統計力学演習 第1回(2004/04/13)

最終更新：2005/07/21(Thu)
田中 宗*

レポート提出時：5月11日の統計力学演習のはじめ

黒板で説明したかどうかにかかわらず，全ての問題を解くこと．また，最後にこの演習に関する感想を書いてください．
問題を解くにあたり，条件の不足があった場合はその旨レポートに記し，解答してください．

問題 1 (Gauss 積分)

(a) $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$ を示せ．

(b) $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx$ を求めよ．

(c) $\int_{-\infty}^{\infty} e^{\alpha x^2+\beta x} dx$ を求めよ．

(d) $\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n-1} e^{-ax^2} dx$, $\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx$ (n は自然数) を求めよ．

問題 2 (Γ 関数)

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt \qquad \Re(z) > 0 \tag{Q-1}$$

により定義されるガンマ関数について次の問に答えよ．

(a) $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ を示せ．

(b) $\Gamma(n+1) = n!$ (n は自然数) を示せ．

(c) $\Gamma(\frac{1}{2})$, $\Gamma(n+\frac{1}{2})$ (n は自然数) を求めよ．

(d) 半径 R の n 次元球の体積 $V_n(R)$ をガンマ関数を用いて表せ．

問題 3 (スターリングの公式)

(a) 区間求積法により $N \gg 1$ のとき，

$$\log N! = N(\log N - 1) + \mathcal{O}(\log N) \tag{Q-2}$$

を示せ．

以降では，式 (Q-2) の精密化を考えよう．

(b) **問題 2** より，

$$N! = \Gamma(N+1) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^N dt \tag{Q-3}$$

である．被積分関数 $f(t) = t^N e^{-t}$ の極大値を求めよ．

(c) 上の結果から，式 (Q-3) の被積分関数を

$$t^N e^{-t} = N^N e^{-N} e^{-\frac{Nx^2}{2}} \tag{Q-4}$$

と変換することで，積分変数を t から x に変える．
また，

$$t = N(1+z) \tag{Q-5}$$

とおくと，x と z が

$$z\frac{dz}{dx} = x(1+z) \tag{Q-6}$$

で結ばれることを示せ．

*居室：理学部1号館 938 号室　　shu-t@spin.phys.s.u-tokyo.ac.jp

(d)

$$z=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{C_n}{n!}x^n \tag{Q-7}$$

の形を仮定し，式 (Q-6) に代入することで C_0,C_1,C_2,$\cdots$ を求め，$\Gamma(N+1)$ の初めの 3 項まで書き下せ．また，この結果より得られる $\log(N!)$ と式 (Q-2) とを比較してみよ．

問題 4 (種々の確率分布)

(a) 成功確率 $p\,(0<p<1)$，失敗確率 $1-p$ の試行を**ベルヌーイ試行**と呼び，記号 $Ber\,(p)$ で表記される．この試行の成功を 1，失敗を 0 とするとき，確率変数 ϵ が次のように与えられる．

$$\epsilon=\begin{cases}1, & \text{確率 } p\\ 0, & \text{確率 } 1-p\end{cases}$$

その確率関数が $f(\epsilon|p)=p^{\epsilon}(1-p)^{1-\epsilon}$ で与えられることを確かめ，この分布の平均 $E(\epsilon)$ と分散 $V(\epsilon)$ を求めよ．

(b) n 回の独立なベルヌーイ試行を ϵ_1,ϵ_2,$\cdots$,ϵ_n とし，そのときの成功回数を $X=\sum_{i=1}^{n}\epsilon_i$ とする．このとき確率変数 X に対する確率関数が $f(x|p)={}_nC_x p^x(1-p)^{n-x}$ で与えられることを確かめ，この分布の平均 $E(X)$ と分散 $V(X)$ を求めよ．これを**二項分布**と呼び，記号 $B_N(n,p)$ で表す．

(c) 二項分布 $B_N(n,p)$ において，独立な試行の回数 n が非常に大きいとき，式 (Q-2) を用いて，これが**正規分布**になることを示せ．ただし，p は極端に小さくないものとする．また，このとき分布の平均 $E(X)$ と分散 $V(X)$ を求めよ．

問題 5 (エントロピー) N_a 個の同じ種類の原子から構成される固体を考える．簡単のため，各原子が平衡位置のまわりで独立に空間の 3 方向に振動しているとする．このとき $N=3N_a$ 個の独立な調和振動子から成るモデルと考えることができる．
調和振動子の固有振動数を ω とするとき，エネルギー準位が $\epsilon_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$($n$ は非負整数) で表されるが，以降では簡単のため，零点振動の寄与 $\frac{1}{2}\hbar\omega$ は無視する．
また，いま考えている系の原子数は非常に大きい ($N\gg 1$) とする．

(a) 固体のエネルギーが

$$E_{(n_1,n_2,\cdots,n_N)}=\sum_{i=1}^{N}n_i\hbar\omega=M\hbar\omega$$

となる場合の数 $W_N(M)$ を近似を使わず厳密に書き下せ．

続いて，２つの固体 A,B を接触させる．これらの固体は上で扱ったモデルで記述されるものであり，同種であるとする．また，両固体は周囲から孤立しているとする．このとき，固体 A(独立な調和振動子 N_A 個) のエネルギーを $E_A=M_A\hbar\omega$，固体 B(独立な調和振動子 N_B 個) のそれを $E_B=M_B\hbar\omega$ とし，先と同様の記法を用いてエネルギー配分の確率は,

$$P(E_A,E_B)=\frac{W_{N_A}(M_A)\,W_{N_B}(M_B)}{W_N(M)} \tag{Q-8}$$

と表される．これを最大化するようなエネルギー配分 (E_A^*,E_B^*) を求めよう．

(b) 式 (Q-8) の分子の対数を

$$\Sigma(E_A,E_B)=\log W(E_A,E_B)=\log W_{N_A}(M_A)\,W_{N_B}(M_B) \tag{Q-9}$$

とおき，式 (Q-2) を適用して，$\Sigma(E_A,E_B)$ を E_A,E_B,N_A,N_B,$\hbar\omega$ などで表せ．

(c) 上の結果より，確率を最大にするような場合はどのような時か求めよ．

(d) エネルギー配分が確率最大の点から微小量 ϵ だけずれた場合，すなわち $(E_A^* + \epsilon, E_B^* - \epsilon)$ を考えよう．このとき $\Sigma(E_A, E_B)$ を ϵ の 2 次まで求めよ．ただし，$\Sigma(E_A^*, E_B^*) = \Sigma^*$ とおけ．またその結果からエネルギーのゆらぎの程度を見積もれ．

次に，調和振動子で記述できる固体のモデルを離れて，より一般的なマクロな系について考えよう．上の問題と同様に，エネルギー E_A なる系 A と，エネルギー E_B なる系 B を熱的に接触させる場合を考察する．ただし，系 A と系 B は周囲から孤立しているとする．

(e) **等重率の原理**とは何か，説明せよ．

(f) 確率最大の条件を次で定義される**エントロピー**を用いて書き下せ．ただし，k_B は**ボルツマン定数**，$W(E)$ はエネルギー E に在る状態の数である．

$$S \equiv k_B \log W(E) \tag{Q-10}$$

(g) エネルギー配分が $(E_A^* + \epsilon, E_B^* - \epsilon)$ のとき，$S(E_A, E_B)$ を ϵ の 2 次まで求め，エントロピーが $\frac{d^2 S(E)}{dE^2} < 0$ なる性質を持つ必要があることを説明せよ．

(h) 式 (Q-10) により定義されたエントロピーから**温度**を次のように定義する．

$$\frac{dS}{dE} \equiv \frac{1}{T} \tag{Q-11}$$

これについて前問の結果及び，講義で取り上げた理想気体の例を踏まえ，論じよ．