

統計力学1 第5回練習問題

1. カノニカル分布について、無限温度 ($\beta = 0$) の場合の分布を求めよ。(X を状態とし、エネルギー $H(X) = E$ の状態密度を W_E として、 E を確率変数として表せ。)
2. (1) で導いた無限温度の分布から $H(X)$ についてのキュムラント生成関数 $C_H(-\beta)$ を求めよ。このキュムラント生成関数をルジャンドル変換する際に、新たな変数として E を導入すると これはある分布関数におけるエネルギーの期待値になっているが、それがカノニカル分布になっている事を確認せよ。またルジャンドル変換したキュムラント母関数が、この分布関数と無限温度の分布関数の Kullback-Leibler divergence (KL-divergence) の形で書ける事を確認せよ。
(今回はキュムラント生成関数を以下で定義する。

$$C_H(-\beta) = \log \left[\int dX p(X) \exp[-\beta H(X)] \right]$$

また、分布間の擬距離として以下のように KL-divergence は定義される。

$$D_{KL}(p|q) = \int dX p(X) \log[p(X)/q(X)]$$

)

3. (2) で求めたキュムラント生成関数や分配関数を用いて、(β を逆温度とした時、) カノニカル分布におけるエネルギー期待値及び熱容量 ($\partial \langle H \rangle / \partial T$ 、定積比熱ともいう。) をキュムラント生成関数の ($\beta = 0$ を代入しない) 微分の形を用いて表せ。また、熱容量が正の値であることを示せ。
4. 第4回の問題と同じく、 L^*L^*L の立方体の中の N 個の自由粒子が平衡状態でカノニカル分布になっている時、(シュレディンガー方程式の結果から状態密度、エネルギー固有値を計算し、) 分配関数を計算してみよ。(状態密度については前回の結果をそのまま用いて良い。) また分配関数からエネルギーの期待値、自由エネルギーを求め、熱力学的な圧力 ($P = -\partial F / \partial V$) を計算せよ。