統計力学 問題(2004/05/11)

最終更新：2005/07/21(Thu)
田中 宗*

レポート提出時：６月１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．

特に断りが無い限り，**平衡状態**を扱っているとせよ．

問題 1 (特性関数)

comment

$P(x)$ を x の確率分布関数とし，次の式で定義される $\tilde{P}(k)$ を**特性関数**という．

$$\tilde{P}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} P(x)\, e^{ikx} dx \tag{Q-1}$$

確率分布関数のフーリエ変換が特性関数になっている．

(a)

$$\begin{cases} \tilde{P}(0) = 1 \\ \left.\frac{d\tilde{P}}{dk}\right|_{k=0} = i\langle x \rangle \\ \left.\frac{d^2\tilde{P}}{dk^2}\right|_{k=0} = -\langle x^2 \rangle \end{cases} \tag{Q-2}$$

を確かめよ．ただし $\langle x \rangle$ は確率分布 $P(x)$ に従う標本値 x の平均値を表す．

(b) 次の確率密度関数について，上の結果を踏まえ，標本値 x の平均 $E(X)$ と分散 $V(X)$ を求めよ．

i. 二項分布 $B_N(n,p)$：$f(x|p) = {}_nC_x p^x (1-p)^{n-x}$
ii. 正規分布 $N\left(\mu, \sigma^2\right)$：$f(x|\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right]$
iii. ポアソン分布 $Po(\lambda)$：$f(x|\lambda) = \frac{\lambda^x}{x!} e^{-\lambda}$，ただし $x = 0, 1, 2, \cdots$
ポアソン分布は「稀な現象の大量観測」と言われる．すなわち二項分布 $B_N(n,p)$ において，$n \to \infty$ のとき $np_n \to \lambda$ として導くことができる．これについても確かめよ．
iv. 指数分布 $E_X(\lambda)$：$f(x|\lambda) = \lambda e^{-\lambda x}$，ただし $0 < x < \infty$ で，母数空間 $\Theta = \{\lambda : 0 < \lambda < \infty\}$ である．

(c) 「有限の平均値 x_0，分散 σ^2 を持つ確率分布 $P(x)$ に従う確率変数が N 個あるとする．これらの確率変数の和を N で割った量,

$$y = \frac{\sum_i^N x_i}{N} \tag{Q-3}$$

は，N が十分大きい極限で平均値 x_0，分散 $\frac{\sigma^2}{N}$ の正規分布に従う」(**中心極限定理**) を証明しよう．

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

i. ディラックのデルタ関数が,

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(a)\,\delta(x-a)\,da \tag{Q-4}$$

を満たすことを利用し，$\delta(x-a)$ のフーリエ表現が次であることを証明せよ.

$$\delta(x-a) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-a)}dk \tag{Q-5}$$

ii. 確率変数 y の確率分布 $P(y)$ が次のようになることを証明せよ．式中の積分は $[-\infty,\infty]$ の区間で実行する.

$$\begin{aligned} P(y) &= \int\cdots\int P(x_1)\cdots P(x_N)\,\delta\left(y-\frac{\sum_i^N x_i}{N}\right)dx_1\cdots dx_N & \text{(Q-6)} \\ &= \frac{1}{2\pi}\int e^{imy}\left[\tilde{P}\left(-\frac{m}{N}\right)\right]^N dm & \text{(Q-7)} \end{aligned}$$

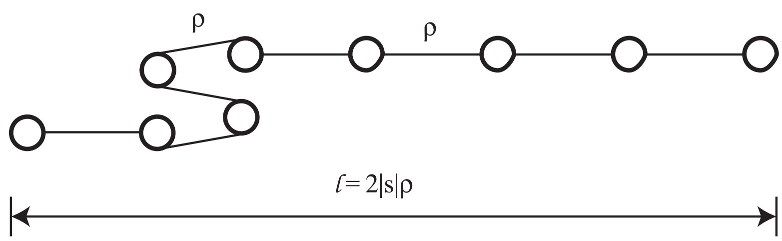
iii. $N\to\infty$ として，$\tilde{P}\left(-\frac{m}{N}\right)$ を２次まで展開し，中心極限定理を証明せよ.

問題 2 (１次元鎖高分子) 図のような N 個の接合部を持つ１次元鎖状高分子について考える．それぞれの結合部の長さは ρ で，接合部が右を向く確率と左を向く確率が等しいとする．このとき,

(a) 先頭から終端までの長さが $l=2|s|\rho$ となる配置の組合せの数を求めよ.

(b) エントロピー $S(l)$ を求めよ．その際 $|s|\ll N$ による近似をしないこと.

(c) 伸びの長さが l のとき，系に対して加えられた力 $\mathcal{F}$ を $|s|\ll N$ の条件下で l の３次まで求めよ．その際，l の１次の項は物理的に何と対応するか.



問題 3 (２準位系・３準位系・連続準位系)

(a) 外部電場 $\mathcal{E}$ と平行，反平行の２方向のみを向ける大きさ ρ の電気分極モーメントが $\mathcal{E}$ 内に N 個あるとする．分極と電場の相互作用は

$$\mathcal{H} = -\boldsymbol{\rho}\cdot\mathcal{E} \tag{Q-8}$$

で与えられる．簡単のため，分極間の相互作用は無いものとする．このとき，カノニカル分布を用いて，ヘルムホルツの自由エネルギー F，内部エネルギー E，内部エネルギーの分散値 $(\Delta E)^2$，比熱 C，電場と同じ方向を向いている分極の数 N_{same}，その分散値 $(\Delta N_{\mathrm{same}})^2$ をそれぞれ求めよ．また，比熱対温度のグラフを書け．その際，低温領域と高温領域でどのような関数に漸近するかも述べよ.

(b) 上と同じ状況について，微視的状態数の数え上げを行う (ミクロカノニカル分布) 方法を用いて，内部エネルギーの表式を求め，(a) と同じ結果になることを確かめよ.

(c) 今度は，分極と $\mathcal{E}$ のなす角が $0, \frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$ の３方向のみを向けるとする．このとき，比熱 $C^{(3)}$ を求め，比熱対温度のグラフを描け.

(d) 更に，分極が任意の方向を向けるとする．このとき，比熱 $C^{(\mathrm{con})}$ を求め，比熱対温度のグラフを描け．(a),(c) のグラフと異なる点があればそれについて述べよ.

問題 4 (理想気体) 温度 T，体積 V の理想気体について以下の問に答えよ．その際，量子的な効果は無視せよ．ただし，理想気体を構成する各原子の質量を m とする．

(a) 微視的な状態の数え上げを単原子理想気体について実行し，状態方程式が成立することを確かめよ．半径 r の n 次元球の体積 $V_n(r)$ は，

$$V_n(r) = \frac{r^n \pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma\left(\frac{n}{2}+1\right)} \qquad \text{(Q-9)}$$

であることは断り無しに使って良い (前回導出したはず)．

(b) 単原子理想気体について，古典統計力学の方法を用い，ヘルムホルツの自由エネルギー F_0，内部エネルギー E_0，比熱 C_0，エントロピー S_0，化学ポテンシャル μ_0，圧力 p_0 を求めよ．また，エントロピーの取る値に着目し，この方法の適用限界を述べよ．

(c) 同じ原子 2 つから成る分子が構成する理想気体について (例えば O_2)，(b) のように物理量を求めよう．

i. 運動エネルギーを，2 原子の重心の並進からの寄与 K_1 と回転運動からの寄与 K_2 に分けて考える．K_1 についての取り扱いは (a) と同じだから K_2 について考えれば良い．I を分子の慣性モーメントとして K_2 は極座標形式で

$$K_2 = \frac{I}{2}\left(\dot{\theta}^2 + \sin^2\theta \cdot \dot{\phi}^2\right) \qquad \text{(Q-10)}$$

であることを示せ．

ii. θ,ϕ に共役な運動量 p_θ,p_ϕ を用いて K_2 を書き下せ．

iii. 以上の結果から，2 原子分子から成る理想気体の回転運動の寄与によるヘルムホルツの自由エネルギー F_2 と，回転・並進の両方を考慮に入れた内部エネルギー $E^{(2)}$，比熱 $C^{(2)}$ を求めよ．ただし，この際「同じ原子 2 つから成る」という点に留意せよ．

(d) ハミルトニアンが一般化された運動量 p_i について次のように書かれたとき，内部エネルギーを求めよ．

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{f} \alpha_i p_i^2 \qquad (\alpha_i > 0) \qquad \text{(Q-11)}$$

(e) 質量 m の単原子からなる理想気体が，一様な重力場の中に立てられた無限に長い筒状の容器に入れられて熱平衡状態に在る．このとき，ヘルムホルツの自由エネルギー F，内部エネルギー E，比熱 C を求め，この結果と (b) の結果の違いについて物理的考察をせよ．

(f) 軸の周りに角速度 Ω で回転している半径 R，長さ h の円筒容器の中にある単原子理想気体の静止座標系から見たエネルギーを求めよ．(b) の結果 (E_0,F_0 など) を用いて表せ．