2020 年後期統計力学２演習 (担当：吉岡)

本授業を受講する際の注意等

- 本演習中に講義の補足をすることが多々あるので、対応する講義の「統計力学２」を必ず同時に受講して下さい。
- 授業の進め方と成績評価の方法は後で連絡します。

予定している内容

1. 統計力学１の復習
   (a) ミクロカノニカル分布とカノニカル分布
   (b) 古典統計力学
2. 低温と量子効果
3. 開いた系とグランドカノニカル分布
4. フェルミ統計とボーズ統計
5. 相転移と相平衡
6. ２次の相転移

この演習問題は、manaba folio や http://goofy.phys.nara-wu.ac.jp/yoshioka/education-20.html に pdf ファイルでアップロードされます。

—統計力学１の復習—

1. 分配関数 Z を用いて、平均エネルギー $\langle E \rangle$ はどのように表されるか。また、以下の式を証明せよ。

$$\frac{d}{d\beta}\langle E \rangle = -\langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle \tag{1}$$

$$\frac{d^2}{d\beta^2}\langle E \rangle = \langle (E - \langle E \rangle)^3 \rangle \tag{2}$$

ただし、$\beta = 1/(k_B T)$ である。さらに、式 (1) を使って、熱容量 C をエネルギーの揺らぎ $\langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle$ を用いて表せ。

2. N 個の独立な一次元調和振動子 (角振動数：ω) からなる系がある。一個の調和振動子のエネルギー固有値は

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots) \tag{3}$$

で与えられる。以下の問いに答えよ。

(a) まずミクロカノニカル分布を使って、その熱的性質を議論する。

i. 系全体のエネルギーを $E = M\hbar\omega + N\hbar\omega/2$ とする。取りうる状態の数 $W_N(E)$ を求めよ。

ii. エントロピー S を求めよ。ただし、$N \gg 1$、$M \gg 1$ としてスターリングの公式を用いよ。

iii. $\dfrac{\partial S}{\partial E} = \dfrac{1}{T}$ を用いて、エネルギーを温度 T の関数として求めよ。また、その結果を用いて、エントロピー S を温度 T の関数として求めよ。

(b) 次に、カノニカル分布の方法を用いる。

i. 一個の調和振動子の分配関数 z_1 を求めよ。

ii. 系全体の分配関数 Z が $Z = z_1^N$ であることを用いて、ヘルムホルツの自由エネルギー F を求めよ。

iii. エネルギー E を求め、ミクロカノニカル分布の方法を用いて得られた結果と比較せよ。

iv. エントロピー $S = -\dfrac{\partial F}{\partial T}$ を温度 T の関数として求め、ミクロカノニカル分布の方法を用いて得られた結果と比較せよ。

3. 磁場の方向に磁気モーメント $\pm\mu$ を持ち得る N 個の原子が、温度 T の熱浴と接して熱平衡状態にある。磁場の大きさを B として以下の問いに答えよ。

   (a) まずミクロカノニカル分布を使って、その熱的性質を議論する。

      i. 磁気モーメントが $+\mu$ となっている原子の数を N_+、$-\mu$ となっている原子の数を N_- とする。系全体のエネルギー E を N_+、N_- を用いて表せ。また取りうる状態の数 $W_N(E)$ を求めよ。

      ii. エントロピー S を求めよ。ただし、スターリングの公式を用いよ。

      iii. $\dfrac{\partial S}{\partial E} = \dfrac{1}{T}$ を用いて、エネルギーを温度 T の関数として求めよ。

   (b) 次に、カノニカル分布の方法を用いる。

      i. 一個の原子の分配関数 z_1 を求めよ。

      ii. 系全体の分配関数 Z が $Z = z_1^N$ であることを用いて、ヘルムホルツの自由エネルギー F を求めよ。

      iii. エネルギー E を求め、ミクロカノニカル分布の方法を用いて得られた結果と比較せよ。

   (c) 磁化 M を磁場 B の関数としてもとめ、図示せよ。

   (d) 磁化率 $\chi = \partial M/\partial B|_{B=0}$ を求めよ。

4. ミクロカノニカル分布の方法を用いて、体積 V の容器の中に閉じ込められた N 個の自由粒子からなる理想気体のエントロピー S がエネルギー E の関数として、

$$S(E) = Nk_B \left\{ \frac{3}{2} \log \frac{4\pi m E}{3(2\pi\hbar)^2 N} + \log \frac{V}{N} + \frac{5}{2} \right\} \tag{4}$$

と表されることを示せ。必要ならば、以下の事項を用いよ。

- 半径 R の n 次元球の体積

$$V_n(R) = \frac{1}{n} \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)} R^n$$

- ガンマ関数 $\Gamma(z)$ の漸近展開 ($|z| \gg 1$)

$$\log \Gamma(z) \sim z \log z - z$$

5. 式 (4) で与えられる理想気体のエントロピーを用いて、以下の問いに答えよ。

   (a) エネルギー E を温度 T の関数として求めよ。

   (b) エントロピー S を温度 T の関数として求めよ。

   (c) ヘルムホルツの自由エネルギーを求めよ。

   (d) 上記の結果を用いて、状態方程式を得よ。

   (e) (b) で求められた S は温度がある特徴的な温度に比べはるかに小さい場合には、正しい値とはならない。そのような温度を求めよ。また、その結果を物理的に解釈せよ。

   (f) (a) で求めたエネルギーは、カノニカル分布では期待値 $\langle E\rangle$ とみなされる。この結果を使って以下の量を求めよ。

$$\frac{\langle (E-\langle E\rangle)^2\rangle}{\langle E\rangle^2} \tag{5}$$

$$\frac{\langle (E-\langle E\rangle)^3\rangle}{\langle E\rangle^3} \tag{6}$$

6. ピストンのついた容器の中に理想気体が入っている。そのエントロピーは式 (4) で与えられる。容器およびピストンは断熱材でできているものとする。

   (a) ピストンを急に引いて体積を 2 倍にした。この過程では気体は仕事をしない。エントロピーの変化量 ΔS を求めよ。

   (b) 次にピストンをゆっくり動かして体積を元に戻した。この時、気体のエネルギーはどうなるか。

7. マックスウエル－ボルツマンの分布則では、運動量 $\boldsymbol{p}$ を持つ粒子の平均の数 $n(\boldsymbol{p})$ は以下の式で与えられる。

$$n(\boldsymbol{p}) \propto \exp\left(-\frac{\boldsymbol{p}^2}{2mk_BT}\right) \tag{7}$$

   以下の問いに答えよ。

   (a) 以下の式を満たすように規格化せよ。

$$N = \sum_{\boldsymbol{p}} n(\boldsymbol{p}) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3}\iiint_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z n(\boldsymbol{p}) \tag{8}$$

(b) 粒子一個あたりの平均エネルギーを求めよ。

8. 古典統計力学を用いて、以下の問いに答えよ。

   (a) N 個の独立な調和振動子 (角振動数：ω) の分配関数 Z、ヘルムホルツの自由エネルギー F、エントロピー S、内部エネルギー E、熱容量 C を求めよ。

   (b) 体積 V の容器に閉じ込められた N 個の原子 (質量：m) からなる理想気体の、分配関数 Z、ヘルムホルツの自由エネルギー F、エントロピー S、圧力 p を求めよ。また、それらの結果を問題 5 の結果と比較せよ。

9. 自由度が f の系の運動エネルギーが

$$K = \sum_{i=1}^{f} \alpha_i p_i^2 \qquad (\alpha_i > 0) \tag{9}$$

と書けるとする。この結果と古典統計力学を用いて運動エネルギーの期待値 $\langle K \rangle$ を計算することによって、エネルギー等分配則を証明せよ。ただし、ポテンシャルエネルギーは運動量に依存しないものとする。

10. エネルギーが運動量 $\boldsymbol{p}$ の関数として

$$\epsilon(\boldsymbol{p}) = c|\boldsymbol{p}| \tag{10}$$

で与えられる気体を超相対論的気体という。ここで、c は光速である。古典統計力学を用いて、体積 V の容器に閉じ込められた N 個の粒子からなる超相対論的理想気体の分配関数 Z、ヘルムホルツの自由エネルギー F、エントロピー S、内部エネルギー E、圧力 p を求めよ。

11. 以下のようなポテンシャル $u(x)$

$$u(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{2}kx^2 & (|x| < a) \\ \infty & (|x| > a) \end{cases} \tag{11}$$

の中を運動する質量 m の粒子 N 個からなる系がある。この系を古典統計力学を用いて取扱い、比熱について論ぜよ。

12. 不完全気体のハミルトニアンは以下のように与えられる。

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m} + \sum_{(i,j)} v(R_{ij}) \tag{12}$$

ただし、$v(R)$ は粒子間の相互作用を表すポテンシャルであり、図 1 で与えられる。また、$R_{ij} = |\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|$ である。以下の問いに答えよ。

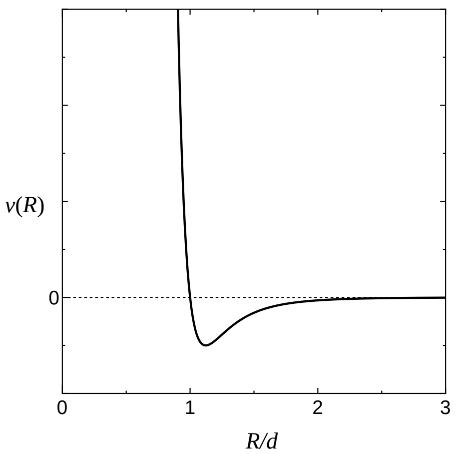


図 1:

(a) $NB/V \ll 1$ として、この系のヘルムホルツの自由エネルギーが

$$F = F_0 + \frac{N^2 k_B T}{V} B \tag{13}$$

となることを示せ。ただし、

$$B = -\frac{1}{2} \int d^3\boldsymbol{R} \left(\mathrm{e}^{-v(R)/k_B T} - 1 \right) \tag{14}$$

(b) 上で得られたヘルムホルツの自由エネルギーから、ファンデルワールスの状態方程式

$$\left(P + \frac{N^2}{V^2} a \right) (V - Nb) = N k_B T \tag{15}$$

を導出せよ。

13. ファンデルワールスの状態方程式

$$\left(P + \frac{N^2}{V^2}a\right)(V - Nb) = Nk_BT \tag{16}$$

にしたがう不完全気体のヘルムホルツの自由エネルギーは

$$F = F_0 + \frac{N^2 k_B T}{V}B \tag{17}$$

$$B = b - \frac{a}{k_B T} \tag{18}$$

で与えられる。以下の問いに答えよ。

(a) 真空中へ自由膨張すると、温度はどうなるか。なお、この過程で外部との熱の出入りはないものとする。

(b) 低圧の容器へ高圧気体を噴射させると気体の温度は変化する。この現象をジュール・トムソン効果という。このとき、エンタルピー H が保存されるので、

$$\mu_{JT} = \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_H \tag{19}$$

をジュール・トムソン係数といい、これが正ならばジュール・トムソン効果で温度が下がり、負ならば温度が上がる。μ_{JT} を求め、温度の関数として図示せよ。なお、このとき

$$V = \frac{Nk_BT}{P} + NB \tag{20}$$

と近似してよい。

—低温と量子効果—

14. 問題 2 の N 個の一次元調和振動子系のエントロピー S と比熱 C に関して以下の問いに答えよ。

   (a) $\hbar\omega \gg k_BT$ の場合と $\hbar\omega \ll k_BT$ の場合の漸近形を求めよ。また、その結果を問題 8 (a) と比較せよ。

   (b) 温度 T の関数として図示し、熱力学第 3 法則が成り立っていることを確認せよ。

15. 磁場 B の方向に値 $g\mu_B m$（$m = J, J-1, J-2, \cdots, -J+1, -J$）だけをもち得る磁気モーメント N 個からなる系がある。以下の問いに答えよ。

   (a) 分配関数 Z と自由エネルギー F を求めよ。

   (b) 磁化 M が以下の式で表されることを示せ。

$$M = Ng\mu_B JB_J\left(\frac{g\mu_B JB}{k_BT}\right) \tag{21}$$

$$B_J(x) = \left(\frac{2J+1}{2J}\right)\coth\left(\frac{2J+1}{2J}x\right) - \frac{1}{2J}\coth\frac{x}{2J} \tag{22}$$

   特に、$J = 1/2$ の場合、また $J \to \infty$（ただし、$g\mu_B J = \mu_0 =$ 一定）の場合はどうなるか？

   (c) 磁化率を求めよ。

   (d) エントロピー S を求めよ。特に $g\mu_B JB/(k_BT) \gg 1$ の場合、および $g\mu_B JB/(k_BT) \ll 1$ の場合にはどうなるか。

   (e) 断熱的に磁場を小さくすると、温度が下がること（断熱消磁）を示せ。

16. 体積 V の空洞中の電磁波に関して、以下の問いに答えよ。

   (a) 角振動数 ω の一個の調和振動子の自由エネルギー $f(\omega)$ を求めよ。ただし、ゼロ点エネルギーは無視してよい。

   (b) 角振動数 ω と $\omega + d\omega$ の間にある電磁波のモードの数は $D_3(\omega)d\omega$ で表されることを示せ。ただし、

$$D_3(\omega) = \frac{V\omega^2}{\pi^2 c^3} \tag{23}$$

   である。この $D_3(\omega)$ を電磁波の状態密度という。

(c) 空洞中の電磁波の自由エネルギー F は

$$F = \int_0^\infty d\omega D_3(\omega) f(\omega) \tag{24}$$

で与えられる。これから、空洞のエネルギー E と熱容量 C を求めるよ。

(d) $P = E/(3V)$ となることを示せ。

17. 前問の (24) を用いて空洞中の電磁波のエントロピー S を求め、

$$S = \frac{C}{3}$$

が成り立つことを確かめよ。

18. 電磁波の進行方向が 2 次元（面積 S）および 1 次元（長さ L）に制限されている場合を考える。ただし、電磁波は横波（偏りの方向は 2 つ）と考えよ。

(a) 各々の場合の電磁波の状態密度 $D_d(\omega)$（$d = 1, 2$）を求めよ。

(b) プランクの輻射公式はどうなるか。

(c) 比熱を求めよ。

(d) エネルギー分布が最大となる波長を $\lambda_{\max}$ とする。$d = 2$、$d = 1$ いずれの場合も $\lambda_{\max} T =$ 定数 となることを示し、その定数を求めよ。

必要ならば、以下の式を用いよ。

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x \frac{x^p}{\mathrm{e}^x - 1} = \Gamma(p+1)\zeta(p+1)$$

$$\Gamma(n+1) = n! \qquad (n: \text{ゼロまたは正の整数})$$

$$\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6},\ \zeta(3) \simeq 1.202,\ \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}$$

19. デバイの内挿公式を導出せよ。さらに、$T \gg \Theta_D$ および $T \ll \Theta_D$ の場合の比熱の温度依存性を求めよ。ここで θ_D はデバイ温度である。必要ならば、以下の積分公式を用いよ。

- $p > 1$ の場合

$$\int_0^y \mathrm{d}x \frac{x^p}{(\mathrm{e}^x - 1)(1 - \mathrm{e}^{-x})} = \begin{cases} \dfrac{y^{p-1}}{p-1} & \cdots y \ll 1 \\ \Gamma(p+1)\zeta(p) & \cdots y \gg 1 \end{cases}$$

20. 格子振動が 2 次元および 1 次元的に伝わる固体におけるデバイの内挿公式を導出せよ。さらに、$T \gg \Theta_D$ および $T \ll \Theta_D$ の場合の比熱の温度依存性を求めよ。ただし、音響モードは 1 つの縦波と 2 つの横波があるとする。

21. 固体中に分散関係 $\omega = A|q|^n$ となる波が存在するとする。ここで、A と n は正の定数である。十分低温の場合、この波による比熱の温度依存性を求めよ。

22. N 個の独立な粒子の系がある。各粒子はエネルギーが 0 と $\epsilon(> 0)$ の 2 つの量子状態をとることができる。ϵ の値は粒子によって異なり、その値が $\epsilon \sim \epsilon + d\epsilon$ である粒子の数は $D(\epsilon)d\epsilon$ である。ただし、

$$D(\epsilon) = \begin{cases} A\epsilon^n & \cdots \quad 0 < \epsilon < \epsilon_M \\ 0 & \cdots \quad \epsilon > \epsilon_M \end{cases} \tag{25}$$

ここで、n は非負の実数である。以下の問いに答えよ。

(a) エネルギーが 0 と ϵ であるような 1 個の粒子の熱容量 $c(\epsilon)$ とエントロピー $s(\epsilon)$ を求めよ。

(b) この系の熱容量 C とエントロピー S の表式を求め、$T \ll \epsilon_M/k_B$ および $T \gg \epsilon_M/k_B$ での温度依存性について考察せよ。

—開いた系とグランドカノニカル分布—

23. グランドポテンシャル $\Omega(T, V, \mu)$ は大分配関数 $\Xi = \sum_{N=0}^{\infty} Z(T, V, N) \mathrm{e}^{\mu N/k_B T}$ を用いて

$$\Omega(T, V, \mu) = -k_B T \log \Xi \tag{26}$$

で与えられる。また、エントロピー S、圧力 P、粒子数 N は以下のように与えられる。

$$S = -\frac{\partial \Omega}{\partial T} \tag{27}$$

$$P = -\frac{\partial \Omega}{\partial V} \tag{28}$$

$$N = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \tag{29}$$

以下の問いに答えよ。

(a) 式 (29) を示せ。

(b) Ω が示量変数であることを用いて、

$$\Omega = -PV \tag{30}$$

であることを示せ。

(c) $\dfrac{\partial N}{\partial \mu} > 0$ であることを示せ。

24. ギブスの自由エネルギー $G(T, P, N)$ は示量変数、化学ポテンシャル μ が示強変数であることを用いて、

$$G(T, P, N) = N\mu(T, P) \tag{31}$$

となることを示せ。

25. 単原子分子理想気体の分配関数 $Z(T, V, N)$ は以下のように与えられる。

$$Z(T, V, N) = \frac{V^N}{N!} \left(\frac{m k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3N/2} \tag{32}$$

以下の問いに答えよ。

(a) 化学ポテンシャル $\mu(T,P)$ を求めよ。

(b) グランドカノニカル分布において、粒子数が N となる確率 $P(N)$ がポアソン分布

$$P(N) = \frac{\langle N\rangle^N}{N!}\exp(-\langle N\rangle) \tag{33}$$

となることを示せ。ただし、$\langle N\rangle$ は N の期待値である。

26. 気体分子 1 個を吸着できる吸着点を N 個有する吸着面がある。吸着点に気体分子 1 個が吸着されるとエネルギーは $-\epsilon$ となる。この吸着面が理想気体中に置かれて熱平衡状態となっている。以下の問いに答えよ。

(a) 化学ポテンシャルを μ として、吸着面の大分配関数を求めよ。

(b) 被覆比 θ は 吸着分子の数/吸着点の数 で定義される。θ を μ を用いて表せ。

(c) 前問 (a) の結果を用いて、θ を圧力 P を用いて表せ。

—フェルミ統計とボーズ統計—

27. グランドカノニカル分布を用いて、フェルミ分布関数とボーズ分布関数を導出せよ。

28. 以下の手順で、ミクロカノニカル分布を用いて、フェルミ分布関数、ボーズ分布関数およびボルツマン分布関数を導出せよ。

    (a) １粒子状態をエネルギーによってグループにわけ、それに番号をつける。このとき、各グループのエネルギーの幅は十分に小さく、１つのグループの属する１粒子状態のエネルギーは、中心の値で代表させてよい。また、それぞれのグループに属する１粒子状態の数は十分に多いものとする。グループ l に属する１粒子状態の数を M_l、そこを占める粒子数を N_l、１粒子状態のエネルギーを E_l とする。フェルミ粒子、ボーズ粒子、古典粒子のグループ l の微視的状態の数 W_l^F、W_l^B、W_l^C は以下の式で表されることを示せ。

$$W_l^F = \frac{M_l!}{N_l!(M_l - N_l)!} \tag{34}$$

$$W_l^B = \frac{(N_l + M_l - 1)!}{N_l!(M_l - 1)!} \tag{35}$$

$$W_l^C = \frac{M_l^{N_l}}{N_l!} \tag{36}$$

    (b) 系全体の可能な状態の数は $W = \prod_l W_l$ で与えられる。拘束条件、

$$N = \sum_l N_l = 一定 \tag{37}$$

$$E = \sum_l E_l N_l = 一定 \tag{38}$$

    のもとで、エントロピー $S = k_B \log W$ を最大にすることによって、フェルミ分布関数、ボーズ分布関数、ボルツマン分布関数を求めよ。

29. グランドカノニカル分布を用いて、フェルミ粒子系とボーズ粒子系のエネルギー E とエントロピー S をそれぞれ求めよ。さらに、フェルミ粒子系とボーズ粒子系の各々について,

$$\Omega = E - TS - \mu N$$

が成り立っていることを示せ。ここで、Ω は (26) で与えられるグランドポテンシャルである。また、エントロピーを分布関数を用いて表せ。

30. ボーズ粒子およびフェルミ粒子の理想気体において、１つの量子状態 j を占める粒子数 n_j の平均値 $\langle n_j \rangle$ からのゆらぎが以下の式で与えられることを示せ。

$$\langle (n_j - \langle n_j \rangle)^2 \rangle = \langle n_j \rangle (1 \pm \langle n_j \rangle) \tag{39}$$

ここで、$+$ はボーズ粒子、$-$ はフェルミ粒子の場合である。

31. d 次元空間を運動する自由粒子の１スピン自由度あたりの状態密度を求めよ。ただし、系の大きさは L^d とし、１個の粒子のエネルギーは

$$\epsilon(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{d} p_i^2 \tag{40}$$

で与えられるものとする。ただし、$\boldsymbol{p} = (p_1, p_2, \cdots, p_d)$ である。また、$d = 1, 2, 3$ の場合にその概形を描け。

32. $k_B T \ll \mu$ の時、以下の展開（ゾンマーフェルト展開）を証明せよ。

$$\begin{aligned} I &= \int_0^\infty d\epsilon \frac{dN}{d\epsilon} f(\epsilon) \\ &= N(\mu) + \sum_{r=1}^{\infty} N^{(2r)}(\mu)(k_B T)^{2r} 2(1 - 2^{1-2r})\zeta(2r) \end{aligned} \tag{41}$$

ここで、$f(\epsilon)$ はフェルミ分布関数である。ただし、$N(\epsilon)$ は $N(0) = 0$ を満たし、$|\epsilon - \mu| \leq k_B T$ であまり激しく変化しない関数である。また、$\zeta(z)$ はテェータ関数である。

33. 体積 V の容器の中に閉じ込められた質量 m、スピン 1/2 のフェルミ粒子系について以下の問いに答えよ。ただし、粒子のエネルギーは $\epsilon(\boldsymbol{p}) = \dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ によって与えられ、粒子の数を N とする。

(a) フェルミ運動量 p_F、フェルミエネルギー ϵ_F、フェルミ温度 T_F、基底状態のエネルギー E_0 を求めよ。

(b) 絶対零度での圧力 P_0 を E_0 と V を用いて表せ。また、なぜ絶対零度での圧力が有限になるか理由を付けて答えよ。

(c) $T \ll T_F$ の場合、化学ポテンシャル μ を決定する式は

$$\begin{aligned} N &= 2\int_0^\infty d\epsilon D(\epsilon) f(\epsilon) \\ &\simeq 2\int_0^\mu d\epsilon D(\epsilon) + \frac{\pi^2}{3} D'(\mu)(k_B T)^2 \end{aligned} \tag{42}$$

で与えられる。ここで、$D(\epsilon) = A\epsilon^{1/2}$ は 1 スピン自由度あたりの状態密度であり、$f(\epsilon) = 1/(\exp\{(\epsilon-\mu)/k_B T\}+1)$。この式より、化学ポテンシャル μ を $(T/T_F)^2$ のオーダーまで求めよ。

(d) $T \ll T_F$ の場合のエネルギーを $(T/T_F)^2$ のオーダーまで求めよ。さらに、その結果を用いて、熱容量を計算せよ。

(e) (d) の結果を定性的に示せ。

34. 前問においてゾンマーフェルト展開を用いて $T \ll T_F$ の場合のエントロピー S を計算し、これが熱容量 C と等しくなることを示せ。

35. 面積 S の 2 次元平面内を運動するスピン 1/2 のフェルミ粒子系について以下の問いに答えよ。ただし、粒子のエネルギーは $\epsilon(\boldsymbol{p}) = \dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ によって与えられ、粒子の数を N とする。

(a) 2 問前の (a) および (b) と同様の考察を行え。

(b) この 2 次元系では、化学ポテンシャルを決定する際ゾンマーフェルト展開を使うことはできないが、厳密に計算することができる。化学ポテンシャルを求めよ。

(c) 2 問前の (d) と同様の考察を行え。

36. 真性半導体では、その伝導帯および価電子帯の分散関係が

$$\epsilon_c(\boldsymbol{p}) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e} + E_g \tag{43}$$

$$\epsilon_v(\boldsymbol{p}) = -\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_h} \tag{44}$$

で与えられる。以下の問いに答えよ。

(a) スピンあたりの状態密度を求めよ。

(b) 絶対零度では、価電子帯が完全に占有され伝導体には電子がまったく存在しない。有限温度における化学ポテンシャルと伝導帯に励起される電子数を求めよ。ただし、励起された電子の数は十分に少なくフェルミ縮退していないものとする。

37. スピンあたりの状態密度 $D(\epsilon)$ を用いて、電子のスピン磁化率の一般的な結果を導出せよ。さらに、$T = 0$、$T \ll T_F$、$T \gg T_F$ の場合にはその磁化率はどうなるか？

38. ２次元電子系のスピン磁化率は厳密に計算することができる。スピン磁化率を求めよ。

39. 高いエネルギーを持つフェルミ粒子は相対論的に取り扱わねばならない。そのエネルギーは、$\epsilon(\boldsymbol{p}) = c\sqrt{\boldsymbol{p}^2 + (mc)^2}$ で与えられる。以下の問いに答えよ。

(a) 高密度のフェルミ粒子系は相対論的に取り扱わねばならない。相対論的な効果が重要となる密度を求めよ。

(b) 超相対論的な場合（$\epsilon(\boldsymbol{p}) = c|\boldsymbol{p}|$）について、絶対零度のエネルギーと圧力、有限温度の熱容量を求めよ。

40. 体積 V の容器の中に閉じ込められた質量 m、スピン 0 のボーズ粒子系について以下の問いに答えよ。

(a) ボーズアインシュタイン凝縮を起こす温度 T_c を求めよ。

(b) $T < T_c$ における最低エネルギー状態を占有する粒子数 $N_0(T)$ を求めよ。

(c) $T < T_c$ におけるエネルギーと熱容量を求めよ。

(d) $T < T_c$ におけるエントロピーを求めよ。

41. 分散関係 $\epsilon(\boldsymbol{p}) = \dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ をもつボーズ粒子が 2 次元平面上を運動している。この時、ボーズ・アインシュタイン凝縮が起こらないことをを示し、化学ポテンシャルを粒子数 N の関数として求めよ。ただし、ボーズ粒子のスピンは 0 としてよい。また、1 次元の場合にボーズ・アインシュタイン凝縮が起こるかどうか考察せよ。

42. 同じ数 N のボーズ粒子、フェルミ粒子、そしてボルツマン統計に従う古典粒子が同じ体積 V の中に入っている場合の圧力を以下のような手順で考える。

(a) そのおのおのが一粒子状態 i を持つとき、ボーズ粒子、フェルミ粒子のグランドポテンシャル Ω_B、Ω_F が以下のように与えられることを示せ。

$$\Omega_B = k_B T \sum_i \ln\{1 - \exp[-(\epsilon_i - \mu)/k_B T]\} \tag{45}$$

$$\Omega_F = -k_B T \sum_i \ln\{1 + \exp[-(\epsilon_i - \mu)/k_B T]\} \tag{46}$$

ここで、k_B はボルツマン定数、T は絶対温度、ϵ_i は一粒子状態 i のエネルギー、μ は化学ポテンシャルである。

(b) グランドポテンシャルと圧力との関係は $\Omega = -PV$ で与えられることを用いて、ボーズ粒子、フェルミ粒子、古典粒子の圧力、P_B、P_F、P_C を書き下し、以下の問いに答えよ。

(b-1) $P_F - P_C > 0$ であることを示せ。ただし、古典粒子の場合には $P_C = Nk_BT/V$ が成立し、フェルミ粒子の場合には $N = \sum_i 1/\{\exp[(\epsilon_i - \mu)/k_B T] + 1\}$ が成り立つことを用いよ。

(b-2) $P_C - P_B > 0$ であることを示せ。ただし、ボーズ粒子の場合には $N = \sum_i 1/\{\exp[(\epsilon_i - \mu)/k_B T] - 1\}$ が成り立ち、また $\exp[(\epsilon_i - \mu)/k_B T] > 1$ であることを用いよ。

(c) (b-1)、(b-2) より、$P_F > P_B$ であることがわかる。この結果を粒子の統計性と関係付けて議論せよ。

43. 前問において、$\epsilon_i = \dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ となるとき、ボーズ粒子であってもフェルミ粒子であっても

$$PV = \frac{2}{3}E \tag{47}$$

となることを示せ。ここで E はエネルギーの平均値である。また、その結果を用いて $P_F > P_C > P_B$ であることを確かめよ。ただし、P_F および P_B に関しては強く縮退した場合の結果を用いよ。

44. スピン 1/2 の核スピンを持つ同種の原子が 2 原子分子を作っている（例えば、$\mathrm{H_2}$）。この分子の回転運動のエネルギー固有値は、

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} \qquad l = 0, 1, 2, \cdots \tag{48}$$

で与えられる。ここで、I は慣性モーメントである。核スピンが 3 重項状態となっている場合をオルソ状態、1 重項状態となっている状態をパラ状態と呼ぶ。以下の問いに答えよ。

(a) 1 個の分子において、核スピンの状態と回転運動を合わせた分配関数を $z_{\mathrm{nuc-rot}}$ とする。$z_{\mathrm{nuc-rot}}$ を求めよ。また、$T \gg \Theta_r = \hbar^2/(2Ik_B)$ の場合の分配関数を求め、古典統計力学による結果と比較せよ。

(b) オルソ状態の分子とパラ状態の分子の数の比を求めよ。特に、$T \gg \Theta_r = \hbar^2/(2Ik_B)$ および $T \ll \Theta_r = \hbar^2/(2Ik_B)$ の場合はどうなるか。

(c) オルソ状態とパラ状態の間の変化が十分に遅い場合には、それらを分離することが可能である。$T \gg \Theta_r = \hbar^2/(2Ik_B)$ および $T \ll \Theta_r = \hbar^2/(2Ik_B)$ の場合、オルソ状態とパラ状態の分子 1 個あたりの比熱を求め、比較せよ。

45. 重水素 D の場合、原子核は核スピン 1 をもつボーズ粒子である。この場合、オルソ $\mathrm{D_2}$ 分子の核スピンの波動関数は核の入れ替えに対して対称で 6 重に縮退している。一方、パラ $\mathrm{D_2}$ 分子の核スピンの波動関数は核の入れ替えに対して反対称で 3 重に縮退している。$T \gg \Theta_r = \hbar^2/(2Ik_B)$ および $T \ll \Theta_r = \hbar^2/(2Ik_B)$ の場合、オルソ状態とパラ状態の分子の数の比を求めよ。また、それぞれの状態の分子 1 個あたりの比熱を求めよ。

—相転移と相平衡—

46. ファンデルワールスの状態方程式 (15) は、$T < T_c$ で熱力学的に不安定になる。臨界温度 T_c は以下の式によって決定される。

$$\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{T=T_c} = 0 \tag{49}$$

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial V^2}\right)_{T=T_c} = 0 \tag{50}$$

T_c とその時の圧力 P_c および V_c を求めよ。また、$p = P/P_c$、$v = V/V_c$、$t = T/T_c$ を用いて状態方程式を書き直せ。

47. ファンデルワールスの状態方程式 (15) にしたがう不完全気体は $T < T_c$ では体積 V と圧力 P の関数として描くと、図 2 のようになる。以下の問いに答えよ。

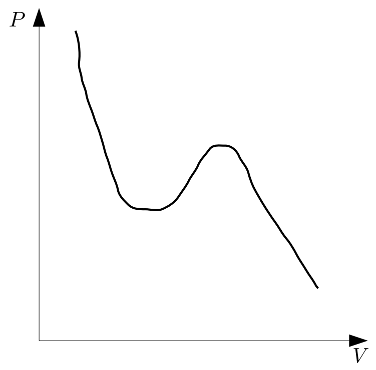


図 2:

(a) この温度ではこの気体は安定ではなく、気体液体共存状態や液体状態となっている。なぜか？

(b) 気体液体共存状態の圧力（飽和蒸気圧）はどのように決定されるか。

48. ある物質が一定量ある場合、ヘルムホルツの自由エネルギー F が体積 V の関数として、相 a と b について図 3 のように知られている。以下の問いに答えよ。

(a) 2 相 a と b の共存は 2 つの曲線の共通接戦をひくことによって定まることを示せ。

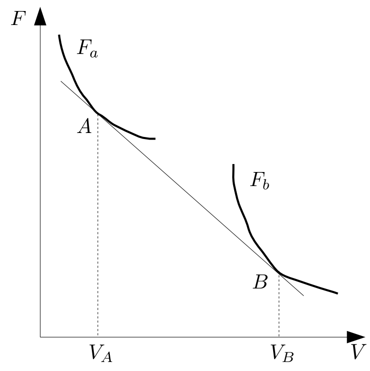


図 3:

(b) 曲線 F_a と F_b がなめらかにつながっているとする。体積 V が $V_A < V < V_B$ を満たすとき、２相 a と b の共存状態が実現する。この系の自由エネルギーを求めよ。また、相 a と b の質量比を求めよ。

—2次の相転移—

49. 最近接相互作用を持つ強磁性イジング模型（$J > 0$）

$$H = -J \sum_{(ij)} S_i S_j \tag{51}$$

をブラッグ-ウイリアムズ近似を用いて取り扱う。ただし、i 格子のスピンを $S_i = \pm 1$、最近接格子点の数を z、全格子点の数を N とする。

(a) 格子点あたりの磁化を m として、エントロピー S とエネルギー E を求めよ。

(b) ヘルムホルツの自由エネルギー F を求め、それを用いて熱平衡状態での m を決定する式を得よ。

(c) 臨界温度 T_c と $T \leq T_c$ および $T \ll T_c$ での m を求めよ。

50. 最近接相互作用を持つ強磁性イジング模型（$J > 0$）

$$H = -J \sum_{(ij)} S_i S_j - h \sum_{i=1}^{N} S_i \tag{52}$$

の平均場近似での取扱いを以下のような定式化で行う。ただし、$S_i = \pm 1$ とする。

(a) i ばんめのサイトのスピン変数を

$$S_i = m + \delta m_i \tag{53}$$

と書く。ここで m は i ばんめのサイトのスピン変数の期待値 $\langle S_i \rangle$ であり、δm_i は期待値からのずれ $S_i - m$ を表す。ずれの2次の項を落としたハミルトニアン H_{MF} が以下のように与えられることを示せ。

$$H_{MF} = \frac{Jm^2Nz}{2} - (Jzm + h) \sum_i S_i \tag{54}$$

(b) (54) から自由エネルギーを求めよ。その結果を使って、格子点あたりの磁化 m を求める式を導出し、$h = 0$ の場合は全問の答えと一致することを示せ。

(c) 磁化率 χ と $h = 0$ における比熱 C を、$T \gtrsim T_c$、$T \lesssim T_c$、$T \ll T_c$ の場合に求めよ。

51. スピン S の強磁性ハイゼンベルク模型（$K > 0$）

$$H = -K \sum_{(i,j)} \boldsymbol{S}_i \boldsymbol{S}_j - h \sum_i S_i^z \tag{55}$$

を平均場近似で取扱い、以下の問いに答えよ。ただし、スピンの期待値については z-成分のみが有限の値をとるものとせよ。また、$S_i^z = -S, -S+1, \cdots, S-1, S$ とする。

(a) 磁化を決定する式を導出せよ。

(b) 臨界温度 T_c を求めよ。また、$T \leq T_c$ および $T \ll T_c$ における自発磁化の温度依存性について論ぜよ。

(c) $h = 0$ の場合の $T > T_c$ における磁化率を求めよ。

52. 最近接相互作用を持つ反強磁性イジング模型（$J > 0$、J の前の符号に注意）

$$H = J \sum_{(ij)} S_i S_j - h \sum_{i=1}^{N} S_i \tag{56}$$

の平均場近似で取扱い、以下の問いに答えよ。ただし、$S_i = \pm 1$ とする。

(a) a 副格子、b 副格子の磁化をそれぞれ m_a、m_b とする。m_a と m_b を決定する自己無撞着方程式を導け。

(b) $h = 0$ の場合、臨界温度 T_N を求め、交替磁化の温度依存性について論ぜよ。

(c) 磁化率を求めよ。

53. １次元イジング模型

$$H = -J \sum_{i=1}^{N} S_i S_{1+1} \tag{57}$$

は分配関数 Z_N の正確な値を求めることができる。以下の手順にしたがって、正確な分配関数を求めよう。

(a) 周期境界条件 $S_{N+1} = S_1$ の場合、分配関数 Z_N は以下のように書けることを示せ。

$$Z_N = \mathrm{Tr} T^N \tag{58}$$

$$T = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{K} & \mathrm{e}^{-K} \\ \mathrm{e}^{-K} & \mathrm{e}^{K} \end{pmatrix} \tag{59}$$

ここで、$K = J/k_B T$ である。

(b) T の固有値と固有ベクトルを求めよ。

(c) ヘルムホルツの自由エネルギー F を求めよ。特に $N \gg 1$ の場合はどうなるか。

(d) エネルギー E および比熱 C を求め、その概形をグラフに描け。

(e) 相関関数 $\langle S_i S_j \rangle$ を求めよ。ただし、$i > j$ とする。

54. 前問を自由境界条件とした場合、分配関数と自由エネルギーはどうなるか？

55. ２次相転移を記述するランダウの自由エネルギーは以下のように与えられる。

$$F = F_0 + a(T - T_c)m^2 + bm^4 - hm \tag{60}$$

ここで、m は秩序変数（磁化）、T は温度、T_c は臨界温度、h は外部磁場である。また、定数 a、b は正の定数である。以下の問いに答えよ。

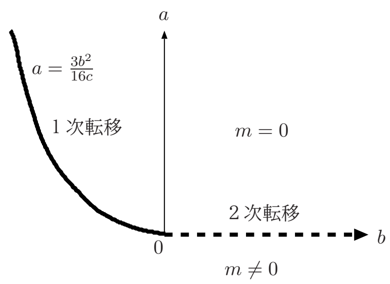
(a) $h = 0$ の場合を考える。磁化 m の温度依存性を求めよ。また、臨界温度近傍でのエントロピーと比熱を求めよ。

(b) 磁化率を求めよ。また、$T > T_c$、$T = T_c$ および $T < T_c$ における磁化曲線（$m - h$ 曲線）の概形を描け。

56. ランダウの自由エネルギー

$$F = \frac{a}{2}m^2 + \frac{b}{4}m^4 + \frac{c}{6}m^6 - hm \tag{61}$$

によって記述される状態に関して、以下の問いに答えよ。ただし、$c > 0$ である。



(a) $h=0$ の場合を考える。準安定状態が現れるための条件を求めよ。

(b) $h=0$ の相図が以下のようになっていることを示せ。

(c) $b=0$ における自発磁化および磁化率を求めよ。ただし、$a=k(T-T_c)(k>0)$ とせよ。また、$h=0$ において臨界温度近傍の比熱に関して論ぜよ。

57. 1次元強磁性イジング模型の分配関数

$$Z=\sum_{s_1}\sum_{s_2}\sum_{s_3}\cdots\exp(K_0\sum_i s_i s_{i+1}) \tag{62}$$

において、偶数サイトのスピンについて和をとると、

$$Z=\sum_{s_1}\sum_{s_3}\sum_{s_5}\cdots\exp(K_1\sum_i s_i s_{i+2}+C) \tag{63}$$

となることを示し、K_0 と K_1 との間の関係を求めよ。ただし C は定数である。また、この操作を無限に繰り返すとパラメータはどうなるか。