試験問題		試験日	曜日	時限	担当者
科目名	熱学・統計力学３	2004 年 2 月	金	2	田崎

以下の問題から二問選択して解答せよ。答えだけでなく、考え方の筋道を簡潔に書くこと。試験日から一年たったら答案を予告なく廃棄することがある。

1. 長さが L の 1 次元的な領域に閉じ込められた質量 m の点粒子の量子力学を考える。粒子には外力は働かないとする。この領域の座標を x $(0 \le x \le L)$ と表す。

(a) ひとつの粒子の定常状態（エネルギーの固有状態）を表す波動関数 $\varphi(x)$ の満たす Schrödinger 方程式を書け。

(b) 上の方程式を解き、互いに独立な定常状態の波動関数（規格化しなくてもよい）と、対応する固有エネルギーを全て求めよ。

ただし波動関数に対する境界条件は、$\varphi(0) = \varphi(L) = 0$ とする。

同じ領域に N 個の質量 m の同種粒子がある場合を、量子力学的に扱う。粒子には外力は働かず、粒子間の相互作用もないとする。

(c) 粒子がボゾンの場合に、基底状態のエネルギーと第一励起状態のエネルギーを求めよ。（個々の粒子のエネルギーではなく、全系のエネルギー。）

(d) 粒子がフェルミオンの場合に、基底状態のエネルギーと第一励起状態のエネルギーを求めよ。この場合のフェルミエネルギーを求めよ。

上のような自由粒子の系が、逆温度 β、化学ポテンシャル μ を持つ大きな系と接して平衡にある場合を考察する。

(e) 粒子がボゾンである場合、フェルミオンである場合それぞれについて、系の全エネルギーを表す式を書け。

和や積分を具体的に評価する必要はない。また、ボーズおよびフェルミ分布関数を導く必要はない。

2. この問題では、二次元の理想 Bose 気体は Bose-Einstein 凝縮をおこさないことを示す。

一粒子の状態密度が、定数 $D > 0$ によって

$$D(\varepsilon) = \begin{cases} 0, & \varepsilon < 0 \\ DV, & \varepsilon \ge 0 \end{cases} \tag{1}$$

と表されるボゾンの理想気体がある。系の体積は V、全粒子数は N_0 であり、系は逆温度 β の熱浴と平衡にある。以下の解答では、粒子密度 $\rho_0 = N_0/V$ を用いて色々な量を表すことが望ましい。

(a) 粒子数 N_0 を積分で表す式を書き下し、そこから μ を求めよ。(講義で調べた 3 次元の場合と違って、任意の β と ρ_0 についてこの方法で μ を求めることができる。)

(b) 最低エネルギーの一粒子状態は縮退しておらず、固有エネルギー $\varepsilon = 0$ を持つとする。この一粒子状態に入っている粒子の個数の期待値 $\langle n_0 \rangle_\beta$ を求めよ。(任意の β について、これは 1 のオーダーの量になり、ボーズ・アインシュタイン凝縮がおきないことがわかる。)

$c > 1$ のとき成り立つ定積分の公式

$$\int_0^\infty \frac{dx}{ce^x - 1} = \log\left(\frac{c}{c-1}\right) \tag{2}$$

を証明抜きで用いてよい。

3. 下の図のように、細長い形をした分子を N 個、次々と直線的につないで作る高分子を考える。各々の分子は、横向きか、縦向きかのいずれかの配置をとる。

系のエネルギーは、分子どうしの結合のしかたで決まるとする。結合のエネルギーは、ふたつの分子の向きに応じて、下のように a, b, c の三種類の値をとる。

この系が、逆温度 β の平衡状態にある。周期的境界条件をとると、系の分配関数が、

$$Z(\beta) = \mathrm{Tr}\begin{pmatrix} e^{-\beta a} & e^{-\beta b} \\ e^{-\beta b} & e^{-\beta c} \end{pmatrix}^N \tag{3}$$

と書けることを示し、 $N \to \infty$ の極限での分子一つあたりの Helmholtz の自由エネルギーを求めよ。

4. 3 次元の立方格子上の通常の Ising 模型を考える。磁場はないとして、スピン系のエネルギーを

$$E[(\sigma_i)] = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \tag{4}$$

とする。$J > 0$ は定数であり、各々のスピン変数は ± 1 の二つの値をとる。和はとなり合う格子点の組すべてについてとる。この系が逆温度 β の平衡状態にある。

講義で述べた平均場近似の次のような改良を考えよう。格子のなかから、となり合う格子点を**二つ**勝手に選んで、仮に、0 と 1 と呼ぶことにする。これら二つのスピンを「生きた」スピンとしてあつかい、それらの周りのスピンのゆらぎを無視しよう。

(a) σ_0 と σ_1 に関わるエネルギー $E_0(\sigma_0, \sigma_1)$ はどうなるか。

上記のエネルギーで $i = 0, 1$ 以外について σ_i を平均場 m に置き換える。

(b) 二つの格子点における磁化 $\langle (\sigma_0 + \sigma_1)/2 \rangle$ を β, J, m の関数として求めよ。

(c) 0, 1 は特別ではないと「開き直り」、 m を決定するための self-consistent equation を書き下せ。

(d) self-consistent equation を $m = f(m)$ と書くと、相転移点は $f'(0) = 1$ という条件で決まる。このことから、相転移点 β_{c} の満たす方程式を書け。

5. 一粒子の状態密度が、定数 $D > 0$ と $g > 0$ によって

$$D(\varepsilon) = D\{\delta(\varepsilon) + \delta(\varepsilon - g)\} \tag{5}$$

と表されるようなフェルミオンの理想気体がある。(g はエネルギーギャップと呼ばれる。)粒子数 N_0 は、ちょうど D に等しくとる。この系が、熱浴(かつ粒子浴)と平衡にある。

(a) 化学ポテンシャルを $\mu = g/2$ と選べば、任意の β について、上の粒子数が得られることを示せ。

(b) 系の全エネルギーの期待値を求め、その温度依存性を示すグラフを描け。また、この系の比熱を求めよ。