

統計力学 演習問題 VIII

1. (a) カノニカル分布で、熱容量が $C = \frac{1}{k_B T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$ と表せることを示せ。
 (b) IV の 4 の系に対しこの公式を用いて熱容量を計算し、以前に求めた結果と等しいことを確かめよ。
2. 古典単原子理想気体に対し前問の公式を用いて熱容量を計算し、以前に求めた結果と等しいことを確かめよ。
3. 以下の各問に答えよ。

(a) 古典調和振動子に対するランジュバン方程式

$$M \frac{d^2 X}{dt^2} + \gamma \frac{dX}{dt} + kX = \xi(t), \quad \langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t) \xi(t') \rangle = I \delta(t - t')$$

から、 $\langle \frac{M}{2} \dot{X}(t)^2 \rangle$ 、 $\langle \frac{k}{2} X(t)^2 \rangle$ を求めよ。

(b) I と γ の間に成り立つべき関係式を求めよ。

4. 温度 T の熱浴とエネルギーをやりとりしている系の、マスター方程式

$$\frac{dP_i}{dt} = \sum_j [W(j \rightarrow i)P_j - W(i \rightarrow j)P_i]$$

について

- (a) 詳細釣り合いの条件が成り立っているとき $W(i \rightarrow j)$ は次のように書けることを示せ。

$$W(i \rightarrow j) = W_{i,j} \exp(\beta E_i), \quad \text{ただし } W_{i,j} = W_{j,i}$$

- (b) 次のような $W(i \rightarrow j)$ は詳細釣り合いの条件を満たすことを示せ。

- i. $W(i \rightarrow j) = W_0 \frac{\exp(-\beta(E_j - E_i))}{1 + \exp(-\beta(E_j - E_i))}$

- ii. $W(i \rightarrow j) = \begin{cases} W_0 & E_i > E_j \\ W_0 \exp(-\beta(E_j - E_i)) & E_i < E_j \end{cases}$

- (c) 詳細釣り合いの条件を満たす場合について、一般化された自由エネルギー

$$F = \sum_i (E_i P_i + k_B T P_i \ln P_i)$$

が時間と共に減少することを示せ。

ヒント：

$$\frac{dF}{dt} = -\frac{k_B T}{2} \sum_{i,j} W_{i,j} (Q_j - Q_i) (\ln Q_j - \ln Q_i), \quad Q_i \equiv P_i \exp \beta E_i$$

を示せばよい。

5. 磁性体においてエネルギーと磁化の期待値がそれぞれあたえられた値になるという条件の下で、一般化されたエントロピーを最大化すると、どのような分布が得られるか。また、そのとき導入されるラグランジュの未定係数はどんな物理的意味を持つか。

6. スピン $S = 1/2$ の粒子の状態を $|S_z = 1/2\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|S_z = -1/2\rangle = |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ と表すとき。次の密度行列 ρ で表される状態はどのような状態か。非対角的な密度行列については対角化を行って調べよ。

(a) $\rho = \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & 1-p \end{pmatrix}, (0 \leq p \leq 1)$ (b) $\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$

(c) $\rho = \begin{pmatrix} \cos^2(\theta/2) & i \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) \\ -i \cos(\theta/2) \sin(\theta/2) & \sin^2(\theta/2) \end{pmatrix}$

7. 4つのスピン $1/2$ の粒子が純粋状態

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{2} (|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2) (|\uparrow\rangle_3 |\downarrow\rangle_4 - |\downarrow\rangle_3 |\uparrow\rangle_4)$$

にあるとする。 $|\sigma\rangle_i (\sigma = \uparrow \text{ or } \downarrow)$ は i 番目 ($i = 1 \sim 4$) の粒子のスピンの z 成分が σ の状態を表す。この時、全系の密度行列は $\rho^{\text{tot}} = |\Phi\rangle \langle \Phi|$ で与えられる。

- (a) $i = 1, 2$ の粒子に対する部分密度行列 $\rho^{12} = \text{Tr}_{34} \rho^{\text{tot}}$ を作り、その固有値を求めよ。ただし、 Tr_{34} は、 $i = 3, 4$ の粒子の状態について部分トレースを取ることを意味し、例えば $|\sigma\rangle_3 |\sigma'\rangle_4 (\sigma, \sigma' = \uparrow \text{ or } \downarrow)$ を基底に取れば

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{34} \rho^{\text{tot}} &= \langle \uparrow |_4 \langle \uparrow |_3 \rho^{\text{tot}} |\uparrow\rangle_3 |\uparrow\rangle_4 + \langle \uparrow |_4 \langle \downarrow |_3 \rho^{\text{tot}} |\downarrow\rangle_3 |\uparrow\rangle_4 \\ &\quad + \langle \downarrow |_4 \langle \uparrow |_3 \rho^{\text{tot}} |\uparrow\rangle_3 |\downarrow\rangle_4 + \langle \downarrow |_4 \langle \downarrow |_3 \rho^{\text{tot}} |\downarrow\rangle_3 |\downarrow\rangle_4 \end{aligned}$$

を意味する。また、得られた ρ^{12} の固有値を用いてエンタングルメントエントロピー $S^{12} = -\text{Tr} \rho^{12} \ln \rho^{12}$ を求めよ。

- (b) $i = 2, 4$ の粒子の状態について部分トレースを取り $i = 1, 3$ の粒子に対する部分密度行列 ρ^{13} を作り、その固有値を求めよ。また、エンタングルメントエントロピー $S^{13} = -\text{Tr} \rho^{13} \ln \rho^{13}$ を求めよ。