anko9801

2023 年 7 月 23 日

目次

1　熱力学の復習、古典・量子統計力学の復習、グランドカノニカル分布の基礎

1.4　物理数学の復習

問題 1.4.1.

ゼータ関数について $\zeta(2), \zeta(4)$ を求めよ。

$$\zeta(x) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^x} \qquad (x > 1) \tag{1}$$

◇

証明

$f_m(x) = x^m$ をフーリエ展開する。

$$f_m(x) = x^m = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_{n,m} e^{inx} \tag{2}$$

このときの係数は次のようになる。

$$c_{n,m} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} x^m e^{-inx} \, \mathrm{d}x \tag{3}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \sum_{i=0}^{4} \left[\frac{m!(-1)^i}{(m-i)!(-in)^{i+1}} x^{m-i} e^{-inx} \right]_{-\pi}^{\pi} \tag{4}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \left(-\frac{m}{(-in)^2} (-1)^n \left(\pi^{m-1} - (-\pi^{m-1}) \right) - \frac{m(m-1)(m-2)}{(-in)^4} (-1)^n \left(\pi^{m-3} - (-\pi)^{m-3} \right) \right) \tag{5}$$

$$= (-1)^n \left(\frac{m}{n^2} \pi^{m-2} - \frac{m(m-1)(m-2)}{n^4} \pi^{m-4} \right) \tag{6}$$

$$c_{0,m} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} x^m \, \mathrm{d}x = \frac{\pi^m}{m+1} \tag{7}$$

これより $f_m(x)$ が求まり、$x = \pi$ を代入することでゼータ関数の値が分かる。

$$f_m(x) = \frac{\pi^m}{m+1} + \sum_{n \neq 0} \left(\frac{m}{n^2} \pi^{m-2} - \frac{m(m-1)(m-2)}{n^4} \pi^{m-4} \right) (-1)^n e^{inx} \tag{8}$$

$$f_2(\pi) = \pi^2 = \frac{\pi^2}{3} + \sum_{n \neq 0} \frac{2}{n^2}, \qquad f_4(\pi) = \pi^4 = \frac{\pi^4}{5} + \sum_{n \neq 0} \left(\frac{4}{n^2} \pi^2 - \frac{24}{n^4} \right) \tag{9}$$

$$\zeta(2) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}, \qquad \zeta(4) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90} \tag{10}$$

□

問題 1.4.2.

次の関数 $I_\pm(\alpha)$ が収束する実数 α の範囲とその収束値を求めよ。

$$I_\pm(\alpha) = \int_0^\infty \frac{z^{\alpha-1}}{e^z \pm 1}\,\mathrm{d}z \tag{11}$$

◇

証明

$$\begin{aligned}
I_\pm(\alpha) &= \int_0^\infty \frac{z^{\alpha-1}}{e^z \pm 1}\,\mathrm{d}z && (12)\\
&= \int_0^\infty z^{\alpha-1}(\pm 1 - e^{-z} \pm e^{-2z} - \cdots)\,\mathrm{d}z && (13)\\
&= \pm\left[\frac{z^\alpha}{\alpha}\right]_0^\infty - \int_0^\infty z^{\alpha-1}e^{-z}\,\mathrm{d}z \pm \int_0^\infty z^{\alpha-1}e^{-2z}\,\mathrm{d}z - \cdots && (14)\\
&= \pm\left[\frac{z^\alpha}{\alpha}\right]_0^\infty - \left(1 \mp \frac{1}{2^\alpha} + \frac{1}{3^\alpha} \mp \cdots\right)\int_0^\infty z^{\alpha-1}e^{-z}\,\mathrm{d}z \qquad (z' = kz) && (15)\\
&= \begin{cases} +\left[\dfrac{z^\alpha}{\alpha}\right]_0^\infty - (1-2^{1-\alpha})\zeta(\alpha)\Gamma(\alpha) \\ -\left[\dfrac{z^\alpha}{\alpha}\right]_0^\infty - \zeta(\alpha)\Gamma(\alpha) \end{cases} && (16)
\end{aligned}$$

これより $|\alpha| \geq 1$ のとき $I_\pm(\alpha)$ は発散し、$|\alpha| < 1$ のとき次のようになる。

$$I_+(\alpha) = -(1-2^{1-\alpha})\zeta(\alpha)\Gamma(\alpha) \tag{17}$$

$$I_-(\alpha) = -\zeta(\alpha)\Gamma(\alpha) \tag{18}$$

□

1.6　3 次元調和振動子

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r}), \qquad V(\boldsymbol{r}) = \frac{k}{2}|\boldsymbol{r}|^2 \tag{19}$$

問題 1.6.1.

固有関数を $\psi(\boldsymbol{r}) = X(x)Y(y)Z(z)$ と変数分離できるとすると固有エネルギーを求めよ。

◇

証明

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\boldsymbol{r})\psi \tag{20}$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}(X''YZ + XY''Z + XYZ'') + V(\boldsymbol{r})XYZ \tag{21}$$
$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} + \frac{Z''}{Z}\right) + \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2)\right)XYZ \tag{22}$$
$$= \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X_i''(x_i)}{X_i(x_i)} + \frac{k}{2}x_i^2\right)\psi = E\psi \tag{23}$$

総和の各項はそれぞれ変数が独立しているから定数となり、それぞれ E_i とおく。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X_i''(x_i)}{X_i(x_i)} + \frac{k}{2}x_i^2 = E_i \tag{24}$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}X_i'' + \frac{k}{2}x_i^2 X_i = E_i X_i \tag{25}$$

これは 1 次元調和振動子のポテンシャルであるので固有エネルギーは次のようになる。

$$E_{i,n} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{26}$$
$$E_{(n_x,n_y,n_z)} = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{27}$$

□

問題 1.6.2.

固有エネルギー ε が $E_0 = 100\hbar\omega \leq \varepsilon < E_0 + \delta E = 110\hbar\omega$ を満たす独立な固有状態は何個あるか? まず ($\hbar\omega \ll \delta E \ll E_0$ として) 概数を評価する方法を考えて評価し、次に具体的に求めてみよう。 ◇

証明

□

問題 1.6.3.

極座標において固有関数が $\psi(\boldsymbol{r}) = R(r)Y(\theta,\phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ と変数分離できるとき固有関数と固有エネルギーはどのように求められるか。

$$x = r\sin\theta\cos\phi, y = r\sin\theta\sin\phi, z = r\cos\theta \tag{28}$$
$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \tag{29}$$

◇

証明

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \tag{30}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) + V(r) \tag{31}$$

$$0 = \left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{2mr^2(E - V(r))}{\hbar^2}\right)\psi(r,\theta,\phi) \tag{32}$$

と書ける。$k = m\omega^2$ とおくと独立な変数であるから定数 λ, m を用いて

$$\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}E - \frac{m^2\omega^2r^4}{\hbar^2}\right)R(r) = \lambda R(r) \tag{33}$$

$$\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)Y(\theta,\phi) = -\lambda Y(\theta,\phi) \tag{34}$$

$$\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \lambda\sin^2\theta\right)\Theta(\theta) = m^2\Theta(\theta) \tag{35}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi(\phi)}{\mathrm{d}\phi^2} = -m^2\Phi(\phi) \tag{36}$$

となる。まず $\Phi(\phi)$ の一般解は次のようになる。

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi(\phi)}{\mathrm{d}\phi^2} + m^2\Phi(\phi) = 0 \tag{37}$$

$$\Phi(\phi) = \begin{cases} Ae^{i|m|\phi} + Be^{-i|m|\phi} & (m^2 \neq 0) \\ C\phi + D & (m^2 = 0) \end{cases} \tag{38}$$

波動関数は連続であるから $\Phi(0) = \Phi(2\pi)$ であり、規格化条件を満たす。$C = D = 0$ となる解は意味を成さず、$m \in \mathbb{Z}$ となる。L_z の固有関数となることから

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi} \qquad (m \in \mathbb{Z}) \tag{39}$$

となる。次に $\Theta(\theta)$ について解く。$z = \cos\theta$ とおくと,

$$\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\right) + \lambda\sin^2\theta\right)\Theta(\theta) = m^2\Theta(\theta) \tag{40}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left((1-z^2)\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}z}\right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-z^2}\right)\Theta(z) = 0 \tag{41}$$

となる。$m = 0$ において $\Theta(z)$ はルジャンドルの微分方程式を満たす。$\Theta(z)$ をべき展開する

ことで

$$(1-z^2)\Theta''-2z\Theta'+\lambda\Theta=0,\qquad \Theta(z)=\sum_{k=0}^{\infty}a_kz^k \tag{42}$$

$$(1-z^2)\sum_{k=2}^{\infty}k(k-1)a_kz^{k-2}-2z\sum_{k=1}^{\infty}ka_kz^{k-1}+\lambda\sum_{k=0}^{\infty}a_kz^k=0 \tag{43}$$

$$\sum_{k=0}^{\infty}((k+1)(k+2)a_{k+2}+(\lambda-k(k+1))a_k)z^k+\mathcal{O}(z)=0 \tag{44}$$

$$a_{k+2}=\frac{k(k+1)-\lambda}{(k+2)(k+1)}a_k \tag{45}$$

となる。よって z について一般に発散しない為には $\lambda=l(l+1)$ $(l\in\mathbb{Z}_{>0})$ とならければならない。すると $m\neq 0$ のときはルジャンドルの陪微分方程式となる。

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left((1-z^2)\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}z}\right)+\left(l(l+1)-\frac{m^2}{1-z^2}\right)\Theta(z)=0 \tag{46}$$

これよりルジャンドルの陪関数 $P_l^m(z)$ と規格化条件から $\Theta_{lm}(\theta)$ は

$$\Theta_{lm}(\theta)=(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^{|m|}(\cos\theta) \tag{47}$$

と書ける。また $R_l(r)$ については $\rho=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}r$ と無次元化すると

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}R_l(r)+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_l(r)+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2r^2-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right)R_l(r)=0 \tag{48}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}R_l(\rho)+\frac{2}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}R_l(\rho)+\left(\lambda+\rho^2-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)R_l(\rho)=0 \qquad \left(\lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}\right) \tag{49}$$

となる。$x=\rho^2$ と変数変換すると

$$x\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}R_l(x)+\frac{3}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}R_l(x)+\frac{1}{4}\left(\lambda+x-\frac{l(l+1)}{x}\right)R_l(x)=0 \tag{50}$$

となり, 級数展開法より $\rho\to\infty$ で発散しない為には n を非負整数として $\lambda=4n+2l+3$ となる。$\rho\to\infty$, $\rho\to 0$ のときの漸近解はそれぞれ $e^{-x/2}$, $x^{l/2}$ となるので $R_l(x)=x^{l/2}e^{-x/2}S_n^\alpha(x)$ と分離すると

$$x\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}S_n^\alpha+(\alpha+1-x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}S_n^\alpha+nS_n^\alpha=0 \tag{51}$$

これはソニンの多項式となるので解はラゲールの陪関数を用いて $S_n^\alpha=L_{n+\alpha}^\alpha$ と書ける。よっ

て固有関数は次のように書ける。

$$\psi(r,\theta,\phi) = R_l(\rho)\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi) \tag{52}$$

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \tag{53}$$

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta) \tag{54}$$

$$R_{nl}(\rho) = \rho^l e^{-\rho^2/2} L_{n+\alpha}^{\alpha}(\rho^2) \qquad \left(\rho = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} r\right) \tag{55}$$

固有エネルギーについては次のようになる。

$$E = \frac{\lambda}{2}\hbar\omega = \left(2n + l + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{56}$$

□

1.7 2 準位系, 3 準位系

問題 1.7.1.

エネルギー準位が 0 と ε からなり、それぞれ m, n 重に縮重する互いに独立な N 個の系が温度 T の熱平衡状態にあるとする。このときの分配関数、エネルギーの期待値、比熱を求めよ。$a = n/m, \beta = \dfrac{1}{k_B T}$ とおく。 ◇

証明

$$Z_N(\beta) = \left(m + ne^{-\beta\varepsilon}\right)^N = m^N\left(1 + ae^{-\beta\varepsilon}\right)^N \tag{57}$$

$$E(\beta) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_N(\beta) = N\frac{a\varepsilon e^{-\beta\varepsilon}}{1+ae^{-\beta\varepsilon}} \tag{58}$$

$$C(T) = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} = -\frac{1}{k_B T^2}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\beta} \tag{59}$$

$$= -Nk_B\beta^2\frac{-a\varepsilon^2 e^{-\beta\varepsilon}(1+ae^{-\beta\varepsilon}) + a\varepsilon e^{-\beta\varepsilon}\cdot a\varepsilon e^{-\beta\varepsilon}}{(1+ae^{-\beta\varepsilon})^2} \tag{60}$$

$$= Nk_B\beta^2\frac{a\varepsilon^2 e^{-\beta\varepsilon}}{(1+ae^{-\beta\varepsilon})^2} \tag{61}$$

$$\frac{C(T)}{Nk_B} = \left(\frac{\varepsilon}{k_B T}\right)^2 \frac{ae^{-\varepsilon/k_B T}}{(1+ae^{-\varepsilon/k_B T})^2} \tag{62}$$

$$= \begin{cases} \left(\dfrac{\varepsilon}{k_B T}\right)^2 ae^{-\varepsilon/k_B T} & (a \ll 1) \\ \left(\dfrac{\varepsilon}{k_B T}\right)^2 \dfrac{1}{ae^{-\varepsilon/k_B T}} & (a \gg 1) \end{cases} \tag{63}$$

□

問題 1.7.2.

エネルギー準位が $0, \varepsilon, b\varepsilon$ からなる独立な N 個の系が温度 T の熱平衡状態にあるとする。このとき分配関数、エネルギーの期待値、比熱を求めよ。 ◇

証明

$$Z_N(\beta) = \left(1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-\beta b\varepsilon}\right)^N \tag{64}$$

$$E(\beta) = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln Z_N(\beta) \tag{65}$$

$$= N\frac{\varepsilon e^{-\beta\varepsilon} + b\varepsilon e^{-\beta b\varepsilon}}{1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-\beta b\varepsilon}} \tag{66}$$

$$C(T) = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} = -\frac{1}{k_B T^2}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\beta} \tag{67}$$

$$= Nk_B\beta^2 \frac{(\varepsilon^2 e^{-\beta\varepsilon} + b^2\varepsilon^2 e^{-\beta b\varepsilon})(1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-\beta b\varepsilon}) - (\varepsilon e^{-\beta\varepsilon} + b\varepsilon e^{-\beta b\varepsilon})^2}{(1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-\beta b\varepsilon})^2} \tag{68}$$

$$= Nk_B(\beta\varepsilon)^2 \frac{e^{-\beta\varepsilon} + (b-1)^2 e^{-\beta(1+b)\varepsilon} + b^2 e^{-\beta b\varepsilon}}{(1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-\beta b\varepsilon})^2} \tag{69}$$

$$\frac{C(T)}{Nk_B} = \left(\frac{\varepsilon}{k_B T}\right)^2 \frac{e^{-\varepsilon/k_B T} + (b-1)^2 e^{-(1+b)\varepsilon/k_B T} + b^2 e^{-b\varepsilon/k_B T}}{(1 + e^{-\varepsilon/k_B T} + e^{-b\varepsilon/k_B T})^2} \tag{70}$$

□

2 理想量子気体とグランドカノニカル分布

2.6 状態を占める粒子数の揺らぎ

問題 2.6.1.

Fermi 粒子系、Bose 粒子系における粒子数の揺らぎを調べよ。 ◇

証明

グランドカノニカル分布の分配関数 Ξ が与えられたときに粒子数の揺らぎは次のように書ける。

$$N = \frac{1}{\beta}\left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial\mu}\right)_{T,V} \tag{71}$$

$$\left(\frac{\partial N}{\partial\mu}\right)_{T,V} = \beta\left(\langle N^2\rangle - N^2\right) = \beta\langle(\Delta\hat{N})^2\rangle \tag{72}$$

これより Fermi 粒子系の粒子数の揺らぎは次のように書ける。

$$\Xi = \prod_{j=1}^{\infty} (1 + e^{-\beta(\varepsilon_j - \mu)}) \tag{73}$$

$$N = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_j - \mu)} + 1} \tag{74}$$

$$\langle (\Delta \hat{N})^2 \rangle = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{\beta(\varepsilon_j - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_j - \mu)} + 1)^2} \tag{75}$$

同様に Bose 粒子系の粒子数の揺らぎは次のようになる。

$$\Xi = \prod_{j=1}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{-\beta(\varepsilon_j - \mu)}} \tag{76}$$

$$N = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_j - \mu)} - 1} \tag{77}$$

$$\langle (\Delta \hat{N})^2 \rangle = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{\beta(\varepsilon_j - \mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_j - \mu)} - 1)^2} \tag{78}$$

$$\frac{\sqrt{\langle (\Delta \hat{N})^2 \rangle}}{N} \to 1 \tag{79}$$

□

3 理想ボーズ気体、ボーズ凝縮

3.1 格子比熱 (Debye 模型)

縦波と 2 つの独立な横波のモードが可能であり、それらの分散関係は $\omega = v_l|\boldsymbol{k}|$, $\omega = v_t|\boldsymbol{k}|$ と表される。

問題 3.1.1.

立方体の周期境界条件における振動数の ◇

証明

□

3.2 3 次元調和トラップ中での Bose-Einstein 凝縮での比熱の変化

それぞれ

4　理想フェルミ気体、低温展開

4.1　Pauli 常磁性

問題 4.1.1.

$$M = \tag{80}$$

$$\chi := \lim_{H\to 0} \frac{M}{H} = \tag{81}$$

◇

4.2　ブロッホの定理

4.3　1 次元周期的井戸型ポテンシャル

4.4　グラフェンにおける分散関係