

試験問題		試験日	曜日	時限	担当者
科目名	熱学・統計力学 2	2004年7月14日	水	1	田崎

答えだけではなく、考え方の筋道を簡潔に書くこと。2005年3月を過ぎたら、答えは予告なく処分する。

0. レポートの提出状況を書け。レポートは、返却済みのものも新規のものも、今日の答案にはさんで提出すること。

1.  $N$  とおりの状態  $i = 1, 2, \dots, N$  をとりうる系がある。状態  $i$  の出現確率を  $p_i$  とする。これは、規格化条件

$$\sum_{i=1}^N p_i = 1 \quad (1)$$

を満たす。このとき情報理論的なエントロピーを

$$S_{\text{inf}} = - \sum_{i=1}^N p_i \log p_i \quad (2)$$

と定義する。

(a) 規格化条件 (1) を満たす範囲で情報論的エントロピー (2) を最大にするような確率分布  $p_i$  とその際の  $S_{\text{inf}}$  を求めよ。

(b) 確率がカノニカル分布

$$p_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z(\beta)} \quad (3)$$

で与えられるとき、

$$S_{\text{inf}} = \beta \{ \langle \hat{E} \rangle_{\beta} - F(\beta) \} \quad (4)$$

が成立することを示せ。ただし  $\hat{E}$  はエネルギー  $E_i$  に対応する物理量、 $F(\beta)$  は Helmholtz の自由エネルギーである。

2. ポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  中の質量  $m$  の粒子  $N$  個からなる理想気体の分配関数は、

$$Z(\beta) = \frac{1}{N!} \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2\beta} \right)^{3N/2} \left\{ \int dx dy dz e^{-\beta V(r)} \right\}^N \quad (5)$$

である。ただし  $x, y, z$  は三次元の直交座標で、 $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$  とした。

質量  $m$  の粒子  $N$  個からなる理想気体を考える。粒子には、

$$V(x, y, z, ) = ar = a \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad (6)$$

というポテンシャルで表される外力が働いている。 $a > 0$  は定数。原点にむかって一定の力で引き戻すという、やや人工的な設定である。

この系が逆温度  $\beta$  の平衡状態にある。

(a) 分配関数  $Z(\beta)$  を求め、自由エネルギー  $F(\beta)$  を求めよ。

(b) この系の熱容量 (全エネルギーの期待値を温度で微分したもの) を求めよ。

なお定積分

$$\int_0^\infty dr r^2 \exp(-Ar) = \frac{2}{A^3} \quad (7)$$

を証明してから用いよ。ただし  $A > 0$ 。

**3.** 講義であつかったのと同じ、理想化されたポリマーの問題を調べよう。

ポリマーは  $N$  個のモノマーの結合したものである。各々のモノマーは、

$$(l, 0), \quad (-l, 0), \quad (0, l), \quad (0, -l) \quad (8)$$

の四通りの配位 (状態) をとり、それらのエネルギーは、順に

$$-fl, \quad fl, \quad 0, \quad 0 \quad (9)$$

である。ここで、 $l$  はモノマーの長さであり、 $f$  はポリマー全体を引っ張る外力である。この系が逆温度  $\beta$  の熱浴と平衡にある。

(a) 系の分配関数を求めよ。

(b) 系のエントロピーを求めよ。

(c) 上で求めたエントロピーが、 $f/T$  という形のみを通して、外力  $f$  と温度  $T$  に依存することを確認せよ。この事実にもとづき、断熱したままポリマーにかかる力  $f$  をゆっくり増加させたときポリマーの温度がどう変化するかを論ぜよ。