2015 年度統計力学 II 宿題と小テスト

2015.7.23 担当 吉森 明

**今日の宿題**(提出の必要なし)

1. (a) $\sigma_1 = -1, 0, 1$ の 3 つの状態を取るスピン系で $H = -\sum_{(i,j)} J\sigma_i\sigma_j$ $(J > 0)$ の相転移温度 $T_c$ を平均場近似で求めよ。ただし、隣り合う粒子の数を $z$ とする。
   (b) 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。
   (c) (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 $\mu$ 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 $\mu$ 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 $\omega$ 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、$\varepsilon_{\vec{\ell}} = c\hbar|\vec{k}(\vec{\ell})|$ が成り立つ。ただし、$c$ は光速、$\vec{k}(\vec{\ell})$ は授業と同じ (周期的境界条件)。$D(\varepsilon)$ を求めなさい。$g = 1$

宿題 5. ① 宿題 4. で $\varepsilon_F$ と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. $\mu = \varepsilon_F + C_1 T + C_2 T$ 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 $E = G(\varepsilon_F) + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 D(\varepsilon_F)$ 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. $B_1(1) > 1$ のとき $z$ が $T$ の減少関数になる事を示せ。

宿題 9. $\varepsilon > 0, D(\varepsilon) = D_0 V \varepsilon^{\frac{1}{2}}$ ($V$ は体積) $\varepsilon \leq 0, D(\varepsilon) = 0$ の時、$x = \beta\epsilon$ と変数変換して

① $T_B$ が $D_0^{-\frac{2}{3}}$ に比例することを示せ。

② $T < T_B$ で $B_1(1) < 1$ を示せ。

③ $T < T_B$ 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。

④ $T < T_B$ の圧力が $T^n$ に比例することを示し、$n$ を求めよ。

宿題 10. デバイモデルの $D(\omega)$ でフォノンのエネルギーが $k_{\mathrm{B}} T << \hbar\omega_D$ で $T^4$ に比例することを示せ。

宿題 11. (a) 周期的な境界条件で光子の $D(\omega)$ と $E$ を求めなさい。

(b) 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 $C_V = C_{V,G} + C_{V,rot} + C_{V,S}$ となることを示しなさい。添字の $G, rot, S$ は重心、回転、スピンを表す。

(c) 分子の慣性モーメントが $I$ とすると、$C_{V,rot}$ について低温の極限で温度 $T$ の依存性を表す式を求めなさい。$x << 1$ で $\ln(1+x) \simeq x$ を使い、$\ell > 1$ は無視して良い。

宿題 12. ① フェルミ粒子からなる同核２原子分子の１分子あたりの分配関数 (重心なし) 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宿題 11c と同様に低温で求めよ。($l \geq 2$ を無視)

宿題 13. (予習)$f(M) = A_0 + A_2 M^2 + A_4 M^4$ 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ヘルムホルツの自由エネルギーを導きなさい。また、グランドカノニカル分布の大分配関数 $\Xi$ から $J = -k_{\mathrm{B}} T \ln \Xi$ を計算し、それからヘルムホルツの自由エネルギーを導くこと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。$\varepsilon_F$ 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 (34) 式から (35) 式を導く条件から $\mu$ と最低準位 $\varepsilon_0$ 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、

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

宿題 9. $T < T_B$ で、圧力に $\varepsilon = 0$ の粒子が寄与しないことを文献を調べて示しなさい。

宿題 10. フォノン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 分子の回転の分配関数を求めよ。

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。