統計力学I　第1回レポート (2016/5/30 出題)

1. カノニカル分布と Jarzynski 等式

エネルギー固有状態が $i = 1, 2, ..., \Omega$ で指定され、対応するエネルギー固有値が E_i である量子系を考える。この系の平衡状態の性質は、カノニカル分布という確率モデルにより記述される。最初、この系が逆温度 β の平衡状態にあるとする。

1. この系の分配関数 $Z(\beta)$、状態 i の出現する確率 p_i を求めよ。

2. エネルギー期待値とヘルムホルツの自由エネルギーを $Z(\beta)$ を用いて表せ。

3. 系のハミルトニアンを $\hat{H}$ とする。$\hat{H}$ のゆらぎが、
$$\sigma_\beta[\hat{H}] = \sqrt{\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \log Z(\beta)} \tag{1}$$
で与えられることを示せ。

次に上の系へ操作を施すことを考える。この操作の結果は、状態の確率的な変化で表現されるとする。つまり、系の初期状態が i のとき、操作後の状態が j である確率は、$\tau_{i\to j}$ (≥ 0) であるとする。また、この確率は

$$\sum_{j=1}^{\Omega} \tau_{i\to j} = 1 \quad (i = 1, 2, ..., \Omega), \qquad \sum_{i=1}^{\Omega} \tau_{i\to j} = 1 \quad (j = 1, 2, ..., \Omega) \tag{2}$$

という規格化条件を満たすものとする。系の初期状態が i であり、かつ操作後の状態が j である確率は、$p_{i,j} := p_i \tau_{i\to j}$ で与えられる。また、一般に i, j の両方に依存する物理量 $f_{i,j}$ の期待値を

$$\langle \hat{f} \rangle := \sum_{i=1}^{\Omega} \sum_{j=1}^{\Omega} p_{i,j} f_{i,j} \tag{3}$$

と定義する。

4. 確率 $p_{i,j}$ が規格化されていることを示せ。

5. 系の初期状態が i であり、操作後の状態が j であるとき、系が外にした仕事は、$W_{i\to j} := E_i - E_j$ である。このとき、Jarzynski 等式
$$\langle e^{\beta \hat{W}} \rangle = 1 \tag{4}$$
を示せ。

6. $\Omega = 2$ として、(2) を満たす $\tau_{i\to j}$ の例をひとつ構成し、$\langle e^{\beta \hat{W}} \rangle$ と $\langle \hat{W} \rangle$ を具体的に計算し、その結果について考察せよ。

2. 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、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\varphi(x,y)=E\,\varphi(x,y) \tag{5}$$

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 (5) 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

$$V_d(R)=\frac{\pi^{d/2}}{(d/2)!}R^d \tag{6}$$

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。