統計力学 I　第 1 回レポート (2016/5/25 出題)

1. 二次元の理想気体

一辺が L の正方形状の領域内に閉じ込められた、質量 m の自由粒子の、定常状態の Schrödinger 方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\varphi(x,y)=E\,\varphi(x,y) \tag{1}$$

で与えられる。ただし、$0\le x\le L,\ \ 0\le y\le L$ であり、任意の x,y について、$\varphi(x,0)=\varphi(x,L)=\varphi(0,y)=\varphi(L,y)=0$ という境界条件（つまり、正方形の辺上で $\varphi(x,y)=0$）を課す。

1. $\varphi(x,y)=\varphi_{\mathrm{x}}(x)\varphi_{\mathrm{y}}(y)$ と変数分離することにより (1) を解いて、すべてのエネルギー固有値とすべての（規格化された）エネルギー固有状態を求めよ。

2. この系の状態数を求めよ。ただし、状態数とはエネルギー固有値が $E_n\le E$ を満たすラベル n の総数のことであり、$E\gg E_0$ ($E_0=\hbar^2\pi^2/(2mL^2)$) であるとする。

同じ系に質量 m の N 個の自由粒子が閉じ込められている場合を考える。これらの粒子に対する外力、および粒子間相互作用は働かないと仮定する。

3. この場合の状態数 $\tilde{\Omega}(E)$ を求めよ。ただし $E\gg E_0$ とし、半径 R の d 次元球の体積は、d が偶数の場合

$$V_d(R)=\frac{\pi^{d/2}}{(d/2)!}R^d \tag{2}$$

であることを用いてよい。

4. 上の状態数 $\tilde{\Omega}(E)$ を $N!$ で割ったものを改めて、$\Omega(E)$ と定義する。N が十分大きいときに、$\Omega(E)$ を数密度 $\rho=N/L^2$, エネルギー密度 $\epsilon=E/L^2$ を用いて表せ。ただし、$m,\pi,\hbar$ などによっている複雑な定数を α_1 と置いてよい。また、Stirling の公式を証明せず用いてよい。（結果が、$\Omega(E)\sim\exp(V\sigma(\epsilon,\rho))$ と書けることを確認しよう。ただし、$V=L^2$。）

上の N 個の自由粒子からなる系が、逆温度 β の平衡状態にあるとする。以下では高温 ($\beta E_0\ll 1$) の場合を考える。

5. この系の分配関数 $Z_N(\beta)$ を評価せよ。また、この系のエネルギー期待値を求めよ。

6. この系のエネルギー密度のゆらぎを求めよ。

7. この系のヘルムホルツの自由エネルギー $F(\beta,N)$ を求めよ。ただし、$N\gg 1$ とし、Stirling の公式を用いてよい。また、単位面積あたりの自由エネルギー $F(\beta,N)/L^2$ を、弱温度 β と密度 ρ を用いて表せ。ただし、$m,\pi,\hbar$ などによっている複雑な定数を α_2 と置いてよい。

2. Boltzmann-Shannon エントロピーと Tsallis のエントロピー

[TA: 近藤寛記 出題]

確率分布 p_i $(i = 1, 2, \cdots, W)$ が与えられた時に、Boltzmann-Shannon エントロピーは、以下で定義される。

$$S(p_1, p_2, \cdots, p_W) = -k \sum_{i=1}^{W} p_i \mathrm{log} p_i \tag{3}$$

ただし k は Boltzmann 定数である。このエントロピーは以下の 4 つの性質を満たす。

(i) p_i について連続である。

(ii) 等確率分布 $p_1 = p_2 = \cdots = p_W = 1/W$ において最大になる。

(iii) $S(p_1, p_2, \cdots, p_W, 0) = S(p_1, p_2, \cdots, p_W)$ が成立する。

(iv) 加法性を満たす。

ここでの加法性とは、2 つの系 A と B が独立であるとき、その合成系 (A, B) の Boltzmann-Shannon エントロピー $S(A, B)$ に対して、

$$S(A, B) = S(A) + S(B) \tag{4}$$

が成り立つことである。ここで、$S(A), S(B)$ は、それぞれ系 A, B の Boltzmann-Shannon エントロピーである。すなわち、系 A が A_i $(i = 1, 2, \cdots, W_A)$ という値を持つ確率を $p_i(A)$、系 B が B_j $(j = 1, 2, \cdots, W_B)$ という値を持つ確率を $p_j(B)$ とするとき、

$$S(A) = -k \sum_{i=1}^{W_A} p_i(A) \, \mathrm{log} p_i(A) \tag{5}$$

$$S(B) = -k \sum_{j=1}^{W_B} p_j(B) \, \mathrm{log} p_j(B) \tag{6}$$

である。

S が (i),(iii) を満たしていることは明らかである。

1. (ii) を満たしていることを確かめよ。すなわち、$\sum_{i=1}^{W} p_i = 1$ の下で $S(p_1, p_2, \cdots, p_W)$ を最大化するようなものが $p_1 = p_2 = \cdots = p_W = 1/W$ であることを示せ。

2. 2 つの独立な系 A, B について (4) を示せ。

加法性の成り立たない系は、このままでは記述できない。そこで、加法性のない系を記述するために、加法性を持たないエントロピーを作ってみる。

$$S_q(p_1, p_2, \cdots, p_W) = \frac{1}{1-q}\left[\sum_{i=1}^{W}(p_i)^q - 1\right] \qquad (q > 0) \tag{7}$$

これを、Tsallis のエントロピーという。これは、以下の 4 つの性質を満たす。

(i) p_i について連続である。

(ii) 等確率分布 $p_1 = p_2 = \cdots = p_W = 1/W$ において最大になる。

(iii) $S_q(p_1, p_2, \cdots, p_W, 0) = S_q(p_1, p_2, \cdots, p_W)$ が成立する。

(iv) 擬加法性（後述）を満たす。

S_q が (i),(iii) を満たしていることは明らかである。

3. (ii) を満たしていることを確かめよ。

4. S_q については (4) のような加法性は成り立たない。2 つの独立な系 A, B からなる合成系 (A, B) に対する $S_q(A, B)$ を計算し、その結果を q, $S_q(A)$, $S_q(B)$ を用いてあらわせ。（この関係式を擬加法性という。）

5. $q \to 1$ の極限で Tsallis のエントロピーは、Boltzmann-Shannon エントロピーに一致することを確かめよ。

このことから、Tsallis のエントロピーは Boltzmann-Shannon エントロピーを加法性が成り立たない場合に拡張したものであることがわかる。