試験問題		試験日	曜日	時限	担当者
科目名	熱学・統計力学３	2005 年 1 月 31 日	月	1	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.　講義で見たように、量子理想気体が高温低密度にあるということは、$\exp[-\beta(\varepsilon-\mu)] \ll 1$ という条件であらわされる。講義では最低次の近似だけをみたが、ここでは、もう一つ先の補正まで求めることにしよう。これによって、フェルミオンとボソンの違いも見えてくる。今年はじめての問題ということで、あまり深くつっこまないのでご安心を。

まず、フェルミあるいはボース分布関数が、

$$f(\varepsilon) \simeq \exp[-\beta(\varepsilon-\mu)] \mp \exp[-2\beta(\varepsilon-\mu)] \tag{1}$$

と近似できることを示せ。これを利用し、三次元の理想気体の場合、つまり一粒子の状態密度が

$$D(\varepsilon) = cV\sqrt{\varepsilon} \tag{2}$$

と書ける（c は定数、V は系の体積）場合について、粒子数（の期待値）N を β, μ の関数として求めよ。そこから、化学ポテンシャル μ を N, β の関数として求めよ。

本当は、このあとエネルギーの期待値を出したいところだが、それは来年以降かな‥

3. 一粒子の状態密度が、定数 $D > 0$ によって

$$D(\varepsilon) = \begin{cases} 0, & \varepsilon < 0 \\ D, & \varepsilon \geq 0 \end{cases} \tag{3}$$

と表されるフェルミオンの理想気体がある。全粒子数を N とし、逆温度 β での平衡状態について考える。

(a) （有限温度を考える前に）フェルミエネルギー ε_{F} はいくらか？

(b) この系の化学ポテンシャル μ を、ε_{F} と β の関数として求めよ。

(c) エネルギーが ε_{F} 以下の一粒子状態に入っている粒子の総数の期待値 N_{F} を求めよ。

不定積分と定積分の公式

$$\int \frac{dx}{1+ce^x} = x - \log(1+ce^x) \tag{4}$$

$$\int_0^\infty \frac{dx}{1+ce^x} = \log\left(1+\frac{1}{c}\right) \tag{5}$$

を証明抜きで用いてよい。

試験問題		試験日	曜日	時限	担当者
科目名	熱学・統計力学3	2005年1月31日	月	1	田崎

4. 講義では、磁性体の原子が担うスピンは上向きと下向きだけをとる場合をあつかってきたが、物質によっては、原子のスピンがベクトル的にふるまうことがある。ここでは、もっとも簡単に、スピンが

$$\mathbf{S} = (1,0),\ (-1,0),\ (0,1),\ (0,-1) \tag{6}$$

という四通りの値を取れるということにしよう。

このようなベクトル的なスピンがたくさん集まった系を考える。エネルギーは、

$$E[(\mathbf{S}_i)] = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j \tag{7}$$

とする。二つのベクトルの内積をとってスカラーにしていることに注意。J は正の定数で、和は隣り合う格子点の組みについてとる。ある一つの格子点と隣り合う格子点の数を n とする。

この系の逆温度 β での平衡状態の性質を平均場近似で調べたい。以下のことに注意しながら self-consistency equation を作れ。

- スピンがベクトルなので、まわりのスピンを平均で置き換えるときには、$\langle\mathbf{S}\rangle = (\bar{S}_x, \bar{S}_y)$ のように平均値も二成分のベクトルにする。
- 注目しているスピンの期待値をとる際も、x 成分と y 成分について、別々に期待値を求める。

こうして作った方程式をもとに、転移点 β_{c} を求めよ。今のままだと連立方程式になっていてややこしいので、$\bar{S}_y = 0$ とおいた場合と、$\bar{S}_x = \bar{S}_y$ とおいた場合の、二つについて計算せよ。

5. スピン 1 の 1 次元強磁性 Ising 模型を扱おう。スピン 1 の系では、各々のスピン変数は $1, 0, -1$ という三つの値をとることができる。(その理由は、角運動量の量子力学を学べばわかるが、ここでは気にしなくてもいい。) 格子点 $i(= 1, 2, \ldots, N)$ の上にのっているスピンのスピン変数を S_i とする。(よって、 $S_i = 1, 0, -1$。)

系のエネルギーは、定数 $J > 0$ を用いて、

$$E[(S_i)] = -J\sum_{i=1}^{N} S_i S_{i+1} \tag{8}$$

と書ける。周期的境界条件 $S_{N+1} = S_1$ を仮定する。この系が逆温度 β の熱浴と平衡に達している。

講義で扱った行列の方法を用いて、$N \to \infty$ の極限でのスピン一つあたりの自由エネルギー $f(\beta)$ を求めよ。ただし、$a > 0, b > 0$ のとき、

$$\begin{pmatrix} a & 1 & b \\ 1 & 1 & 1 \\ b & 1 & a \end{pmatrix} \tag{9}$$

という形の行列の三つの固有値のうち最大のものは、

$$\lambda_{\max} = \frac{1}{2}\left(1 + a + b + \sqrt{9 - 2(a+b) + (a+b)^2}\right) \tag{10}$$

であることを証明抜きで用いてよい。