2003.12.8 担当 吉森 明

II-2. n 粒子分布関数
2-2. 2粒子分布関数の実験

目標 2粒子密度が直接実験で測定できることを理解する。

- 実験で測定できるのは、$\rho^{(2)}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ ではなくて、それのフーリエ変換。
- 中性子やX線の弾性散乱で2粒子密度のフーリエ変換が測定できる。
- 測定の原理は波の干渉。

目次 (1) フーリエ変換
(2) 散乱実験
(3) 測定結果

(1) フーリエ変換
○ 並進対称性のある系

$$\boxed{\text{平均したものに対して}\mathbf{r}\to\mathbf{r}+\mathbf{a}\text{ としても、値は変わらない。}}$$

例1 $\rho^{(1)}(\mathbf{r})=\rho^{(1)}(\mathbf{r}+\mathbf{a})$ だから、 $\boxed{\rho^{(1)}(\mathbf{r})=\rho}$:$\mathbf{r}$ によらない。

例2 $\rho^{(2)}(\mathbf{r},\mathbf{r}')=\rho^{(2)}(\mathbf{r}+\mathbf{a},\mathbf{r}'+\mathbf{a})$ だから、

$$\boxed{\rho^{(2)}(\mathbf{r},\mathbf{r}')=\rho^{(2)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\ :\mathbf{r}\text{ と }\mathbf{r}'\text{の差にしかよらない} \tag{1}$$

したがって、

$$\rho^{(2)}(\mathbf{r},\mathbf{r}')=\rho^2 g(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{2}$$

○ フーリエ変換

$$\tilde{\rho}(\mathbf{k},\mathbf{k}')\equiv\int d\mathbf{r}\int d\mathbf{r}'\rho^{(2)}(\mathbf{r},\mathbf{r}')e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}+i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \tag{3}$$

ここで、積分は全体積Vでする。並進対称性があるとき、

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}(\mathbf{k},\mathbf{k}') &= \int d\mathbf{r}\int d\mathbf{r}'\rho^2 g(\mathbf{r}-\mathbf{r}')e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}+i\mathbf{k}'\mathbf{r}} && (4)\\ &= \rho^2 V\delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k}'}\{\tilde{h}(\mathbf{k})+V\delta_{\mathbf{k},0}\} && (5)\end{aligned}$$

(宿題31)。ここで、$\delta_{i,j}$はクロネッカーのデルタで、

$$\boxed{\tilde{h}(\mathbf{k})=\int d\mathbf{r}h(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}} \tag{6}$$

(5) 式は、$\tilde{\rho}(\mathbf{k},\mathbf{k})$ **が** $\mathbf{k}=-\mathbf{k}'$ **しか値がない**事を示している。

宿題:

28 (20 点) N個の粒子系に対して、充分小さい体積dvをもった領域を考える。この領域に2つ以上粒子が入る可能性を無視すれば、N個の粒子のうち1つでもこの領域に入る確率は、$\rho^{(1)}(\mathbf{r})dv$で表わせる。ところが、確立ならば全事象をたし合わせると1になるのに、

$$\int \rho^{(1)}(\mathbf{r})d\mathbf{r} = N \tag{7}$$

となる。この数え方のどこが間違っているか答えなさい。

29 (20 点) カノニカル分布で理想気体の場合の、$g(\mathbf{r})$ を求めなさい。

30 (20 点) グランドカノニカル分布の $g(\mathbf{r})$ の定義を与え、理想気体の場合を計算しなさい。

31 (20 点) (5) 式を示しなさい。