演習問題 3:量子理想気体の基礎他

問題 1. スピン 1/2 の 2 つのスピン $\boldsymbol{S}_1, \boldsymbol{S}_2$ からなる量子系を考える。

(a) 次のハミルトニアンに対して $\Phi = (|\uparrow_1\uparrow_2\rangle, |\uparrow_1\downarrow_2\rangle, |\downarrow_1\uparrow_2\rangle, |\downarrow_1\downarrow_2\rangle)$ とおき $h = \Phi^\dagger H_Q \Phi$ を求めよ。

$$H_Q = J\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 = J\Big(\frac{1}{2}(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}) + S_{1z}S_{2z}\Big)$$

(b) h を対角化し $J > 0$ の時の H_Q の基底状態が次のようになることを示せ。$|\Psi_0\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\uparrow_2\rangle)$.

(c) $\mathrm{Tr} = \mathrm{Tr}_1\mathrm{Tr}_2$ に注意して

$$\rho_0 = \mathrm{Tr}_2|\psi_0\rangle\langle\psi_0| = \langle\uparrow_2|\psi_0\rangle\langle\psi_0|\uparrow_2\rangle + \langle\downarrow_2|\psi_0\rangle\langle\psi_0|\downarrow_2\rangle$$

を求めよ。

(d) エンタングルメントエントロピー $\sigma_1 = -\langle\log\rho_0\rangle_{\rho_0}$ を求めよ。$\sigma_1 > 0$ であることを 1 と 2 はエンタングルしているという。

(e) $J < 0$ の時の H_Q の基底状態の一つは次のようになることを示せ。$|\Psi_1\rangle = |\uparrow_1\uparrow_2\rangle$

(f) $\rho_1 = \mathrm{Tr}_2|\psi_1\rangle\langle\psi_1|$

(g) エンタングルメントエントロピー $\sigma_1 = -\langle\log\rho_1\rangle_{\rho_1}$ を求めよ。$\psi_1\rangle$ はエンタングルしているか？

問題 2. フェルミ粒子とボーズ粒子エントロピーを考えよう。

(a) グランドカノニカル分布における自由エネルギー J とエントロピー S の関係を求めよ。

(b) Fermi 粒子系の大分配関数 $\Xi_F = \prod_{\vec{k}}(1 + e^{-\beta(\epsilon_{\vec{k}}-\mu)})^{+1} = e^{-\beta J_F}$ から自由エネルギー J_F を求め、エントロピー S_F が以下の形となることを示せ

$$S_F = \sum_{\vec{k}}\{-(1-f)\ln\,(1-f) - f\ln\,f\},\quad f = f(\epsilon_{\vec{k}}) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\vec{k}}-\mu)}+1}$$

(c) ボーズ粒子系の大分配関数 $\Xi_B = \prod_{\vec{k}}(1 - e^{-\beta(\epsilon_{\vec{k}}-\mu)})^{-1} = e^{-\beta J_B}$ から自由エネルギー J_B を求め、エントロピー S_B が以下の形となることを示せ

$$S_B = \sum_{\vec{k}}\{(1+n_B)\ln\,(1+n_B) - n_B\ln\,n_B\},\quad n_B = n_B(\epsilon_{\vec{k}}) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\vec{k}}-\mu)}-1}$$

(d) 一粒子エネルギーが $[\epsilon, \epsilon + \delta\epsilon]$ に含まれる一粒子状態が G 個あるとし、この系に N 個のフェルミ粒子が存在するとする。このとき全エネルギーが $[E, E + \delta E]$, $(E = N\epsilon, \delta E \sim N\delta\epsilon)$ に含まれる状態数 $\Omega_F(E)$ をもとめよ。

(e) $G >> 1$, $N >> 1$ の場合、スターリングの公式を用い $s_F = \frac{1}{G}\ln \Omega_F$ をもとめよ。ただし $f = \frac{N}{G}$ とする。

(f) 同じ状況でボーズ粒子のばあいの $\Omega_B(E)$、$s_B = \frac{1}{G}\ln \Omega_B$ を求めよ。ただし $n_B = \frac{N}{G}$ とする。

(g) 状態密度を $D(\epsilon)$ として $G = \delta\epsilon D(\epsilon)$ であることを用いて次式を確認せよ

$$S_{F,B} = \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon D(\epsilon) s_{F,B}$$

問題 3. Canonical 分布におけるエネルギー密度および Grand Canonical 分布における粒子数密度の揺らぎについて次の式を示せ。

(a)

$$\langle(\frac{\hat{H}}{V} - \frac{\langle\hat{H}\rangle_c}{V})^2\rangle_c = \frac{1}{V}kT^2\frac{\partial}{\partial T}\frac{\langle\hat{H}\rangle_c}{V},\ \ \langle(\frac{\hat{N}}{V} - \frac{\langle\hat{N}\rangle_{gc}}{V})^2\rangle_{gc} = \frac{1}{V}kT\frac{\partial}{\partial \mu}\frac{\langle\hat{N}\rangle_{gc}}{V}$$

　更に、Grand Canonical 分布における一粒子状態の占有数密度の揺らぎ $\langle(\Delta\hat{n}_k)^2\rangle$、$\Delta\hat{n}_k = \hat{n}_k - \langle\hat{n}_k\rangle$ について。

(b) フェルミ粒子系の場合　$\langle(\Delta\hat{n}_k)^2\rangle = \langle\hat{n}_k\rangle(1 - \langle\hat{n}_k\rangle)$ を示せ。

(c) ボーズ粒子系の場合　$\langle(\Delta\hat{n}_k)^2\rangle = \langle\hat{n}_k\rangle(1 + \langle\hat{n}_k\rangle)$ を示せ。
よって　$\langle\hat{n}_k\rangle >> 1$ のとき $\frac{\langle(\Delta\hat{n}_k)^2\rangle}{\langle\Delta\hat{n}_k\rangle^2} \to 1$

(d) 高温、低密度の場合、ボルツマン分布に従う古典系の場合には　$\frac{\langle(\Delta\hat{n}_k)^2\rangle}{\langle\Delta\hat{n}_k\rangle^2}$ はどうなるか。

問題 4. Grand Canonical 分布においてフェルミ分布、もしくは、ボーズ分布から高温、低密度の場合を考えボルツマン分布に従う古典系を考える。

(a) 全粒子数が一粒子状態の占有数の和であることから、化学ポテンシャルを粒子密度及び温度の関数として求めよ。

(b) $\lambda = e^{\beta\mu}$ として大分配関数が $\Xi = e^{\lambda f}$ と書けることを示せ。

(c) この古典近似が正当化できる条件を粒子間の平均距離及び、粒子のド・ブロイ波長をもちいて述べよ。