2023年度 物理工学基礎演習 (統計力学第一)
第4回 問題

担当; 水田 郁 (mizuta@qi.t.u-tokyo.ac.jp, 工学部 9 号館 325 号室)

提出日; 6/12 13:00 (前半クラス), 6/5 13:00 (後半クラス)

I 理想量子気体

逆温度 β、化学ポテンシャル μ を持つ熱粒子浴と接触した量子系で、平衡状態において状態 i (この状態におけるエネルギー E_i、粒子数 N_i とする) が実現する確率 p_i は

$$p_i = \frac{1}{\Xi(\beta,\mu)} e^{-\beta(E_i - \mu N_i)}, \quad \Xi(\beta,\mu) = \sum_i e^{-\beta(E_i-\mu N_i)}$$

で与えられる。ここで p_i をグランドカノニカル分布、(β,μ) を大分配関数と呼ぶ。

(1) グランドカノニカル分布を用いて理想量子気体の分布関数を求めよう。この系の 1 粒子量子状態は $j=1,2,\ldots,\infty$ で指定され、それぞれのエネルギーは ε_j であるとする。このとき、理想量子気体の状態 i は、量子状態 j を占有する粒子数 n_j の組 $i=\{n_j\}_j$ で指定される ($N_i=\sum_j n_j$, $E_i = \sum_j n_j \varepsilon_j$)。ただし、$n_j$ の取り得る値は、Fermi-Dirac 統計に従う粒子 (fermion) については $\{0,1\}$、Bose-Einstein 統計に従う粒子 (boson) については $\{0,1,\ldots,\infty\}$ である。これを用いて、

$$\langle n_j \rangle = \begin{cases} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_j-\mu)}+1} & \text{Fermi-Dirac 統計に従うとき} \\ \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_j-\mu)}-1} & \text{Bose-Einstein 統計に従うとき} \end{cases}$$

を導け。なお、これらの粒子数分布は、その量子状態のエネルギー期待値 ε のみに依存し、

$$f_F(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}, \quad f_B(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}$$

はそれぞれ Fermi-Dirac 分布、Bose-Einstein 分布と呼ばれる。

(2) ある物理量 A の期待値 $\langle A \rangle$ が $\langle A \rangle = \sum_j a(\varepsilon_j)$ [ただし、$a(\varepsilon)$ は ε について十分滑らかな関数] であると仮定する。このとき、状態数 $\Omega(\varepsilon) = \sum_{j;\varepsilon_j \leq \varepsilon} 1$ の ε についての導関数 $D(\varepsilon) = \frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}\varepsilon}$ (状態密度) を用いて、

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon D(\varepsilon) a(\varepsilon)$$

と表せることを示せ。ただし、系の体積は十分大きく、1 粒子エネルギー固有値 ε_j の感覚は限りなく狭くなるものとする。

(3) 一辺の長さ L で周期境界条件下の d 次元立方体中の自由粒子を考える。この粒子の固有状態は波数 $\boldsymbol{k}$ で指定される平面波状態 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ であり、整数 n_i を用いて $\boldsymbol{k} = \frac{2\pi}{L}(n_1,n_2,\ldots,n_d)$ となるものだけが許容される。この自由粒子が $\varepsilon(\boldsymbol{k}) = A|\boldsymbol{k}|^r$ $(r>0)$ の分散関係を持つとき、その状態密度 $D_{d,r}(\varepsilon)$ が、

$$D_{d,r}(\varepsilon) = g\frac{L^d}{(2\pi)^d}\frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}\frac{1}{A^{d/r}r}\varepsilon^{(d-r)/r}$$

で与えられることを示せ (ここで、g をスピンなどの内部自由度に起因する縮重度とした)。また、$r=2$ の場合における $D_{d,2}(\varepsilon)$ の概形を $d=1,2,3$ の場合に描け (これは、$\varepsilon(\boldsymbol{k}) = \hbar^2\boldsymbol{k}^2/2m$ である非相対論的な自由粒子の状態密度を与える)。

II　理想 Fermi 気体

体積 V の立方体の中に閉じ込められた N 個の自由粒子からなる理想 Fermi 気体を考える。粒子のエネルギー固有値は $\varepsilon(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m}$ で与えられ、スピンは 1/2 であるとする。次の問いに答えよ。

(1) 絶対零度において Fermi 粒子に占められる準位のうちで最高のエネルギー準位を Fermi エネルギーという。この粒子系の Fermi エネルギー ε_F を求めよ。

(2) 絶対零度におけるこの系の全エネルギーを ε_F を用いて表せ。また、これを用いて粒子系の圧力 P を求めよ。

(3) $\varepsilon < 0$ で $h(\varepsilon) = 0$ であるような滑らかな関数 $h(\varepsilon)$ に対して、十分低温な範囲では以下の近似ができる。

$$\int_0^\infty h(\varepsilon) f_F(\varepsilon) \mathrm{d}\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} h(\varepsilon) \mathrm{d}\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} \left(h'(\varepsilon_F) - \frac{D'(\varepsilon_F)}{D(\varepsilon_F)} h(\varepsilon_F) \right) (k_B T)^2 + \mathcal{O}\big((k_B T)^4\big).$$

この式を用いて低温における系のエネルギー $E(T)$ および比熱 $C(T)$ を求めよ。また、余裕があれば上式の近似 (Sommarfeld 展開) を導出せよ。

(4) 磁場 H 中に置かれた各電子のエネルギー準位は Zeeman 効果により $\varepsilon_\sigma(\boldsymbol{k}) = \hbar^2 \boldsymbol{k}^2 / 2m - \sigma \mu_0 H$ に分裂する (ただし、磁場の運動項への寄与は無視した)。ここで、$\sigma = +1$ (-1) は磁場に平行 (反平行) なスピン磁気モーメントを持つ電子を表す。この系の低磁場・低温極限における磁化率を求めよ。

(5) Na は常温・常圧で体心立方構造を取り、格子定数は $a = 4.225$ Å で与えられる。それぞれの Na 原子が 1 つの電子を供給するとしたとき、この系の電子密度 [1/m^3] および Fermi 温度 [K] ($T_F = \varepsilon_F / k_B$) を求めよ。ただし、Na 原子の作るポテンシャル, 電子間相互作用は無視して、Na 原子が供給する電子の集合が理想 Fermi 気体とみなせるとする。

III　理想 Bose 気体

体積 V の立方体の中に閉じ込められた N 個の自由粒子からなる理想 Bose 気体を考える。粒子のエネルギー固有値は $\varepsilon(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m}$ で与えられ、スピンは 0 であるとする。次の問いに答えよ。

(1) 粒子数密度 $\rho = \langle N \rangle / V$ を計算し、それを関数

$$F_{1/2}(\alpha) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \mathrm{d}x \frac{x^{1/2}}{e^{x+\alpha} - 1}$$

を用いて表せ。ただし、$\langle n_j \rangle / V$ が全ての j について ρ より十分小さい量であるとする。

(2) 上で求めた ρ を用いて、逆温度 β、密度 ρ および化学ポテンシャル μ の間に成り立つ関係式を導出せよ。また、これを μ について解いて μ を β, ρ の関数として表すとき、$\beta > \beta_c$ で解 μ が存在しなくなる。このような閾値 β_c を求めよ。

(3) $\beta > \beta_c$ の時、すなわち $T < T_c = 1/(k_B \beta_c)$ を満たす低温領域では、一粒子基底状態 $j = 1$ を巨視的な数の粒子が占有するような状態が実現している (Bose-Einstein 凝縮)。この状態において $j = 1$ の占有数密度 $\langle n_1 \rangle / V$ を温度の関数として表し、その概形を図示せよ。

(4) 温度 T におけるエネルギー期待値 $E(T)$ が転移温度 $T = T_c$ でも連続であることを示せ。

(5) 分散 $\varepsilon(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m}$ を持つ 2 次元の理想 Bose 気体は Bose-Einstein 凝縮を起こさないことを説明せよ。