2008 年度統計力学 II 宿題 11 (7 月 2 日出題、7 月 9 日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] ボース粒子からなる同核 2 原子分子の分配関数がなぜ $r_e z_S + r_o z_A$ になるか説明し、(8.10)〜(8.12) と同様に低温での比熱の式を導け。$r_e$、$z_S$、$r_o$、$z_A$ は授業と同じ記号、慣性モーメントテンソルを $I$、スピンを $s_A$ とする。

[解答](実際の解答にはここまで計算を丁寧に書かなくて良い。)

波動関数の対称性 (「授業ノート 2」P1-2、教科書 P110 から P111) から、粒子の入れ替えに対して、全波動関数の符号は変わらない。ここで、全波動関数は、位置に対してだけでなくスピンも考えるので、次の 2 つの可能性がある。

1. 位置の波動関数は対称 (粒子の入れ替えに対して符号を変えない) で、かつスピンについても対称。
2. 位置の波動関数は反対称 (粒子の入れ替えに対して符号を変える) で、かつスピンについても反対称。

分配関数は、**全ての可能性について足し合わせる**ので、それぞれの可能性に対応する分配関数を $j_1$、$j_2$ とすると、

$$j_{\text{rot-nu}} = j_1 + j_2 \tag{1}$$

となる。

位置のエネルギー固有値について、対称のものだけ足し合わせた分配関数を $r_e$、反対称だけ足し合わせた分配関数を $r_o$ とする。スピンについても同様に $z_S$ と $z_A$ を定義すると、$j_1$、$j_2$ それぞれでは位置とスピンは独立なので積で書ける。つまり、

$$j_1 = z_S r_e \tag{2}$$
$$j_2 = z_A r_o \tag{3}$$

これらから $j_{\text{rot-nu}} = z_S r_e + z_A r_o$ が導ける。

比熱は、低温なので教科書 P127 の $r_e$ と $r_o$ のうち、宿題 9 と同様に $J > 1$ を無視すると、

$$r_e = 1 + \cdots \tag{4}$$
$$r_o = 3e^{-2\Theta/T} + \cdots \tag{5}$$

$j_{\text{rot-nu}}(T) = z_S r_e + z_A r_o$ に (4) 式と (5) 式を代入

$$j_{\text{rot-nu}}(T) = z_S + z_A 3e^{-2\Theta/T} + \cdots \tag{6}$$

授業で説明したように (教科書 P126)$z_S = (S_A+1)(2S_A+1)$、$z_A = S_A(2S_A+1)$ から

$$= (S_A+1)(2S_A+1) + 3S_A(2S_A+1)e^{-2\Theta/T} + \cdots \tag{7}$$

対数をテーラー展開すると、$\ln(1+x) = x + \cdots$ だから、

$$\begin{aligned}
&\ln j_{\text{rot-nu}}(T) \\
&= \ln\{(S_A+1)(2S_A+1) + S_A(2S_A+1)3e^{-2\Theta/T} + \cdots\} && (8)\\
&= \ln\left[(S_A+1)(2S_A+1)\left\{1 + \frac{3S_A}{(S_A+1)}e^{-2\Theta/T} + \cdots\right\}\right] && (9)\\
&= \ln(S_A+1)(2S_A+1) + \ln\left\{1 + \frac{3S_A}{(S_A+1)}e^{-2\Theta/T} + \cdots\right\} && (10)\\
&= \ln(S_A+1)(2S_A+1) + \frac{3S_A}{(S_A+1)}e^{-2\Theta/T} + \cdots && (11)
\end{aligned}$$

これを使うと、

$$\begin{aligned}
E &= -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln j_{\text{rot-nu}}(T) && (12)\\
&= -\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\ln(S_A+1)(2S_A+1) + \frac{3S_A}{(S_A+1)}e^{-2\Theta/T} + \cdots\right) && (13)\\
&= -\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\frac{3S_A}{(S_A+1)}e^{-2\beta k_{\mathrm{B}}\Theta} + \cdots\right) && (14)\\
&= \frac{3S_A}{(S_A+1)}(2k_{\mathrm{B}}\Theta)e^{-2\beta k_{\mathrm{B}}\Theta} + \cdots && (15)
\end{aligned}$$

比熱は、

$$\begin{aligned}
C_v &= \frac{\partial E}{\partial T} && (16)\\
&= \frac{6S_A}{(S_A+1)}k_{\mathrm{B}}\Theta\frac{2\Theta}{T^2}e^{-2\Theta/T} + \cdots && (17)
\end{aligned}$$

[問題 2.] 低温の時 (8.5) 式の大きい $J$ の項は、無視できることを示せ。

[解答] (8.5) 式で $T << \Theta$ を考える。

$$\frac{\Theta}{T} >> 1 \text{ だから、} X \equiv \exp[-\frac{\Theta}{T}] \text{ は、小さい。つまり、} X << 1 \tag{18}$$

$$\exp[-J(J+1)\frac{\Theta}{T}] = X^{J(J+1)} \text{で、今、} X << 1 \text{ だから、} \tag{19}$$

$$X^{J(J+1)} \text{は、} \boxed{J \text{ が大きいほど小さい。}} \tag{20}$$

つまり、$T << \Theta$ の時は、$J$ の大きい項は無視できる。