作成 2010 年, 公開 2024 年 8 月

『統計力学 I』補充問題

田崎晴明

拙著『統計力学』関連のフォルダーを探索していたら、2010 年の日付の、この補充問題のファイルをみつけた。確かにいくつかの問題を作った記憶がある。教科書を出版した後、レポート用の課題として使っていたのだと思われる。

また、本書のサポート web ページにも「補充問題」という項目が設けてあったので、おそらく、このファイルをさらに充実させたものを公開する計画だったのだろう。ただ、その後、それを実行する余裕も時間もなく 14 年が過ぎてしまった。あまり完成度は高くないと思うし、数も少ないが、せっかくなので最初の形のままのものを公開しておこうと思う。少しでもお役に立てば幸いである。

なお、私の手元にはこれらの問題の解答はない。「解答をください」「これであってるか教えてください」といったご質問には対応できないので、ご了承いただきたい。

確率論

1. [**気体分子数のゆらぎ**] 体積 λv の容器の中に密度（分子数を体積でわったもの）ρ の気体が入っている。各々の分子は、容器内に完全に一様ランダムに分布すると仮定する。容器の中の体積 v の部分に着目し、この中に含まれる分子数を $\hat{n}$ とする。v と ρ を固定し、パラメター $\lambda \geq 1$ を色々に変えることを考える。

(a) 分子数 $\hat{n}$ の期待値とゆらぎを求めよ。$\lambda \nearrow \infty$ のとき、ゆらぎはどうなるか。

(b) 分子数 $\hat{n}$ が n に等しい確率 $\mathrm{Prob}[\hat{n} = n]$ を求めよ。$\lambda \nearrow \infty$ のとき、この確率はどうなるか。

(c) 1 気圧・室温の空気を理想気体と仮定し、v を一辺が 1 cm の立方体、一辺が 10^{-8} m の立方体としたとき、それぞれについて、分子数の期待値とゆらぎを求めよ。なお、λv は部屋の体積と考えて、$\lambda \gg 1$ としてよい。

2. [**誕生日の確率**] A さんの通う学校には、一学年に各々 50 名のクラスが 10 個ある[*1]。A さんの学年には、うるう年生まれの人はいない。各々の生徒の誕生日は（互いに完全に独立に）365 日のいずれかを等確率でとると仮定して、以下の問に答えよ。

なお、計算の式だけでなく（パソコンなどを使って）具体的な数値も求めること。

[*1] こんなにクラスや学年の人数が多い学校は（特に、今では）ほとんどないだろう。ちなみに、私が通った地元の小学校では一学年に 45 名程度のクラスが 10 個あったと思う。

(a) A さんと同じクラスに、A さんと同じ誕生日の人が少なくとも一人いる確率はいくつか。
(b) A さんと同じ学年に、A さんと同じ誕生日の人が少なくとも一人いる確率はいくつか。
(c) A さんの学年に、同じ誕生日の二人以上の生徒がいる確率はいくつか。
(d) A さんのクラスに、同じ誕生日の二人以上の生徒がいる確率はいくつか。

3. [**もう一人の子の性別**] 女の子を一人連れて散歩しているお父さんに出会った。聞いてみると、この家に子供は二人いるという。もう一人の子供が男の子である確率はいくらか[*2]？

もちろん、このままでは確率は算出できない。まず、（以前の出産とは独立に）確率 1/2 で男女が生まれ[*3]、必ず成長すると仮定する。さらに、お父さんが以下の三つの「戦略」に従って行動すると仮定し、それぞれの場合に、もう一人の子供が男の子である確率を求めよ（もちろん、三つの答えが全て等しくはない）。

(a) この町のお父さんは、かならずもっとも年上の子供を連れて散歩をする。
(b) この町のお父さんは、散歩の時は、（以前の散歩の経歴とは独立に）等確率でいずれかの子供を連れて散歩に出る。
(c) この町のお父さんは、もし女の子がいれば、かならず女の子のうちの一方を連れて散歩に出る。

4. [**マルコフ連鎖における大数の法則**] 本文では、大数の法則（定理 2.4）の例として独立な系がたくさん集まったものだけを取り上げた。しかし、独立な系の集まりでなくても、大数の法則が成立する例はいくらでもある。簡単な例題をみよう。

$\psi_i = \pm 1$ をとる N 個の数字の列 $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_N$ を次のような確率的なルールで作ろう。

$0 < p < 1$ を満たす定数 p を一つ選んでおく。ψ_1 は確率 1/2 で 1、確率 1/2 で -1 とする。さらに、$i = 1, 2, \ldots, N-1$ について、ψ_i が決まった後、ψ_{i+1} は、確率 p で ψ_i と等しく、確率 $1-p$ で ψ_i と異なった値をとるとする。

ψ_i を値とする物理量（ランダム変数）を $\hat{\psi}_i$ と書く。

(a) ψ_i が 1, -1 をとる確率を求めよ。

[*2] この問題では「条件つき確率」という本書では扱っていない概念を用いる。厳密にいうと、本書の補充問題とは言えないことを断っておく。

[*3] 実際には男が生まれる割合がわずかに高いそうだ。

(b) $1 \le i < j \le N$ を満たす整数 i, j について、期待値 $\langle \hat{\psi}_i \hat{\psi}_j \rangle$ を求めよ。
(c) $\widehat{\Psi} := N^{-1} \sum_{i=1}^{N} \hat{\psi}_i$ という物理量についての大数の法則を示せ[*4]。

統計力学の基礎

5. [**一般の物理量の期待値とゆらぎ**] $\hat{A}$ をなんらかのマクロな物理量（エネルギー固有状態 i において確定値 A_i をとるような量）とする。

状態 i のエネルギーを E_i とする。新しい（仮想的な）パラメター α を用いて、拡張された分配関数

$$Z(\beta,\alpha) = \sum_i \exp[-\beta(E_i - \alpha A_i)] \tag{1}$$

を定義する（$Z(\beta,0)$ が通常の分配関数)。すると、($\alpha = 0$ の）通常のカノニカル分布での $\hat{A}$ の期待値 $\langle \hat{A} \rangle$ とゆらぎ $\sigma[\hat{A}]$ が、

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} \log Z(\beta,\alpha) \bigg|_{\alpha=0} \tag{2}$$

$$\sigma[\hat{A}] = \frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \log Z(\beta,\alpha) \bigg|_{\alpha=0}} \tag{3}$$

と書けることを示せ。

さらに、体積 V が十分に大きいとき、V によらない関数 $f(\beta,\alpha)$ （単位体積あたりの自由エネルギー）を使って、分配関数を

$$Z(\beta,\alpha) = \exp[-V f(\beta,\alpha)] \tag{4}$$

と表すことができるとする。このとき、通常のカノニカル分布で、$\hat{A}/V$ の期待値が V によらないこと、$\hat{A}/V$ のゆらぎが $1/\sqrt{V}$ に比例することを示せ（もちろん、上の結果を使う)。

6. [**三つの独立な部分からなる系**] ある量子力学的な系のエネルギー固有状態が三つの正整数の組 (i,j,k) で指定され、対応するエネルギー固有値が $E_{(i,j,k)} = E_i^{(1)} + E_j^{(2)} + E_k^{(3)}$ と書けるとする。つまり、この系は（量子力学の系として）三つの独立な部分からなる。この系の、逆温度 β の平衡状態をカノニカル分布で記述する。

この系の自由エネルギー、エネルギーの期待値、エネルギーのゆらぎ、エントロピーを、三つの系がそれぞれ平衡にある場合の対応する量を使って書き表せ。なお、一般に、カノ

[*4] 気にしないでいい注：本文と同様に、大数の弱法則を示せばいい。

ニカル分布 p_ℓ に従う平衡状態のエントロピーを

$$S = -k \sum_{\ell} p_\ell \log p_\ell \tag{5}$$

と定義する。

カノニカル分布の応用

7. [**磁気モーメントが異なるスピンの系**] ここでは異なった種類のスピンが隣り合って並んでいて、相互作用している系を考える*5。$2N$ 個のスピンからなる系を考え、各々のスピン変数を $\sigma_1, \ldots, \sigma_{2N}$ とする。これらは、それぞれ $\sigma_i = \pm 1$ という値をとる。

この系が外部磁場 H のもとにあるときのエネルギーを、

$$E(\sigma_1, \ldots, \sigma_{2N}) = J \sum_{j=1}^{N} \sigma_{2j-1}\, \sigma_{2j} - H \sum_{j=1}^{N} \{\mu_{\mathrm{o}}\, \sigma_{2j-1} + \mu_{\mathrm{e}}\, \sigma_{2j}\} \tag{6}$$

とする。$J > 0$ はペアになったスピンを逆に向けようとする相互作用の強さ、$\mu_{\mathrm{o}} > 0$, $\mu_{\mathrm{e}} > 0$ は、奇数番目のスピンと偶数番目のスピンそれぞれの磁気モーメントである（μ_{o} と μ_{e} がかならずしも等しくないところがこの問題のミソ）。

(a) まず、$N = 1$（つまり、スピンが二つ）の場合に、系がとりうる（ミクロな）状態を列挙し、それらのエネルギーを求めよ。それををもとに分配関数を求めよ。この結果をもとに、一般の N についての分配関数を求めよ。

(b) 逆温度 β での磁化

$$\hat{m} = \frac{1}{2N} \sum_{j=1}^{N} \{\mu_{\mathrm{o}}\, \sigma_{2j-1} + \mu_{\mathrm{e}}\, \sigma_{2j}\} \tag{7}$$

の期待値を求めよ。

(c) 磁場が 0 のときの磁化率

$$\chi(\beta) = \left. \frac{\partial}{\partial H} \langle \hat{m} \rangle_\beta \right|_{H=0} \tag{8}$$

を求めよ。高温のと低温の極限での $\chi(\beta)$ のふるまいはどうなるか？ 低温については、μ_{o} と μ_{e} が等しい場合と異なる場合に分けて議論せよ。

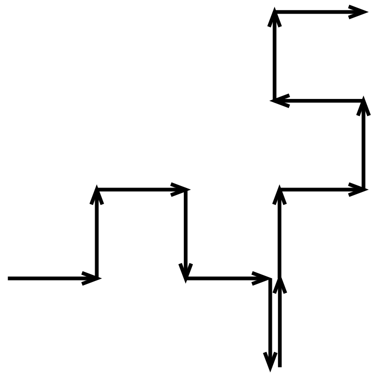
8. [**高分子の簡単なモデル**] 本文（5-6-4 節）よりも単純な高分子のモデルを考える。

*5 二種類の異なった原子が並んでいると思えばいい。

モノマー（長さ ℓ の向きのついた線分）を N 本用意する。これらを次々とつないで、高分子を作る。具体的には、まず 1 番目のモノマーの始点を原点に固定。それからは、i 番目のモノマーの終点と $i+1$ 番目のモノマーの始点を一致させながら、つないでいく。

さらに、かなり人工的な仮定だが、各々のモノマーは、上下左右の四通りの向きのいずれかを向くとする。モノマーどうしはいくら重なっても構わないとする。N 番目のモノマーの終点を x 軸正の方向に力 $f > 0$ で引っ張る。

こうすると、たとえば下図のような高分子ができる。



まとめれば、各々のモノマーは、

$$(\ell, 0), \quad (-\ell, 0), \quad (0, \ell), \quad (0, -\ell) \tag{9}$$

の四通りの配位（状態）をとり、それらのエネルギーは、順に

$$-f\ell, \quad f\ell, \quad 0, \quad 0 \tag{10}$$

であるとできる（本文の例と同様、このエネルギーが、高分子の端を引っ張る効果を表現している)。この系が逆温度 β の熱浴と平衡にある。

(a) 系の分配関数を求めよ。

(b) 高分子の端点（つまり、N 番目のモノマーの端の点）を $(\hat{X}, \hat{Y})$ とする。平衡状態での期待値 $\langle \hat{X} \rangle$, $\langle \hat{Y} \rangle$ を求めよ。

9. **[円筒の中の古典気体]** x, y, z を三次元のデカルト座標とし、$\sqrt{x^2 + y^2} \le R$, $0 \le z \le L$ で指定される円筒状の領域に閉じこめられた、質量 m の粒子 N 個からなる古典的な理想気体を考える。粒子には、a を正の定数として、

$$V(x, y, z) = -a\,(x^2 + y^2) \tag{11}$$

というポテンシャルで表される外力が働いている（円筒型の宇宙ステーションを軸のまわりに自転させ（遠心力によって）擬似重力を作っていると思っていい[*6]）。

---

*6 宇宙ステーションを回転させると、内部では、遠心力のほかにコリオリ力が働く。詳しく調べると、コ

この系が逆温度 β の平衡状態にある。

(a) 円筒の中心（$x = y = 0$）と円筒の端（$\sqrt{x^2 + y^2} = R$）での気体の密度はどちらが大きいか？　また、両者の比を求めよ。
(b) 分配関数 $Z(\beta)$ を求めよ。
(c) 全系のエネルギーの期待値を求めよ。
(d) $\beta aR \gg 1$ と $\beta aR \ll 1$ のとき、それぞれ、全系のエネルギーの期待値はどうなるか？

10. [**箱の上下での圧力**]　x, y, z を三次元の直交座標とし、$0 \le x \le L$, $0 \le y \le L$, $h_0 \le z \le h_1$ で指定される箱の中に閉じこめられた、質量 m の粒子 N 個からなる古典的な理想気体を考える。粒子には、

$$V(x, y, z) = mgz \tag{12}$$

というポテンシャルで表される外力（つまり、一様な重力）が働いている。この系が逆温度 β の平衡状態にある。

(a) 分配関数 $Z(\beta)$ を求め、対応する自由エネルギー $F(\beta; L, h_0, h_1)$ を求めよ。
(b) 容器の底面と上面での圧力は、それぞれ、

$$p_0 = \frac{1}{L^2}\frac{\partial F(\beta; L, h_0, h_1)}{\partial h_0}, \quad p_1 = -\frac{1}{L^2}\frac{\partial F(\beta; L, h_0, h_1)}{\partial h_1} \tag{13}$$

と書ける。この事実を熱力学の立場から説明せよ。
(c) p_0, p_1 を求めよ。
(d) 二つの圧力の差を求め、その意味を述べよ。

リオリ力は気体の平衡状態には影響しないことがわかる。