第１回統計熱力学レポート問題:回答例

福島孝治 (東京大学大学院総合文化研究科)
平成 16 年 11 月 26 日 y : ver. 1.0

1-1

表と裏の確率は同じなので，全ての可能性のうちに，表が n 枚出る場合の数の割合が求める確率 $P_N(n)$ である:

$$P_N(n) = \frac{{}_N C_n}{2^N} = \frac{N!}{(N-n)!n!}\frac{1}{2^N} \tag{1}$$

1-2

$N \gg 1$ として，スターリングの公式 $\log(N!) = N\log N - N$ より，

$$\begin{aligned}
\log(P_N(n)) &= -N\log 2 + \log N! - \log((N-n)!) - \log n! \\
&\simeq -N\log 2 + N\log N - N - (N-n)\log(N-n) + (N-n) - n\log n + n \\
&= -N\log 2 + N\log N - (N-n)\log(N-n) - n\log n \qquad (2)
\end{aligned}$$

ここで，もっともらしい条件は，$\frac{d\log P_N(n)}{dn} = 0$ である．

$$\frac{d\log P_N(n)}{dn} = \log(N-n) - (N-n)\frac{-1}{N-n} - \log n - 1 = \log\left(\frac{N-n}{n}\right)$$

よって，もっともらしい n^* は $\frac{N-n^*}{n^*} = 1$ より，$n^* = \frac{N}{2}$

1-3 問題では $P_N(n)$ をテイラー展開で二次までもとめよとなっているが，講義でやったように，$\log P_N(n)$ を展開する．

$$\begin{aligned}
\log P_N(n) &= \log P_N(n^*) + \frac{1}{2!}\frac{d^2}{dn^2}\log P_N(n)\Big|_{n=n^*}(n-n^*)^2 + O((n-n^*)^3) \\
&\downarrow \quad \frac{d^2}{dn^2}\log P_N(n) = \frac{d}{dn}\log\left(\frac{N-n}{n}\right) = \frac{-1}{N-n} - \frac{1}{n} \\
&\simeq \log P_N(N/2) - \frac{1}{2}\left(\frac{1}{N-N/2} + \frac{1}{N/2}\right)(n-n^*)^2 \\
&= -\frac{2}{N}(n-N/2)^2 + \text{const.}
\end{aligned}$$

よって，定数 C を用いて，

$$P_N(n) = C\exp\left(-\frac{2}{N}(n-N/2)^2\right) \tag{3}$$

となる．これはガウス関数である．

1-4 ガウス積分省略

1-5

規格化定数は，$C\int P_N(n) = 1$ より決まる．前問の答えより，$C\sqrt{\frac{\pi}{2/N}} = 1$ より，$C = \sqrt{\frac{2}{N\pi}}$ となり，

$$P_N(n) = \sqrt{\frac{2}{N\pi}}\exp\left(-\frac{2}{N}(n-N/2)^2\right)$$

である．

1-6 モーメントの計算

期待値と分散 $(\langle n^2\rangle - \langle n\rangle^2)$ はそれぞれ,

$$\langle n\rangle = \int dnnP_N(n) = \frac{N}{2} \tag{4}$$

$$\langle n^2\rangle - \langle n\rangle^2 = \int dnn^2P_N(n) - \frac{N^2}{4} = (\frac{N}{4} + \frac{N^2}{4}) - \frac{N^2}{4} = \frac{N}{4} \tag{5}$$

となる．

1-7 実際の実験の検証.

スターリングの公式を使って，ガウス分布を出したが，それがどの程度の N からよく合っているのかを見てみたいということや，期待値とその分散によるゆらぎの効果が N とともにどうなっているのかを見たいというのが，題意である．実際に，何人もの学生が貴重な実験をやってくれている．その講評はまた後程詳しく書いてみたい.

練習問題

[**過去問 1．**]

大きな熱浴 (系 II) に接している系 I の統計力学はカノニカル分布で記述できることを以下の手順に従って示せ．各設問には答えだけでなく，その理由も明確に記すこと．

1. 全系 I+II は孤立しているものとして，そのミクロな状態には等重率を仮定する．また，簡単のためにエネルギー状態は離散的になっているとする．全系のエネルギー $E_{\mathrm{tot}}(=E_I+E_{II})$ の時の状態数を $W_{\mathrm{tot}}(E_{\mathrm{tot}})$ とする．また，熱浴の状態数を $W_{II}(E_{II})$ とすると，系 I のエネルギーが E_I^α のあるミクロ状態 α の実現する確率 p_I^α を W_{tot}，W_{II} を用いて表せ．
2. 熱浴のエネルギーが，系 I のエネルギよりも十分大きい ($E_{\mathrm{tot}} \gg E_I$) として，確率 p_I^α が
$$p_I^\alpha \propto \exp\left(CE_I^\alpha\right)$$
となることを示せ．比例定数 C も求めよ．
3. ミクロな状態数とエントロピーの関係 (Boltzmann の関係式)
$$S(E) = k_B \log W(E)$$
と熱力学関係式
$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{T}$$
を用いて，カノニカル分布を導け．ここで，T は温度，k_B はボルツマン定数である．
4. 確率 p_I^α を規格化せよ．
5. 系 I のエネルギーのその分布に関する期待値と前問の規格化定数との関係を示せ．

[**過去問 2．**]

質量 m の粒子 N 個の古典理想気体が，一様重力下の地面に立てられた底面積 A の無限に高い円筒中に入っている．温度 T の熱平衡状態にあるとして，以下の問いに答えよ．

1. まず，系のエネルギーは，円筒の容器の底を基準 $(z=0)$ として，

$$E = \sum_{i}^{N} \left(\frac{p_{ix}^2 + p_{iy}^2 + p_{iz}^2}{2m} + mgz_i \right) \tag{6}$$

   で与えられる．ここで，p_{ix}, p_{iy}, p_{iz} は i 番目の粒子の運動量であり，z_i はその高さを表している．また，重力加速度は g とした．この系の分配関数を求めよ．但し，各粒子は区別できないことに注意せよ．必要ならば，ガウス積分の公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-x^2) = \sqrt{\pi}$$

   を用いてもよい．

2. N が十分大きいとして，ヘルムホルツ自由エネルギーを求めよ．Stirling の公式 $\ln N! \simeq N \ln N$ を用いてもよい．
3. 粒子の存在する高さの期待値を求めよ．
4. 自由エネルギーからこの系のエネルギーと比熱を求めよ．
5. この比熱を (重力のない) 単原子理想気体の比熱と比較して，その理由を考察せよ．

問題 1 「古典調和振動子系のカノニカル分布での取り扱い」：

N 個の相互作用しない質量 m，角振動数 ω の調和振動子系がある．各振動子は 1 つの振動自由度しか持っていないとする[1]．ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}(\{x_i\},\{p_i\}) = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{p_i^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}x_i^2\right) \tag{7}$$

1. 分配関数 $Z(T)$ を温度 T の関数として求め，内部エネルギー (エネルギーの期待値)，比熱，エントロピーを温度 T の関数で導き，グラフで概略を示せ．

2. エネルギー等分配則を導け．すなわち，

$$\langle\frac{p_i^2}{2m}\rangle = \text{これこれ} \tag{8}$$

$$\langle\frac{m\omega^2 x_i^2}{2}\rangle = \text{これこれ} \tag{9}$$

   を調べよ．

3. (ちょっと難しい)．ハミルトニアンに非調和項 $V(\{x_i\})$,

$$V(\{x_i\}) = C_1 x_i^3 + C_2 x_i^4 \tag{10}$$

   を加えたときに，比熱に対する非調和項の補正[2]を温度 T に比例する項まで調べよ．

問題 2 「3 状態模型$+\alpha$」：

N 個の格子点に値が $\mu m (m=-1,0,1)$ をとる磁気モーメントがある．この系に磁場 H をかけたときのハミルトニアンは,

$$\mathcal{H}(\{m_i\}) = -\mu H\sum_{i=1}^{N} m_i \tag{11}$$

で与えられているとする．

1. この系の温度 T での分配関数 $Z(T)$ を求め，内部エネルギー (エネルギーの期待値)，比熱を温度 T の関数で導き，グラフで概略を示せ．
2. また平均磁化 $M=\langle\sum_i m_i\rangle$ を H の関数として求め，概略を示せ．何が起きているかを説明せよ．
3. 帯磁率 $\chi_0=\left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{H=0}$ を求め，温度変化の概略を示せ．
4. (ちょっと難しい)．各磁気モーメントが一般的の磁気量子数 $m_i = -J,-J+1,\cdots,J-1,J$ と $2J+1$ とおりの値をとるときに，同様な解析を行い，比較してみよう．