統計力学II演習問題

2008年11月25日

[1] 演算子 $\hat{c}$ と $\hat{c}^\dagger$ がボーズ粒子の交換関係

$$[\hat{c}, \hat{c}^\dagger]_+ \equiv \hat{c}\hat{c}^\dagger - \hat{c}^\dagger\hat{c} = 1, \qquad [\hat{c}, \hat{c}]_+ = [\hat{c}^\dagger, \hat{c}^\dagger]_+ = 0,$$

を満たすものとする。また状態 $|n\rangle$ $(n = 0, 1, 2, \cdots)$ を

$$\hat{c}|0\rangle = 0, \qquad |n\rangle \equiv \frac{(\hat{c}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle,$$

で定義する。

(a) $[\hat{c}, (\hat{c}^\dagger)^n] = n(\hat{c}^\dagger)^{n-1}$ を証明せよ。

(b) 演算子 $\hat{n} \equiv \hat{c}^\dagger\hat{c}$ を定義する。(a) の結果を用いて $\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$ を示せ。

[2] 演算子 $\hat{c}$ と $\hat{c}^\dagger$ がフェルミ粒子の交換関係

$$[\hat{c}, \hat{c}^\dagger]_- \equiv \hat{c}\hat{c}^\dagger + \hat{c}^\dagger\hat{c} = 1, \qquad [\hat{c}, \hat{c}]_- = [\hat{c}^\dagger, \hat{c}^\dagger]_- = 0,$$

を満たすものとする。また状態 $|n\rangle$ $(n = 0, 1, 2, \cdots)$ を

$$\hat{c}|0\rangle = 0, \qquad |n\rangle \equiv \frac{(\hat{c}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle,$$

で定義する。

(a) $(\hat{c}^\dagger)^2 = 0$ を証明せよ。

(b) $n \geq 2$ に対して $(\hat{c}^\dagger)^n = 0$ を証明せよ。

(c) (b) の結果より、状態 $|n\rangle$ は $n = 0, 1$ のみに対して有限であることがわかる。演算子 $\hat{n} \equiv \hat{c}^\dagger\hat{c}$ を定義する。$n = 0, 1$ に対して $\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle$ を示せ。

[3] 1粒子エネルギー固有値が ε_k で与えられる理想気体を考える。ここで k は1粒子固有状態を指定するすべての量子数である。次の場合について、状態密度

$$D(\varepsilon) \equiv \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k)$$

を求めよ。

(a) 質量 M と大きさ s のスピンを持ち、一辺 L の正方形領域を運動する2次元自由粒子。周期境界条件を採用すると、この場合の一粒子固有状態を指定する量子数は $k = (\mathbf{p}, m_s)$ で与えられる。ここで $\mathbf{p} \equiv \dfrac{2\pi\hbar}{L}(n_x, n_y)$ は運動量 $(n_x, n_y = 0, \pm1, \pm2, \cdots)$、また $m_s = s, s-1, \ldots, -s$ は z 方向のスピン量子数。一粒子エネルギーはスピンに依存せず、$\varepsilon_k = \dfrac{\mathbf{p}^2}{2M}$ で与えられる。

(b) 質量 M と大きさ s のスピンを持ち、長さ L の領域を運動する 1 次元自由粒子。周期境界条件を採用すると、この場合の一粒子固有状態を指定する量子数は $k = (p, m_s)$ で与えられる。ここで $p \equiv \dfrac{2\pi\hbar}{L} n_x$ は運動量 ($n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$)、また $m_s = s, s-1, \ldots, -s$ は z 方向のスピン量子数。一粒子エネルギーはスピンに依存せず、$\varepsilon_k = \dfrac{p^2}{2M}$ で与えられる。

(c) 大きさ s のスピンを持ち、次のハミルトニアンで記述される 3 次元調和振動子：

$$\hat{h} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} + \frac{1}{2} m\omega^2 (x^2 + y^2 + z^2).$$

この場合の一粒子固有状態を指定する量子数は $k = (n_x, n_y, n_z, m_s)$ で与えられる。ここで $n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, \cdots$、また $m_s = s, s-1, \ldots, -s$ は z 方向のスピン量子数。一粒子エネルギーは

$$\varepsilon_k = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) \hbar\omega,$$

で与えられる。

[4] 水素原子核型クーロン・ポテンシャル中を運動する電子に対する 1 粒子ハミルトニアンは、

$$\hat{h} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} - \frac{Ze^2}{r}, \qquad r \equiv \sqrt{x^2 + y^2 + z^2},$$

で与えられる。ここで $Z = 1, 2, \cdots$ は素電荷 e を単位とする原子核の電荷を表す。対応する 1 粒子束縛固有状態 k は、主量子数 $n = 1, 2, \cdots$、方位量子数 $\ell = 0, 1, 2, \cdots, n-1$、磁気量子数 $m = \ell, \ell - 1, \cdots, -\ell$、スピン量子数 $m_s = \pm\frac{1}{2}$ を用いて、

$$k = (n, \ell, m, m_s),$$

で指定される。また、磁場の無い場合の固有エネルギーは主量子数のみに依存し、E_0 をある正の定数として

$$\varepsilon_k = -\frac{Z^2 E_0}{n^2}, \tag{1}$$

で与えられる。

(a) $n = 1, 2, 3$ の各準位について、それぞれの縮重度を求めよ。

次に、1 粒子エネルギーが (1) 式で与えられる <u>多電子系</u> を考える。電子間の相互作用を無視すると、この系に複数の電子が存在するときのハミルトニアンは、第二量子化の表示で

$$\hat{H} = \sum_k \varepsilon_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k$$

で与えられる。ただし、$\hat{c}_k$ はフェルミ粒子の交換関係をみたす場の演算子である。

(b) $Z = 2$ の原子核に 2 電子が存在する場合 (He) について、基底状態のエネルギーと電子配置を求めよ。

(c) $Z = 6$ の原子核に 6 電子が存在する場合 (C) について、基底状態のエネルギーと電子配置を求めよ。