

10月24日(2017) 学修相談実施報告

来室学生

三回生 男子 一名

四回生 男子 一名

計二名

質問内容

三回生

1. マッカーリー・サイモンの 17, 18 章(統計熱力学の範囲)を授業で習い始めた。分配関数を用いて n モルの単原子気体のエネルギー $\langle E \rangle$ が次式で与えられること示すよう、課題が出されたが、考え方がよくわからないので教えてほしい。

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2}nRT$$

四回生

1. 課題として与えられた論文を読んでいて、「スピノーダル分解」という用語が出てきたが、具体的にどのような事柄を指すのかわからないので聞きにきた。

回答内容

三回生

1. 統計熱力学は、エネルギー準位等、分子 1 個についての知識(ミクロな知識)に基づいて、1 モルの分子が示す性質(マクロな性質)を導き出す方法であることを簡単に説明した後、学生にとっては課題に答えることが先決であると考えたので、以下の 3 つの式をまず定義として覚えるように言った。式の番号はテキストの式の番号。

(i) 分配関数の定義式

$$Q(N, V, \beta) = \sum_i e^{-\beta E_i(N, V)} \quad (17.14)$$

(ii) エネルギー準位 E_i を占める分布確率 p_i の定義

$$p_i(N, V, \beta) = \frac{e^{-\beta E_i(N, V)}}{Q(N, V, \beta)} \quad (17.15)$$

(iii) 比例定数の定義

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad (17.16)$$

そうすると、分布確率 p_i がわかっているのので、系の(平均)エネルギー $\langle E \rangle$ は次式で表わされること、

$$\langle E \rangle = \sum p_i \times E_i$$

この式に p_i の定義式を代入して得られる式は、分配関数の対数をとった $\ln Q(N, V, \beta)$ を β で偏微分して得られる式と一致すること、即ち次式の関係が得られること、を筋道としてまず覚えればよい。

$$\langle E \rangle = - \left(\frac{\partial \ln Q}{\partial \beta} \right)_{N,V} \quad (17.20)$$

$\langle E \rangle$ を具体的に計算するには、 Q を系に即して表わさなければならないが、単原子(理想)気体の場合には、 Q は式(17.22)に (17.23) を代入すればよいので、これらを用いて Q の対数は次式で表わされること、

$$\begin{aligned} \ln Q &= N \ln q - \ln N! \\ &= -\frac{3N}{2} \ln \beta + \frac{3N}{2} \ln \left(\frac{2\pi m}{h^2} \right) + N \ln V - \ln N! \end{aligned}$$

また、得られた式から容易に次式が導かれるので、

$$\left(\frac{\partial \ln Q}{\partial \beta} \right)_{N,V} = -\frac{3N}{2\beta} = -\frac{3}{2} N k_B T$$

結果を式(17.20)に代入して、課題に答えることができる、と回答。最後の 2 つの式については学生が自分で計算できることを確かめた。

アンサンブルの種類(ε_i と E_i など)や分配関数の種類(q と Q など)についての説明は、現段階ではしなかった。

四回生

1. 「スピノーダル分解」については知らない、と回答。 それに言及している論文の箇所を、引用文献か何か手掛りになるものがないか尋ねたが、何もないし、用語を調べたがよくわからないとのことであったので、後で調べてみることにした。

(以上)