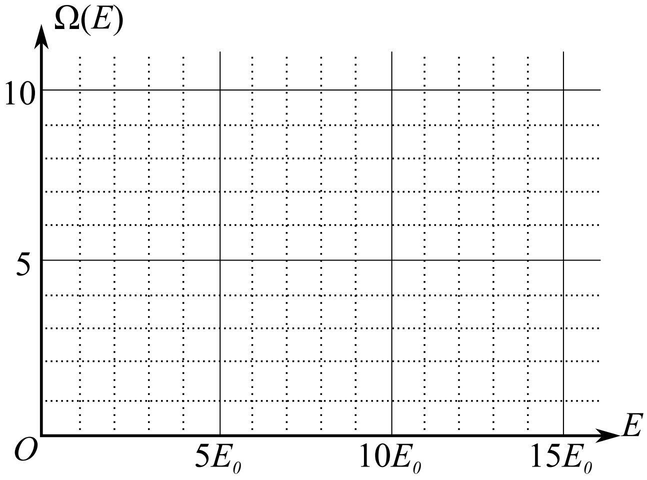
統計力学 (2017 年度：鳴海)　　番号:　　名前:

中間試験 1　1 から 59 の目が均等に出るサイコロを 1 つ投げる．出た目の 2 乗を確率変数 $\hat{f}$ とするとき，期待値 $\left\langle \hat{f} \right\rangle$ を求めよ．必要であれば，公式 $\displaystyle\sum_{i=1}^{n} i^2 = \frac{1}{6}n(n+1)(2n+1)$ を用いなさい．

中間試験 2　エネルギー固有値が $E_{(n_x,n_y)} = E_0\left(n_x^2 + n_y^2\right)$（ただし，$n_x$ と n_y はともに自然数，E_0 はある正の定数）で表されるとき，状態数 $\Omega(E)$ と E の関係を $0 \leq E \leq 15E_0$ についてグラフで表せ．



中間試験 3　状態数が $\Omega(E) = E^3$ で表される孤立系を考える．系のエネルギー U が $10 < U < 20$ であるとき，系がエネルギー固有状態 i である確率 p_i を求めよ．ただし，$10 < U < 20$ を満たすほとんどすべてのエネルギー固有状態は巨視的に共通の性質を持つとせよ．

中間試験 4　低密度の単原子分子理想気体（体積 V，粒子数 N）では，分配関数が $Z = CV^N$（ただし，C は体積に依存しない量）で表される．このとき，理想気体の状態方程式を導け．なお，カノニカル分布では圧力は $P = k_{\mathrm{B}} T \dfrac{\partial}{\partial V} \log Z$（ただし，$T$ は絶対温度）で表される．

中間試験 5　ヘルムホルツの自由エネルギー F は，分配関数 $Z = \sum_i e^{-\beta E_i}$（ただし，$\beta$ は逆温度，E_i はエネルギー固有状態 i でのエネルギー固有値）に対して，$F = -k_{\mathrm{B}} T \log Z$（ただし，$T$ は絶対温度）として定義される．このとき，次の問いに答えよ．

(1)　系がエネルギー固有状態 i である確率を p_i とする．$p_i = e^{\beta(F-E_i)}$ と書けることを示せ．

(2)　エントロピー S は，内部エネルギー U を用いて，$S = -(F-U)/T$ として定義される．このとき，S を k_{B} と p_i を用いて表せ．なお，内部エネルギー U はエネルギー固有値の期待値と等しいとせよ．

中間試験 6　2 つのエネルギー固有状態しか持たない系（逆温度 β）をカノニカル分布で考える．それぞれの固有状態のエネルギー固有値が $-E$，E（ただし，E はある正の定数）であるとき，次の問いに答えよ．

(1)　分配関数 Z を求めよ．

(2)　エネルギー固有値 $-E$，E に対応する確率を p_- と p_+ と表す．p_- と p_+ を求めよ．

(3)　系の内部エネルギー U を求めよ．

(4)　系の絶対温度を T とする．このとき，比熱 $C = \dfrac{dU}{dT}$ を，E，k_{B}，T を用いて表せ．

中間試験 7　N 個の区別できる粒子が含まれる孤立系を考える．i 番目の粒子（$i = 1, 2, \ldots, N$）が有するエネルギーは $n_i \varepsilon_0$（ただし，n_i は 0 以上の整数，ε_0 はある正の定数）と表されるものとする．粒子間の相互作用が無視できるとき，$\boldsymbol{n} = (n_1, \ldots, n_N)$ を用いて系のエネルギー固有状態（これを状態 $\boldsymbol{n}$ と呼ぶ）が定められる．M をある自然数として，次の問いに答えよ．

(1) 系の全エネルギーが ε_0 $\left(\text{つまり,} \displaystyle\sum_{i=1}^{N} n_i = 1\right)$ となる状態の総数は N であることを説明せよ．

(2) 系の全エネルギーが $M\varepsilon_0$ となる状態の総数を求めよ．

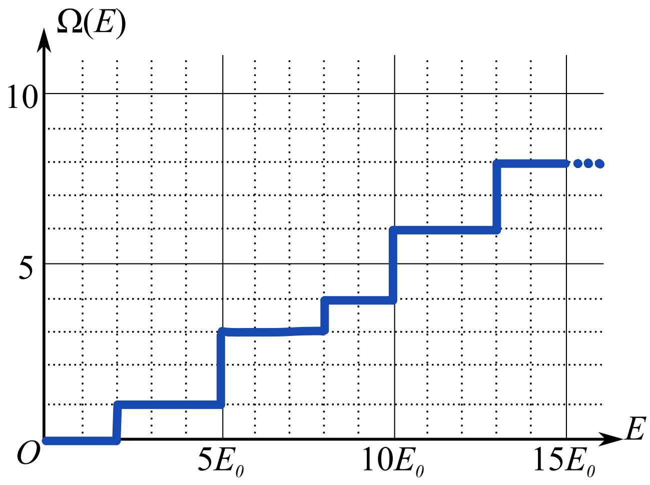
(3) 系の全エネルギーが $M\varepsilon_0$ であるとき，系が状態 $\boldsymbol{n}$ である確率 $p_{\boldsymbol{n}}$ を，等重率の原理を仮定して求めよ．

中間試験 1　1 から 59 の目が均等に出るサイコロを 1 つ投げる．出た目の 2 乗を確率変数 $\hat{f}$ とするとき，期待値 $\langle \hat{f} \rangle$ を求めよ．必要であれば，公式 $\displaystyle\sum_{i=1}^{n} i^2 = \frac{1}{6}n(n+1)(2n+1)$ を用いなさい．

$$\langle \hat{f} \rangle = \sum_{i=1}^{59} i^2 \underbrace{P_i}_{\frac{1}{59}} = \frac{1}{59}\cdot\frac{1}{6}\cdot 59\cdot 60\cdot 119 = 1190$$
〃

中間試験 2　エネルギー固有値が $E_{(n_x,n_y)} = E_0\left(n_x^2 + n_y^2\right)$（ただし，$n_x$ と n_y はともに自然数，E_0 はある正の定数）で表されるとき，状態数 $\Omega(E)$ と E の関係を $0 \le E \le 15E_0$ についてグラフで表せ．

n_x, n_y	$E_{(n_x,n_y)}$
1 , 1	$2E_0$
1 , 2	$5E_0$
2 , 1	$5E_0$
2 , 2	$8E_0$
1 , 3	$10E_0$
3 , 1	$10E_0$
2 , 3	$13E_0$
3 , 2	$13E_0$
3 , 3	$18E_0$
⋮	⋮



〃

中間試験 3　状態数が $\Omega(E) = E^3$ で表される孤立系を考える．系のエネルギー U が $10 < U < 20$ であるとき，系がエネルギー固有状態 i である確率 p_i を求めよ．ただし，$10 < U < 20$ を満たすほとんどすべてのエネルギー固有状態は巨視的に共通の性質を持つとせよ．

$10 < E_i < 20$ となるエネルギー固有状態の個数は

$\Omega(20) - \Omega(10) = 7000$.

よって 等重率の原理を仮定することにより，

$$P_i = \begin{cases} \dfrac{1}{7000} & (10 < E_i < 20) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$
〃

中間試験 4　低密度の単原子分子理想気体（体積 V，粒子数 N）では，分配関数が $Z = CV^N$（ただし，C は体積に依存しない量）で表される．このとき，理想気体の状態方程式を導け．なお，カノニカル分布では圧力は $P = k_{\mathrm{B}}T\dfrac{\partial}{\partial V}\log Z$（ただし，$T$ は絶対温度）で表される．

$\log Z = \log C + N\log V$ より　$\dfrac{\partial}{\partial V}\log Z = \dfrac{N}{V}$

よって　$P = k_B T\dfrac{N}{V} \iff PV = Nk_BT$ ∎

中間試験 5　ヘルムホルツの自由エネルギー F は，分配関数 $Z = \sum_i e^{-\beta E_i}$（ただし，$\beta$ は逆温度，E_i はエネルギー固有状態 i でのエネルギー固有値）に対して，$F = -k_{\mathrm{B}}T\log Z$（ただし，$T$ は絶対温度）として定義される．このとき，次の問いに答えよ．

(1) 系がエネルギー固有状態 i である確率を p_i とする．$p_i = e^{\beta(F-E_i)}$ と書けることを示せ．

(2) エントロピー S は，内部エネルギー U を用いて，$S = -(F-U)/T$ として定義される．このとき，S を k_{B} と p_i を用いて表せ．なお，内部エネルギー U はエネルギー固有値の期待値と等しいとせよ．

(1)　$F = -k_BT\log Z \iff -\beta F = \log Z \iff e^{-\beta F} = Z$

$P_i = \dfrac{e^{-\beta E_i}}{Z}$ の Z に上の式を代入すると　$P_i = \dfrac{e^{-\beta E_i}}{e^{-\beta F}} = e^{\beta(F-E_i)}$ ∎

(2)　$P_i = e^{\beta(F-E_i)} \iff \log P_i = \beta(F-E_i)$

両辺に P_i をかけて i について和をとると $\sum_i P_i\log P_i = \sum_i P_i\,\beta(F-E_i)$

右辺は $\beta F\sum_i P_i - \beta\sum_i P_iE_i = \beta F - \beta U$ なので $\beta(F-U) = \sum_i P_i\log P_i$

よって

$S = -\dfrac{F-U}{T} = -k_B\cdot\beta(F-U) = -k_B\sum_i P_i\log P_i$ 〃

中間試験 6　2 つのエネルギー固有状態しか持たない系（逆温度 β）をカノニカル分布で考える．それぞれの固有状態のエネルギー固有値が $-E$, E（ただし，E はある正の定数）であるとき，次の問いに答えよ．

(1)　分配関数 Z を求めよ．

(2)　エネルギー固有値 $-E$, E に対応する確率を p_- と p_+ と表す．p_- と p_+ を求めよ．

(3)　系の内部エネルギー U を求めよ．

(4)　系の絶対温度を T とする．このとき，比熱 $C = \dfrac{dU}{dT}$ を，E, k_B, T を用いて表せ．

(1) $$Z = e^{\beta E} + e^{-\beta E} \,//$$

(2) $$P_- = \frac{e^{\beta E}}{e^{\beta E} + e^{-\beta E}}, \quad P_+ = \frac{e^{-\beta E}}{e^{\beta E} + e^{-\beta E}} \,//$$

(3) $$U = (-E)P_- + EP_+ = -\frac{e^{\beta E} - e^{-\beta E}}{e^{\beta E} + e^{-\beta E}} E \,// \quad \left(= -\tanh(\beta E)\, E \right)$$

(別) $$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log(e^{\beta E} + e^{-\beta E}) = -\frac{e^{\beta E} - e^{-\beta E}}{e^{\beta E} + e^{-\beta E}} E$$

(4) $$C = \frac{dU}{dT} = \frac{d\beta}{dT}\frac{dU}{d\beta} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{d}{d\beta}\left(-\frac{e^{\beta E} - e^{-\beta E}}{e^{\beta E} + e^{-\beta E}} E \right)$$

$$= \cdots = \frac{4E^2}{k_B T^2} \frac{1}{(e^{\beta E} + e^{-\beta E})^2} \,// \quad \left(= \frac{E^2}{k_B T^2} \cdot \frac{1}{\cosh^2(\beta E)} \right)$$

(参考) 双曲線関数 (hyperbolic function)

$$\cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2}, \quad \sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}, \quad \tanh x = \frac{\sinh x}{\cosh x}$$

性質 $$\frac{d}{dx}\cosh x = \sinh x, \quad \frac{d}{dx}\sinh x = \cosh x \quad (\leftarrow 符号に注意)$$

$$\frac{d}{dx}\tanh x = \frac{1}{\cosh^2 x}$$ etc.

中間試験 7　N 個の区別できる粒子が含まれる孤立系を考える．i 番目の粒子（$i = 1, 2, \ldots, N$）が有するエネルギーは $n_i \varepsilon_0$（ただし，n_i は 0 以上の整数，ε_0 はある正の定数）と表されるものとする．粒子間の相互作用が無視できるとき，$\boldsymbol{n} = (n_1, \ldots, n_N)$ を用いて系のエネルギー固有状態（これを状態 $\boldsymbol{n}$ と呼ぶ）が定められる．M をある自然数として，次の問いに答えよ．

(1) 系の全エネルギーが ε_0 $\left(つまり，\displaystyle\sum_{i=1}^{N} n_i = 1\right)$ となる状態の総数は N であることを説明せよ．

(2) 系の全エネルギーが $M\varepsilon_0$ となる状態の総数を求めよ．

(3) 系の全エネルギーが $M\varepsilon_0$ であるとき，系が状態 $\boldsymbol{n}$ である確率 $p_{\boldsymbol{n}}$ を，等重率の原理を仮定して求めよ．

(1) 全エネルギーが ε_0 となるのは，1つの粒子のみ ε_0 で他は全てエネルギーが0であるような状況．どの粒子がエネルギーをもつかで N 通りあるので，状態の総数は N となる．

(2) M こ の球を N 人に配付する場合の数に等しく，これはさらに M この球と $N-1$ このしきりを並べる場合の数に等しい．よって

$$\frac{(M+N-1)!}{M!\,(N-1)!} \text{ 通り}$$

(3) 等重率の原理を仮定すると，

$$P_{\boldsymbol{n}} = \begin{cases} \dfrac{M!\,(N-1)!}{(M+N-1)!} & (\text{状態 } \boldsymbol{n} \text{ のエネルギーが } M\varepsilon_0) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$