

問題

以下の設問に答えよ。ただし、温度を T 、ボルツマン定数 $k_B = 1.4 \times 10^{-23}$ J/K、プランク定数 $h = 2\pi\hbar = 6.6 \times 10^{-34}$ Js とする。

1. 各問に答えよ

- (a) 等確率（等重率）の原理について説明せよ。
- (b) エネルギー等分配の法則を説明せよ。
- (c) 化学ポテンシャルの定義と化学ポテンシャルが重要な熱力学量となる系の例について説明せよ。
- (d) フェルミ粒子とボース粒子の違いについて説明せよ。
- (e) フェルミ・ディラック分布関数を記せ。ただし、 E をフェルミ粒子のエネルギー、 μ を化学ポテンシャルとする。
- (f) $T = 0$ と $T > 0$ の場合について、フェルミ・ディラック分布関数を図示せよ。
- (g) ボース・アインシュタイン分布関数を記せ。ただし、 E をボース粒子のエネルギー、 μ を化学ポテンシャルとする。

2. 理想気体のモデルとして、一辺 L で体積 $V = L^3$ の立方体の容器中に閉じ込められた量子力学的な粒子を考える。

- (a) まず、1粒子について考える。周期的境界条件より、運動量 \mathbf{p} と1粒子エネルギー ϵ のとりうる値を示せ。
- (b) 1粒子エネルギー ϵ より小さい量子状態の数 $\Omega(\epsilon)$ を求めよ。 $\Omega(\epsilon)$ は運動量空間における半径 $\sqrt{2m\epsilon}$ の球内部に含まれるとりうる \mathbf{p} の数に相当する。
- (c) 独立な N 粒子系におけるエネルギー E のとりうる値を示せ。
- (d) N 粒子系における $\Omega(E)$ を求めよ。ただし、 n 次元空間における半径 R の球の体積は $V_n(R) = \frac{2\pi^{n/2}}{n\Gamma(n/2)} R^n$ ($\Gamma(z)$ はガンマ関数) である。
- (e) エネルギーが E と $E + \Delta E$ の間にある状態密度 $W(E) = \frac{d\Omega(E)}{dE} \Delta E$ より、エントロピー $S = k_B \log W(E)$ を求めよ。ただし、量子力学的要請から、粒子同士は区別できないことに注意せよ。
- (f) 前問において、粒子同士を区別したときに生じる熱力学的な問題を指摘せよ。
- (g) この系の温度 T と E の関係を説明せよ。

3. ハミルトニアン

$$H = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q_i^2}{2} \right) \quad (1)$$

で記述できる N 個の古典一次元調和振動子からなる系について考える。ここで、 p_i, q_i は振動子 i のそれぞれ運動量と座標である。

- (a) 1 粒子（振動子）分配関数 z は式 (1) で決められるエネルギーの粒子が (p, q) 位相空間に分布していることから、以下のように表される：

$$z = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-\frac{1}{k_B T} \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 q^2}{2} \right) \right] dpdq. \quad (2)$$

z を計算せよ。

- (b) N 粒子分配関数 Z を求めよ。
(c) ヘルムホルツの自由エネルギーを求めよ。
(d) エントロピー $S = (E - F)/T$ を求めよ。ここで、 E は N 粒子系の全エネルギーである。

数学公式

スターリングの式 $\log N! \simeq N(\log N - 1)$

ガンマ関数 $\Gamma(n+1) = n!$, $\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{(2n)!}{2^{2n}n!} \sqrt{\pi}$ (n は整数)

ガウス積分 $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\pi/a}$

1 粒子分配関数 $z = \sum_i^n e^{-E_i/k_B T}$

ヘルムホルツの自由エネルギー $F = -k_B T \log Z$

以上