

2016年度 京都大学理学部 統計力学C 演習

(初回) 組分け名簿に載っていない人は今日の終了後までにクラス担当者に申し出てください。

日程

毎回 金曜日 14:45 – 16:15; 2016/12/23, 2016/12/30 は休み。小レポートは初回, 11/4 頃, 12/16 頃に出題。

回	講義日	演習日	予定している内容	配布問題	発表問題	出欠
1	2016/10/ 5	2016/10/ 7	量子力学・統計力学の基本事項	1–10	1–2	
2	2016/10/12	2016/10/14	量子統計に従う理想気体	11–16		
3	2016/10/19	2016/10/21				
4	2016/10/26	2016/10/28	理想ボース粒子系と調和振動子	17–22		
5	2016/11/ 2	2016/11/ 4				
6	2016/11/ 9	2016/11/11	理想フェルミ粒子系	23–28		
7	2016/11/16	2016/11/18				
8	2016/11/30	2016/11/25	磁場中フェルミオンの量子化	29–34		
9	2016/12/ 7	2016/12/ 2				
10	2016/12/14	2016/12/ 9	原子・分子の量子論	35–40		
11	2016/12/21	2016/12/16				
12	2016/12/28	2017/ 1/ 6	量子多体系の相転移	補充問題		
13	2017/ 1/11	2017/ 1/13				
14	2017/ 1/18	2017/ 1/20				
(15)	2017/ 1/25	2017/ 2/ 3	(期末レポート提出)			

方針

講義「統計力学C」で解説される内容を中心に演習を行います。発表者その他の受講者が積極的な質疑応答を行うことで、量子統計力学に習熟します。(単位系は国際単位系 (SI) を用います)

配布する問題を皆が解いて(宿題)集まり、発表者が黒板で解いて質疑応答を行うのを主とします。次回発表することになったら、問題を解くだけでなく、ぜひ発表用のまとめを作って、何回か練習しましょう。発表時は初めに 問題番号・氏名・学生番号の下4桁 を見やすく書いてください。そして、

次の (5–10) 分で何を説明するか宣言する→宣言した時間で説明する→何を説明したかまとめる

というサイクルごとに質問に対応することの繰り返しで、進めてください。

宿題 1 問につき、長くても発表者による説明 20–25 分, 質疑応答およびクラス担当者からのコメント 5–10 分の 30 分で終わらせることを原則とします。

次週の宿題発表者は、まだ発表していない人を優先に、希望者からクラス担当者が指名しますが、指名された人が来ていない場合はその場で希望者に振り替えます(状況により分割可能、* つきの問題・小問は省略可)。

発表者まかせにするのではなく、積極的に参加するとの意識を持ち、随時発言してください。発表にプロジェクターが必要なときは、前の週にクラス担当者と相談してください。

成績

以下を加算した数値をもとに、100 – 0 点の間でつける予定です。

- 発表 ((S(20),) A(15), B(10), F(0)) 単位の取得を希望する人は必ず発表すること。最大 45 点。
- 小レポート (A(15), D(5), F(0)) 第 1 回は本日配布、再来週 (10 月 21 日) 演習時締切。他の人と相談してもよいが、解答の作成は他の受講者の答案を見ずに自力で行うこと。2 週間後の演習終了時に提出締切。メールの場合は 担当教員と TA の両方に 締切日 (日本時間) 中に。締切の次の演習の際に返却予定。F の場合は返却 2 週間後までの再提出を強く推奨する。D の場合も再提出可能。合計 45 点満点。
- 期末レポート (40 点満点+20 点程度のオプション課題を予定) 期末に 1 回。

教室と当初のクラス担当 TA (後半は交替の予定)

原則として交互に教員が担当しますが、出張などにより変更することがあります。

組 (教室)	氏名	所属	E メールアドレス
1 組 (302)	足立景亮 (Kyosuke Adachi)	物理学第一教室	k.adachi at scphys.kyoto-u.ac.jp
2 組 (303)	今村征央 (Yukihisa Imamura)	基礎物理学研究所	yukihisa.imamura at yukawa.kyoto-u.ac.jp

連絡先

担当教員: 手塚真樹 (物理学第一教室 凝縮系理論グループ。理学研究科 5 号館 439 号室)

質問がある場合、なるべく電子メール (tezuka at scphys.kyoto-u.ac.jp) で事前に連絡してください。他の用事がない限り、水曜日 15–18 時は原則として在室するようにします。

演習ウェブページ

<http://cond.scphys.kyoto-u.ac.jp/~tezuka/smc/>

もし読めないなど不具合があれば、上記メールまたは 075–753–3798 までお知らせください。

アンケート

回答は評価に無関係で、任意です。個人が識別できる情報は、本演習の運営の目的でのみ使用します。

(a) 系登録は済んでいますか?

(0:まだ 1:数理科学系 2:物理科学系 3:地球惑星科学系 4:化学系 5:生物科学系 9:理学部生以外)

(b) 全学共通科目の (1)「物理学基礎論 A」(2)「熱力学」(3)「振動・波動論」,

理学部科目の (A)「統計力学 A(または旧 熱・統計力学 1)」, (Ax)「統計力学 A(旧 熱・統計力学 1) 演習」, (B)「統計力学 B(または旧 熱・統計力学 2)」, (Bx)「統計力学 B(旧 熱・統計力学 2) 演習」, (C)「統計力学 C(または旧 量子物性論)」を履修したか、または履修予定ですか?

(1:履修した 2: 今期履修する 3:次の学期に履修予定である 4:履修していないが内容は充分理解しており履修しない 5:履修せず内容も充分理解していないが履修する予定はない 9:不明)

(c) この演習に求めることを自由に書いてください。

(d) その他、言いたいことがあれば自由に書いてください。

(思いつかなければ、クラス担当者と教員がよく知らないと思われることを何か)

第1章 量子力学・統計力学の基本事項

3回生前期までに学んだ量子力学・古典統計力学の基本事項で、本演習の問題を解くのに必要なことを復習します。復習に多くの時間を割くことはできないので、必要に応じて各自で演習問題や教科書の問題などを復習してください。また、本演習で頻繁に必要な数学公式・近似法も確認します。これらについては、演習の過程で追加する内容もあります。

1.1 第1回その場問題 [1-2]

問題 [1] Kosterlitz-Thouless 転移

2次元の古典 XY スピン系を考える。面積 $L = l^2$ の面 $A = \{(x, y) | 0 \leq x, y \leq l\}$ 上に面内を向くスピン $\mathbf{S} = (S_x, S_y)$ が正方格子状に配列した系で、ハミルトニアンが

$$\hat{H} = -J_0 \sum_{\langle i, j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -J_0 \sum_{\langle i, j \rangle} (S_{i,x} S_{j,x} + S_{i,y} S_{j,y}), \quad (1.1.1)$$

で与えられるとする。各スピン $\mathbf{S}_i$ が x 軸の正の方向となす角度を (反時計回りに) θ_i としよう (以後、スピンの向きを複素平面上での $e^{i\theta_i}$ の向きと同一視する)。以下では $J > 0$ 、すなわち相互作用が強磁性的な場合を考える。隣り合うスピンはほぼ同じ方向を向こうとするので、低温では角度の差は小さく、

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = S^2 \cos(\theta_i - \theta_j) \simeq \text{const.} - \frac{S^2}{2} (\theta_i - \theta_j)^2 \quad (1.1.2)$$

と近似できる。最近接スピンの間隔を $a (\ll l \ll L)$ とし、 a より充分大きなスケールで見ると、各点 $\mathbf{r}$ のまわりのスピンの角度は連続的に変化しているとみなせるとしよう。 $J = J_0 S^2$ とする。

(a) このとき、連続極限をとることができ、

$$\hat{H} = \frac{J}{2} \int_A d\mathbf{r} (\nabla \theta(\mathbf{r}))^2 + \text{const.} \quad (1.1.3)$$

と近似できることを説明せよ。なお、このとき、系全体の磁化

$$\mathbf{M} = \sum_i \mathbf{S}_i = \int_A \frac{d\mathbf{r}}{a^2} \mathbf{S}(\mathbf{r}) \quad (1.1.4)$$

の x, y 成分は複素数

$$\tilde{M} = S \int_A \frac{d\mathbf{r}}{a^2} e^{i\theta(\mathbf{r})} \quad (1.1.5)$$

の実部と虚部となる。

(b) 十分に高温であれば磁化は存在しない。温度を下げていっても、有限温度で、巨視的な磁化が生じる相転移は起きないことを説明しよう。

系全体でスピンの向きが揃った $(\theta(\mathbf{r}) = \theta_0)$ 状態 Θ_0 をまず考える。これと、スピンの向きが平面波 $\theta(x, y) = \frac{2\pi}{l} x$ (つまり、下端で $+x$ 向き、上端で $-x$ 向き) に従う状態 Π_y のエネルギーの差 ΔE を

求めよう。 ΔE の l 依存性と、似たようなスピンの揃わない状況 (欠陥) を作る方法の数の l 依存性から、渦の生成に関する自由エネルギーの損得を考え、任意に有限温度を固定したとき、 l が充分大きければ巨視的な磁化が生じないことを説明せよ。

- (c) 系全体としては巨視的な磁化が生じるような相転移はないにもかかわらず、有限温度で相転移が起きることを説明しよう。 $\theta(\mathbf{r})$ は元々スピンの存在する点上で定義された量なので、スピンのないところでは定義されない (特異点を持つ) ことが許される。また、 θ を 2π の整数倍ずらしてもスピンの向きは変わらない。そこで、ある 1 点を新たな原点ととして極座標 (r, ϕ) を導入し、そのまわりで θ が $\theta = n\phi$ (n は 0 でない整数) のように変化する状況を考えてみよう。このような構造を渦と呼ぶ。

まず、スピンの x, y 方向に最近接スピンをもつ正方格子状に並んでいるとして、 4×4 の格子の中央に中心をもつ $n = +1$ および $n = -1$ の渦を図示せよ。

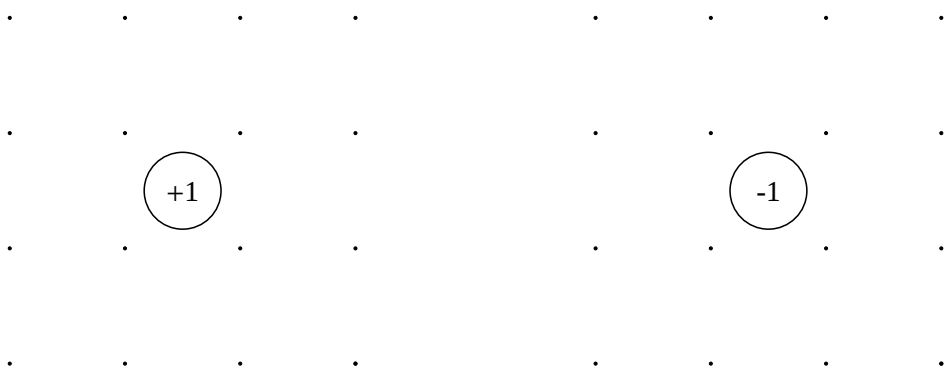


図 1.1: 正方格子上的 XY スピン系の渦。右方向を $+x$ 向き、上方向を $+y$ 向きとする (座標軸は省略した)。

そして、 $|\nabla\theta(\mathbf{r})| = \frac{n}{r}$ となることから、渦を形成することによるエネルギーの増加 E_n を評価せよ。ここで、 $\int r^{-1} dr$ のような積分が現れるが、相転移の有無を議論するにあたっては、積分の下端は a , 上端は l とおいて問題ない (なぜか?)。

- (d) $n = \pm 1$ の自由な渦 1 個のエネルギーは E_1 , 渦の場所の選び方は $W = (l/a)^2$ と考えられるので、与えられた、スピンの空間変化が緩やかな状態に 1 個渦を加えることによる自由エネルギーの変化は

$$\Delta\mathcal{F} = E_1 - k_B T \log W \quad (1.1.6)$$

と見積もれる。相転移の起きる温度 T_{KT} を評価せよ。

T_{KT} より高温では多数の渦が励起される。スピンの向きの相関

$$C(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \cos(\theta(\mathbf{r}) - \theta(\mathbf{r}')) \rangle \quad (1.1.7)$$

に注目すると、 $T > T_{KT}$ のとき、ある程度離れたスピンの向きはほぼ相関をもたないが (距離の関数として指数関数的に減衰する)、 $T < T_{KT}$ では、渦は正負の符号のものが束縛しあって、渦の効果が無視できるようになり、 $|C(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|$ は $r = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ の関数として幂的に $(r^{-1/(2\pi K)})$ のように、ただし $K = J/(k_B T)$ 減衰するようになることがわかる。これが (Berezinskii-)Kosterlitz-Thouless 転移である。

問題 [2] ミクロカノニカルアンサンブル

古典統計力学の範囲で、ミクロカノニカルアンサンブルの方法により、エネルギー E , 体積 V , 粒子数 N の非相対論的気体の系について考えよう。ただし、便宜上、粒子はスピン $1/2$ に相当する内部自由度をもつものとする。

粒子の位置 $\{\mathbf{x}_i\}$, 運動量 $\{\mathbf{p}_i\}$ の張る $6N$ 次元の位相空間の体積 h^{6N} ごとに、一つの微視的な状態が存在すると考える。エネルギー E までの状態数を $\Omega_0(E)$ で表し、充分小さい δE により、エネルギーが E に充分近いとみなせる状態の数 $W(E)$ を

$$W(E) = \Omega(E)\delta E = \Omega_0(E + \delta E) - \Omega_0(E) \simeq \frac{\partial \Omega_0(E)}{\partial E} \delta E \quad (1.1.8)$$

と表すことにする。

運動エネルギーは運動量を用いて $\sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}$ と表される。 $\{\mathbf{p}_i\}$ の張る $3N$ 次元空間のうち $\sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} \leq E$ なる領域を $V_p(E)$ と書こう。これは、半径 $\sqrt{2mE}$ の $3N$ 次元 (超) 球体となる。

半径 r の n 次元球体の体積 $V_n(r)$ は

$$V_n(r) = \frac{\pi^{n/2} r^n}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)} \quad (1.1.9)$$

で与えられ、粒子が区別できるとした場合、エネルギーが E 以下の状態の占める相空間内の体積は、

$$\int_V \cdots \int_V d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_N \int_{V_p(E)} \cdots \int_{V_p(E)} d\mathbf{p}_1 \cdots d\mathbf{p}_N = V^N \frac{(2\pi m E)^{3N/2}}{\Gamma((3N/2) + 1)}. \quad (1.1.10)$$

となる。

ここで、上記にスピン自由度からくる 2^N を掛けて h^{6N} で割ったものが微視的な状態の個数であるが、粒子が区別できないとし、区別できる微視的な状態の個数は、これをさらに $N!$ で割ったものと近似できると考える。すると、

$$\Omega_0(E) = \frac{2^N V^N (2\pi m E)^{3N/2}}{h^{3N} N! \Gamma((3N/2) + 1)}. \quad (1.1.11)$$

となるから、状態密度 $\Omega(E)$ は

$$\Omega(E) = \frac{\partial \Omega_0(E)}{\partial E} = \frac{2^N V^N (2\pi m E)^{3N/2}}{h^{3N} N! \Gamma(3N/2)} \frac{1}{E}. \quad (1.1.12)$$

となる。また、エントロピーを

$$S(E, V, N) = k_B \log W(E, V, N) \quad (1.1.13)$$

で定義する。

(a) エントロピー $S(E, V, N)$ が与えられたとき、熱力学の関係式

$$dE = TdS - pdV + \mu dN \quad (1.1.14)$$

を用いて、温度 T , 圧力 p , 化学ポテンシャル μ を求める方法を説明せよ。

次に、(1.1.8), (1.1.12), (1.1.13) から、エントロピーを計算せよ。ただし、Stirling の近似式

$$n! \simeq \sqrt{2\pi n} n^n e^{-n} \quad (1.1.15)$$

を用い、 N に比例する項のみを残せばよい。

(b) 温度 T とエネルギー E の関係を表す式を導け。また、圧力 p を T, V, N で表せ。

エントロピー S を T, V, N で表し、Helmholtz の自由エネルギー $\mathcal{F} = E - TS$ を、自然な変数 (T, V, N) を用いて表せ。

(c) n 次元の球の体積の公式 (1.1.9) を導出せよ。

(d) Stirling の近似式 (1.1.15) をそれぞれ導出せよ。

Stirling の近似式については、たとえば次のようにすると導出できる。ガンマ関数の定義より

$$n! = \Gamma(n+1) = \int_0^\infty e^{-x} x^n dx = \int_0^\infty e^{-x} (e^{\ln x})^n dx \quad (1.1.16)$$

であり、 $x = ny$ とおくと、

$$n! = e^{n \ln n} n \int_0^\infty e^{n(\ln y - y)} dy \quad (1.1.17)$$

となる。さて、 (a, b) で定義された滑らかな関数 $f(y)$ が $y = y_0$ で最大値をとるとき、テイラー展開

$$f(y) = f(y_0) + f'(y_0)(y - y_0) + \frac{f''(y_0)}{2}(y - y_0)^2 + O((y - y_0)^3) \quad (1.1.18)$$

において $f'(y_0) = 0$, $f''(y_0) \equiv -C < 0$ なので、 n が充分大きいとき、 $t = \sqrt{nC}(y - y_0)$ を用いて

$$\int_a^b e^{nf(y)} dy \approx e^{nf(y_0)} \int_a^b e^{-n(C/2)(y-y_0)^2} dy \approx \frac{e^{nf(y_0)}}{\sqrt{nC}} \int_{-\infty}^\infty e^{-t^2/2} dt = e^{nf(y_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{nC}} \quad (a < y_0 < b) \quad (1.1.19)$$

と近似できる (ラプラスの方法)。これを用いて $n! \approx \sqrt{2\pi n}(n/e)^n$ と近似できることがわかる。

なお、上記の導出に不満な人は、より厳密な議論、またはより高精度な近似を与えてもよい。

1.2 第 1 回小レポート課題 (締切: 2016/10/21)

配布した用紙に問題 [3]–[6] のうち 2 問以上への解答を書いて提出してください。

問題 [3] 古典スピン系

N 個のサイトに $+1$ または -1 の値をとりうる変数 σ_i が配置された古典 Ising 模型

$$\mathcal{H}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (1.2.1)$$

(J_{ij} はスピン間相互作用, H は磁場) を考える。温度 T での分配関数は、 $\beta \equiv (k_B T)^{-1}$ を用いて

$$Z_N(T, H) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp(-\beta \mathcal{H}(\{\sigma_i\})) \quad (1.2.2)$$

と書ける。 $(2^N$ 個の) $\{\sigma_i\}$ を $n (= 1, 2, \dots, 2^N)$ でラベルし、 n 番目の状態におけるエネルギー ($= \mathcal{H}(\{\sigma_i\})$) を E_n , 磁化を $M_n (= \sum_i \sigma_i)$ と書く。 $Z_N = \sum_n \exp(-\beta E_n)$ となる。Helmholtz の自由エネルギーは $\mathcal{F} = -k_B T \log Z_N$ で与えられる。

このとき、エネルギーの期待値 $\langle E \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_n E_n \exp(-\beta E_n)$ と磁化の期待値 $\langle M \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_n M_n \exp(-\beta E_n)$ がそれぞれ

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z_N} \frac{\partial Z_N}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z_N, \quad (1.2.3)$$

$$\langle M \rangle = \frac{\partial}{\partial(\beta H)} \log Z_N, \quad (1.2.4)$$

で与えられることを確かめよ。

また、このとき、比熱 $C = \frac{\partial}{\partial T} \langle E \rangle$ および帯磁率 $\chi = \frac{\partial}{\partial H} \langle M \rangle$ が、それぞれ、

$$C = \frac{1}{k_B T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2), \quad \chi = \frac{1}{k_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2), \quad (1.2.5)$$

のように表されることを示せ。

問題 [4] 物理数学の復習

(a) ゼータ関数

$$\zeta(x) \equiv \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^x} \quad (x > 1) \quad (1.2.6)$$

は統計力学の様々な場面で現れる。

$$\zeta(2) = \pi^2/6 \quad (1.2.7)$$

および

$$\zeta(4) = \pi^4/90 \quad (1.2.8)$$

を適当な方法で示せ。

(たとえば、 $x \in [-\pi : \pi]$ で定義された関数 $f_m(x) = x^m$ ($m = 2, 4$) をフーリエ級数展開することにより、 $f_m(\pi)$ を 2 通りに表してみよ。)

(b)

$$I_{\pm}(\alpha) \equiv \int_0^{\infty} \frac{z^{\alpha-1}}{e^z \pm 1} dz \quad (1.2.9)$$

とする。 $I_+(\alpha), I_-(\alpha)$ が収束する実数 α の範囲をそれぞれ述べ、収束するとき、その値をゼータ関数およびガンマ関数

$$\Gamma(x) \equiv \int_0^{\infty} z^{x-1} e^{-z} dz \quad (1.2.10)$$

を用いて表せ。(ヒント: $z > 0$ のとき $(1 \pm e^{-z})^{-1} = 1 \mp e^{-z} + e^{-2z} \mp \dots$)

問題 [5] 調和振動子

ハミルトニアン

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \quad V(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2 \quad (1.2.11)$$

のもとで x 軸上を運動する質量 m の粒子を考える。エネルギー固有値が

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (1.2.12)$$

で与えられることを示そう。

(a) シュレーディンガー方程式

$$\hat{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \psi(x) = E\psi(x) \quad (1.2.13)$$

において、

$$q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad \lambda = \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \quad (1.2.14)$$

とすることにより、長さエネルギーを無次元化した式が得られる。ここでさらに、

$$\psi = e^{-q^2/2} f(q) \quad (1.2.15)$$

として、 $f(q)$ の満たすべき式

$$\frac{df}{dq^2} - 2q \frac{df}{dq} + 2\lambda f = 0 \quad (1.2.16)$$

が得られることを説明せよ。

(b) $f(q)$ を q に関して冪級数展開しよう。ただし、(1.2.16) において第 1 項は q の次数を 2 つ下げ、第 2 項と第 3 項は変えないので、

$$f(q) = q^s \sum_{\nu=0}^{\infty} c_{\nu} q^{2\nu}, \quad c_0 \neq 0 \quad (1.2.17)$$

と書けるとしてよい。

c_0 の満たすべき式から $s=0$ または $s=1$ となることを示し、また、 $c_{\nu+1}$ と c_{ν} の満たすべき関係式を求めよ。そして、 $f \rightarrow 0$ ($q \rightarrow \infty$) であることから、 $c_j \neq 0$ となる最大の $j(\geq 0)$ が存在することを示し、 $s=0$ のとき $\lambda=2j$, $s=1$ のとき $\lambda=2j+1$ となることを示せ。

(c) 下から少なくとも 3 個の固有状態の波動関数を簡単に図示せよ。

問題 [6] 3 次元調和振動子

(非相対論的な) ハミルトニアン

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}), \quad V(\mathbf{r}) = \frac{k}{2} |\mathbf{r}|^2 \quad (1.2.18)$$

に従って 3 次元空間 (直交座標系 (x, y, z) とする) を運動する質量 m の粒子を考える。

(a) 波動関数は一般には x, y, z の混ざった関数となるが、固有関数が

$$\psi(\mathbf{r}) = X(x)Y(y)Z(z) \quad (1.2.19)$$

のように書けると仮定して、このような (規格化された) 独立な固有関数と固有エネルギーの組をすべて求めよ。ただし、1 次元調和振動子のエネルギー固有値が $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) で与えられることを用い、対応する規格化された固有関数を $\phi_n(x)$ として用いてよい。

(b) 固有エネルギー ϵ が $E_0 = 100\hbar\omega \leq \epsilon < E_0 + \delta E = 110\hbar\omega$ を満たす独立な固有状態は何個あるか? まず ($\hbar\omega \ll \delta E \ll E_0$ として) 概数を評価する方法を考えて評価し、次に具体的に求めてみよう。(後で、剛体壁に囲まれた平坦なポテンシャルの場合を調べたときに、比較してみよ。)

(c) * 極座標 (r, θ, ϕ) を

$$x = r \sin \theta \cos \phi, y = r \sin \theta \sin \phi, z = r \cos \theta, \quad (1.2.20)$$

のように導入しよう。

$$\Lambda = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{\sin^2 \theta} \partial^2 \phi^2 \quad (1.2.21)$$

とすると、

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \Lambda \quad (1.2.22)$$

と書けることがわかる。上記と同様に、固有関数が

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y(\theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (1.2.23)$$

のように書けると仮定して、固有関数と固有エネルギーの組をどのように全て求められるか説明せよ。

(小レポート 1 問題はここまで)

1.3 第 2 回までの宿題: 第 2 章の今回配布分も予習してください

問題 [7] 平衡にある系と熱力学ポテンシャル

熱力学においては、系のある熱平衡状態についてエントロピー S , 温度 T , 体積 V , 圧力 p , 粒子数 N , 化学ポテンシャル μ などの物理量を一意的に得ることができると考えるが、これらの物理量 (状態量) は全てが互いに独立ではない! いくつかの独立変数によって状態を指定し、それらの関数を用いて (偏微分などにより) 残りの物理量を表すことができる。このような関数を、(選んだ独立変数についての) 熱力学ポテンシャル (あるいは、完全な熱力学関数) と呼ぶ。

上記の中で、示量性の量は S, V, N であり、示強性の量は T, p, μ である。そこで、 S, V, N を独立変数とする熱力学ポテンシャルとして、内部エネルギー U を考え、その全微分が

$$dU(S, V, N) = TdS - pdV + \mu dN \quad (1.3.1)$$

で与えられるとしよう。(外部への仕事 $\int -pdV$ で与えられるような系を仮定している。)

このとき、 T, p, μ は

$$T(S, V, N) = \left(\frac{\partial U(S, V, N)}{\partial S} \right)_{V, N}, \quad p(S, V, N) = - \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_{S, N}, \quad \mu(S, V, N) = \left(\frac{\partial U}{\partial N} \right)_{S, V} \quad (1.3.2)$$

と書ける。同様に、エントロピー S は、 (U, V, N) を独立変数としたときに熱力学ポテンシャルとなる。

(a) 自由エネルギー

独立変数を (T, V, N) と選んだ場合に、全微分の係数が残りの状態量の簡単な (微分を含まない) 式で表される自然な熱力学ポテンシャルとして、Helmholtz の自由エネルギー $\mathcal{F} = U - TS$ が採用できることを 説明せよ。(Legendre 変換を用いる)

さて、熱平衡状態ではエントロピーが与えられた条件のもとで最大となる。すなわち、仮想的な (微小とは限らない) 変化により系のエントロピーが δS , 内部エネルギーが δU , 体積が δV 増大して、系が外部に $\delta W = -p\delta V$ の仕事をしたとすると $\delta S < (\delta U - \delta W)/T$ が成り立つ。このことを用いて、 T, V, N が固定された系では、熱平衡状態において上記で定義した $\mathcal{F}$ が最小となることを 説明せよ。

同様に、独立変数を (T, p, N) と選んだ場合には、Gibbs の自由エネルギー $\mathcal{G} = U - TS + pV$ が最小の状態が熱平衡状態となる。

(補足) 4 種類の熱力学ポテンシャルの全微分は、いわゆる熱力学の四角形にまとめられる: 上辺に S, E, V と書き、残る辺の中央に、 E に続く 3 文字 F, G, H を、時計回りに書く。次に S と共役な示強性の量 T を右下、 V と共役な示強性の量 p を左下に書く。最後に、左上の S から右下の T へ、左下の p から右上の V へ、それぞれ矢印を引く。

各辺の中央が、その辺の両端の量を変数とする熱力学ポテンシャルになっている。

(b) Gibbs-Duhem の関係

S, V, N は示量性の量なので、系の大きさを n 倍すると nS, nV, nN となる。このとき

$$U(nS, nV, nN) = nU(S, V, N) \quad (1.3.3)$$

を仮定してよい。これにより、Gibbs-Duhem の関係

$$U = TS - pV + \mu N \quad (1.3.4)$$

を示し(これにより $\mathcal{G} = \mu N$ となることがわかる)、グランドポテンシャル $\Phi(T, V, \mu) = -pV (= \mathcal{F} - \mathcal{G})$ の全微分 $d\Phi$ を $dT, dV, d\mu$ を用いて表せ。

以下では簡単のため、粒子の出入りはない (N が一定) とする。

$dU = TdS - pdV$ から $(\partial T/\partial V)_S = -(\partial p/\partial S)_V$ が得られ、 $\mathcal{F}$ や $\mathcal{G}$ 、またエンタルピー $H \equiv U + pV$ の全微分の式から、似た形の一連の式が得られる (Maxwell の関係式)。また、3 個の変数 x, y, z が、2 個を定めれば残りの 1 個も定まる関係にあるとき、

$$\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x = -1$$

が成り立つ。余裕があれば、これらを適宜用いて次に答えよ。

(c)* 熱容量と圧縮率

定積熱容量 C_V および定圧熱容量 C_p は

$$C_V = T \left(\frac{\partial S(T, V)}{\partial T} \right)_V, \quad C_p = T \left(\frac{\partial S(T, p)}{\partial T} \right)_p, \quad (1.3.5)$$

と定義される。熱力学ポテンシャルの 2 階微分の符号に着目して、これらが $C_p > C_V > 0$ を満たすことを説明せよ。

等温圧縮率 κ_T および断熱圧縮率 κ_S についても議論せよ。ただし

$$\kappa_T = -V^{-1} \left(\frac{\partial V(T, p)}{\partial p} \right)_T, \quad \kappa_S = -V^{-1} \left(\frac{\partial V(S, p)}{\partial p} \right)_S. \quad (1.3.6)$$

第2章 量子統計に従う理想気体

2.1 理想量子気体

問題 [8] 状態密度

質量 m の粒子からなる理想量子気体が、一辺の長さ L の立方体の箱 (体積 $V = L^3$) に入っている。壁は侵入できない剛体壁であり、その 1 粒子量子状態 n は、Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_n(\mathbf{r}) = \epsilon_n\psi_n(\mathbf{r}) \quad (2.1.1)$$

によって決められる。(ここではスピン自由度は考えない。) $\hbar\omega = \pi^2\hbar^2/(2mL^2)$ としよう。

- (a) このとき 1 粒子状態の波動関数 $\psi_n(\mathbf{r})$ とそのエネルギー固有値 ϵ_n を計算し、 $\epsilon \gg \hbar\omega$ の場合に、エネルギーが ϵ 以下の状態数 $\Omega(\epsilon)$ と状態密度 $D(\epsilon) = \frac{d\Omega(\epsilon)}{d\epsilon}$ を適切な近似のもとに求めよ。また、1 次元、2 次元の場合、状態密度はどのようなになるか答えよ。
- (b) * 固有エネルギー ϵ が $E_0 = 100\hbar\omega \leq \epsilon < E_0 + \delta E = 110\hbar\omega$ を満たす独立な固有状態は何個あるか? まず上記で求めた状態密度から ($\hbar\omega \ll \delta E \ll E_0$ として) 概数を評価し、次に実際に数えてみよう。また、以前調べた、調和振動子ポテンシャルの場合と比較してみよう。
- (c) 気体が充分希薄な同種 $N(\gg 1)$ 粒子からなるとして、(統計性の効果を見捨てる) エネルギー E までの状態数 $\Omega(E)$ を求め、これによりエントロピー $S(E)$ を計算せよ。どのような近似を用いたか具体的に説明せよ。

さらに、

$$\frac{1}{T} = \frac{dS(E)}{dE} \quad (2.1.2)$$

を用いてエネルギーと温度の関係を求め、高温で古典的エネルギー等分配則が成り立つことを確かめよ。

- (d) 量子性によるずれは、どの程度の温度より低温で顕著になると考えられるか? 熱的 de Broglie 波長

$$\lambda_T = \frac{h}{\sqrt{2\pi mk_B T}} \quad (2.1.3)$$

を用いて説明せよ。

2.2 Fermi 分布と Bose 分布

問題 [9] 分布関数の導出

Fermi 分布および Bose 分布について、個々の粒子に許される量子状態の分布をいくつかのグループに分ける方法で、導出してみよう。

まず、総数 N 個の Fermi 粒子系を考える。このとき、 ℓ 番目のグループは G_ℓ 個の量子状態をもち、そのエネルギーはほぼ等しく ϵ_ℓ とみなせるとする。全系の巨視的状态は各グループに属する粒子数 N_ℓ を指定することで決まる。ここで、 G_ℓ 、 N_ℓ は、ともに大きな数であるとする。

- (a) $\{N_\ell\}$ の組で指定された状態の熱力学的重率 $W(\{N_\ell\})$ とエントロピー $S(\{N_\ell\})$ をそれぞれ求めよ。
- (b) 全粒子数と全エネルギーがともに一定 ($\sum_\ell N_\ell = N$, $\sum_\ell \epsilon_\ell N_\ell = E$) の条件下で、エントロピー $S(\{N_\ell\})$ を最大にする分布 N_ℓ/G_ℓ を求めよ。(ラグランジュの未定乗数法を用いるとよい)
- (c) この結果から、Fermi 気体に対して、1 粒子状態 k の占有数の熱平均値が

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon_k - \mu}{k_B T}\right) + 1} \quad (2.2.1)$$

となることを説明せよ。ここで、 μ は化学ポテンシャル、 T は温度である。

注: (b) で与えたミクロカノニカル分布 (E, N) での全系のエントロピーに比べ、 $\{N_\ell\}$ を 1 つ固定した系のエントロピーのうち最大のものは当然小さくなります。しかし、差を N で割ったものは、 ℓ の個数 L を一定に保って N を大きくすると 0 に近づくことがわかります。(たとえば $N = Ln$ で $G_\ell = 2n$ と ϵ_ℓ は ℓ に依らないとして、 L を固定してエントロピーの差の n 依存性を調べてみましょう)

- (d) ここまでと同様にして、Bose 気体に対する $\langle n_i \rangle$ を求めよ。

問題 [10] 分布関数 (グランドカノニカル)

- (a) 問題 [9] で扱った理想量子気体の大分配関数を求めよ。
- (b) 粒子数の平均値を求め、分布関数

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} \pm 1} \quad (2.2.2)$$

を導け。ここで $+$ は Fermi 統計、 $-$ は Bose 統計の場合である。

- (c) 古典極限において、両統計とも Boltzmann 統計に帰着する。その条件について調べよ。

(ここまで 2016/10/07 配布)

16SMC1 第 1 回小レポート+アンケート 提出用紙 評価 A・D・F演習 __ 組 学籍番号 ____ - ____ 氏名 ^{ふりがな} _____

提出日 ____ 月 ____ 日 再提出 ____ 月 ____ 日 採点者 _____

(a) ____ (b) (1) ____ (2) ____ (3) ____ (A) ____ (Ax) ____ (B) ____ (Bx) ____ (C) ____

(c) _____

(d) _____

[解答: 裏面も使用可、選んだ問題の番号を明記すること。初回提出期限は 10 月 21 日の演習]

[再提出の場合、前の記述を消さず、何を追加・変更したかわかるように記述]

