

9.4 マクスウェル・ボルツマンの分布

熱学・統計力学要論 (2017)

田中担当クラス

<http://www-het.phys.sci.osaka-u.ac.jp/~tanaka/teaching.html>

第9章 統計力学の考え方

N 個の質点から成る (古典) 系

質点の質量を m として, 全エネルギーは,

$$E(q, p) = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N). \quad (1)$$

以下では, ポテンシャル $V(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N)$ を $V(q)$ と略記する.
温度 T のカノニカル分布で考える.

$$\mathcal{P}^{(C)}(q, p) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(q, p)}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}. \quad (2)$$

式 (1) を代入.

$$\mathcal{P}^{(C)}(q, p) = \frac{1}{Z} e^{-\beta V(q)} \prod_{i=1}^N e^{-\frac{\beta}{2m} \mathbf{p}_i^2}. \quad (3)$$

一方, Z は,

$$\begin{aligned} Z &= \int e^{-\beta E(q,p)} d\Gamma = \int e^{-\beta V(q)} \prod_{i=1}^N e^{-\frac{\beta}{2m} \mathbf{p}_i^2} \frac{d^3 q_1 \cdots d^3 q_N d^3 p_1 \cdots d^3 p_N}{(2\pi\hbar)^{3N}} \\ &= \int e^{-\beta V(q)} \frac{d^3 q_1 \cdots d^3 q_N}{(2\pi\hbar)^{3N}} \left(\int e^{-\frac{\beta}{2m} \mathbf{p}^2} d^3 p \right)^N, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\int e^{-\frac{\beta}{2m} \mathbf{p}^2} d^3 p = \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta}{2m} p^2} dp \right)^3 = \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2}. \quad (5)$$

よって,

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^{(C)}(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N) &\equiv \int \mathcal{P}^{(C)}(q, p) \frac{d^3 q_1 \cdots d^3 q_N}{(2\pi\hbar)^{3N}} \\ &= \left(\frac{\beta}{2\pi m} \right)^{3N/2} \prod_{i=1}^N e^{-\frac{\beta}{2m} \mathbf{p}_i^2}. \end{aligned} \quad (6)$$

つまり，どの質点も等方的な運動量分布を持つ．

$$\mathcal{P}^{(C)}(\mathbf{p}) = \left(\frac{\beta}{2\pi m}\right)^{3/2} e^{-\frac{\beta}{2m}\mathbf{p}^2} = \left(\frac{\beta}{2\pi m}\right)^{3/2} e^{-\frac{\beta}{2m}p_x^2} e^{-\frac{\beta}{2m}p_y^2} e^{-\frac{\beta}{2m}p_z^2}. \quad (7)$$

速度 ($\mathbf{p} = m\mathbf{v}$) の分布に直す．

$$\mathcal{P}^{(C)}(\mathbf{p})d^3p = \mathcal{P}^{(M-B)}(\mathbf{v})d^3v = \mathcal{P}^{(M-B)}\frac{1}{m^3}d^3p, \quad (8)$$

より，

マクスウェル-ボルツマンの (速度) 分布

$$\mathcal{P}^{(M-B)}(\mathbf{v}) = \left(\frac{\beta m}{2\pi}\right)^{3/2} e^{-\frac{\beta}{2}m\mathbf{v}^2} = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2k_B T}\right) \quad (9)$$

任意のポテンシャル $V(q)$ について成り立つ．

エネルギー等分配則

1 自由度 (1 つの質点の 1 方向の運動) の運動エネルギーの期待値は,

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \left(\frac{\beta}{2\pi m} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{2m} e^{-\frac{\beta}{2m} p^2} dp = \frac{1}{2} k_B T. \quad (10)$$

すべての自由度に対して, 同じ期待値 $k_B T/2$ が得られる.

エネルギー等分配則

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2} k_B T \quad (11)$$

質点系が古典力学に従うときの結果.