統計力学 問題(2004/04/27)

田中 宗*

問題 1 (正規分布)

(a) 次の関数を規格化せよ (定数 A を決定せよ). これを**正規分布**と呼ぶ.

$$f(x|\boldsymbol{\theta}) = A\exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right] \qquad (-\infty < x < \infty) \tag{Q-1}$$

ただし母数空間 Θ は, $\Theta = \left\{\boldsymbol{\theta} = \left(\mu, \sigma^2\right) : -\infty < \mu < \infty, 0 < \sigma^2 < \infty\right\}$ とする.

(b) 正規分布, すなわち式 (Q-1) に従うとき, 標本値 x の平均値 $E(X)$ と分散 $V(X)$ を求めよ.

問題 2 (鞍点法) $F(x) \sim \mathcal{O}(N)$ であり (ここで N は十分大きいとする), かつ $x = x_0$ において $F(x)$ が最大値を取るとき,

$$X = \int_{-\infty}^{\infty} e^{F(x)} dx \tag{Q-2}$$

の値を評価せよ.

問題 3 (カノニカル分布) 温度 T の熱浴に接触して, 平衡状態に在るマクロな大きさを持った系を考える. 熱浴と注目する系はエネルギーの交換のみを許す機構となっており, 熱浴と系を合わせた全系は孤立系であるとする. 当然, 熱浴は注目する系に比べて非常に大きい系であるとする. このとき注目する系は**カノニカル分布**に従う. このときヘルムホルツの自由エネルギーを F を用いて, エネルギー E が次のように書けることを説明せよ. ただし $\beta = \frac{1}{k_{\rm B}T}$ とする.

$$E = -k_{\rm B}T^2\frac{\partial}{\partial T}(\beta F) = \frac{\partial}{\partial \beta}(\beta F) \tag{Q-3}$$

問題 4 (グランドカノニカル分布) 温度 T, 化学ポテンシャル μ の「浴」に接触して平衡状態に在るマクロな大きさを持った系を考える.「浴」と系はエネルギーと粒子の交換を許す機構となっており, 熱浴と系を合わせた全系は孤立系であるとする. 当然,「浴」は注目する系に比べて非常に大きい系であるとする. 注目する系を系 A,「浴」を系 B とする.

(a) 系 A がエネルギー E_A, 粒子数 N_A に在る状態数を $W_A(E_A, N_A)$ と書こう. いま考えている系は平衡状態に在ることから, 系 A と系 B の温度と化学ポテンシャルが等しいということを表現せよ.

(b) 系 A がエネルギー E_A, 粒子数 N_A(平衡状態) に在る確率 $P(E_A, N_A)$(規格化因子込み) が次の形で書けることを示せ. これを**グランドカノニカル分布**と言う. また, Ξ を**大分配関数**と言う.

$$P(E_A, N_A) = \frac{1}{\Xi}\exp\left[-\frac{E_A(N_A) - \mu N_A}{k_{\rm B}T}\right] \tag{Q-4}$$

また, $\lambda \equiv e^{\beta\mu}$($\lambda$ を**絶対活動度**という), N_A を固定したときの分配関数を Z_{N_A} とすると, 大分配関数が次式のようになることを確かめよ.

$$\Xi = \sum_{N_A} \lambda^{N_A} Z_{N_A} \tag{Q-5}$$

(c) 系がグランドカノニカル分布に従うとき, エネルギーの表式はこれまで使用した記号を用いて,

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta}\log\Xi + k_{\rm B}T\mu\frac{\partial}{\partial \mu}\log\Xi \tag{Q-6}$$

で表されることを説明せよ.

---

*居室：218 shu-t@spin.t.u-tokyo.ac.jp
統計力学演習の問題は次の WEB ページに掲載します。
http://spin.t.u-tokyo.ac.jp/ ~shu-t/enshu/enshu.html

(d) 系 A の圧力を p，体積を V とすると，

$$pV = k_{\mathrm{B}} T \log \Xi \tag{Q-7}$$

となることを示せ．

問題 5 (マクスウェル・ボルツマン分布)　理想気体を構成する各粒子の平衡における速度分布関数は**カノニカル分布**(特に理想気体の場合は**マクスウェル・ボルツマン分布**と呼ぶ) に従う．粒子の速度の x,y,z 成分が v_x,v_y,v_z であるときの速度分布関数を $P(v_x, v_y, v_z)$ とし，温度を T，各粒子の質量を m とすると，

$$P(v_x, v_y, v_z) = \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi k_{\mathrm{B}} T}}\right)^3 e^{-\frac{m}{2k_{\mathrm{B}}T}\left(v_x^2+v_y^2+v_z^2\right)} dv_x dv_y dv_z \tag{Q-8}$$

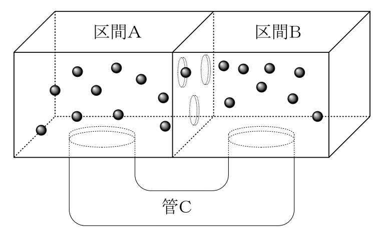
が成り立つ．

(a) 空間の等方性を仮定し，$v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$ の分布 $P_v(v)$ を求めよ．

(b) $P_v(v)$ が最大になる v_0，$P_v(v)$ に従う平均 $\langle v \rangle$，$P_v(v)$ に従う 2 乗平均の平方根 $\sqrt{\langle v^2 \rangle}$ を求め，その温度依存性を調べよ．

(c) 温度 T で熱平衡に在る理想気体が入っている箱 (気体密度を ρ とする) の中から単位時間当りに小孔 (面積 A) を通して噴出する気体粒子の平均個数を求めよ．

(d) 容器の中に多数の小孔を持つ壁を入れて，容器内を 2 つの区間 A，B に分けてある．2 つの区間に**十分希薄な**同一理想気体を詰め，区間 A の温度を T_A，区間 B の温度を T_B に保つとき，定常状態では区間 A の圧力を p_A，区間 B の圧力を p_B とすると，



$$\frac{p_A}{p_B} = \sqrt{\frac{T_A}{T_B}} \tag{Q-9}$$

を満たすことを示せ．また，管 C で 2 つの区間を繋げ，2 つの区間の圧力が等しくなるようにするとどうなるか．

問題 6 (情報論的エントロピー)

(a) ある状態 (**熱平衡状態に限らない**)s_i にある確率を $P(s_i)$ とすると，

$$S_{\mathrm{I}} \equiv -k_{\mathrm{B}} \sum_i P(s_i) \log P(s_i) \tag{Q-10}$$

で定義される S_{I} を**情報論的エントロピー**という．エントロピーを最大にする分布が熱平衡状態に対応していることと，全系でエネルギーが保存することを利用し，熱平衡状態 S_i^{eq} をとる確率 $P(s_i^{\mathrm{eq}})$ が**カノニカル分布**と一致することを説明せよ．

(b) 上の問題の条件に全系で粒子数が保存するという条件を加えると，熱平衡状態 s_i^{eq} をとる確率 $P(s_i^{\mathrm{eq}})$ が**グランドカノニカル分布**と一致することを説明せよ．

(c) これまでの論理とは逆に，式 (Q-10) に**等重率の原理**から考えられるミクロカノニカル分布における確率 $P(s_i)$ を代入し，

$$S_{\mathrm{st}} \equiv k_{\mathrm{B}} \log W(E) \tag{Q-11}$$

で定義されるエントロピーと情報論的エントロピー，すなわち式 (Q-10) が一致することを確かめよ．

(d) カノニカル分布，グランドカノニカル分布について，式 (Q-11) から導かれる確率 $P(s_i^{\mathrm{eq}})$ を式 (Q-10) に代入し，カノニカル分布，グランドカノニカル分布においても，式 (Q-10) と式 (Q-11) が一致することを確かめよ．