2009 年度統計力学 II 宿題 9 (6 月 24 日出題、7 月 1 日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] 異核 2 原子分子 1 個の分配関数が $Z_1 = Z_G j_{rot} Z_S$ の時、1 分子あたりの比熱が $C_V = C_{V,G} + C_{V,rot} + C_{V,S}$ となることを示し、特に $C_{V,rot}$ については、(8.10) 式を使って[*1] (8.12) 式を導け。添字の G, rot, S は重心、回転、スピンを表す。また、$x << 1$ で $\ln(1+x) \simeq x$ を使え。

[解答] [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。)

教科書 P55(4.17) 式から

$$\boxed{E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_1} \tag{1}$$

ここで、$\beta = 1/(k_{\rm B}T)$ とした。$Z_1 = Z_G j_{rot}(T) Z_S$ だから

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z_G j_{rot}(T) Z_S) \tag{2}$$

対数の公式から、

$$= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_G - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln j_{rot}(T) - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_S \tag{3}$$

$\epsilon_G \equiv -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_G$、$\epsilon_{\rm rot} \equiv -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln j_{rot}(T)$、$\epsilon_S \equiv -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_S$ とすると、

$$= \epsilon_G + \epsilon_{\rm rot} + \epsilon_S \tag{4}$$

これは、エネルギーが 3 つの自由度の寄与の和で書ける事を表している。

一方、比熱は、P9 の (1.30) 式

$$\boxed{C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V} \tag{5}$$

[*1] プリントは「から」になっていましたが、「を使って」の意味です。

(4) 式を代入すると、

$$= \frac{\partial \epsilon_G}{\partial T} + \frac{\partial \epsilon_{\mathrm{rot}}}{\partial T} + \frac{\partial \epsilon_S}{\partial T} \tag{6}$$

$C_{VG} = \partial \epsilon_G / \partial T$、$C_{V\mathrm{rot}} = \partial \epsilon_{\mathrm{rot}} / \partial T$、$C_{VS} = \partial \epsilon_S / \partial T$ とすれば、答えが示せる。

(8.12) 式は、$\Theta = \hbar^2/(2Ik_{\mathrm{B}})$ とすると、

$$j_{rot}(T) = \sum_{J=0}^{\infty} (2J+1) \exp[-J(J+1)\frac{\Theta}{T}] \tag{7}$$

ここで、$T << \Theta$ を考えると、J の大きい項は無視できる (次回問題 2 参照)。

$J > 1$ を無視すると、

$$j_{rot}(T) = 1 + 3\exp[-2\frac{\Theta}{T}] \tag{8}$$

(1) 式から、

$$\epsilon_{\mathrm{rot}} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln j(T) \tag{9}$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left(1 + 3\exp[-2\frac{\Theta}{T}] \right) \tag{10}$$

$x << 1$ の時の公式 $\ln(1+x) = x + \cdots$ から、

$$= -\frac{\partial}{\partial \beta} \left(3\exp[-2\frac{\Theta}{T}] + \cdots \right) \tag{11}$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \beta} (3\exp[-2\beta k_{\mathrm{B}}\Theta] + \cdots) \tag{12}$$

$$= 6k_{\mathrm{B}}\Theta \exp[-2\beta k_{\mathrm{B}}\Theta] + \cdots \tag{13}$$

(5) 式から、

$$C_{V\mathrm{rot}} = N\frac{\partial \epsilon_{\mathrm{rot}}}{\partial T} \tag{14}$$
$$= N\frac{\partial}{\partial T}\left(6k_{\mathrm{B}}\Theta \exp[-2\beta k_{\mathrm{B}}\Theta] + \cdots\right) \tag{15}$$
$$= N\frac{\partial}{\partial T}\left(6k_{\mathrm{B}}\Theta \exp[-2\frac{\Theta}{T}] + \cdots\right) \tag{16}$$
$$= 6Nk_{\mathrm{B}}\Theta\frac{2\Theta}{T^2}e^{-2\Theta/T} + \cdots \tag{17}$$

(8.12) 式が導ける。

[問題 2.] 光子の数は人間には制御出来ないが、熱力学の原理によって決まると、授業中に説明した。具体的に理想ボース気体の統計力学を使って (平均の) 粒子数を求めなさい。ただし、$\omega > 0$ の光子の粒子数とする。[*2]

[解答] 授業中に説明した様に、熱力学の原理より化学ポテンシャル μ は 0 だから、状態密度を $\tilde{D}(\epsilon)$ として、問題 1 と同じ様に (10.5) 式を使うと

$$\langle N\rangle_{\omega>0} = \int_0^\infty \frac{\tilde{D}(\epsilon)}{\exp[\beta\epsilon]-1}d\epsilon \tag{18}$$

ω に変数変換すると、

$$= \int_0^\infty \frac{D(\omega)}{\exp[\beta\hbar\omega]-1}d\omega \tag{19}$$

$D(\omega) = V\omega^2/(\pi^2 c^3)$ を代入すると

$$= \int_0^\infty \frac{V\omega^2}{\pi^2c^3}\frac{1}{\exp[\beta\hbar\omega]-1}d\omega \tag{20}$$
$$= \frac{V}{\pi^2c^3}\int_0^\infty \frac{\omega^2}{\exp[\beta\hbar\omega]-1}d\omega \tag{21}$$

[*2] 訂正: プリントの問題文はこの但し書きが抜けていました。申し訳ありません。訂正して下さい。$\omega = 0$ のものは BEC と同じ事情で熱力学を使っても決めれません。

$x = \beta\hbar\omega$ に変数変換すると、

$$= \frac{V}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \frac{(k_{\mathrm{B}}T)^2 x^2}{\hbar^2} \frac{1}{\exp[x] - 1} \frac{k_{\mathrm{B}}T dx}{\hbar} \tag{22}$$

$$= \frac{V}{\pi^2 c^3} \frac{(k_{\mathrm{B}}T)^3}{\hbar^3} \int_0^\infty \frac{x^2}{\exp[x] - 1} dx \tag{23}$$

ボース-アインシュタイン積分からツェーター関数を使うと、

$$= \frac{V}{\pi^2 c^3} \frac{(k_{\mathrm{B}}T)^3}{\hbar^3} \Gamma(3)\zeta(3) \tag{24}$$