

問 1. 理想量子気体のエントロピーと粒子数の揺らぎ

大正準集団を用いて、理想ボーズおよびフェルミ粒子について

- (a) エントロピーを $\langle n_i \rangle$ で表わす式を求めよ。ただし、 n_i は i 番目の 1 粒子状態にある粒子の数である。
- (b) i 番目の 1 粒子状態にある粒子数の揺らぎ、 $\langle (n_i - \langle n_i \rangle)^2 \rangle$ を $\langle n_i \rangle$ で表わせ。

問 2. 自由粒子の固有値と固有関数 (1 次元)

1 次元空間で、長さ L の線状領域 ($0 < x < L$) の中に閉じ込められた質量 m の 1 個の粒子を考える。この粒子の固有エネルギー E_n 、対応する固有関数 $\psi_n(x)$ とすると、Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$$

となる。

- (a) 境界条件 $\psi_n(0) = \psi_n(L) = 0$ のもとに $\psi_n(x)$ 、 E_n を求めよ。
- (b) 上の境界条件の代わりに周期境界条件、すなわち任意の x について $\psi_n(x) = \psi_n(x+L)$ 、を仮定した場合の $\psi_n(x)$ 、 E_n を求めよ。

問 3. 自由粒子の固有値と固有関数 (3 次元)

一辺 L の立方体の箱の中に閉じ込められた質量 M の 1 個の粒子を考える。ここでは立方体の 4 つの頂点が $(0, 0, 0)$ 、 $(L, 0, 0)$ 、 $(0, L, 0)$ 、 $(0, 0, L)$ となるような座標系を仮定する。

- (a) この粒子の固有エネルギー E_i 、対応する固有関数 $\psi_i(x, y, z)$ とすると、Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \psi_i(x, y, z) = E_i \psi_i(x, y, z)$$

となる。ここで $\psi_i(x, y, z) = X_l(x)Y_m(y)Z_n(z)$ と書けると仮定すると $X_l(x)$ 、 $Y_m(y)$ 、 $Z_n(z)$ は

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} X_l(x) &= \varepsilon_l X_l(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dy^2} Y_m(y) &= \varepsilon_m Y_m(y) \\ -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dz^2} Z_n(z) &= \varepsilon_n Z_n(z) \end{aligned}$$

を満たし、かつ $E_{(l,m,n)} = \varepsilon_l + \varepsilon_m + \varepsilon_n$ となることを示せ。

- (b) 箱の表面で $\psi_{(l,m,n)}(x, y, z) = 0$ となる境界条件を課すことは、 $X_l(x)$ について $X_l(0) = X_l(L) = 0$ という境界条件を、 $Y_m(y)$ 、 $Z_n(z)$ についても同様な境界条件を課すことと等しいことを確認して、 $X_l(x)$ 、 $Y_m(y)$ 、 $Z_n(z)$ を求め、これから $\psi_{(l,m,n)}(x, y, z)$ 、 $E_{(l,m,n)}$ を求めよ。
- (c) 周期境界条件、すなわち、任意の x, y, z について $\psi_i(x, y, z) = \psi_i(x+L, y, z)$ 、 $\psi_i(x, y, z) = \psi_i(x, y+L, z)$ 、 $\psi_i(x, y, z) = \psi_i(x, y, z+L)$ を仮定した場合について $\psi_{(l,m,n)}(x, y, z)$ 、 $E_{(l,m,n)}$ を求めよ。

問 4. 自由粒子の 1 粒子状態密度

問 3 と同様に一辺 L の立方体の箱の中に閉じ込められた質量 M の 1 個の粒子を考える。

- (a) $\varepsilon \gg \hbar^2/(ML^2)$ として、 ε より小さい固有エネルギーを持つ固有状態の数 $N(\varepsilon)$ を求めよ。箱の表面で $\psi_{(l,m,n)}(x,y,z) = 0$ とした場合と周期境界条件を仮定した場合とを比較せよ。
- (b) 上の結果を利用して、状態密度 $D(\varepsilon)$ を求めよ。

問 5. 理想量子統計の分布関数（小正準集団によるアプローチ）

N 個の相互作用のない 1 種類の粒子からなる系を考える。系を互いにエネルギーの近い量子状態からなる細胞に分割し、細胞 i にある量子状態の数を G_i 、粒子の数を N_i 、粒子の 1 粒子エネルギーを ε_i とする。このとき、系の粒子数 N 、全エネルギー E は

$$N = \sum_i N_i, \quad E = \sum_i \varepsilon_i N_i$$

と書ける。

- (a) 粒子の種類が (i) 古典粒子、(ii) ボーズ粒子、(iii) フェルミ粒子である場合にその統計的性質はどう異なるか説明せよ。
- (b) 上の 3 種類の粒子の系それぞれについて各細胞にある粒子の数の組 $\{N_i\}$ が与えられた時、状態の数 $W(\{N_i\})$ はそれぞれどうなるか？
- (c) 3 種類の粒子の系それぞれについてラグランジュの未定係数法を用いて粒子数 N および全エネルギー E が一定であるという拘束条件のもとに $\log W(\{N_i\})$ が停留状態にあるための条件を求めよ。これにより、エネルギーが ε_i の量子状態にある粒子数 $n_i = N_i/G_i$ を求めよ。また、2 つの未定係数の熱力学的意味は何か？（ヒント： N_i, G_i は十分大きいとしてスターリングの公式を用いてよい。）
- (d) 上の結果を用いて 3 種類の粒子の系それぞれについてエントロピーを $\{n_i\}$ で表わせ。