

問題

以下の設問1から3に解答せよ。ただし、ボルツマン定数を k_B 、プランク定数を $h = 2\pi\hbar$ 、虚数単位を i とする。

1. 以下の各問のうち、2問を選択し、解答せよ。

- (a) 等確率（等重率）の原理について説明せよ。
- (b) 1成分系の圧力-温度相図を描き、「化学ポテンシャル」と「ギブスの相律」という語を用いて相平衡状態を議論せよ。
- (c) ミクロカノニカル集団、カノニカル集団、グランドカノニカル集団の違いを説明せよ。
- (d) フェルミ粒子とボース粒子の実例を挙げ、それらの違いについて説明せよ。

2. 固有振動数 ω の一次元調和振動子を量子論的に取り扱った場合、エネルギー準位は

$$\epsilon_n = (n + 1/2)\hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (1)$$

と表せる。

(a) 調和振動子1個の分配関数は、

$$z = \frac{1}{2 \sinh(\hbar\omega/2k_B T)} \quad (2)$$

であることを示せ。

- (b) 調和振動子 N 個からなる系のヘルムホルツの自由エネルギー F を求めよ。
- (c) 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。
- (d) 本設問の結果をもとにして、固体の比熱について考察せよ。

3. 相互作用しない質量 m の電子 N 個からなる、体積 V 、温度 T の自由電子ガスを考える。このとき、1 電子の波動関数は、

$$\psi(\mathbf{r}, t) \propto \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (3)$$

で表される。ここで、 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ 、 t 、 $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ 、 ω はそれぞれ実空間の座標、時間、電子の波数、振動数である。

- (a) 自由電子ガスが 1 辺 $L = V^{1/3}$ の立方体の中にあるとして、周期的境界条件を導入すると、例えば x 成分について $\psi(x + L) = \psi(x)$ が成り立つ。このとき電子の運動量 $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ とエネルギー ϵ の取り得る値を示せ。
- (b) 1 電子のエネルギーが ϵ_0 より小さくなる電子の量子状態の数を求めよ。
- (c) 絶対零度 ($T = 0$) における電子の持つ最大エネルギー ϵ_F を求めよ。
- (d) エネルギー ϵ の状態を占める平均の電子数を表す関数を示し、 $T = 0$ および $T \neq 0$ について ϵ 依存性を図示せよ。

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 $F = -k_B T \log Z$

等比級数の無限和 $\sum_{n=1}^{\infty} a_1 r^{n-1} = \frac{a_1}{1-r}$

以上