anko9801

2023 年 7 月 30 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 · · · 2
  1.4 物理数学の復習 · 2
  1.6 3 次元調和振動子 · 3
  1.7 2 準位系, 3 準位系 · 7
2 理想量子気体とグランドカノニカル分布 · 8
  2.6 状態を占める粒子数の揺らぎ · 8
3 理想ボーズ気体、ボーズ凝縮 · 9
  3.1 格子比熱 (Debye 模型) · 9
  3.7 3 次元調和トラップ中での Bose-Einstein 凝縮での比熱の変化 · · · · · · · · · 12
4 理想フェルミ気体、低温展開 · 13
  4.1 Pauli 常磁性 · 13
  4.2 ブロッホの定理 · 13
  4.3 1 次元周期的井戸型ポテンシャル · 13
  4.4 グラフェンにおける分散関係 · 13

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。

$$\zeta(x) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^x} \qquad (x > 1) \tag{1.1}$$

◇

証明

$f_m(x) = x^m$ をフーリエ展開する。

$$f_m(x) = x^m = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_{n,m} e^{inx} \tag{1.2}$$

このときの係数は次のようになる。

$$c_{n,m} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} x^m e^{-inx} \, \mathrm{d}x \tag{1.3}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \sum_{i=0}^{4} \left[\frac{m!(-1)^i}{(m-i)!(-in)^{i+1}} x^{m-i} e^{-inx} \right]_{-\pi}^{\pi} \tag{1.4}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \left(-\frac{m}{(-in)^2} (-1)^n \left(\pi^{m-1} - (-\pi^{m-1}) \right) - \frac{m(m-1)(m-2)}{(-in)^4} (-1)^n \left(\pi^{m-3} - (-\pi)^{m-3} \right) \right) \tag{1.5}$$

$$= (-1)^n \left(\frac{m}{n^2} \pi^{m-2} - \frac{m(m-1)(m-2)}{n^4} \pi^{m-4} \right) \tag{1.6}$$

$$c_{0,m} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} x^m \, \mathrm{d}x = \frac{\pi^m}{m+1} \tag{1.7}$$

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。

$$f_m(x) = \frac{\pi^m}{m+1} + \sum_{n \neq 0} \left(\frac{m}{n^2} \pi^{m-2} - \frac{m(m-1)(m-2)}{n^4} \pi^{m-4} \right) (-1)^n e^{inx} \tag{1.8}$$

$$f_2(\pi) = \pi^2 = \frac{\pi^2}{3} + \sum_{n \neq 0} \frac{2}{n^2}, \qquad f_4(\pi) = \pi^4 = \frac{\pi^4}{5} + \sum_{n \neq 0} \left(\frac{4}{n^2} \pi^2 - \frac{24}{n^4} \right) \tag{1.9}$$

$$\zeta(2) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}, \qquad \zeta(4) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90} \tag{1.10}$$

□

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。

$$I_\pm(\alpha) = \int_0^\infty \frac{z^{\alpha-1}}{e^z \pm 1}\,\mathrm{d}z \tag{1.11}$$

◇

証明

$$\begin{aligned}
I_\pm(\alpha) &= \int_0^\infty \frac{z^{\alpha-1}}{e^z \pm 1}\,\mathrm{d}z &(1.12)\\
&= \int_0^\infty z^{\alpha-1}(\pm 1 - e^{-z} \pm e^{-2z} - \cdots)\,\mathrm{d}z &(1.13)\\
&= \pm\left[\frac{z^\alpha}{\alpha}\right]_0^\infty - \int_0^\infty z^{\alpha-1}e^{-z}\,\mathrm{d}z \pm \int_0^\infty z^{\alpha-1}e^{-2z}\,\mathrm{d}z - \cdots &(1.14)\\
&= \pm\left[\frac{z^\alpha}{\alpha}\right]_0^\infty - \left(1 \mp \frac{1}{2^\alpha} + \frac{1}{3^\alpha} \mp \cdots\right)\int_0^\infty z^{\alpha-1}e^{-z}\,\mathrm{d}z \qquad (z' = kz) &(1.15)\\
&= \begin{cases} +\left[\frac{z^\alpha}{\alpha}\right]_0^\infty - (1-2^{1-\alpha})\zeta(\alpha)\Gamma(\alpha) \\ -\left[\frac{z^\alpha}{\alpha}\right]_0^\infty - \zeta(\alpha)\Gamma(\alpha) \end{cases} &(1.16)
\end{aligned}$$

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。

$$I_+(\alpha) = -(1-2^{1-\alpha})\zeta(\alpha)\Gamma(\alpha) \tag{1.17}$$

$$I_-(\alpha) = -\zeta(\alpha)\Gamma(\alpha) \tag{1.18}$$

□

1.6　3 次元調和振動子

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r}), \qquad V(\boldsymbol{r}) = \frac{k}{2}|\boldsymbol{r}|^2 \tag{1.19}$$

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

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\boldsymbol{r})\psi \tag{1.20}$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}(X''YZ + XY''Z + XYZ'') + V(\boldsymbol{r})XYZ \tag{1.21}$$
$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{X''}{X} + \frac{Y''}{Y} + \frac{Z''}{Z}\right) + \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2)\right)XYZ \tag{1.22}$$
$$= \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X_i''(x_i)}{X_i(x_i)} + \frac{k}{2}x_i^2\right)\psi = E\psi \tag{1.23}$$

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。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{X_i''(x_i)}{X_i(x_i)} + \frac{k}{2}x_i^2 = E_i \tag{1.24}$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}X_i'' + \frac{k}{2}x_i^2 X_i = E_i X_i \tag{1.25}$$

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。

$$E_{i,n} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{1.26}$$
$$E_{(n_x,n_y,n_z)} = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{1.27}$$

□

問題 1.6.2.

固有エネルギー ε が $E_0 = 100\hbar\omega \le \varepsilon < E_0 + \delta E = 110\hbar\omega$ 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。

$$x = r\sin\theta\cos\phi, y = r\sin\theta\sin\phi, z = r\cos\theta \tag{1.28}$$
$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \tag{1.29}$$

◇

証明

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) && (1.30)\\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) + V(r) && (1.31)\\
0 &= \left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{2mr^2(E - V(r))}{\hbar^2}\right)\psi(r,\theta,\phi) && (1.32)
\end{aligned}
$$

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

$$
\begin{aligned}
&\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}E - \frac{m^2\omega^2r^4}{\hbar^2}\right)R(r) = \lambda R(r) && (1.33)\\
&\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)Y(\theta,\phi) = -\lambda Y(\theta,\phi) && (1.34)\\
&\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \lambda\sin^2\theta\right)\Theta(\theta) = m^2\Theta(\theta) && (1.35)\\
&\frac{\mathrm{d}^2\Phi(\phi)}{\mathrm{d}\phi^2} = -m^2\Phi(\phi) && (1.36)
\end{aligned}
$$

となる。まず $\Phi(\phi)$ の一般解は次のようになる。

$$
\frac{\mathrm{d}^2\Phi(\phi)}{\mathrm{d}\phi^2} + m^2\Phi(\phi) = 0 \tag{1.37}
$$

$$
\Phi(\phi) = \begin{cases} Ae^{i|m|\phi} + Be^{-i|m|\phi} & (m^2 \neq 0)\\ C\phi + D & (m^2 = 0)\end{cases} \tag{1.38}
$$

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

$$
\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi} \qquad (m \in \mathbb{Z}) \tag{1.39}
$$

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

$$
\begin{aligned}
&\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\right) + \lambda\sin^2\theta\right)\Theta(\theta) = m^2\Theta(\theta) && (1.40)\\
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left((1-z^2)\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}z}\right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{1-z^2}\right)\Theta(z) = 0 && (1.41)
\end{aligned}
$$

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

$$(1-z^2)\Theta''-2z\Theta'+\lambda\Theta=0, \qquad \Theta(z)=\sum_{k=0}^{\infty}a_k z^k \tag{1.42}$$

$$(1-z^2)\sum_{k=2}^{\infty}k(k-1)a_k z^{k-2}-2z\sum_{k=1}^{\infty}ka_k z^{k-1}+\lambda\sum_{k=0}^{\infty}a_k z^k=0 \tag{1.43}$$

$$\sum_{k=0}^{\infty}((k+1)(k+2)a_{k+2}+(\lambda-k(k+1))a_k)z^k+\mathcal{O}(z)=0 \tag{1.44}$$

$$a_{k+2}=\frac{k(k+1)-\lambda}{(k+2)(k+1)}a_k \tag{1.45}$$

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。

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left((1-z^2)\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}z}\right)+\left(l(l+1)-\frac{m^2}{1-z^2}\right)\Theta(z)=0 \tag{1.46}$$

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

$$\Theta_{lm}(\theta)=(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^{|m|}(\cos\theta) \tag{1.47}$$

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

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}R_l(r)+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_l(r)+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2r^2-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right)R_l(r)=0 \tag{1.48}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}R_l(\rho)+\frac{2}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}R_l(\rho)+\left(\lambda+\rho^2-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)R_l(\rho)=0 \qquad \left(\lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}\right) \tag{1.49}$$

となる。$x=\rho^2$ と変数変換すると

$$x\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}R_l(x)+\frac{3}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}R_l(x)+\frac{1}{4}\left(\lambda+x-\frac{l(l+1)}{x}\right)R_l(x)=0 \tag{1.50}$$

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

$$x\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}S_n^\alpha+(\alpha+1-x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}S_n^\alpha+nS_n^\alpha=0 \tag{1.51}$$

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。

$$\psi(r,\theta,\phi) = R_l(\rho)\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi) \tag{1.52}$$

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi} \tag{1.53}$$

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^{|m|}(\cos\theta) \tag{1.54}$$

$$R_{nl}(\rho) = \rho^l e^{-\rho^2/2}L_{n+\alpha}^{\alpha}(\rho^2) \qquad \left(\rho = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}r\right) \tag{1.55}$$

固有エネルギーについては次のようになる。

$$E = \frac{\lambda}{2}\hbar\omega = \left(2n+l+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{1.56}$$

□

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。$a=n/m, \beta=\dfrac{1}{k_BT}$ とおく。 ◇

証明

$$Z_N(\beta) = \left(m+ne^{-\beta\varepsilon}\right)^N = m^N\left(1+ae^{-\beta\varepsilon}\right)^N \tag{1.57}$$

$$E(\beta) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_N(\beta) = N\frac{a\varepsilon e^{-\beta\varepsilon}}{1+ae^{-\beta\varepsilon}} \tag{1.58}$$

$$C(T) = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} = -\frac{1}{k_BT^2}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\beta} \tag{1.59}$$

$$= -Nk_B\beta^2\frac{-a\varepsilon^2e^{-\beta\varepsilon}(1+ae^{-\beta\varepsilon})+a\varepsilon e^{-\beta\varepsilon}\cdot a\varepsilon e^{-\beta\varepsilon}}{(1+ae^{-\beta\varepsilon})^2} \tag{1.60}$$

$$= Nk_B\beta^2\frac{a\varepsilon^2e^{-\beta\varepsilon}}{(1+ae^{-\beta\varepsilon})^2} \tag{1.61}$$

$$\frac{C(T)}{Nk_B} = \left(\frac{\varepsilon}{k_BT}\right)^2\frac{ae^{-\varepsilon/k_BT}}{(1+ae^{-\varepsilon/k_BT})^2} \tag{1.62}$$

$$= \begin{cases} \left(\dfrac{\varepsilon}{k_BT}\right)^2 ae^{-\varepsilon/k_BT} & (a \ll 1) \\ \left(\dfrac{\varepsilon}{k_BT}\right)^2 \dfrac{1}{ae^{-\varepsilon/k_BT}} & (a \gg 1) \end{cases} \tag{1.63}$$

□

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

$$Z_N(\beta) = \left(1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-\beta b\varepsilon}\right)^N \tag{1.64}$$

$$E(\beta) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_N(\beta) \tag{1.65}$$

$$= N\frac{\varepsilon e^{-\beta\varepsilon} + b\varepsilon e^{-\beta b\varepsilon}}{1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-\beta b\varepsilon}} \tag{1.66}$$

$$C(T) = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} = -\frac{1}{k_B T^2}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\beta} \tag{1.67}$$

$$= Nk_B\beta^2\frac{(\varepsilon^2 e^{-\beta\varepsilon} + b^2\varepsilon^2 e^{-\beta b\varepsilon})(1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-\beta b\varepsilon}) - (\varepsilon e^{-\beta\varepsilon} + b\varepsilon e^{-\beta b\varepsilon})^2}{(1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-\beta b\varepsilon})^2} \tag{1.68}$$

$$= Nk_B(\beta\varepsilon)^2\frac{e^{-\beta\varepsilon} + (b-1)^2 e^{-\beta(1+b)\varepsilon} + b^2 e^{-\beta b\varepsilon}}{(1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-\beta b\varepsilon})^2} \tag{1.69}$$

$$\frac{C(T)}{Nk_B} = \left(\frac{\varepsilon}{k_B T}\right)^2\frac{e^{-\varepsilon/k_B T} + (b-1)^2 e^{-(1+b)\varepsilon/k_B T} + b^2 e^{-b\varepsilon/k_B T}}{(1 + e^{-\varepsilon/k_B T} + e^{-b\varepsilon/k_B T})^2} \tag{1.70}$$

□

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。

$$N = \frac{1}{\beta}\left(\frac{\partial \ln \Xi}{\partial \mu}\right)_{T,V} \tag{2.1}$$

$$\left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)_{T,V} = \beta\left(\langle N^2\rangle - N^2\right) = \beta\langle(\Delta\hat{N})^2\rangle \tag{2.2}$$

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。

$$\Xi = \prod_{j=1}^{\infty}(1 + e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)}) \tag{2.3}$$

$$N = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_j-\mu)}+1} \tag{2.4}$$

$$\langle(\Delta\hat{N})^2\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{\beta(\varepsilon_j-\mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_j-\mu)}+1)^2} \tag{2.5}$$

同様に Bose 粒子系の粒子数の揺らぎは次のようになる。

$$\Xi = \prod_{j=1}^{\infty} \frac{1}{1-e^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)}} \tag{2.6}$$

$$N = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_j-\mu)}-1} \tag{2.7}$$

$$\langle(\Delta\hat{N})^2\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{\beta(\varepsilon_j-\mu)}}{(e^{\beta(\varepsilon_j-\mu)}-1)^2} \tag{2.8}$$

$$\frac{\sqrt{\langle(\Delta\hat{N})^2\rangle}}{N} \to 1 \tag{2.9}$$

□

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.

固体の体積を V、全原子数を $N(\gg 1)$ として、振動数が ω と $\omega + \mathrm{d}\omega$ の間にある状態の数 $D(\omega)d\ \omega$ を求めよ。固体を各辺の長さが L $(L^3 = V)$ の立方体と考え、周期境界条件をとってよい。 ◇

証明

周期境界条件と媒体が奇妙な振動をしない条件として次のように書ける。分散関係

$\omega = v_l|\boldsymbol{k}|$

$$\boldsymbol{k} = \frac{\pi}{L}(n_x, n_y, n_z) \qquad \left(0 \leq n_i \leq \sqrt[3]{N}\right) \tag{3.1}$$

$$\frac{\omega L}{v\pi} = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \tag{3.2}$$

v に対して $\dfrac{\omega L}{v\pi}$ を半径とする第一象限の表面積と近似できる。

$$D(\omega) = \frac{1}{8}\frac{4\pi}{3}\left(\frac{\omega L}{v_l \pi}\right)^3 + \frac{2}{8}\frac{4\pi}{3}\left(\frac{\omega L}{v_t \pi}\right)^3 \tag{3.3}$$

$$= \frac{\omega^3 L^3}{6\pi^2}\left(\frac{1}{v_l^3} + \frac{2}{v_t^3}\right) \tag{3.4}$$

$$= \frac{\omega^3 L^3}{6\pi^2}\frac{v_t^3 + 2v_l^3}{v_l^3 v_t^3} \tag{3.5}$$

$$D(\omega)\,\mathrm{d}\omega = \frac{\omega^2 L^3}{2\pi^2}\frac{v_t^3 + 2v_l^3}{v_l^3 v_t^3}\,\mathrm{d}\omega \tag{3.6}$$

$$\tag{3.7}$$

□

問題 3.1.2.

$D(\omega)$ を Debye 振動数 ω_D を用いて表せ。 ◇

証明

$$\int_0^{\omega_D} D(\omega)\,\mathrm{d}\omega = \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^2 L^3}{2\pi^2}\frac{v_t^3 + 2v_l^3}{v_l^3 v_t^3}\,\mathrm{d}\omega = 3N \tag{3.8}$$

$$\omega_D = \frac{v_l v_t}{L}\left(\frac{18N\pi^2}{v_t^3 + 2v_l^3}\right)^{1/3} \tag{3.9}$$

これより ω_D を用いて $D(\omega)$ は次のように求まる。

$$D(\omega) = \begin{cases} \dfrac{9N\omega^2}{\omega_D^3} & (\omega < \omega_D) \\ 0 & (\omega > \omega_D) \end{cases} \tag{3.10}$$

□

問題 3.1.3.

この模型における固体の定積比熱 C を求め、高温、低温での振る舞いを調べよ。また、Einstein 模型 ($3N$ 個の独立な調和振動子が、いずれも等しい振動数 ω を持つ) と比較せよ。

◇

証明

ω に対する調和振動子における比熱 $c(\omega)$ を用いて比熱 C は次のように求まる。

$$\begin{aligned}
C &= \int_0^\infty D(\omega)c(\omega)\,\mathrm{d}\omega && (3.11)\\
&= \int_0^{\omega_D} \frac{9N\omega^2}{\omega_D^3}k_B\left(\frac{\beta\hbar\omega e^{\beta\hbar\omega/2}}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\right)^2\mathrm{d}\omega && (3.12)\\
&= 9Nk_Bb^2\int_0^1 \frac{x^4e^{bx}}{(e^{bx}-1)^2}\,\mathrm{d}x \qquad \left(x=\frac{\omega}{\omega_D}, b=\beta\hbar\omega_D\right) && (3.13)\\
&= -9Nk_Bb^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}b}\int_0^1 \frac{x^3}{e^{bx}-1}\,\mathrm{d}x && (3.14)
\end{aligned}$$

高温極限 $(b \ll 1)$ のとき Bernoulli 数 B_n の定義を用いて次のように計算できる。

$$\begin{aligned}
\int_0^1 \frac{x^3}{e^{bx}-1}\,\mathrm{d}x &= \int_0^1 \sum_{n=0}^\infty \frac{B_nb^{n-1}}{n!}x^{n+2}\,\mathrm{d}x && (3.15)\\
&= \sum_{n=0}^\infty \frac{B_n}{(n+3)n!}b^{n-1} && (3.16)\\
&= \frac{1}{3b}-\frac{1}{8}+\frac{1}{60}b-\frac{1}{5040}b^3+\frac{1}{272160}b^5-\cdots. && (3.17)
\end{aligned}$$

低温極限 $(b \gg 1)$ のとき分母を展開することで次のように計算できる。

$$\begin{aligned}
\int_0^1 \frac{x^3}{e^{bx}-1}\,\mathrm{d}x &= \int_0^1 x^3\sum_{n=1}^\infty e^{-nbx}\,\mathrm{d}x = \sum_{n=1}^\infty\int_0^1 x^3e^{-nbx}\,\mathrm{d}x && (3.18)\\
&= \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{(nb)^4}\int_0^{nb} t^3e^{-t}\,\mathrm{d}t \qquad (t=nbx) && (3.19)\\
&\approx \frac{1}{b^4}\zeta(4)\Gamma(4) && (3.20)\\
&= \frac{1}{b^4}\frac{\pi^4}{15} && (3.21)
\end{aligned}$$

よって比熱は高温、低温について次のような値となる。

$$\begin{aligned}
C &= 9Nk_Bb^2\int_0^1 \frac{x^4e^{bx}}{(e^{bx}-1)^2}\,\mathrm{d}x && (3.22)\\
&\approx \begin{cases} 3Nk_B & (b\ll 1)\\ 3Nk_B\dfrac{4\pi^4}{5b^3} & (b \gg 1)\end{cases} && (3.23)
\end{aligned}$$

Einstein 模型における比熱は次のようになる。

$$\begin{aligned}
C &= 3Nk_B\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2\sinh\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}\right)^2 && (3.24)\\
&\approx 3Nk_Bb^2e^{-b} && (3.25)
\end{aligned}$$

よって温度 T に対する依存性が異なることが分かる。 $\square$

問題 3.1.4.

一般化して、d 次元における格子比熱の低温 $(T \ll \omega_D)$ での温度依存性を調べよ。 $\diamond$

証明

一般の d 次元において状態密度 $D(\omega)$ と比熱 C は次のようになる。

$$D(\omega) = \begin{cases} 3N\dfrac{d\omega^{d-1}}{\omega_D^d} & (\omega < \omega_D) \\ 0 & (\omega > \omega_D) \end{cases} \tag{3.26}$$

$$C = \int_0^\infty D(\omega)c(\omega)\,\mathrm{d}\omega \tag{3.27}$$

$$= 3dNk_Bb^2\int_0^1 \frac{x^{d+1}e^{bx}}{(e^{bx}-1)^2}\,\mathrm{d}x \tag{3.28}$$

$$\tag{3.29}$$

低温極限 $(b \gg 1)$ において

$$\int_0^1 \frac{x^d}{e^{bx}-1}\,\mathrm{d}x = \int_0^1 x^d\sum_{n=1}^\infty e^{-nbx}\,\mathrm{d}x = \sum_{n=1}^\infty\int_0^1 x^de^{-nbx}\,\mathrm{d}x \tag{3.30}$$

$$= \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{(nb)^{d+1}}\int_0^{nb} t^de^{-t}\,\mathrm{d}t \qquad (t = nbx) \tag{3.31}$$

$$\approx \frac{1}{b^{d+1}}\zeta(d+1)\Gamma(d+1) \tag{3.32}$$

これより比熱は次のようになる。

$$C \approx 3Nk_B\frac{1}{b^d}d(d+1)\zeta(d+1)\Gamma(d+1) \tag{3.33}$$

よって比熱は温度 T に対して T^d に比例する。 $\square$

3.7 3 次元調和トラップ中での Bose-Einstein 凝縮での比熱の変化

問題 3.7.1.

3 次元等方調和ポテンシャル $V(r) = (m\omega^2/2)|r|^2$ 中での質量 m の単原子分子の気体の Bose-Einstein 凝縮 (BEC) について、凝縮温度 T_c のすぐ上およびすぐ下での比熱を計算し、比較せよ。原始相互作用が無視できるとして原子の質量 1.44×10^{-25} kg, 調和振動子閉じ込めの角周波数 $\omega = 2$ π $\times 60$ Hz, 原子の個数 2.0×10^3 個のとき、転移温度を求めよ。 $\diamond$

証明

$\square$

4　理想フェルミ気体、低温展開

4.1　Pauli 常磁性

問題 4.1.1.

磁場による効果を無視した自由電子におけるスピン磁化率 χ_s を求める。ただし磁場 H における 1 電子のエネルギーは次のようになる。

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m} \pm \mu_B H \tag{4.1}$$

このとき磁場下での磁化 M と絶対零度のスピン磁化率を求めよ。 ⋄

証明

$$M = \mu_B (N_+ - N_-) \approx \mu_B (2\mu_B \mu_0 H D(\varepsilon_F)) \tag{4.2}$$

$$\chi := \lim_{H \to 0} \frac{M}{H} = 2\mu_B^2 \mu_0 D(\varepsilon_F) \tag{4.3}$$

□

問題 4.1.2.

χ_s について、低温での、T について最低次の補正を求めよ。 ⋄

証明

□

問題 4.1.3.

Fermi 縮退温度 T_F に比べ充分高温での表式を求めよ。低温の場合と比べてどうなるか? ⋄

証明

□

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