熱力学 1　第 12 講課題
8223036　栗山淳
①エネルギーの期待値が書きのように表せることを示せ。

$$\langle E\rangle = -\frac{\partial logZ}{\partial\beta}$$

$$-\frac{\partial\log Z}{\partial\beta} = -\frac{\partial\log Z}{\partial Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta}$$

$$= -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta}$$

$Z = \sum_j e^{-\frac{E_j}{kT}}$であるから,

$$-\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta} = -\frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial\beta}\sum_j e^{-\frac{E_j}{kT}}$$

ここで$\beta = \frac{1}{kT}$より

$$-\frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial\beta}\sum_j e^{-\frac{E_j}{kT}} = -\frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial\beta}\sum_j e^{-E_j\beta}$$

$$= -\frac{1}{Z}\sum_j -E_j e^{-E_j\beta}$$

$$= \sum_j \frac{E_j e^{-E_j\beta}}{Z}$$

ここで$P_j = \frac{e^{-E_j\beta}}{Z}$より

$$\sum_j \frac{E_j e^{-E_j\beta}}{Z} = \sum_j E_j P_j$$

$$\sum_j E_j P_j = \langle E\rangle$$

よって$\langle E\rangle = -\frac{\partial logZ}{\partial\beta}$が成り立つことが示された。

②エネルギーの揺らぎ(分散)が下記のように表せることを示せ。

$$\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2 = \frac{\partial^2\log Z}{\partial\beta^2}$$

$$\langle E^2\rangle = \sum_j P_j E_j^2$$

$P_j = \frac{e^{-E_j\beta}}{Z}$より

$$=\sum_j \frac{E_j^2 e^{-E_i\beta}}{Z}$$

$$=\frac{1}{Z}\sum_j E_j^2 e^{-E_i\beta}$$

$$=\frac{1}{Z}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\sum_j e^{-E_i\beta}$$

$Z=\ \sum_j e^{-E_i\beta}$より

$$=\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial\beta^2}$$

よって$\langle E^2\rangle=\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial\beta^2}$であることが分かった。

また，$\langle E\rangle^2$は①の結果を用いると次のように表すことができる。

$$\langle E\rangle^2=\left(-\frac{\partial logZ}{\partial\beta}\right)^2$$

$$=\left(-\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta}\right)^2$$

$$=\frac{1}{Z^2}\left(\frac{\partial Z}{\partial\beta}\right)^2$$

よって$\langle E\rangle^2=\frac{1}{Z^2}\frac{\partial^2 Z}{\partial\beta^2}$であることが分かった。

以上より

$$\langle E^2\rangle-\langle E\rangle^2=\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial\beta^2}-\frac{1}{Z^2}\left(\frac{\partial Z}{\partial\beta}\right)^2$$

$$=\frac{\mathrm{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial\beta^2}-\left(\frac{\partial Z}{\partial\beta}\right)^2}{Z^2}$$

$$=\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{\left(\frac{\partial Z}{\partial\beta}\right)}{Z} \qquad (\because 商の微分)$$

ここで①より$\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta}=\frac{\partial logZ}{\partial\beta}$であることが分かっているので

$$=\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{\partial logZ}{\partial\beta}$$

$$=\frac{\partial^2\log Z}{\partial\beta^2}$$

よって$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2}$が成り立つことが示された。