

試験問題		試験日	曜日	時限	担当者
科目名	熱学・統計力学 3	2009年1月21日	水	1	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. 単位体積当たりの一粒子状態密度が $\nu(\epsilon)$ である理想フェルミ気体を考える。定数 $\epsilon_0 > 0$ があり、 $\epsilon < 0$ あるいは $\epsilon > 2\epsilon_0$ では $\nu(\epsilon) = 0$ であり、また、任意の ϵ について $\nu(\epsilon) = \nu(2\epsilon_0 - \epsilon)$ が成り立つとする（つまり関数 $\nu(\epsilon)$ は ϵ_0 に関して対称）。この系で可能な最大の密度は、 $\rho_{\max} = \int_0^{2\epsilon_0} d\epsilon \nu(\epsilon)$ である。ここでは、密度が $\rho = \rho_{\max}/2$ の場合を考える。

(a) 化学ポテンシャルを $\mu = \epsilon_0$ と選べば、任意の β において、上の密度が実現されることを示せ。

簡単な例として、

$$\nu(\epsilon) = \frac{\rho_{\max}}{2} \left\{ \delta\left(\epsilon - \frac{\epsilon_0}{2}\right) + \delta\left(\epsilon - \frac{3\epsilon_0}{2}\right) \right\} \quad (1)$$

という場合を考える。

(b) この系の平衡状態での、エネルギー密度と単位体積あたりの比熱を求めよ。

3. 調和振動子型のポテンシャル中に原子集団を閉じこめた場合のボース・アインシュタイン凝縮について見よう。

一粒子状態密度が、定数 $\alpha > 0$ によって $D(\epsilon) = \alpha\epsilon^2$ と書けるような、理想ボース気体がある（ここでは、単位体積あたりの一粒子状態密度ではなく、一粒子状態密度そのものを考えていることに注意）。全粒子数を N とし、逆温度 β での平衡状態を考える。

まず、ボース・アインシュタイン凝縮が生じる可能性を考えずに、この系の化学ポテンシャル μ を決定する関係式を書き下せ。その際、

$$\tilde{\eta}(x) := \int_0^\infty du \frac{u^2}{e^{-x}e^u - 1} \quad (2)$$

という関数を用いよ。

次に、 $\tilde{\eta}(0) \simeq 2.4$ が有限であることに注意し、十分に低温では、この系でボース・アインシュタイン凝縮が生じることを示せ。

4. 単位体積あたりの一粒子状態密度が定数 $c > 0$ によって $\nu(\epsilon) = c\sqrt{\epsilon}$ と書ける理想フェルミ気体を考える (つまり、三次元の自由粒子)。この系が、逆温度 β 、化学ポテンシャル μ の平衡状態にある。この系の圧力 P と単位体積あたりのエネルギー u が $P = (2/3)u$ の関係で結ばれることを示せ。

大分配関数 Ξ によって圧力が $P = (\beta V)^{-1} \log \Xi$ と書けること、理想フェルミ気体の大分配関数は

$$\Xi(\beta, \mu) = \prod_{j=1}^{\infty} \{1 + e^{-\beta(\epsilon_j - \mu)}\} \quad (3)$$

と書けること (j は一粒子エネルギー固有状態の名前で ϵ_j は一粒子エネルギー固有値) を用いてよい。圧力を積分で表示し、内部エネルギーの積分表示と見比べるといいだろう。

5. 3次元の立方格子上的スピン 1 の Ising 模型を考える。

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。(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 の上にはのっているスピンのスピン変数を S_i とする (よって、 $S_i = 1, 0, -1$)。

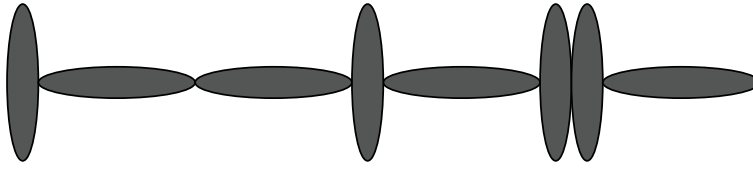
系のエネルギーは、

$$E[(S_i)] = - \sum_{\langle i, j \rangle} \{JS_i S_j + D(S_i S_j)^2\} \quad (4)$$

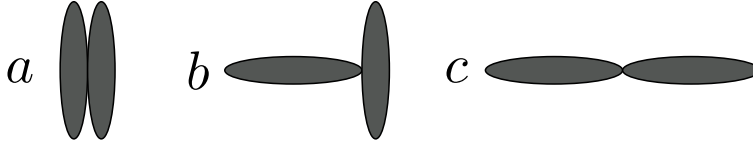
とする。 J, D はともに正のパラメーターであり、和はすべての隣りあう格子点についてとる。

この系が逆温度 β の平衡にある。講義と同じ方針に従って平均場近似を作り、スピンの期待値 $\psi = \langle S_i \rangle$ についての自己整合方程式を作れ。それに基づいて、系の転移点 β_c を求めよ。

6. 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、隣り合う分子どうしの結合のしかただけで決まるとする。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。



全系のエネルギーは、全ての隣り合うペアについて、結合のエネルギーをたしあげたものである。

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、

$$Z(\beta) = \text{Tr} \left[\begin{pmatrix} e^{-\beta a} & e^{-\beta b} \\ e^{-\beta b} & e^{-\beta c} \end{pmatrix}^N \right] \quad (5)$$

と書けることを示し、 $N \rightarrow \infty$ 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。