

試験問題		試験日	曜日	時限	担当者
科目名	熱学・統計力学 3				田崎

以下の問題から二問選択して解答せよ。答案用紙一枚目の上部の余白に何番を選択したかをはっきりと書け。

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 ($0 \leq x \leq L$) 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. ボース・アインシュタイン凝縮の基本的なところを見よう。

単位体積あたりの一粒子状態密度が、定数 $c > 0$ によって $\nu(\epsilon) = c\sqrt{\epsilon}$ と書けるような、理想ボース気体を考える。講義で示したように、ボース・アインシュタイン凝縮が生じているとき、逆温度 β での平衡状態での粒子の密度を

$$\rho = \rho_1 + \int_0^\infty d\epsilon \nu(\epsilon) f_{\beta, \mu}(\epsilon) \quad (1)$$

と書くことができる (ボース分布関数 $f_{\beta, \mu}(\epsilon)$ の中では、 $\mu \simeq 0$ としてよい)。ただし、

$$\rho_1 = \frac{\langle \hat{n}_1 \rangle}{V} \quad (2)$$

は、一粒子基底状態に入っている粒子の密度である。

ここで、 ρ を一定にして逆温度 β を変化させる設定を考えると、 $\beta \geq \beta_c$ において

$$\frac{\rho_1(\beta)}{\rho} = 1 - \left(\frac{\beta_c}{\beta} \right)^{3/2} \quad (3)$$

となる。 β_c を求め、(3) を示せ。なお、

$$\eta_0 := \int_0^\infty du \frac{\sqrt{u}}{e^u - 1} \quad (4)$$

が有限の定数であることを用いよ。

3. イジング模型で、逆温度を臨界点に固定し、磁場 h を小さくしていくときにも、臨界現象がみられる。たとえば、磁化は

$$m(\beta_c, h) \approx h^{1/\hat{\delta}} \quad (5)$$

のように、 h に特異な依存性を示して 0 に近づく。平均場近似を用いて、この臨界現象を議論し、臨界指数 $\hat{\delta}$ を求めてみよう。

講義と同様、もっとも標準的なイジング模型を考える。つまり、 d 次元立方格子の各々の格子点 i にスピン変数 $\sigma_i = \pm 1$ がのっており、スピン配位 $(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ に対応するエネルギーは、

$$E_{(\sigma_1, \dots, \sigma_N)} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j - \mu_0 H \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (6)$$

である。

- (a) 講義と同様にして、この系の平均場近似をおこない、自己整合方程式を作れ。
- (b) $\beta = 1/(2dJ)$ の転移点上で、磁場 H が 0 でないが小さいときの自己整合方程式の解を求め、臨界指数 $\hat{\delta}$ を求めよ。

4. 講義でみたように、黒体輻射の問題を、光子（化学ポテンシャル $\mu = 0$ をもつボソン）の理想気体とみなして解析することができる。この考えを用いて、体積 V の系で、圧力 p と全エネルギー U のあいだに

$$p = \frac{U}{3V} \quad (7)$$

の関係が成り立つことを示そう。

念のため復習しておく、各々の波数ベクトル \mathbf{k} に対してエネルギー $\hbar c|\mathbf{k}|$ の光子が二種類ずつ対応している。また、波数ベクトルについての和は、

$$\sum_{\mathbf{k}} (\dots) \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{(\text{全空間})} d^3\mathbf{k} (\dots) \quad (8)$$

と書き直せる。

さて、定義にしたがえば、光子の理想気体の大分配関数は、

$$\Xi(\beta) = \prod_{\mathbf{k}} \left(\sum_{n_{\mathbf{k}}=0}^{\infty} \exp[-\beta \hbar c|\mathbf{k}| n_{\mathbf{k}}] \right)^2 \quad (9)$$

と書ける。二つの偏向状態についての積を取り入れるため、和を二乗した。分配関数がわかれば、圧力は、

$$p = \frac{\log \Xi(\beta)}{\beta V} \quad (10)$$

により求められる。また、系の全エネルギーは、

$$U = 2 \sum_{\mathbf{k}} \hbar c |\mathbf{k}| \langle n_{\mathbf{k}} \rangle_{\beta,0} \quad (11)$$

である。

- (a) 大分配関数 (9) の和を正確に評価せよ。
- (b) その結果を圧力 (10) に代入し、 \mathbf{k} についての和を積分に直せ。さらに、回転対称性を利用して積分変数を $k = |\mathbf{k}|$ に直せ。
- (c) エネルギー (11) も、 $k = |\mathbf{k}|$ の積分で表せ。
- (d) これらの結果から、求める (7) の関係を示せ。

5. 一粒子の状態密度が、定数 $D > 0$ によって

$$D(\varepsilon) = \begin{cases} 0, & \varepsilon < 0 \\ D, & \varepsilon \geq 0 \end{cases} \quad (12)$$

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

$$\int \frac{dx}{1 + ce^x} = x - \log(1 + ce^x) \quad (13)$$

$$\int_0^\infty \frac{dx}{1 + ce^x} = \log \left(1 + \frac{1}{c} \right) \quad (14)$$

を証明抜きで用いてよい。

6. 一次元格子の格子点を $i = 1, 2, \dots, N$ とし、各々の格子点の上にスピン $\sigma_i = \pm 1$ がのっているとする。磁場がなく **自由境界条件** の場合のエネルギーは、交換相互作用定数を $J > 0$ として、

$$E(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (15)$$

である（講義であつかった周期境界の場合とは端の相互作用が違うことに注意）。この系の分配関数は、

$$Z_N(\beta) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp[-\beta E(\sigma_1, \dots, \sigma_N)] \quad (16)$$

である。

- (a) 境界条件に注意しつつ $Z_2(\beta)$ を求めよ。
- (b) $Z_3(\beta)$ の定義式で、 σ_3 についての和だけを実行せよ。このとき σ_2 は ± 1 しかとらないことに注意せよ。
- (c) $N \geq 3$ に関して、 $Z_N(\beta)$ を $Z_{N-1}(\beta)$ で表す関係がある。それを求めよ。
- (d) $Z_N(\beta)$ を求めよ。