# エントロピーゼミ

hsjoihs

# 目次

		_
はじめに	 •••••	2
(1.1)	• • • • • • • • • •	2
(a)	 •••••	3
(b)	 •••••	3
(c)	 •••••	3
(d)	 •••••	3
(1.4)	 • • • • • • • • • • • •	4
おき	 •••••	5
(2.7)	 •••••	6
(a)	 •••••	6
(b)	 •••••	7
(c)	 •••••	7
補足	 •••••	8
(2.8)	 •••••	9
(a)	 	. 10
(b)		. 10

(3.1)	. 10
(3.7)	. 11
(a)	. 11
(b)	. 12
(3.8)	. 14
(a)	. 15
(a) 補足	. 15
(b)	. 16

### はじめに

およそこういう pdf というのは、書かれた文脈から切り離されて電子の海をなんか漂ったり漂わなかったりするものである。ということで最低限の文脈をファイル内に収めておいたほうがよい。以下は James P. Sethna の Statistical Mechanics: Entropy, Order Parameters And Complexity (2020 年 8 月 18 日現在 http://pages.physics.cornell.edu/-sethna/StatMech/EntropyOrderParametersComplexity.pdf に存在する)第一版の演習題を hsjoihs が解いたり解かなかったり補足したりしたものである。 演習題の原文を見ながら読むことが想定されているが、一応この pdf だけで最低限の文脈は追うことができるように書こうと意図はしている。

# (1.1)

3 面ダイス(1 か 2 か 3 が出る)が 2 つあって、それらを使って「区別可能なさいころ」「ボゾンさいころ」「フェルミオンさいころ」を転がせという問題。「区別可能なさいころ」は大学入試で出てくるやつで、「ボゾンさいころ」は 2 つ目のさいころが 1 つ目より小さかったらそれは無かったことにして両方振り直す。「フェルミオンさいころ」は 2 つ目のさいころが 1 つ目以下だったら両方振り直し。

(a)

3 面ダイスが公平であるとき、目の合計が 5 になる確率は「区別可能」「ボゾン」「フェルミオン」でどう変わるか、という問題。「区別可能」の場合は事象の確率がそれぞれ  $\frac{1}{9}$  であるなかで (2,3) と (3,2) があるので確率は  $\frac{2}{9}$  である。「ボゾン」の場合は、本の Fig. 1.4 を見ればわかるように事象の確率はそれぞれ  $\frac{1}{6}$  で、そのうちひとつしかないので当然  $\frac{1}{6}$ 、「フェルミオン」の場合は事象の確率はそれぞれ  $\frac{1}{3}$  なので  $\frac{1}{3}$  となる。

(b)

2 つの 3 面ダイスの出目が等しくなる確率。「区別可能」では  $\frac{3}{9}=\frac{1}{3}$ 。「ボゾン」では  $\frac{3}{6}=\frac{1}{2}$ で「フェルミオン」では 0。

(c)

(d)

今度は表がp=1/3、裏が2/3の確率で出るコイン。「無かったことにする」をしていない

という条件で全部裏になる確率  $p_{TTT\cdots}$  は当然  $\left(\frac{2}{3}\right)^M$ 。「区別可能」においては Z は当然 1 なので、「区別可能」で M 枚が全部が裏になる確率は  $p_{TTT\cdots}/Z_{\mathrm{Distinguishable}} = \left(\frac{2}{3}\right)^M$ 。「ボゾン」で全部が裏になる確率は、同様に  $\left(\frac{2}{3}\right)^M/Z_{\mathrm{Boson}}$  と書けるわけである。さて、「無かったことにする」をしていないという条件のもとでは、M-m 枚の裏の後に m 枚の表が来る確率は  $\left(\frac{2}{3}\right)^{M-m} \left(\frac{1}{3}\right)^m = \frac{2^{M-m}}{3^M}$  であって、これを足し合わせることで得られる  $Z_{\mathrm{Boson}}$  は  $\sum_{m=0}^{M} \frac{2^{M-m}}{3^M} = \frac{2^{M+1}-1}{3^M}$  である。(暗算は不安なので M=1 と M=2 を入れて考えてみるが、えーと M=1 なら 1 で合っていて、M=2 なら 2/9 だけ削られるから、はい多分合ってるでしょう。)ということで、「ボゾン」ですべてのコインが裏になる確率は

$$\frac{\left(\frac{2}{3}\right)^{M}}{2^{M+1}-1} = \frac{2^{M}}{2^{M+1}-1} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{1-2^{-M-1}}$$

なので、M が大きくなるにつれて、「ボゾン」ですべてのコインが裏になる確率は  $\frac{1}{2}$  に近づく。このように、 $M\to\infty$  の極限をとってもなお、すべてのボソンが基底状態(裏)にある確率が非 0 であることを、「ボーズ凝縮」と呼ぶ。

# (1.4)

スターリングの公式より、 $\log(n!)$  はだいたい  $n\log n - n + \log(2\pi n)/2$  であり、 もっと 雑に言うとだいたい  $n\log n - n$  である。

えっとこの問題長ったらしく誘導ついてるんですが、めんどいのでオチだけ言いますね。

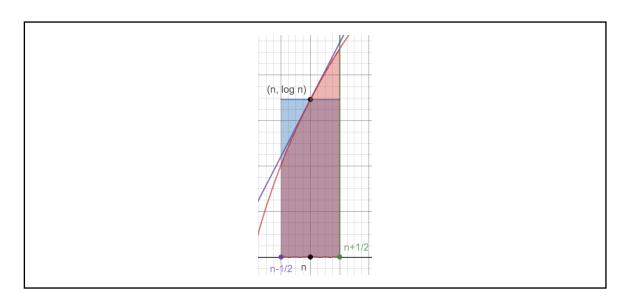


図 1

座標平面上に  $n-\frac{1}{2} \le x \le n+\frac{1}{2}, 0 \le y \le \log n$  で面積  $\log n$  の長方形を置く (青)。 ここで、 $y=\log x$  に対して  $(n,\log n)$  を通る接線(紫)を引く。 この接線で長方形を切ってできた三角形を、 $(n,\log n)$  中心に 180 度回転させて上にくっつけることでできる 台形の面積もこれまた面積  $\log n$  である。 グラフの凸性より、 $y=\log x$  のグラフと x 軸と 縦線とが囲む面積は台形の面積よりわずかに小さいことがわかり、 $\log n$  をわずかに下回ることがわかる。 ということで、k=2 から k=n まで  $\log k$  を足し合わせることで得られる  $\log n!$  は、 $\int_{1.5}^{n+\frac{1}{2}}\log x \mathrm{d}x = \left(n+\frac{1}{2}\right)\log\left(n+\frac{1}{2}\right) - \left(n+\frac{1}{2}\right) - 1.5\log 1.5 + 1.5$  よりわずかに大きい。 とりあえず  $c=-\frac{1}{2}-1.5\log 1.5 + 1.5$   $\approx 0.3918$  としておくと、 $\log n! \approx \left(n+\frac{1}{2}\right)\left(\log n+\log\left(1+\frac{1}{2n}\right)\right) - n + c \approx \left(n+\frac{1}{2}\right)\left(\log n+\frac{1}{2n}\right) - n + c$  ということで、 $\log n!$  はだいたい  $n\log n-n+\frac{1}{2}\log n+\left(\frac{1}{2}+c\right)$  であることが分かる。

#### おまけ

ところで、「わずかに小さい」でわずかに発生した誤差が積もり積もってどれくらいの大き さになるのかというのは気になるところである。図より、誤差はかなり小さそうだという直 感はあるが。 図にあるかなり小さい誤差の面積を g(n) と置く。定義より  $\log n = g(n) + \int_{n-1/2}^{n+1/2} \log x dx$  である。

これをすごく整理すると 
$$g(n) = -n \log \left( \frac{1 + \frac{1}{2n}}{1 - \frac{1}{2n}} \right) - \frac{1}{2} \log \left( 1 - \frac{1}{4n^2} \right) + 1$$
 と書けて、

 $\log(1+x)$ の級数展開でバラしてやるとこれは

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\left(4n^2\right)^{-k}}{2k(2k+1)} = \frac{1}{2 \cdot 3 \cdot 4^1 n^2} + \frac{1}{4 \cdot 5 \cdot 4^2 n^4} + \frac{1}{6 \cdot 7 \cdot 4^3 n^6} + \cdots$$

といったふうになり、減衰は  $n^{-2}$  の速さで起こりそうだとみえる。級数展開に頼ると  $x^2g(x)$  が  $x\geq 1$  で単調減少であるような気がするので、 $x\geq 2$  において  $g(x)\leq \frac{4g(2)}{x^2}$ 

ということで、
$$0 \leq \log k - \int_{k-1/2}^{k+1/2} \log x dx \leq \frac{4g(2)}{k^2}$$
を足し合わせることで

$$0 \le \log n! - \int_{1.5}^{n+1/2} \log x dx \le \sum_{k=2}^{n} \frac{4g(2)}{k^2} \le \left(-1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2}\right) 4g(2) = 2\left(\frac{\pi^2}{6} - 1\right) \log\left(\frac{432e^2}{3125}\right) \approx 0.02739$$

# (2.7)

くし型関数  $\sum_{n=-\infty}^{n=\infty}\delta(x-nL)$  を初期条件として拡散方程式  $\partial\rho/\partial t=D\partial^2\rho/\partial x^2$  を解くことを考える。

(a)

まだ時間があまり経過していないならば、-L/2 < x < L/2 の範囲内での挙動というのは、t=0 のときに原点に生えていたやつのみの拡散でだいたい近似できるはず。t=0 のときに原点に生えているディラックデルタというのは時刻 t では  $G(x,t)=\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-x^2/4Dt\right)$  になっているのだったから、初期条件がくし型関数であっても、まだ時間があまり経過していないならば、-L/2 < x < L/2 の範囲内での挙動はだいたい  $\rho(x,t) \approx \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-x^2/4Dt\right)$  らへんであることが期待される。

(b)

くし型関数を形式的にフーリエ級数展開して得られるのは

$$\frac{1}{L} + \frac{2}{L}\cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) + \frac{2}{L}\cos\left(\frac{4\pi x}{L}\right) + \frac{2}{L}\cos\left(\frac{6\pi x}{L}\right) + \cdots$$

である $^{*1}$ 。拡散方程式は、初期条件の  $\exp(\pm \mathrm{i}kx)$  に対して  $\exp(-Dk^2t)$  が掛かって時間が経つにつれ高周波成分が強く減衰していくのであったから、十分長い時間が経ったときにおける挙動というのは、まあだいたい最初の 2 項に減衰を掛けた  $\frac{1}{L}+\frac{2}{L}\cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right)\mathrm{e}^{-D(2\pi/L)^2t}$  みたいなもんだろう、と期待できる。

(c)

さて、(a) と (b) では、近似を行うことで、難しい無限和を考えずに「まあだいたいこの簡単な 代物みたいなものじゃないかな」という直感を得ることができた。とはいえ、近似というのは 「この状況ではこの項は小さいので」という判断に基づいて行うものであるのだから、それを 逆転させて「この項が小さいことを期待して近似するには、この状況でないと」というのを調 べておかねばならないわけだ。

ということで調べておこう。(a) でどんな仮定をしたかといえば、「原点以外の場所から広がってきた正規分布が -L/2 < x < L/2 の範囲にまだあまり侵略してきていない」というものであった。x = L に生えているディラックデルタが広がってきて -L/2 < x < L/2 の範囲に顕著な影響を与えてきては困るわけである。つまりそれはどういうことかというと、正規

1 ちなみに、部分和 
$$\frac{1}{L} + \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{N} \cos \left( \frac{2n\pi x}{L} \right)$$
は  $\frac{1}{L} \frac{\sin \left( \frac{(2N+1)\pi x}{L} \right)}{\sin \left( \frac{\pi x}{L} \right)}$  に等しいことが知られている(当

然ながら分母が 0 になる箇所はいい感じの対処が必要だが)(数学的帰納法を回すか、 $\frac{1}{L} + \frac{2}{L} \sum_{n=1}^{N} \exp\left(\frac{2\mathrm{i} n\pi x}{L}\right)$  の

実部と見て等比数列の和で処理)。ところで-L/2 < x < L/2という条件をつければ $\dfrac{1}{L}\dfrac{\sin\left(\dfrac{(2N+1)\pi x}{L}\right)}{\sin\left(\dfrac{\pi x}{L}\right)}$ は

だいたい 
$$\frac{1}{L} \frac{\sin\left(\frac{(2N+1)\pi x}{L}\right)}{\frac{\pi x}{L}} = \frac{1}{\pi x} \sin\left(\frac{(2N+1)\pi x}{L}\right)$$
 である。  $-$ 般に、 $\frac{\sin kx}{\pi x}$  で  $k \to \infty$  とするとディラックデルタ。

分布の標準偏差  $\sqrt{2Dt}$  が距離 L/2 に比べて十分小さいということが期待されているという意味である。この期待を  $\sqrt{2Dt}$  《 L/2 と書く。《 の前後には正の量が来て、その 2 つの量に対して「比が顕著であって前者が後者よりけっこう小さい」という期待を表す記号である。

t に関する期待に落とし込むべく、両辺を 2 乗すると、 $2Dt \ll \frac{L^2}{4}$ 、つまり  $t \ll \frac{L^2}{8D}$  が期待されていることが分かる。ここでこの 8 とかいう定数は「十分小さい」という表現の曖昧さの中に押し込んでしまうことにすると、 $\tau$  という量を  $\frac{L^2}{D}$  と定義しておいて、 $t \ll \tau$ であることを期待する、と書ける。

同じことを (b) でもやる。  $\frac{1}{L}+\frac{2}{L}\cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right)$   $\mathrm{e}^{-D(2\pi/L)^2t}+\frac{2}{L}\cos\left(\frac{4\pi x}{L}\right)$   $\mathrm{e}^{-D(4\pi/L)^2t}+\cdots$  第三項以降が無視できそうなときというのは、時間が十分経って第三項以降が第二項以前と比べて十分減衰したと言えそうなときであるわけで、つまり第三項に掛かっている減衰要素  $\mathrm{e}^{-D(4\pi/L)^2t}$  が 第二項に掛かっている減衰要素  $\mathrm{e}^{-D(2\pi/L)^2t}$  より十分小さいときである。 つまり

$$e^{-D(4\pi/L)^2 t} \ll e^{-D(2\pi/L)^2 t}$$

$$1 \ll e^{-4\pi^2 t D/L^2} e^{16\pi^2 t D/L^2} = e^{12\pi^2 t D/L^2}$$

さて、 $\mathrm{e}^A$  が 1 より顕著に大きくあるためには、A が 1 よりもすこし大きくあってほしい。 A が 1 より顕著に大きいのなら、もうそれはそれは安心して「 $\mathrm{e}^A$  が 1 より顕著に大きい」と言えるので、先程の式に戻るなら  $1 \ll 12\pi^2 tD/L^2$  であれば安心。 $1 \ll tD/L^2$  であればさらに安心( $12\pi^2 \approx 100$  倍して初めて 1 をちょっと上回っていれば十分なのに、もとから 1 より顕著に大きいのなら何も心配ない)。 ということで  $L^2/D \ll t$  であれば (b) の近似はものすごくよい近似である。

#### 補足

ということで、L と D から計算できる  $\tau$  という値を比較対象として、t が十分大きい・小さいという話をすることができた。一般に物理学において、なんらかの物理量が「大きい」「小さい」という表現をするときには、「なにと比べて?」という質問が欠かせない。なお、今回はわりと真面目に言語化したが、 そもそも  $\ll$  というのは雑な近似の適用範囲を雑に測るためのツールであり、意図的にかなり曖昧な表現である。実際、(b) に関しては「 $L^2/D$  と比較して t が極端に小さいというわけでないのなら、(b) の近似はものすごくよい近似である」である一方で、(a) に関してはそもそも平方根が顕著さを圧縮してしまうせいで「 $L^2/D$  と比較して t が極端に小さくないと (a) の近似はかなり悪い近似になってしまう」という性質を持つ。

百聞は一見に如かず。https://www.desmos.com/calculator/ayd2jkqk3o で実際の挙動を見てみよう。L=2.6、D=0.1 に設定してあるので  $\tau=67.6$  である。 $0.05 \le t \le 0.7$  ぐらいにおいては (a) はよい近似であり、(b) は微妙である。これが t=2 ぐらいになってくると (b) がかなりよい近似になってきて、一方 (a) は  $\pm L/2$  近くでの誤差が目立つようになってくる。t=15 ぐらいになってくるともう (b) も実際の解もただの真っ平らにしか見えない。

「(a) は  $t \ll \tau$  での近似、(b) は  $\tau \ll t$  での近似」という捉え方は、こういう細部を全部吹き飛ばした、かなり雑で荒っぽい分析である(そのぶん暗算でも十分できてかなり便利)、ということ。

(2.8)

熱伝導率  $k_t$  である材料での熱の動きを調べる。温度は場所と時刻に依存して決まり、T(x,y,z,t)、または  $T(\mathbf{r},t)$  と書ける(太字はベクトルを表す)。このときエネルギーの流れ  $\mathbf{J}(x,y,z,t)$  はベクトル場であり、各点において

- ベクトル **J** の x 成分は  $-k_t \partial T/\partial x$
- ベクトル **J** の y 成分は  $-k_t \partial T/\partial y$
- ベクトル  $\mathbf{J}$  の z 成分は  $-k_t \partial T/\partial z$

であると言える(実は、拡散方程式の導出と同様、ランダムウォークからこれを出すこともできる)。これを  ${f J}=-k_t \nabla T$  と略記する。

一方、エネルギーは局所的に保存される。これはつまりエネルギーには増えない・減らないという制約だけではなく突然ワープしてこないということも言っている。この事実は、エネルギー密度を E(x,y,z,t) とすると、

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -\left(\frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z}\right)$$

と書ける。(ここで  $J_x,J_y,J_z$  とは  ${\bf J}$  の x 成分、y 成分、z 成分である。)なぜエネルギー保存をこう表記できるのかを知らない人は、https://eman-physics.net/fluid/continuity.html の「電磁気学をまだ学んでいない人向けの説明」 の辺りを軽く眺めるか、 もしくは 「ヘーそう表記できるんか」と流してこの先を読み進めよう。上記の式は  $\partial E/\partial t = -\nabla\cdot{\bf J}$  と略記する。

(a)

場所にも時刻にも依存しない  $c_p$  と  $\rho$  を使って  $E=c_p \rho T$  と書ける場合、今まで出てきた式を代入するだけで簡単に

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{c_n \rho} \frac{\partial E}{\partial t} = -\frac{1}{c_n \rho} \nabla \cdot \mathbf{J} = \frac{k_t}{c_n \rho} \nabla \cdot \nabla T$$

が分かる。これは  $\frac{\partial T}{\partial t}=\frac{k_t}{c_p\rho}\nabla^2 T$ と略記され、Tが拡散方程式を満たすことが分かる。

(b)

 $T(x,y,z,0) = \sin(kx)$  であるときに T(x,y,z,t) を求めたい。

「もしかしたら解は  $T(x,y,z,t)=f(t)\sin(kx)$  と書けるのかもしれない」という謎の着想を思いついてあげることによってこれは簡単に解くことができる。この謎の着想を残りに代入してやる、まず t=0 のことを考えてやると f(0)=1 である。次に、 $\frac{\partial T}{\partial t}$  というのは  $f'(t)\sin(kx)$  である。 最後に、 $\nabla^2 T=\partial^2 T/\partial x^2+\partial^2 T/\partial y^2+\partial^2 T/\partial z^2$  だが、y や z 方向には変化がないので x だけ考えればよく、 $\nabla^2 T$  とは  $-k^2 f(t)\sin(kx)$  のことである。

以上を  $\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k_t}{c_p \rho} \nabla^2 T$  に代入すれば、 $f'(t) \sin(kx) = -\frac{k_t}{c_p \rho} k^2 f(t) \sin(kx)$  である。f は微分することで  $-\frac{k_t}{c_p \rho} k^2$  倍になる関数であるのだから、指数関数であり、f(0) = 1 と合わせて考えると  $f(t) = \exp\left(-\frac{k_t}{c_p \rho} k^2 t\right)$  である。

ということで解は  $T(x,y,z,t)=\exp\left(-\frac{k_t}{c_p\rho}k^2t\right)\sin(kx)$  であるわけだ。 つまり振幅は指数関数的に減衰していくのであって、その速さは波長の 2 乗に反比例する。

(3.1)

もしボルツマン定数  $k_B=1.380649\times 10^{-23} {
m J/K}$  (定義値) で温度を表す習慣になっていたら、(気) 温を表すのにはジュールにどのような接頭辞をつけていただろうか?という問題。 室温はだいたい  $300{
m K}$  ぐらいであるため、だいたい  $4\times 10^{-21} {
m J}$  である。21 を 3 で割ると 7 で、7 は古典ギリシャ語で $\epsilon\pi\tau\alpha$  (heptá) であるのだからこれは 4 ゼプトジュール。

(3.7)

単原子分子であるヘリウムと、二原子分子である水素をともに理想気体として近似し、二種の混合気体について考える問題。粒子数が N の単原子分子理想気体について  $\Omega_1(E_1) \propto E_1^{3N/2}$  であることはすでに示している。そして実は(常識的な温度においては) $\Omega_2(E_2) \propto E_2^{5N/2}$  であることが知られている(この話は間接的には高校物理でも出てくる)。

(a)

系 1 がエネルギー  $E_1$  であるような確率密度 $^{*2}$   $\rho(E_1)=\frac{\Omega_1(E_1)\Omega_2(E-E_1)}{\Omega(E)}$  を求めよ $^{*3}$ 、という問題。ついでに確率密度を最大にするような  $E_1$  である  $E_1^{\max}$  も求めてほしいらしい。

ということで計算する。 まず  $\Omega(E)$  というのは  $\int_0^E \Omega_1(E_a)\Omega_2(E-E_a)\mathrm{d}E_a$  \*4であるわけで、 題意よりこれは  $\int_0^E E_a^{3N/2} \big(E-E_a\big)^{5N/2}\mathrm{d}E_a$  である。 これを真面目に計算するのは大変そうだが、大学入試でお世話になった人も多いであろう「1/6 公式」

$$\int_{\alpha}^{\beta} (x - \alpha)(\beta - x)dx = \frac{1}{6}(\beta - \alpha)^{3}$$

の一般化である「第1種オイラー積分」

$$\int_{\alpha}^{\beta} (x-\alpha)^m (\beta-x)^n dx = \frac{m!n!}{(m+n+1)!} (\beta-\alpha)^{m+n+1}$$

2 よく使われる表現だが、慣れていない人にとって誤解を招きやすい気もするのでもう少しひらいて書くと、「エネルギーが  $E_1$  と  $E_1+\Delta E$  の間に存在する確率がだいたい  $\rho(E_1)\Delta E$  である。 $\Delta E$  がゼロに近づくほどこの近似が良くなる」というような代物として考えられる確率密度関数、という感じの意味である。

3 問題文には一言も書いてないが、総エネルギーを E と固定して問題を解くという話である。

4 つまり、 $0 \leq E_a \leq E$  の間を  $E_a$  が動いたとき、それぞれの  $E_a$  において、「気体 1 がエネルギー  $E_a$  を持ったときの状態数 x 気体 2 が残りのエネルギーを持ったときの状態数」 を計算し、 最後にそれを全部連続的に足す、つまり積分したもの、みたいに把握しておけば良い

がそのまま当てはまり、 $\Omega(E)=\frac{(3N/2)!(5N/2)!}{(1+4N)!}\,E^{1+4N}$  とあっけなく求まる。 ということで

$$\rho(E_1) = \frac{\Omega_1(E_1)\Omega_2(E - E_1)}{\Omega(E)} = \frac{E_1^{3N/2}(E - E_1)^{5N/2}}{\frac{(3N/2)!(5N/2)!}{(1+4N)!}} E^{1+4N}$$
$$= \frac{(1+4N)!}{(3N/2)!(5N/2)!} \frac{1}{E} \left(\frac{E_1}{E}\right)^{3N/2} \left(1 - \frac{E_1}{E}\right)^{5N/2}$$

と求まった\*5。

「ついでに確率密度を最大にするような  $E_1$  である  $E_1^{\max}$  も求めてほしい」と言われているのでそれも。 とりあえず入力がめんどいので  $\eta=E_1/E$ 、 $\alpha=\frac{(1+4N)!}{(3N/2)!(5N/2)!}\frac{1}{E}$  と置いてやると  $\rho(E\eta)=\alpha\eta^{3N/2}(1-\eta)^{5N/2}$ 、右辺を  $\eta$  で微分すれば

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}\rho(E\eta) = \alpha \left(\eta^{3N/2}\right)' (1-\eta)^{5N/2} + \alpha \left(\eta^{3N/2}\right) \left((1-\eta)^{5N/2}\right)'$$

$$= \alpha \left(\frac{3N}{2}\eta^{\frac{3N}{2}-1}\right) (1-\eta)^{5N/2} + \alpha \left(\eta^{3N/2}\right) \left(-\frac{5N}{2}(1-\eta)^{\frac{5N}{2}-1}\right)$$

$$= \alpha \eta^{3N/2} (1-\eta)^{5N/2} \left(\frac{3N}{2\eta} - \frac{5N}{2(1-\eta)}\right)$$

 $\frac{3N}{2\eta} - \frac{5N}{2(1-\eta)}$ が 0 になるのは  $3(1-\eta) = 5\eta$ 、 つまり  $3 = 8\eta$  であるときなので、  $E_1^{\max} = \frac{3}{8}E$  といえる。

(b)

今求めた  $ho(E_1)$  をガウシアンで近似しろ、という問題。ガウシアンというのは指数関数の肩

<sup>5</sup> ここで  $\frac{1}{E}$  の因子が出てきているが、それは当然のことである。先程述べたように、確率密度というのは「エネルギーが  $E_1$  と  $E_1$  +  $\Delta E$  の間に存在する確率がだいたい  $\rho(E_1)\Delta E$  である。 $\Delta E$  がゼロに近づくほどこの近似が良くなる」という代物なのだから、確率密度は  $\Delta E$  を掛け算して無次元量になるようであってほしいわけである。

に二次関数が載っている形なので、 $\rho(E_1)$  の対数をテイラー展開して高次の項を落としてやることで近似ができそうである。 $\eta=\frac{3}{8}$  で最大になるのだから、そこを中心にテイラー展開をしたいので、 $\varepsilon=\eta-\frac{3}{8}$  としておく。

$$\begin{split} \log \left( \rho(E\eta) \right) &= \log \alpha + \frac{3N}{2} \log \eta + \frac{5N}{2} \log(1 - \eta) \\ &= \log \alpha + \frac{3N}{2} \log \left( \frac{3}{8} + \varepsilon \right) + \frac{5N}{2} \log \left( \frac{5}{8} - \varepsilon \right) \\ &= \left( \log \alpha + \frac{3N}{2} \log \frac{3}{8} + \frac{5N}{2} \log \frac{5}{8} \right) + \frac{3N}{2} \log \left( 1 + \frac{8\varepsilon}{3} \right) + \frac{5N}{2} \log \left( 1 - \frac{8\varepsilon}{5} \right) \\ &\approx \left( \log \alpha + \frac{3N}{2} \log \frac{3}{8} + \frac{5N}{2} \log \frac{5}{8} \right) + \frac{3N}{2} \left( \frac{8\varepsilon}{3} - \frac{1}{2} \left( \frac{8\varepsilon}{3} \right)^2 \right) + \frac{5N}{2} \left( -\frac{8\varepsilon}{5} - \frac{1}{2} \left( \frac{8\varepsilon}{5} \right)^2 \right) \\ &= \left( \log \alpha + \frac{3N}{2} \log \frac{3}{8} + \frac{5N}{2} \log \frac{5}{8} \right) + \frac{N}{2} \left( 8\varepsilon - \frac{32\varepsilon^2}{3} \right) + \frac{N}{2} \left( -8\varepsilon - \frac{32\varepsilon^2}{5} \right) \\ &= \left( \log \alpha + \frac{3N}{2} \log \frac{3}{8} + \frac{5N}{2} \log \frac{5}{8} \right) + \frac{32N\varepsilon^2}{2} \left( -\frac{1}{3} - \frac{1}{5} \right) \\ &= \left( \log \alpha + \frac{3N}{2} \log \frac{3}{8} + \frac{5N}{2} \log \frac{5}{8} \right) - \frac{128}{15} N\varepsilon^2 \end{split}$$

一応定数項も計算しておくか。

$$\log((4N)!) - \log((3N/2)!) - \log((5N/2)!) + \frac{3N}{2}\log\frac{3}{8} + \frac{5N}{2}\log\frac{5}{8} + \log(1+4N) - \log E$$

$$\approx 4N\log(4N) - 4N + \frac{1}{2}\log(8\pi N)$$

$$-\frac{3N}{2}\log(3N/2) + \frac{3N}{2} - \frac{1}{2}\log(3\pi N)$$

$$-\frac{5N}{2}\log(5N/2) + \frac{5N}{2} - \frac{1}{2}\log(5\pi N)$$

$$+\frac{3N}{2}\log\frac{3}{8} + \frac{5N}{2}\log\frac{5}{8} + \log(1+4N) - \log E$$

 $\log N$  より速く増大する項はすべて打ち消し合い、結果として定数項は

$$\frac{1}{2}\log\left(\frac{8\pi N}{3\pi N\cdot 5\pi N}\right) + \log(1+4N) - \log E = \log\sqrt{\frac{8(1+4N)^2}{15\pi NE^2}}$$

となる。

ということで、以上をまとめると、 $\log \left( \rho(E\eta) \right) \approx \log \sqrt{\frac{8(1+4N)^2}{15\pi N E^2}} - \frac{128}{15} N \left( \eta - \frac{3}{8} \right)^2$ であり、

$$\rho(E_1) \approx \sqrt{\frac{128N^2}{15\pi N E^2}} \exp\left(-\frac{128}{15}N\left(\frac{E_1}{E} - \frac{3}{8}\right)^2\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt{\frac{15E^2}{256N}}} \exp\left(-\frac{\left(E_1 - \frac{3E}{8}\right)^2}{2 \cdot \frac{15}{256}\frac{E^2}{N}}\right)$$

と、平均  $\frac{3E}{8}$  で分散  $\frac{15E^2}{256N}$  とする正規分布で近似できることが分かった。 $^{*6}$ 

ここから取り出せる物理学的に有意義な量としては、平均エネルギー  $\langle E_1 \rangle = \frac{3E}{8}$ 、一粒子あたりの「エネルギーの揺らぎ」  $\frac{\sqrt{\left\langle \left(E_1 - E_1^{\max}\right)^2 \right\rangle}}{N} = \frac{1}{N} \sqrt{\frac{15}{256}} \frac{E^2}{N} = \frac{3E}{8N} \sqrt{\frac{5}{12N}} = \left\langle \frac{E_1}{N} \right\rangle \sqrt{\frac{5}{12N}}$  などがある。

## (3.8)

本文 (3.28) (脚注にあった計算なので読み合わせでは飛ばしている)によると、系が系 1 と 系 2 から成り立っていて系 1 にはエネルギー  $E_1$ 、系 2 にはエネルギー  $E_2$  =  $E - E_1$  がある という状況においては、 $E_1$  の確率密度分布はガウシアンで、その分散は  $\sigma_{E_1}^2 = -\frac{k_B}{\frac{\partial^2 S_1}{\partial E_1^2} + \frac{\partial^2 S_2}{\partial E_2^2}}$  で

<sup>6</sup> 定数項の計算めっちゃ面倒でしたね。ということで、(本の本文にあるように) 定数項は捨てて計算し、あとで正規化された確率密度分布になるように(というか正規分布の形になるように) 定数項の辻褄を合わせるのが普通です。

あるらしい。\*7

(a)

$$c_v$$
 を粒子あたりの定積比熱  $c_v = rac{1}{N}rac{\partial E}{\partial T}\left|_{V,N}$  としたとき、 $rac{1}{k_B}rac{\partial^2 S}{\partial E^2}\left|_{V,N} = -rac{1}{k_B T}rac{1}{Nc_v T}$ 

を示せという問題。

まず温度の定義より 
$$\frac{\partial S}{\partial E} \Big|_{V,N} = \frac{1}{T}$$
であるので 
$$\frac{1}{k_B} \frac{\partial^2 S}{\partial E^2} \Big|_{V,N} = \frac{1}{k_B} \frac{\partial (1/T)}{\partial E} \Big|_{V,N} = \frac{1}{k_B} \left( -\frac{1}{T^2} \right) \frac{\partial T}{\partial E} \Big|_{V,N}$$
 
$$= -\frac{1}{k_B T^2 \frac{\partial E}{\partial T}} = -\frac{1}{k_B T^2 N c_v}$$

ということで示された。

### (a) 補足

計算自体は簡単だったが(というかほぼ定義を組み合わせるだけ)、これにはどのような物理学的解釈を与えることができるのだろうか。この答えは丁寧にも問題文に書いてある。  $\frac{1}{k_BT}\frac{1}{Nc_vT}$ とあるが、 $Nc_vT$ というのはだいたい絶対零度からTまで系の温度をあげるのに必要なエネルギーであり(特に $c_v$ が温度に依存しなければ厳密にそう)系全体が持っているエネルギーぐらいの大きさの量である。一方で $k_BT$ というのはそれぞれの分子が持っているエネルギーぐらいの大きさの量である。

7 念のためさっきの (3.7) の問題がこれで解けることを確認しておく。 $\Omega_1(E_1) \propto E_1^{3N/2}$  なので対数 取ってボルツマン定数掛けて  $S_1(E_1) = \frac{3N}{2} k_B \log E_1$  であって、 $\Omega_2(E_2) \propto E_2^{5N/2}$  なので  $S_2(E_2) = \frac{5N}{2} k_B \log E_2$  となる。 $\frac{\partial^2 S_1}{\partial E_1^2} = \frac{3N}{2} k_B \frac{\partial (1/E_1)}{\partial E_1} = -\frac{3N}{2} k_B \frac{1}{E_1^2}$ 、同様に  $\frac{\partial^2 S_2}{\partial E_2^2} = -\frac{5N}{2} k_B \frac{1}{E_2^2}$  なので結果として  $\sigma_{E_1}^2 = -\frac{k_B}{-\frac{3N}{2} k_B \frac{1}{E_1^2} - \frac{5N}{2} k_B \frac{1}{E_2^2}} = \frac{1}{\frac{3N}{2} \frac{64}{9E^2} + \frac{5N}{2} \frac{64}{25E^2}} = \frac{1}{N\frac{32}{3E^2} + N\frac{32}{5E^2}} = \frac{1}{N\frac{32}{E^2} \frac{8}{15}} = \frac{15E^2}{256N^2}$  わぁかんたん。

 $-rac{1}{k_B}rac{\partial^2 S}{\partial E^2}$  の逆数というのはエネルギーのゆらぎ幅の 2 乗ぐらいであるのだから、 $\sqrt{Nc_vT\cdot k_BT}$  というのはエネルギーのゆらぎ幅ぐらいであり、つまりエネルギーのゆらぎ幅は  $Nc_vT$  と  $k_BT$  の相乗平均みたいな振る舞いをする。つまり、一粒子あたりのエネルギーの  $\sqrt{N}$  倍オーダー。

これを N で割ると、一粒子あたりの「エネルギーの揺らぎ」は一粒子あたりのエネルギーの  $1/\sqrt{N}$  倍オーダー。

このような視点で見てみると、これって応答(系をこれぐらい変化させるには外部からどれくらいのことをしなければならないか。今回は比熱。)と揺らぎとの間に式が成り立っているということであってすごい。これを「揺動応答関係」と呼ぶらしい。

(b)

系が粒子数 N の系 1 と粒子数 N の系 2 から成り立っていて、それぞれの比熱が  $c_v^{(1)}$  と  $c_v^{(2)}$  であるとき、

$$\frac{1}{c_v^{(1)}} + \frac{1}{c_v^{(2)}} = \frac{Nk_B T^2}{\sigma_{E_1}^2}$$

であることを示せ、という問題。 まあこれもそのままで、 さっき示した  $\frac{1}{k_B}\frac{\partial^2 S}{\partial E^2} = -\frac{1}{k_B T N c_v T}$  から

$$-NT^2 \frac{\partial^2 S_1}{\partial E_1^2} = \frac{1}{c_v^{(1)}}$$

$$-NT^{2}\frac{\partial^{2} S_{2}}{\partial E_{2}^{2}} = \frac{1}{c_{v}^{(2)}}$$

が出るので、こいつを足せば

$$\frac{1}{c_v^{(1)}} + \frac{1}{c_v^{(2)}} = -NT^2 \bigg( \frac{\partial^2 S_1}{\partial E_1^2} + \frac{\partial^2 S_2}{\partial E_2^2} \bigg) = -NT^2 \bigg( -\frac{k_B}{\sigma_{E_1}^2} \bigg)$$

で一件落着。