2004年度統計力学II 授業ノート 2
7章の復習

2004.5.10 担当 吉森 明

(1) フェルミ粒子とボーズ粒子

古典力学ではN個の粒子の微視状態(教科書P23参照)は、粒子に番号を付けて、それぞれの位置と運動量で指定される。

$$
\begin{aligned}
\{q_l, p_l\} &= \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \ldots, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \ldots, \mathbf{p}_N\} \text{と} \\
\{q_l, p_l\} &= \{\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3, \ldots, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_3, \ldots, \mathbf{p}_N\} \text{は、別の微視状態} \qquad (1)
\end{aligned}
$$

ところが、**量子力学**では次の2つの変更をしなければならない。

1. スピンの自由度を加える。
2. 波動関数で表す。

i番目の粒子のスピンの自由度をs_iとすると、

$$\psi(\mathbf{r}_1, s_1, \mathbf{r}_2, s_2, \ldots, \mathbf{r}_N, s_N) = \psi(1, 2, \ldots, N) \qquad (2)$$

位置とスピンを両方書くのは面倒なので、右辺のように書くことにする。

量子力学では、これらに加えて、粒子の入れ替えについて、特別な考慮を必要とする。つまり、1番目と2番目の粒子を入れ替えると、

$$\psi(1, 2, \ldots, N) \qquad (3)$$
$$\psi(2, 1, \ldots, N) \qquad (4)$$

の2つの微視状態を考えることができるが、実はこれだけではなくて、さらにそれらの**重ね合せの状態**

$$C_1\psi(1, 2, \ldots, N) + C_2\psi(2, 1, \ldots, N) \qquad (5)$$

もある。C_1とC_2は、任意の定数なので、無限に微視状態を考えることが出来るが、実際は**特別な条件を満たす波動関数しか存在しない**。

$$\boxed{\psi(1, 2, \ldots, N) = \pm\psi(2, 1, \ldots, N)} \qquad (6)$$

(6)式が示す性質は、ある時刻で満たせば、永遠に満たしつづけることが証明出来る(略)。さらに、右辺の$\pm$も未来永劫変らないので、$+$をとる粒子と$-$をとる粒子で別の名前を付ける。

$+$: ボーズ粒子
$-$: フェルミ粒子

具体的には、2個の粒子に対して、例えば、$\psi(1)\phi(2)$ と$\phi(1)\psi(2)$ とこの2つの重ね合せが考えられるが、実際存在しているのは、

$$\psi(1)\phi(2) \quad + \quad \phi(1)\psi(2) \tag{7}$$
$$\psi(1)\phi(2) \quad - \quad \phi(1)\psi(2) \tag{8}$$

の2種類しかない。(7) 式がボーズ粒子で、(8) 式がフェルミ粒子に対応する。

$\boxed{\phi = \psi \text{の時}}$

フェルミ粒子: $\psi(1)\phi(2) - \phi(1)\psi(2) = 0$ だから、存在しない。

$\boxed{\text{フェルミ粒子は同じ状態に2つ以上粒子が入れない。}}$(パウリの排他律)

ボーズ粒子はボルツマン粒子 (古典力学) と同じか?

古典力学で$N!$で割れば、ボーズ粒子と同じ微視状態の数え方になるか? 答えは、$N!$で割っても**同じ状態に2つ以上粒子があると同じにならない**。

同じ状態に2つ以上入らなければ、

$$\text{ボルツマン} = \text{ボーズ} = \text{フェルミ} \tag{9}$$

(2) 状況設定と微視状態の数え方

相互作用していない粒子系 (理想気体) のグランドカノニカル分布を計算したい。ただし、フェルミ粒子とボーズ粒子の性質を正しく取り扱う。1粒子の固有状態 (教科書P109参照) に番号をつけて$k = 1, 2, \ldots$ で表す。

粒子に番号を付けるのは不便。なぜなら、同じ固有状態に2個以上の粒子があると困る。もちろん、$N!$で割ってもだめ。そこで、各固有状態kに粒子が何個入っているかで、微視状態を指定する。

$$\begin{array}{ccccccc} \{k\} & = \{ & 1, & 2, & 3, & 4, & \cdots\} \\ \text{粒子}1 & & \bigcirc & & & & \\ \text{粒子}2 & & \bigcirc & & & & \\ \text{粒子}3 & & & & & \bigcirc & \\ \text{粒子}4 & & & \bigcirc & & & \\ \vdots & & & & & & \\ \hline \text{計} & & 2 & 1 & 0 & 1 & \end{array} \left.\begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \end{array}\right\} \begin{array}{l}\text{粒子に番号。} \\ \text{ここを見るの} \\ \text{を止める}\end{array} \tag{10}$$

$\longleftarrow$ ここを見る (1つの微視状態)

つまり、

$\boxed{\{n_k\} = \{2, 1, 0, 1, \ldots, \} \text{ で微視状態を指定}}$

全粒子数は、

$$N(\{n_k\}) = \sum_k n_k \tag{11}$$

全エネルギーは、k番目の固有状態のエネルギー固有値をϵ_kとすると、

$$E(\{n_k\}) = \sum_k n_k \epsilon_k \tag{12}$$

グランドカノニカル分布は

$$P(\{n_k\}) = \frac{1}{\Xi} \exp[-\beta \sum_k n_k \epsilon_k + \beta\mu \sum_k n_k] \tag{13}$$

(3) 大分配関数
確率の積の法則

$$\textbf{独立}\text{の}2\text{つの事象}AB\text{がおこる確率} = A\text{がおこる確率} \times B\text{がおこる確率} \tag{14}$$

ただし、**独立でなければならない。**

もし、カノニカル分布であれば、粒子数が決まっているので、$\sum_k n_k = N$という条件がついて、

$$\{n_k\} = \{n_1, n_2, n_3, \ldots, \} \tag{15}$$

の$n_1, n_2, n_3, \ldots$は、互いに独立でない。しかし、グランドカノニカル分布であれば、$\sum_k n_k = N$という条件はないので、

$$\boxed{\text{各固有状態に入る粒子の個数は互いに独立}}$$

実際、

$$\begin{aligned} P(\{n_k\}) &\propto \exp[-\beta \sum_k n_k \epsilon_k + \beta\mu \sum_k n_k] &(16)\\ &= \exp[-\beta n_1 \epsilon_1 + \beta\mu n_1] \exp[-\beta n_2 \epsilon_2 + \beta\mu n_2] \cdots &(17)\\ &= \prod_k \exp[-\beta n_k \epsilon_k + \beta\mu n_k] &(18) \end{aligned}$$

これから、k番目の固有状態にn_k個粒子が入る確率$P_k(n_k)$を、

$$P_k(n_k) = \frac{1}{\Xi_k} \exp[-\beta n_k \epsilon_k + \beta\mu n_k] \tag{19}$$

とすると、

$$\boxed{P(\{n_k\}) = \prod_k P_k(n_k)} \tag{20}$$

大分配関数は、

$$\begin{aligned} (20)\text{式の左辺} &= \frac{1}{\Xi} \exp[-\beta \sum_k n_k \epsilon_k + \beta\mu \sum_k n_k] &(21)\\ (20)\text{式の右辺} &= \prod_k \frac{1}{\Xi_k} \exp[-\beta n_k \epsilon_k + \beta\mu n_k] &(22) \end{aligned}$$

したがって、

$$\boxed{\Xi = \prod_k \Xi_k} \tag{23}$$

つまり、Ξを計算するには、Ξ_kを計算すれば良い。

$$\Xi_k = \sum_{n_k\text{のすべての可能性}} \exp[-\beta n_k \epsilon_k + \beta\mu n_k] \tag{24}$$

1. フェルミ粒子
   同じ状態に2つ以上入れないから、$\boxed{n_k = 0, 1\text{だけ}}$。
   $$\Xi_k = 1 + \exp[-\beta\epsilon_k + \beta\mu] \tag{25}$$
   1項目は$n_k = 0$で、2項目は$n_k = 1$から来る。

2. ボーズ粒子
   いくつでも入るので、$\boxed{n_k = 0, 1, 2, \ldots}$。
   $$\Xi_k = \sum_{n=0}^{\infty} \exp[-\beta n \epsilon_k + \beta\mu n] = \sum_{n=0}^{\infty} r^n \tag{26}$$
   ここで、$r = e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)}$とした。(26)式は無限等比級数だから、$1/(1-r)$と計算できるので、
   $$\Xi_k = \frac{1}{1 - \exp[-\beta\epsilon_k + \beta\mu]} \tag{27}$$

これらをあわせると、

$$\begin{aligned} J(T, V, \mu) &= -k_{\mathrm{B}} T \ln \Xi = -k_{\mathrm{B}} T \ln \prod_k \Xi_k = -k_{\mathrm{B}} T \sum_k \ln \Xi_k && (28) \\ &= -k_{\mathrm{B}} T \sum_k \{\pm \ln(1 \pm e^{-\beta(\epsilon_k - \mu)})\} && (29) \end{aligned}$$

$+$はフェルミ粒子、$-$はボーズ粒子。

宿題(5月17日締め切り)

1粒子のエネルギー固有状態が2個しかない2準位系(教科書P44参照)を考える。粒子がフェルミ統計、ボーズ統計、ボルツマン統計に従う場合の**カノニカル分布**における分配関数をそれぞれ求めなさい。ただし、エネルギー固有値は、ϵと$-\epsilon$とし、粒子数は$N = 2$、温度をTとする。さらに、化学ポテンシャルをμとして、**グランドカノニカル分布**の大分配関数を求めなさい。