統計力学第一

土井正男教員

2008/07/29

1. 体積 V, 温度 T の箱の中の気体を考える。箱は化学ポテンシャル μ の粒子浴とつながっており,箱の中の分子の数 N は変動するものとする。箱の中に N 個の分子が入っているときの分配関数を $Z_N(T,V)$ とすると,箱の中に N 個の粒子が入っている確率 P_N は次のように書ける。

$$P_N = \frac{1}{\Xi} Z_N e^{\beta \mu N}$$

ここで $\beta=1/k_BT$ で、 Ξ は次の式で定義される大分配関数である.

$$\Xi(T, V, \mu) = \sum_{0}^{\infty} Z_N e^{\beta \mu N} = \sum_{0}^{\infty} Z_N \xi^N$$

ここで $\xi=e^{eta\mu}$ とおいた. 粒子は古典力学に従うものとして以下の問いに答えよ.

(a) 箱の中の分子の平均密度 $n=\langle N \rangle/V$ は次の式で与えられることを示せ.

$$n = \frac{1}{V\beta} \frac{\partial \ln \Xi}{\partial \mu}$$

- (b) $\partial n/\partial \mu > 0$ であることを示せ.
- (c) 分子は質量 m の単原子分子理想気体であり、かつ分子 i,j の間に働く相互作用ポテンシャルを $u({m r}_i-{m r}_j)$ とすると、N 個の分子からなる系のハミルトン関数は次のようになる.

$$H_N = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=i+1}^{N} u(r_i - r_j)$$

分配関数 Z_N は次のように書ける.

$$Z_N = \frac{N! \lambda_T^{3N}}{\int} d\boldsymbol{r}_1 \cdots d\boldsymbol{r}_N \exp[-\beta \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N u(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j)]$$

熱波長 λ_T を m,\hbar を用いて表せ.

- (d) $\xi \ll 1$ のときには、 $\Xi = 1 + Z_1 \xi$ と近似できる.この近似のもとで化学ポテンシャル μ を計算し、それが理想気体に対するカノニカル分布を用いて計算した結果と一致することを示せ.
- (e) 粒子が直径 a の剛体球である場合, u(r) は次のように書ける.

$$u(\mathbf{r}) = \begin{cases} \infty & |\mathbf{r}| < a \\ 0 & |\mathbf{r}| > a \end{cases}$$

 Z_2 を計算せよ.

- (f) $\xi \ll 1$ の場合, $\Xi = 1 + Z_1 \xi + Z_2 x i^2$ と近似し, n を ξ の 2 次の項まで求めよ. また, その結果を用いて, 剛体粒子からなる気体の化学ポテンシャルは同じ数密度の理想気体の化学ポテンシャルに比べて大きくなるか, 小さくなるかを議論せよ.
- 2. 体積 V の立方体状の箱の中に N 個のフェルミ粒子が閉じ込められている。粒子は質量 m の理想フェルミ粒子であるとして、以下の問いに答えよ。
 - (a) この系の 1 粒子状態密度 $D(\epsilon)$ は次のように書ける.

$$D(\epsilon) = AV\epsilon^{1/2}$$

定数 A を m,\hbar を用いて表せ.

- (b) $e^{\beta\mu}\gg 1$ の場合、粒子の化学ポテンシャル μ を A,N,V を用いて表せ.
- (c) $e^{\beta\mu}\ll 1$ の場合、粒子の化学ポテンシャル μ を A,N,V を用いて表せ、また、その結果を古典統計を用いて求めた化学ポテンシャルの表式と比較せよ、
- 3. 2次元平面内に (0,0),(1,0),(1,1),(0,1) を頂点とする正方形を描き、その中に点を一様にランダムに置く、点の面密度を n として以下の問いに答えよ、
 - (a) 任意に点を選んでその極座標を (r,θ) とする. θ の累積確率分布関数 $Q(\theta)$ と、確率密度関数 $P(\theta)$ を求め、グラフに表せ.
 - (b) 任意の点を中心に半径 r の円を描いたとき、この円の中に他の点が入っていない確率 P(r) を求めよ. $r\ll 1$ としてよい.
 - (c) 任意の点からそれにもっとも近い点までの距離 r_m の平均値 $\langle r_m \rangle$ を求めよ. $n \gg 1$ としてよい.