3　量子論からの準備

時間に依存しない 1 次元 Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)\phi(x)=E_n\phi(X). \tag{1}$$

無限に深い 1 次元井戸型ポテンシャルは次のような解を持つ.($n\in\mathbb{N}_{>0}$.)

$$V(x)=\begin{cases}0 & (0\le x\le L).\\ \infty & (\text{otherwise}).\end{cases}. \tag{2}$$

$$\Rightarrow \phi(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi}{L}x & (0\le x\le L).\\ 0 & (\text{otherwise}).\end{cases},\ E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2=E_1n^2. \tag{3}$$

時間に依存しない 3 次元 Schrödinger 方程式は.($\boldsymbol{n}:=(n_x,n_y,n_z)\in\mathbb{N}^3_{>0}$.)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{x})\right)\phi(\boldsymbol{x})=E_{\boldsymbol{n}}\phi(\boldsymbol{x}). \tag{4}$$

無限に深い 3 次元井戸型ポテンシャルは次のような解を持つ.($\boldsymbol{n}^2:=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}$)

$$V(\boldsymbol{x})=\begin{cases}0 & (0\le x\le L \text{ and } 0\le y\le L \text{ and } 0\le z\le L:\ \text{interior}).\\ \infty & (\text{otherwise}).\end{cases}. \tag{5}$$

$$\Rightarrow \phi(\boldsymbol{x})=\begin{cases}\prod_{i\in\{x,y,z\}}\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{\pi n_i}{L}x_i & (\text{interior}).\\ 0 & (\text{otherwise}).\end{cases},\ E_{\boldsymbol{n}}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\boldsymbol{n}^2=E_1\boldsymbol{n}^2. \tag{6}$$

状態数 $\Omega(E)$ を次のように定義する. (3 次元のとき $n\in\mathbb{N}_{>0}\to\boldsymbol{n}\in\mathbb{N}^3_{>0}$)

$$\Omega(E):=|\{E_{n\in\mathbb{N}_{>0}}|E_n\le E\}|. \tag{7}$$

以下の議論では系が十分高温である ($E>>E_1\Rightarrow\sqrt{E/E_1}>>1$) と仮定する.
(1D,$N=1$)

$$\sqrt{\frac{E}{E_1}}-1<\Omega(E)\le\sqrt{\frac{E}{E_1}}. \tag{8}$$

$$\Rightarrow\Omega(E)\simeq\sqrt{\frac{E}{E_1}}=\frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar}L\sqrt{E}. \tag{9}$$

$(3D,N=1),\ V:=L^3,$

$$\frac{1}{8}\frac{4\pi}{3}\left(\sqrt{\frac{E}{E_1}}-\sqrt{3}\right)^3<\Omega(E)\le\frac{1}{8}\frac{4\pi}{3}\sqrt{\frac{E}{E_1}}^3. \tag{10}$$

$$\Rightarrow\Omega(E)\simeq\frac{\pi}{6}\sqrt{\frac{E}{E_1}}^3=\frac{(2m)^{3/2}}{6\pi^2\hbar^3}VE^{3/2}. \tag{11}$$

$(3D, N >> 1),\ \epsilon := E/V,\ \rho := N/V,\ \alpha := (m/3\pi)^{3/2}\hbar^{-3}e^{5/2},\ \sigma(\epsilon,\rho) := \rho\ln(\alpha\epsilon^{3/2}\rho^{-5/2}),$

$$\frac{1}{2^{3N}N!}V_{3N}\left(\sqrt{\frac{E}{E_1}}-\sqrt{3N}\right) < \Omega(E) \leq \frac{1}{2^{3N}N!}V_{3N}\left(\sqrt{\frac{E}{E_1}}\right). \tag{12}$$

$$\Rightarrow \Omega(E) \simeq \frac{1}{N!}\frac{1}{(3N/2)!}\alpha'^{N}E^{3N/2}V^{N}. \tag{13}$$

$$\simeq \exp\left[V\rho\ln(\alpha\epsilon^{3/2}\rho^{-5/2}) + \ln(\sqrt{6}\pi N)\right] \sim \exp\left[V\sigma(\epsilon,\rho)\right]. \tag{14}$$

ただし,V_ν を ν 次元球の体積 (15)(ν を偶数) として計算した.

$$V_\nu(r) = \frac{\pi^{\nu/2}}{\Gamma((\nu/2)+1)}r^\nu = \begin{cases} \frac{\pi^{\nu/2}}{(\nu/2)!}r^\nu & \nu:\ \text{even}\ . \\ \frac{2(2\pi)^{(\nu-1)/2}}{\nu!!}r^\nu & \nu:\ \text{odd}\ . \end{cases} \tag{15}$$

またスターリングの公式 (16) を利用して式を簡略化した.

$$n >> 1 \Rightarrow n! \simeq \sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n \sim \left(\frac{n}{e}\right)^n. \tag{16}$$

相互作用がある系についても $\Omega \sim \exp\left[V\sigma(\epsilon,\rho)\right]$ の形で書ける. 条件 (i),(ii) を満たすような相互作用 v についてマクロな系の基底エネルギー密度 ϵ_0, 状態数は次のような極限値をもつ.

$$(i)\ \exists r_0 > 0, \forall r > r_0, v(r) \leq 0. \tag{17}$$

$$(ii)\exists b > 0, \forall N, \forall \boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N, \sum_{i,j(i>j)}^{N} v(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|) \geq -bN. \tag{18}$$

$$\Rightarrow \forall\rho > 0,\ \exists\epsilon_0(\rho) = \lim_{V\to\infty}\frac{E_{GS}(V,N)}{V}. \tag{19}$$

$$\forall\rho > 0, \forall\epsilon > \epsilon_0,\ \exists\sigma(\epsilon,\rho) = \lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\ln\Omega_{V,N}(E). \tag{20}$$