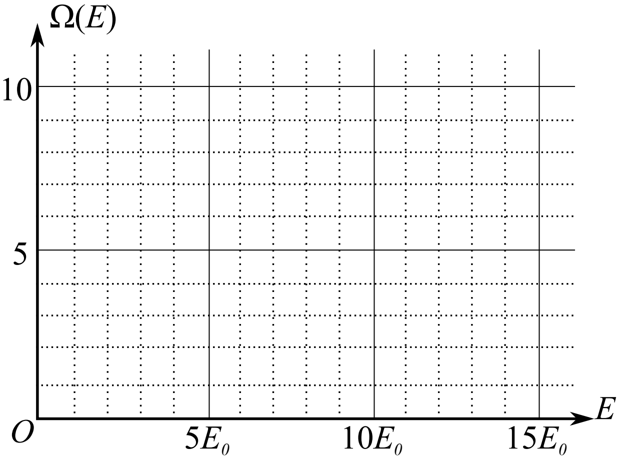
中間試験 1　1 から 35 の目が均等に出るサイコロを 1 つ投げる．出た目の 2 乗を確率変数 $\hat{f}$ とするとき，期待値 $\left\langle \hat{f} \right\rangle$ を求めなさい．必要であれば，$\displaystyle\sum_{i=1}^{n} i^2 = \frac{1}{6} n(n+1)(2n+1)$ を用いなさい．

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 は正の定数）で表されるとき，状態数 $\Omega(E)$ を $0 \leq E \leq 15E_0$ についてグラフに表しなさい．



中間試験 3　ある孤立系の状態数が $\Omega(E) = 10^{(E/E_0)^3}$ で表されるとする．　系のエネルギーが $3E_0$ であるとき，エネルギー固有状態 i が実現する確率 p_i を近似的に求めなさい．ここでは，エネルギー固有値 E_i が $2E_0 < E_i < 3E_0$ を満たすエネルギー固有状態 i は共通のマクロな性質を持つと考えなさい．

中間試験 4　単原子分子理想気体（原子の質量 M，体積 V，粒子数 N，逆温度 β）について，低密度では分配関数が $Z = \dfrac{V^N}{N!}\left(\dfrac{2\pi M}{\beta h^2}\right)^{3N/2}$（ただし，$h$ はプランク定数）で表される．このとき，理想気体の状態方程式を導出しなさい．なお，圧力が $p = \dfrac{1}{\beta}\dfrac{\partial}{\partial V}\log Z$ と表されることは既知とし，ボルツマン定数を k_{B} としなさい．

中間試験 5　ヘルムホルツの自由エネルギー F について，次の問いに答えなさい．以下では，β が逆温度，V が体積，Z が分配関数，U が内部エネルギー，T が絶対温度を表すものとしなさい．

(1) 熱力学では，圧力 p は $p = -\dfrac{\partial F}{\partial V}$ と表される．圧力の表式 $p = \dfrac{1}{\beta}\dfrac{\partial}{\partial V}\log Z$ を踏まえ，F を β と Z を用いて表しなさい．

(2) 熱力学では，エントロピー S は $S = -\dfrac{\partial F}{\partial T}$ と表される．$S = \dfrac{U-F}{T}$ を満たすことを示しなさい．ただし，内部エネルギーが $U = -\dfrac{\partial}{\partial \beta}\log Z$ と表されることは既知としなさい．

中間試験 6　温度が一定（逆温度 β）で磁場 $\vec{H}=(0,0,H)$（ただし，$H>0$）のある空間に，電子が一つ固定されている．電子はスピンと呼ばれる固有の角運動量を有しており，z 方向を向く状態（「状態 $+$」と呼ぶ）と，$-z$ 方向を向く状態（「状態 $-$」と呼ぶ）の二つがエネルギー固有状態である．また，エネルギー固有値は，磁気モーメント μ_0（ただし，$\mu_0>0$）を用いて，状態 $+$ では $E_+=-\mu_0 H$，状態 $-$ では $E_-=\mu_0 H$ と表される．

(1) 分配関数 Z を求めなさい．

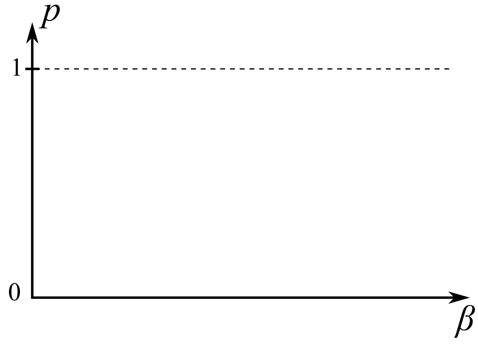
(2) 状態 $+$ に対応する確率を p_+，状態 $-$ に対応する確率を p_- と表す．p_+ と p_- を求めなさい．

(3) $\beta\to 0$ と $\beta\to\infty$ について，p_+ と p_- の値を求めなさい．

(4) β に対して，p_+ は単調増加，p_- は単調減少することを示しなさい．

(5) p_+ と p_- を，横軸を β とするグラフで表しなさい．ただし，$\beta>0$ について $\dfrac{\partial^2 p_+}{\partial\beta^2}<0$，$\dfrac{\partial^2 p_-}{\partial\beta^2}>0$ であることは既知としなさい．

(6) 系の内部エネルギー U を求めなさい．



中間試験 7　カノニカル分布に関して，次の問いに答えなさい．以下では，Z が分配関数，k_{B} がボルツマン定数，β が逆温度，T が絶対温度を表すものとしなさい．

(1) エネルギー固有値の期待値 $\left\langle \hat{\mathcal{H}} \right\rangle$ を計算することにより，内部エネルギーの表式 $U = -\dfrac{\partial}{\partial \beta} \log Z$ を導出しなさい．

(2) 内部エネルギーのゆらぎの表式 $\sigma = \sqrt{\dfrac{\partial^2}{\partial \beta^2} \log Z}$ を導出しなさい．

(3) 比熱は $C = \dfrac{\partial U}{\partial T}$ により定義される．C を k_{B}，T，σ を用いて表しなさい．

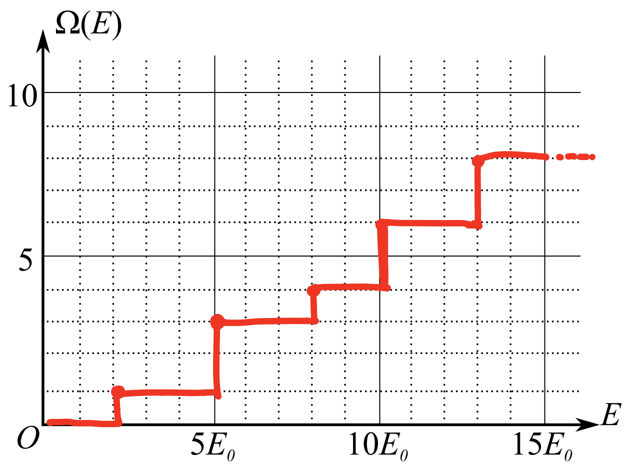
解答例

中間試験 1　1 から 35 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 $\left\langle \hat{f} \right\rangle$ を求めなさい．必要であれば，$\displaystyle\sum_{i=1}^{n} i^2 = \frac{1}{6} n(n+1)(2n+1)$ を用いなさい．

$$\langle \hat{f} \rangle = \sum_{i=1}^{35} i^2 p_i = \frac{1}{35} \cdot \frac{1}{6} \cdot 35 \cdot 36 \cdot 71 = 6 \cdot 71 = 426 \,/\!/$$

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 は正の定数）で表されるとき，状態数 $\Omega(E)$ を $0 \le E \le 15E_0$ についてグラフに表しなさい．

n_x	n_y	E
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　ある孤立系の状態数が $\Omega(E) = 10^{(E/E_0)^3}$ で表されるとする． 系のエネルギーが $3E_0$ であるとき，エネルギー固有状態 i が実現する確率 p_i を近似的に求めなさい．ここでは，エネルギー固有値 E_i が $2E_0 < E_i < 3E_0$ を満たすエネルギー固有状態 i は共通のマクロな性質を持つと考えなさい．

$\Omega(3E_0) = 10^{27}$, $\Omega(2E_0) = 10^{8}$

よって $2E_0 < E_i < 3E_0$ となる状態の数は

$\Omega(3E_0) - \Omega(2E_0) = 10^{27} - 10^{8} \fallingdotseq 10^{27}$.

よって等重率の原理より

$$p_i = \begin{cases} \dfrac{1}{10^{27}} & (2E_0 < E_i < 3E_0) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \,/\!/$$

中間試験 4　単原子分子理想気体（原子の質量 M，体積 V，粒子数 N，逆温度 β）について，低密度では分配関数が $Z = \dfrac{V^N}{N!}\left(\dfrac{2\pi M}{\beta h^2}\right)^{3N/2}$（ただし，$h$ はプランク定数）で表される．このとき，理想気体の状態方程式を導出しなさい．なお，圧力が $p = \dfrac{1}{\beta}\dfrac{\partial}{\partial V}\log Z$ と表されることは既知とし，ボルツマン定数を k_B としなさい．

$$p = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial V}\log\left[\frac{V^N}{N!}\left(\frac{2\pi M}{\beta h^2}\right)^{\frac{3N}{2}}\right] = \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial V}\log V^N = \frac{N}{\beta V}$$

ここで $\beta = \dfrac{1}{k_B T}$ より　$p = \dfrac{k_B T N}{V} \iff pV = Nk_B T$ ■

中間試験 5　ヘルムホルツの自由エネルギー F について，次の問いに答えなさい．以下では，β が逆温度，V が体積，Z が分配関数，U が内部エネルギー，T が絶対温度を表すものとしなさい．

(1) 熱力学では，圧力 p は $p = -\dfrac{\partial F}{\partial V}$ と表される．圧力の表式 $p = \dfrac{1}{\beta}\dfrac{\partial}{\partial V}\log Z$ を踏まえ，F を β と Z を用いて表しなさい．

(2) 熱力学では，エントロピー S は $S = -\dfrac{\partial F}{\partial T}$ と表される．$S = \dfrac{U - F}{T}$ を満たすことを示しなさい．ただし，内部エネルギーが $U = -\dfrac{\partial}{\partial \beta}\log Z$ と表されることは既知としなさい．

(1)　$p = \dfrac{1}{\beta}\dfrac{\partial}{\partial V}\log Z = -\dfrac{\partial}{\partial V}\left(-\dfrac{1}{\beta}\log Z\right)$ なので $F = -\dfrac{1}{\beta}\log Z$ //

(2)
$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{1}{\beta}\log Z\right) = \left\{\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{1}{\beta}\right)\right\}\log Z + \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial T}\log Z$$
$$= k_B \log Z + \frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial T}\log Z \quad \cdots ※$$

ここで

$$\frac{\partial}{\partial T} = \frac{\partial \beta}{\partial T}\cdot\frac{\partial}{\partial \beta} = \left\{\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{1}{k_B T}\right)\right\}\cdot\frac{\partial}{\partial \beta} = -\frac{1}{k_B T^2}\frac{\partial}{\partial \beta} = -\frac{\beta}{T}\frac{\partial}{\partial \beta}$$ より，

$$※ = \frac{\frac{1}{\beta}\log Z}{T} - \frac{\frac{\partial}{\partial \beta}\log Z}{T} = \frac{-F}{T} - \frac{-U}{T} = \frac{U - F}{T}$$ ■

中間試験 6　温度が一定（逆温度 β）で磁場 $\vec{H} = (0, 0, H)$（ただし，$H > 0$）のある空間に，電子が一つ固定されている．電子はスピンと呼ばれる固有の角運動量を有しており，z 方向を向く状態（「状態 $+$」と呼ぶ）と，$-z$ 方向を向く状態（「状態 $-$」と呼ぶ）の二つがエネルギー固有状態である．また，エネルギー固有値は，磁気モーメント μ_0（ただし，$\mu_0 > 0$）を用いて，状態 $+$ では $E_+ = -\mu_0 H$，状態 $-$ では $E_- = \mu_0 H$ と表される．

(1) 分配関数 Z を求めなさい．
(2) 状態 $+$ に対応する確率を p_+，状態 $-$ に対応する確率を p_- と表す．p_+ と p_- を求めなさい．
(3) $\beta \to 0$ と $\beta \to \infty$ について，p_+ と p_- の値を求めなさい．
(4) β に対して，p_+ は単調増加，p_- は単調減少することを示しなさい．
(5) p_+ と p_- を，横軸を β とするグラフで表しなさい．ただし，$\beta > 0$ について $\dfrac{\partial^2 p_+}{\partial \beta^2} < 0$，$\dfrac{\partial^2 p_-}{\partial \beta^2} > 0$ であることは既知としなさい．
(6) 系の内部エネルギー U を求めなさい．

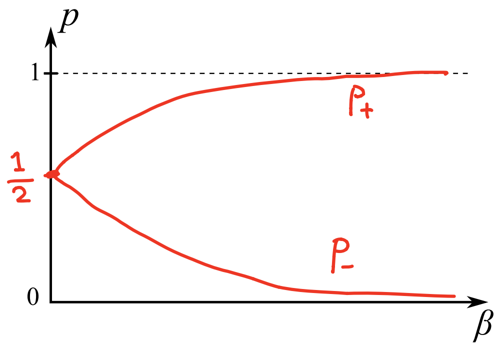
(1) $Z = \sum_i e^{-\beta E_i} = e^{-\beta E_+} + e^{-\beta E_-} = e^{\beta \mu_0 H} + e^{-\beta \mu_0 H}$ //

(2) $P_+ = \dfrac{e^{-\beta E_+}}{Z} = \dfrac{e^{\beta\mu_0 H}}{e^{\beta\mu_0 H} + e^{-\beta\mu_0 H}}$, $P_- = \dfrac{e^{-\beta E_-}}{Z} = \dfrac{e^{-\beta\mu_0 H}}{e^{\beta\mu_0 H} + e^{-\beta\mu_0 H}}$ //

(3) $\beta \to 0$ では $P_+ = P_- = \frac{1}{2}$.
$\beta \to \infty$ では $P_+ = \dfrac{1}{1 + e^{-2\beta\mu_0 H}} \to 1$, $P_- = \dfrac{e^{-2\beta\mu_0 H}}{1 + e^{-2\beta\mu_0 H}} \to 0$.

(4) $\dfrac{\partial P_+}{\partial \beta} = \dfrac{2\mu_0 H e^{-2\beta\mu_0 H}}{(1 + e^{-2\beta\mu_0 H})^2} > 0$. よって P_+ は単調増加.
$\dfrac{\partial P_-}{\partial \beta} = \dfrac{-2\mu_0 H e^{-2\beta\mu_0 H}}{(e^{2\beta\mu_0 H} + 1)^2} < 0$. よって P_- は単調減少,

(5) (3) と (4) の結果と $\dfrac{\partial^2 P_+}{\partial \beta^2} < 0$, $\dfrac{\partial^2 P_-}{\partial \beta^2} > 0$ を踏まえると右のようになる,



(6) $U = -\dfrac{\partial}{\partial \beta} \log Z$
$= -\dfrac{\partial}{\partial \beta} \log(e^{\beta\mu_0 H} + e^{-\beta\mu_0 H})$
$= -\dfrac{e^{\beta\mu_0 H} - e^{-\beta\mu_0 H}}{e^{\beta\mu_0 H} + e^{-\beta\mu_0 H}} \mu_0 H$ //

※期待値の定義から計算することもできる.

中間試験 7　カノニカル分布に関して，次の問いに答えなさい．以下では，Z が分配関数，k_{B} がボルツマン定数，β が逆温度，T が絶対温度を表すものとしなさい．

(1)　エネルギー固有値の期待値 $\left\langle \hat{\mathcal{H}} \right\rangle$ を計算することにより，内部エネルギーの表式 $U = -\dfrac{\partial}{\partial \beta} \log Z$ を導出しなさい．

(2)　内部エネルギーのゆらぎの表式 $\sigma = \sqrt{\dfrac{\partial^2}{\partial \beta^2} \log Z}$ を導出しなさい．

(3)　比熱は $C = \dfrac{\partial U}{\partial T}$ により定義される．C を k_{B}，T，σ を用いて表しなさい．

(1) $U = \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = \sum_i E_i p_i = \sum_i E_i \dfrac{e^{-\beta E_i}}{Z} \cdots ☆$

ここで $\dfrac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta E_i} = -E_i e^{-\beta E_i}$ なので，

$☆ = -\dfrac{1}{Z}\dfrac{\partial}{\partial \beta}\sum_i e^{-\beta E_i} = -\dfrac{1}{Z}\dfrac{\partial Z}{\partial \beta} = -\dfrac{\partial}{\partial \beta}\log Z$ ■

(2) $\langle \hat{\mathcal{H}}^2 \rangle = \sum_i E_i^2 p_i = \sum_i E_i^2 \dfrac{e^{-\beta E_i}}{Z} = \dfrac{1}{Z}\sum_i E_i^2 e^{-\beta E_i} \cdots ☆☆$

ここで $\dfrac{\partial^2}{\partial \beta^2} e^{-\beta E_i} = E_i^2 e^{-\beta E_i}$ なので

$☆☆ = \dfrac{1}{Z}\dfrac{\partial^2}{\partial \beta^2}\sum_i e^{-\beta E_i} = \dfrac{1}{Z}\dfrac{\partial^2}{\partial \beta^2} Z$

よって

$\sigma^2 = \langle \hat{\mathcal{H}}^2 \rangle - \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle^2 = \dfrac{1}{Z}\dfrac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \left(\dfrac{1}{Z}\dfrac{\partial Z}{\partial \beta}\right)^2 \cdots (*)$

また，

$\dfrac{\partial^2}{\partial \beta^2}\log Z = \dfrac{\partial}{\partial \beta}\left(\dfrac{1}{Z}\dfrac{\partial Z}{\partial \beta}\right) = \dfrac{\partial Z^{-1}}{\partial \beta}\cdot\dfrac{\partial Z}{\partial \beta} + \dfrac{1}{Z}\dfrac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2}$

$= -\dfrac{1}{Z^2}\dfrac{\partial Z}{\partial \beta}\cdot\dfrac{\partial Z}{\partial \beta} + \dfrac{1}{Z}\dfrac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2}$ なので $(*) = \dfrac{\partial^2}{\partial \beta^2}\log Z$

$\sigma > 0$ より $\sigma = \sqrt{\dfrac{\partial^2}{\partial \beta^2}\log Z}$ ■

(3) $C = \dfrac{dU}{dT} = -\dfrac{\beta}{T}\dfrac{dU}{d\beta} = +\dfrac{1}{k_B T^2}\dfrac{d^2}{d\beta^2}\log Z$

$\therefore C = \dfrac{\sigma^2}{k_B T^2}$ //