統計力学第一

土井正男教員

2007/07/31

1. 体積 V, 温度 T の箱に閉じ込められた, r 種類の分子からなる理想気体を考える. 分子は質量 $m_a(a=1,2,\cdots)$, 内部エネルギー (分子自身の化学結合エネルギー)ϵ_a を持つ古典的な粒子であるとみなす. プランク定数を $\hbar$ とし, 古典近似の下で以下の問に答えよ.
   (a) それぞれの分子の数を N_a とすると, 系のハミルトン関数は次のようになる.
   $$\sum_{a=1}^{r}\sum_{i=1}^{N_a}\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}_{a,i}^2+\sum_{a=1}^{r}N_a\epsilon_a$$
      i. 古典統計に基づいて, この系の分配関数を計算せよ.
      ii. この系の圧力 P と, 分子の化学ポテンシャル μ_a を計算せよ.
   (b) 2 種類の分子 A, B からなる理想気体を考える. 分子 A と B は次の化学反応によって移り変わるとする.
   $$A \leftrightarrow 2B$$
   系の中には, 最初, N 個の A 分子のみが入っていたとし, 以下の問に答えよ.
      i. A 分子の中で分解した分子の割合を x とすると, 次の式が成り立つ.
      $$\frac{1-x}{x^2}=Kn$$
      ここで $n=N/V$ は A 分子の初期数密度である. 定数 K を求めよ.
      ii. この系の圧力 P と n の関係を求め, その概略をグラフに表せ.
2. 質量 m, スピン 1/2 の粒子の一次元運動を考える. 粒子は長さ L の箱の中に閉じ込められており, 大きさ B の磁場がかかっている. 粒子のエネルギー固有状態は二つの量子数 (n,σ) で指定され, そのときのエネルギーは次のように書くことができる.
   $$\epsilon_{n,\sigma}=\epsilon n^2-\mu B\sigma$$
   ここで n は $1,2,3,\cdots$ の値をとり, σ は 1 または -1 の値を取る. ここで $\epsilon \gg \mu B$ であるものとする. 系の温度を T, $\beta=1/k_BT$ とし, 以下の問に答えよ.
   (a) ϵ を $m,\hbar,L$ を用いて表せ.
   (b) 箱の中に粒子が一つある場合を考える.
      i. $\beta\epsilon \ll 1$ のとき, 系の分配関数を求め, 古典近似を用いて計算したものと一致するかどうかを議論せよ.
      ii. $\beta\epsilon \gg 1$ のとき, 系が基底状態 $(1,1)$ にある確率 P_g, 第一励起状態 $(1,-1)$ にある確率 P_e を求めよ.

iii. $\beta\epsilon \gg 1$ のとき, スピン量子数 σ の熱平均 $<\sigma>$ を求め, B の関数としてグラフに表せ.

(c) 箱の中に二つの粒子がある場合を考える. 粒子の間の相互作用は無視できるものとする. 系の固有状態は, 量子数の組 $(n_1, \sigma_1, n_2, \sigma_2)$ で表される.

i. 系の基底状態のエネルギー E_g, および, 第一励起状態のエネルギー E_e を求めよ.

ii. $\beta\epsilon \gg 1$ のとき, スピン量子数の和の熱平均 $<\sigma_1 + \sigma_2>$ を求め, (b) における結果と比較せよ.

3. $x_i (i = 1, 2, \cdots, N)$ は互いに独立に次の確率密度分布に従う.

$$P(x_i) = a \exp(-a x_i) \; x_i \geq 0$$

互いに独立な確率変数であるとする.

(a) $x = (x_1 + x_2)/2$ の確率密度関数を求めよ.

(b) $(\sum_{i=1}^{N} x_i)/N$ の確率密度関数を求めよ.