i+1}-\boldsymbol{r}_i|=a$ という拘束条件を満たす系とみなす。f が十分に小さいとき、$X(T,f)=fK^{-1}$ と書くことができる。ばね定数 K の温度依存性を説明せよ。結果だけでなく導出過程も記せ。(結果だけ覚えている場合にはそれを書くことで部分点がある。)

(v)$\tilde{E}=\tilde{E}(T,f)$ と変位 $X=X(T,f)$ をつかって、エントロピー $S(\tilde{E},f)$ を (T,X) の関数として表せる。前問と同じ極限で、エントロピー $S(T,X)$ は、

$$S(T,X)=S_{\mathrm{kin}}(T)+S_{\mathrm{con}}(X) \tag{8}$$

と分解される。$S_{\mathrm{kin}}(T)$ は T の増加関数であり、$S_{\mathrm{con}}(X)$ は $X>0$ で X の減少関数であることを確かめることができる。さて、最初、このバネは温度 T_0 の平衡状態にあって自然長にある $(X=0)$ とせよ。バネを孤立化させたのち、ゆっくりとひっぱる。変位が X のときの温度を $T(X)$ と記す。$T(X)$ と T_0 の関係を決める式を書き、その大小関係について議論せよ。

III　質量 m, 半径 a の球を N 個用意し、水が入った容器に入れる。ここで、半径 a は 10^{-4}cm とし、微粒子とよばれる。微粒子の密度は水の密度よりも大きいとすると、重力により微粒子は沈降する。重力加速度を g とする。容器の底を $z=0$ とし、N が十分大きいときに観測される微粒子の z 方向の数密度場 $\rho(z)$ を統計力学によって求めたい。

(i) まず、N 個の微粒子の重心の力学座標 $\Gamma=(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N,\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\cdots,\boldsymbol{p}_N)$ が平衡統計力学に従うとする。この際、水の自由度など Γ 以外の力学自由度は全て温度一定の熱浴だとみなす。Γ の分布は

$$P_\beta^{\mathrm{c}}(\Gamma)=\frac{1}{Z}\mathrm{e}^{-\beta\sum_i\left(\frac{|\boldsymbol{p}_i|^2}{2m}+\tilde{m}gz_i\right)} \tag{9}$$

で与えられる。ただし、$z_i\geq 0$ で定義され、x_i, y_i も容器の領域に制限されていることに注意せよ。Z は規格化因子である。z_i は i 番目の粒子の位置の z 座標であり、$\tilde{m}$ は微粒子の有効質量である。微粒子の重力によるポテンシャルエネルギーの寄与に有効質量が関わる理由を説明し、必要な物理量を適宜定義し $\tilde{m}$ を与えよ。

(ii) 与えられた微粒子の力学状態 Γ に対して、微粒子の数密度場は

$$\hat{\rho}(z;\Gamma)=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\delta(z_i-z) \tag{10}$$

で定義される。観測される数密度場は Γ に関して $P_\beta^{\mathrm{c}}(\Gamma)$ で期待値をとったものなので、

$$\rho(z)=\int d\Gamma P_\beta^{\mathrm{c}}(\Gamma)\hat{\rho}(z;\Gamma) \tag{11}$$

と定義される。この積分を具体的に計算することにより、$\rho(z)$ を求めよ。