

2009 年度 統計力学 II 問題

制限時間 90 分 担当 吉森 明

問題用紙 4 枚、解答用紙 2 枚（裏を使っても良い）。解答用紙が足りないときは、申し出れば 3 枚以上使える。解答用紙の 1 枚目に何枚使ったかを書くこと。全ての解答用紙に学籍番号と名前を書きなさい。解答は、式変形の途中も書くこと。

注意: 小テストの得点は、約 1.1 倍して加点する。ただし、第 1 回小テストは大問の 1.、第 2 回小テストは大問の 2.、第 3 回小テストは大問の 3. の配点以上には加点しない。したがって、うまくいかなかった小テストに対応する問題を中心に解く方が得点は増えます。

すべての問題で、 \hbar はプランク定数を 2π で割ったもの、 k_B は、ボルツマン定数を表し、 T は温度、 $\beta \equiv 1/(k_B T)$ とする。また、 V は体積、 N は粒子数で、 V も N も充分大きく、 $1/V$ や $1/N$ は無視する。 N/V は無視しない。1 粒子の状態は密に詰まっている。

1. 状態密度 $D(\epsilon)$ が内部自由度を含めて

$$D(\epsilon) = \begin{cases} VD_0\sqrt{\epsilon + \epsilon_0} & \epsilon > -\epsilon_0 \\ 0 & \epsilon \leq -\epsilon_0 \end{cases} \quad (1)$$

で与えられている理想フェルミ気体を考える ($\epsilon_0 \geq 0$)。グランドカノニカル分布を使って、次の問いに答えなさい。

- (a) フェルミエネルギー ϵ_F を求めなさい。
- (b) $\epsilon_0 = 0$ の時、 $T > 0$ における系の全エネルギー E を温度 T でテーラー展開する。化学ポテンシャル μ の展開

$$\mu = \epsilon_F - \frac{\pi^2 (k_B T)^2}{12 \epsilon_F} + \dots \quad (2)$$

を使って、

$$E = A\{1 + Bk_B T + C(k_B T)^2 + \dots\} \quad (3)$$

と展開したとき、 A 、 B 、 C を求めなさい。 ϵ_F を使っても良い。ただし、

$z = \exp[\beta\mu]$ とすると、

$$E = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} V D_0 (k_B T)^{5/2} f_{5/2}(z) \quad (4)$$

$$\begin{aligned} f_{5/2}(z) &\equiv \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{3/2}}{e^x/z + 1} dx \\ &= \frac{8}{15\sqrt{\pi}} (\ln z)^{5/2} \left[1 + \frac{5\pi^2}{8} \frac{1}{(\ln z)^2} + \dots \right] \end{aligned} \quad (5)$$

となることを使いなさい。

2. 今度は、内部自由度を含めた状態密度 $D(\epsilon)$ がある関数 $\nu(\epsilon)$ を使って、

$$D(\epsilon) = \begin{cases} V\nu(\epsilon) & \epsilon > 0 \\ 0 & \epsilon \leq 0 \end{cases} \quad (6)$$

で与えられる理想ボース気体をグランドカノニカル分布を使って考える。ただし、 $\nu(\epsilon)$ に対して、 $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon^{-a} \nu(\epsilon) = 0$ が成り立つ $a > 0$ が存在する。

(a) 温度 T を固定して、粒子数を小さい値から大きくしていくと、ある粒子数 N_B でボース-アインシュタイン凝縮 (BEC) が起こる。 N_B を

$$\eta(T) \equiv \int_0^\infty \frac{\nu(k_B T x)}{e^x - 1} dx \quad (7)$$

で定義される関数 $\eta(T)$ と V 、 k_B 、 T を使って表しなさい。次の公式を使っても良いが、 ϵ_l を N_B の式に使ってはいけない。

$$N = \sum_l \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_l - \mu)} - 1} \quad (8)$$

(b) 粒子数が N_B より大きい時、圧力 P を求めなさい。ただし、

$$\Psi(T) \equiv \int_0^\infty \frac{\Gamma(k_B T x)}{e^x - 1} dx \quad (9)$$

で定義される関数 $\Psi(T)$ を使いなさい。ここで、

$$\Gamma(\epsilon) = \int_0^\epsilon \nu(\epsilon_1) d\epsilon_1 \quad (10)$$

で、 $\lim_{\epsilon \rightarrow \infty} \Gamma(\epsilon) e^{-\beta\epsilon} = 0$ を仮定する。また、次の公式を使っても良いが、 ϵ_l を P の式に使ってはいけない。

$$J = -PV = k_B T \sum_l \ln(1 - e^{\beta(\mu - \epsilon_l)}) \quad (11)$$

3. 重水素 (D_2) 理想気体を考える。重水素は、スピン 1 のボース粒子で、慣性モーメント I を持った剛体回転子とする。

(a) 分子 1 個の回転とスピンの分配関数 j を、量子論に基づき、 z_S 、 z_A 、 r_e 、 r_o で表せ。ただし、スピンの固有関数について、粒子を入れかえた時に符号が変わらないものから計算した分配関数を z_S 、変わるものから計算した分配関数を z_A とし、回転についても同様に r_e 、 r_o を定義する。

(b) 分子 1 個の回転運動のエネルギー準位は、方位量子数 ℓ を使って、

$$\epsilon_\ell = \frac{\hbar^2}{2I} \ell(\ell+1) \quad (\ell = 0, 1, 2, \dots) \quad (12)$$

で与えられる。この ϵ_ℓ を使って、

$$j = \sum_{\ell=0}^{\infty} g(\ell) e^{-\beta \epsilon_\ell} \quad (13)$$

と書ける。ここで、 $g(\ell)$ は ℓ のある関数を表す。方位量子数 ℓ の平均値 $\langle \ell \rangle$ は、

$$\langle \ell \rangle = \frac{1}{j} \sum_{\ell=0}^{\infty} \ell g(\ell) e^{-\beta \epsilon_\ell} \quad (14)$$

によって計算できるが、 $\Theta = \hbar^2 / (2Ik_B)$ とすると温度 T が $T \ll \Theta$ の時、

$$\langle \ell \rangle = a \exp\left[-b \frac{\Theta}{T}\right] + \dots \quad (15)$$

の形に書ける。 a と b を求めなさい。ここで、異核 2 原子分子の回転の分配関数は、

$$j_{\text{rot}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \exp\left[-\ell(\ell+1) \frac{\Theta}{T}\right] \quad (16)$$

で表され、核スピンの大きさを s_A とすると、

$$z_S = (s_A + 1)(2s_A + 1) \quad z_A = s_A(2s_A + 1) \quad (17)$$

となることを使ってもよい。ただし、 a 、 b の式に s_A を使ってはいけない。

4. ハミルトニアン

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_i \sigma_j \quad (18)$$

で表される格子の上に並んだ粒子系がある ($J > 0$)。和 $\sum_{\langle i,j \rangle}$ は、最近接対格子点についてとる。各粒子は $(n+2)$ 個の状態をとり、そのうち、1 個は $\sigma_i = 1$ 、もう 1 個は $\sigma_i = -1$ 、残りの n 個は $\sigma_i = 0$ の値を持つ。カノニカル分布に対する平均場近似を使って、以下の問いに答えなさい。ここで、 n は整数とする ($n > 0$)。

(a) σ_i の平均値は i によらないので、 $\langle \sigma \rangle$ と書くことにする。温度 T の時の $\langle \sigma \rangle$ に対する平均場近似の式を $\langle \sigma \rangle = f(\langle \sigma \rangle)$ の形で導きなさい。最近接格子点の数は z とする。ここで、 $f(\langle \sigma \rangle)$ は、 $\langle \sigma \rangle$ のある関数を表す。

(b) (a) で求めた $f(\langle \sigma \rangle)$ を $\langle \sigma \rangle$ が小さいとして、 $\langle \sigma \rangle^3$ までテーラー展開すると、

$$f(\langle \sigma \rangle) = f_1 \beta \langle \sigma \rangle + f_3 \langle \sigma \rangle^3 \quad (19)$$

が得られる。 f_1 と f_3 を求めなさい。ただし、 $x > 2$ の x に対して

$$\frac{e^\alpha - e^{-\alpha}}{e^\alpha + x - 2 + e^{-\alpha}} = \frac{2\alpha}{x} \left\{ 1 + \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{x} \right) \alpha^2 \dots \right\} \quad (20)$$

となることを使っても良い。その場合は、今の問題で α と x が何に相当するか、必ず定義すること。

(c) 平均場近似の式が (19) 式で近似できる範囲 ($n < 4$) で相転移温度 T_c を f_1, k_B で表しなさい。