2014 年度統計力学 II 宿題と小テスト

2014.7.24 担当 吉森 明

今日の宿題(提出の必要なし)

1. (a) 授業で与えたランダウ自由エネルギーで比熱のとびを求めなさい。
   (b) (ランダウ) 自由エネルギーとして、$F(M,T) = A_0(T) + A_2(T)M^2 + bM^4/4$ を考える。$A_2(T) = e^{aT} - c$ の時の相転移が起こる転移温度 T_c を求めなさい。
2. 1 次相転移を表すために、次の様な (ランダウ) 自由エネルギー

$$F(M,T) = A_0(T) + \frac{a}{2}(T - T_0)M^2 - \frac{b}{4}M^4 + \frac{c}{6}M^6 \tag{1}$$

を考える。この $F(M,T)$ のもとでは、実現する M がある温度 T_c で不連続に変化する。つまり、T_c で M がとびを示すが、このとびを求めなさい。ただし、答えに T_c を使って良い。

問題 1.(重要)

宿題 1. 粒子数を N、質量を m、i 番目の粒子の運動量を $\mathbf{p}_i$ として、今ハミルトニアン H が

$$H = \sum_i^N \frac{|\mathbf{p}_i|^2}{2m} \tag{2}$$

と書けている古典系について

(a) 温度 T、体積 V、N が与えられている時、カノニカル分布から分配関数
(b) 温度 T、体積 V、化学ポテンシャル μ が与えられている時、グランドカノニカル分布から大分配関数

を求めなさい。

宿題 2. 1 粒子のエネルギー固有状態が 3 個ある 3 準位系を考える。それぞれの状態のエネルギー固有値は、$0, \epsilon, 2\epsilon (\epsilon > 0)$ で、粒子はたがいに相互作用していない理想気体とする。

(a) 温度 T の熱溜に接しているとし、粒子がフェルミ統計、ボーズ統計に従う場合の**カノニカル分布**における分配関数をそれぞれ求めなさい。ただし、粒子数は $N = 3$ する。
(b) さらに、化学ポテンシャルを μ の粒子溜めに接するとして、**グランドカノニカル分布**の大分配関数を求めなさい。ただし、$\mu < 0$ とする。この時、(5) 式

の r' をフェルミ粒子の場合に全て書きなさい。さらに、ボース粒子の場合に、エネルギー固有値が 0 の準位には 1 つも入っていない状態の中で、全エネルギーの低いものから 9 個数えて、書きなさい。ただし、すべての準位に 1 つも入っていない場合を含める。

宿題 3. 角振動数 ω の調和振動子系について 1 粒子のエネルギー固有値が $\varepsilon_\ell = \hbar\omega\ell$ $(\ell = 0, 1, 2, \dots)$ のとき $\varepsilon \gg \hbar\omega$ で、$D(\varepsilon)$ を求めなさい。

宿題 4. 相対論効果が大きいとき、$\varepsilon_{\vec{\ell}} = c\hbar|\vec{k}(\vec{\ell})|$ ただし、c は光速、$\vec{k}(\vec{\ell})$ は授業と同じ (周期的境界条件)。$D(\varepsilon)$ を求め、ε_F を計算しなさい。

宿題 5. ① 宿題 4. でエネルギーと圧力を求めよ

② 授業で略した部分積分を計算し $E = \frac{3}{2}PV$ を示せ。

宿題 6. $\mu = \varepsilon_F + C_1T + C_2T$ としたとき、$C_1 = 0$、$C_2 = -\frac{\pi^2}{6}\frac{k_B^2}{D(\varepsilon_F)}\frac{dD(\varepsilon)}{d\varepsilon}\Big|_{\varepsilon=\varepsilon_F}$ をまた $E = G(\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2D(\varepsilon_F)$ を授業で省いた計算を補って示せ。

宿題 7. $\varepsilon_{\vec{\ell}} = c\hbar|\vec{k}(\vec{\ell})|$ のとき、授業で説明したのと同じように $b(\varepsilon_{\vec{\ell}})/V << N/V$ を示せ $(\vec{\ell} \neq 0)$。

宿題 8. $\varepsilon > 0, D(\varepsilon) = D_0V\varepsilon^{\frac{1}{2}}$($V$ は体積) $\varepsilon \leq 0, D(\varepsilon) = 0$ の時、$x = \beta\epsilon$ と変数変換して T_B が $D_0^{-\frac{2}{3}}$ に比例することと $T < T_B$ で $B_1(1) < 1$ となることを示せ。また、$T < T_B$ のとき $\varepsilon > 0$ と $\varepsilon = 0$ の粒子数 N_e と N_0 を全粒子数 N と T、T_B で表せ。

宿題 9. BEC をおこす理想ボース気体で $D(\varepsilon) = D_0V\varepsilon^{\frac{1}{2}}(\varepsilon \geq 0), D(\varepsilon) = 0(\varepsilon < 0)$ の時、$T < T_B$ の圧力が T^n に比例することを示し、n を求めよ。

宿題 10. 周期境界条件で光子の状態密度 $D(\omega)$ とエネルギー E を求めよ。

宿題 11. ① 異核 2 原子分子 1 個の分配関数が $Z_1 = Z_G j_{rot} Z_S$ の時、1 分子あたりの比熱が $C_V = C_{V,G} + C_{V,rot} + C_{V,S}$ となることを示せ。

② 分子の慣性モーメントを I として、$C_{V,rot}$ を低温の極限で求めなさい。G, rot, S は重心、回転、スピンを表す。また、$x << 1$ で $\ln(1 + x) \simeq x$ を使え。

宿題 12. ① フェルミ粒子からなる同核 2 原子分子の分配関数を r_e,r_o,Z_A,Z_S で表せ。

② 水素分子 H_2 のスピンと回転の 1 分子あたりの比熱への寄与を先週の異核 2 原子分子の宿題と同様に低温で求めよ。($l \geq 2$ を無視)

宿題 13. ①$\sigma_i = -1, 0, 1$ の 3 つの状態をとるスピン系で $H = -\sum_{(i,j)} J\sigma_i\sigma j(J > 0)$ の相転移温度 T_c を平均場近似で求めよ。隣り合う粒子の数を z とする。

②(予習)$f(M) = A_0 + A_2M^2 + A_4M^4$ で $A_2 > 0$ と $A_2 \leq 0$ のそれぞれで $f(M)$

を最小にする M とその M の $f(M)$ をすべて求めよ。$A_4 > 0$

問題 2.(余裕があれば解くこと)

宿題 1. (2) 式のハミルトニアンでカノニカル分布の分配関数から化学ポテンシャルを導きなさい。グランドカノニカル分布の大分配関数から粒子数 N を化学ポテンシャルで表して、それを逆に解く事により両者を比較しなさい。特に N が大きい時一致する事を示せ。

宿題 2. 粒子に区別がある古典力学に対応する統計にボルツマン統計がある。これは、粒子に番号をつけて固有状態を数え、最後に粒子数 N の $N!$ で割る。宿題 1 の 3 準位系で、カノニカル分布の分配関数 ($N = 3$) と、グランドカノニカル分布の大分配関数を求めなさい。また、粒子を区別するのにも関わらず、なぜ $N!$ で割るのか、説明しなさい。

宿題 3. 波動関数 $\psi(x, y, z)$ が $\psi(0, y, z) = \psi(L, y, z) = \psi(x, 0, z) = \psi(x, L, z) = \psi(x, y, 0) = \psi(x, y, L) = 0$ のときエネルギー固有値を求めなさい (自由粒子ポテンシャルなし)。

宿題 4. (授業で説明した) 自由粒子 (周期的、内部自由度 g、非相対論) で $T = 0$ のとき低い準位から順に N 個の粒子をつめて最大波数 k_F を求めよ。ε_F を使ってはいけない。

宿題 5. T を含まない $X(\varepsilon)$ について $\int_0^\infty X(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$ を T^2 までテーラー展開しなさい。$f(\varepsilon)$ はフェルミ分布関数。

宿題 6. プリント「授業ノート 1」の (32) 式から (33) 式を導く条件から μ と最低準位 ε_0 の関係を示せ。

宿題 7. $D(\varepsilon) \propto \varepsilon^{1/2}$ のとき、$\int_0^\infty D(\varepsilon) b(\varepsilon) d\varepsilon$ が $z \to 1$ で発散しないことを示せ。ただし、$b(\varepsilon)$ はボース分布。

宿題 8. ２次元平面に閉じ込められたボース粒子の BEC はどうなるか？ただし、

$$D(\varepsilon) = \begin{cases} D_0(\text{定数}), & \varepsilon > 0 \\ 0, & \varepsilon \le 0 \end{cases}$$ を使ってよい。

宿題 9. $T < T_c$ で、圧力に $\varepsilon = 0$ の項が寄与しないことを [問題 1.] の $D(\varepsilon)$ で授業と別の方法で示せ。。$E = CVT^{5/2}$(C は定数) を導き、それから比熱を求め、T で積

分してエントロピーを出し、ヘルムホルツの自由エネルギーを求めて V で微分して圧力を求めよ。

宿題 10. フォノンや光子の化学ポテンシャルが 0 であることを熱力学の自由エネルギー最小の原理 (長岡 P83) から導け。

宿題 11. 異核 2 原子分子の j_{rot} について、低温で大きい l は無視できることを示せ。

宿題 12. 2 原子分子のハミルトニアンは極座標で

$$H = \frac{1}{2I}\left(p_\theta^2 + \frac{p_\phi^2}{\sin^2\theta}\right) \tag{3}$$

で表される。古典論で 1 分子の分配関数を計算せよ。

宿題 13. N 個のイジングスピンが環状に並んだ系で**問題 1** の①と同じ H を考える ($\sigma_i = \pm 1$)

$$\exp(k\sigma_i\sigma_{i+1}) = \cosh k + \sigma_i\sigma_{i+1}\sinh k \tag{4}$$

を使って分配関数を厳密に求めよ。

小テスト (重要)

第 1 回　次の関連する 2 つの問いに答えなさい。

1. 1 粒子エネルギー固有値 $\epsilon_{\mathbf{s}}$ が次の式で与えられる理想フェルミ気体の状態密度 $D(\epsilon)$ を求めなさい。(ϵ は充分大きい)

$$\epsilon_{\mathbf{s}} = \frac{\hbar^2|\mathbf{k}(\mathbf{s})|^2}{2m} + \epsilon_0 \tag{5}$$

ここで ϵ_0 は波数ベクトル $\mathbf{k}(\mathbf{s})$ によらない定数を表す。ただし、粒子は、1 辺の長さが L で体積が $V = L^3$ の立方体内に閉じ込められていて、内部自由度は無視する。また、波数ベクトル $\mathbf{k}(\mathbf{s})$ は、

$$\mathbf{k}(\mathbf{s}) = \frac{2\pi}{L}\mathbf{s}, \qquad \mathbf{s} = (l_x, l_y, l_z), \qquad l_x, l_y, l_z = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{6}$$

で、与えられる。さらに、m は粒子の質量で、$\hbar$ はプランク定数を 2π で割ったものを表す。

2. また、1. の条件のもとで、$\epsilon_0 = 0$ として、$\epsilon > 0$ の $D(\epsilon)$ を $D(\epsilon) = D_0\epsilon^n$ と書くことにする。V と粒子数 N が充分大きく、状態が密に詰まっているとき、絶対零度の N とエネルギー E を D_0 と n と ϵ_F を使って表せ。ただし、ϵ_F はフェルミエネルギー (絶対零度のときの化学ポテンシャル) を表す。

第 2 回　充分大きい体積 V の容器に、状態密度 $D(\epsilon)$ が

$$D(\epsilon) = \begin{cases} VD_0(\epsilon - \epsilon_0)^{1/2} & \epsilon > \epsilon_0 \\ 0 & \epsilon \leq \epsilon_0 \end{cases} \tag{7}$$

で与えられている理想ボース気体が入っている。ここで $D_0(> 0)$ と ϵ_0 は ϵ によらない定数を表す。粒子数を $N(N >> 1)$、ボース-アインシュタイン凝縮 (BEC) が起こる温度を T_B とし、グランドカノニカル分布を使って

$$(k_{\mathrm{B}}T_B)^n D_0 \frac{V}{N}\eta = 1 \tag{8}$$

を導き、n を求めなさい。ただし、内部自由度は無視し、k_{B} はボルツマン定数で、

$$\eta \equiv \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{e^x - 1}dx \tag{9}$$

状態は密に詰まっているとする。

ヒント: $x = \beta(\epsilon - \epsilon_0)$ と変数変換をする。また、この場合のボース-アインシュタイン凝縮は、$\underline{\mu = 0\ \textbf{でなく、}\mu = \epsilon_0}$ で起こる。

第 3 回　k_{B} は、ボルツマン定数を表し、T は温度、$\hbar$ はプランク定数を 2π で割ったものを表す。また、$\beta \equiv 1/(k_{\mathrm{B}}T)$ を使っても良い。

異核 2 原子分子を剛体回転子と見なせる時、分子の慣性モーメントを I とすると、回転運動のエネルギー固有値は、

$$\epsilon_l = \frac{\hbar^2}{2I}l(l+1) \qquad (l = 0, 1, 2, \dots) \tag{10}$$

で与えられる。回転運動の固有状態を指定する量子数は、l の他に m もあり、$-l \leq m \leq l$。1 分子のヘルムホルツの自由エネルギーに対する寄与 f_{rot} について、低温の極限で、絶対値が最も大きいものから 2 つ書くと、

$$f_{\mathrm{rot}} = Ak_{\mathrm{B}}T\exp[-C\frac{\Theta}{T}] + Bk_{\mathrm{B}}T\exp[-D\frac{\Theta}{T}] + \cdots \tag{11}$$

となる。実数 A、B、C、D を求めよ。ただし、$\Theta = \hbar^2/(2Ik_{\mathrm{B}})$ で、次の公式を

使っても良いが、x、F、Z を答えに書いてはいけない。

$$|x| << 1 \text{ で、} \qquad \ln(1+x) \simeq x - \frac{x^2}{2} \tag{12}$$

$$F = -k_{\mathrm{B}} T \ln Z \tag{13}$$