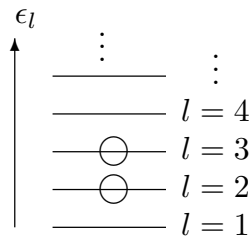


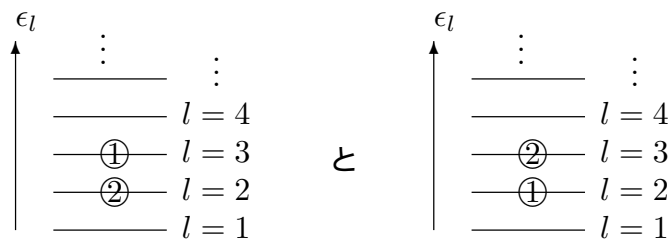
1 波動関数の対称性*1

「授業ノート 1」で説明したように、同種の粒子が 2 個ある時、2 粒子全体の固有状態は、図に書く事が出来て例えば、



この状態を数式で表すとどうなるかを考える。

上の状態は、「授業ノート 1」P4 にもあるように



の重ね合わせの状態を表している。1 番目の粒子の位置を \mathbf{r}_1 、2 番目を \mathbf{r}_2 と書いて、1 粒子の固有関数を $\phi_l(\mathbf{r})$ で表すとすると、左の状態は、 $\phi_3(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2)$ 、右の状態は、 $\phi_3(\mathbf{r}_2)\phi_2(\mathbf{r}_1)$ と波動関数で書ける。しかし、これらの状態はそれぞれの粒子がどの固有状態にあるのか区別しているので、量子力学ではこのどちらの状態も許されない。許されるのはこれらの重ね合わせの状態

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = a\phi_2(\mathbf{r}_1)\phi_3(\mathbf{r}_2) + b\phi_2(\mathbf{r}_2)\phi_3(\mathbf{r}_1) \quad (1)$$

だけになる。→ a, b は、どうやって決めるのか。

*1「授業ノート 1」付録と内容が重なっている。

波動関数の対称性

同種粒子は、粒子を入れ替えても同じ状態 = $|\psi|^2$ が変らない

例えば、 $\psi = \phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2)$ は、粒子 1 と 2 を入れ替えると、 $\phi_1(\mathbf{r}_2)\phi_2(\mathbf{r}_1)$ となる。これは、 $|\psi|^2$ が変るので、 $\psi = \phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2)$ は、許されない。

一般に N 個の粒子系で許される波動関数を考えよう。 \mathbf{r}_i を i 番目の粒子の位置とすると、粒子系全体の波動関数 $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ は、

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = c\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \text{ で、 } |c|^2 = 1 \quad (2)$$

を満たさなければならない。ここで、 c は $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$ によらない定数と仮定する。右辺でもう 1 度 \mathbf{r}_1 と \mathbf{r}_2 を入れ替えると

$$= c^2\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (3)$$

これは最初の波動関数と同じでなければならない。→ $c^2 = 1$ 、ゆえに $c = \pm 1$

つまり、

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \pm\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (4)$$

\pm は、粒子の種類によって違う (仮定) → $\begin{cases} +: \text{ボース粒子} \\ -: \text{フェルミ粒子} \end{cases}$

結局、

ボース粒子: 入れ替えても値が変らない。
例えば、 $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$
フェルミ粒子: 入れ替えるとマイナスを付けたものと同じ。
例えば、 $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = -\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$

2 粒子 2 準位の場合 ($l = 1, 2$)

全粒子の波動関数は、(1) 式同様、

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = a\phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2) + b\phi_1(\mathbf{r}_2)\phi_2(\mathbf{r}_1) \quad (5)$$

と表せる。

ボース粒子は、(4) 式に代入して、

$$a\phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2) + b\phi_1(\mathbf{r}_2)\phi_2(\mathbf{r}_1) = a\phi_1(\mathbf{r}_2)\phi_2(\mathbf{r}_1) + b\phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2) \quad (6)$$

$\phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2)$ と $\phi_1(\mathbf{r}_2)\phi_2(\mathbf{r}_1)$ は独立だから、左辺の第 1 項と右辺の第 2 項、左辺の第 2 項と右辺の第 1 項が等しくなければならない。したがって、 $a = b$ が示せる。

フェルミ粒子は、

$$a\phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2) + b\phi_1(\mathbf{r}_2)\phi_2(\mathbf{r}_1) = -a\phi_1(\mathbf{r}_2)\phi_2(\mathbf{r}_1) - b\phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2) \quad (7)$$

だから、同様に左辺の第 1 項と右辺の第 2 項、左辺の第 2 項と右辺の第 1 項が等しくなければならないので、 $a = -b$ となる。

結局

$$\text{ボース粒子} \quad \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = a\{\phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2) + \phi_1(\mathbf{r}_2)\phi_2(\mathbf{r}_1)\} \quad (8)$$

$$\text{フェルミ粒子} \quad \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = a\{\phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2) - \phi_1(\mathbf{r}_2)\phi_2(\mathbf{r}_1)\} \quad (9)$$

2 角運動量*2

角運動量は、ベクトル \hat{l} で、量子力学 I では、微分演算子として定義した。

$$\hat{l}_x = \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (10)$$

$$\hat{l}_y = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) = i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (11)$$

$$\hat{l}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (12)$$

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 \quad (13)$$

ここで、 x, y, z は粒子の座標 θ, ϕ は極座標を表す。また、 i は虚数単位、 \hbar はプランク定数を 2π で割ったもの。

固有値、固有関数

\hat{l}^2 と \hat{l}_z は、交換可能なので、同時固有関数を持つ。その固有関数は名前がついていて、

$$\boxed{Y_l^m(\theta, \phi) : \text{球面調和関数}} \quad (14)$$

*2 量子力学 I 講義ノート No. 4 P2-P10 を参照のこと。

添え字 l と m は、固有値と関係している。つまり、

$$\begin{aligned} \hat{l}^2 Y_l^m(\theta, \phi) &= \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi) \\ \hat{l}_z Y_l^m(\theta, \phi) &= \hbar m Y_l^m(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (15)$$

縮退度

$Y_l^m(\theta, \phi)$ は、2つの整数の組 (l, m) で指定される。

$$l = 0, 1, 2, \dots \quad (16)$$

$$-l \leq m \leq l \quad (17)$$

したがって、 m は、 $(2l+1)$ 個の値を取る。例えば、 $l=1$ のとき、 $m=-1, 0, 1$ で、 m は3つ。

\hat{l}^2 の固有値は、 l だけで決まって、 m によらない。 $Y_l^m(\theta, \phi)$ と $Y_l^{m'}(\theta, \phi)$ は、同じ固有値 $l(l+1)$ を与える。 m は $(2l+1)$ 個の値をとるので、

$$\hat{l}^2 \text{ の固有値は } (2l+1) \text{ 個に縮退している}$$

質量 m の1個の粒子の中心力ポテンシャル $V(r)$ での運動: ハミルトニアンは、

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) = \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + \frac{\hat{l}^2}{r^2} \right] + V(r) \quad (18)$$

と書けるから、 $I = mr^2$ とすると、

$$H_{\text{rot}} = \frac{\hat{l}^2}{2I} \quad (19)$$

は回転の部分のハミルトニアンと考える事が出来る。その固有値 ϵ_l は、

$$\epsilon_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) \quad (20)$$

また、エネルギーの縮退は、 \hat{l}^2 の固有値の縮退と同じ。したがって、

$$(2l+1) \text{ 個に縮退} \quad (21)$$

3 スピン*3

スピンは内部自由度と言われる。

古典力学では1つの粒子の状態は位置ベクトル $\mathbf{r} = (x, y, z)$ と運動量ベクトル $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ で表される。これは、1粒子の自由度は位置とその運動量しかない事を示している。

ところが、量子力学では、位置やその運動量だけでは説明できない実験事実がある。そこで、新しい自由度として、スピン自由度が導入された。スピン自由度は3つの成分を持ったベクトルとして観測される。つまり、量子力学では

1つの粒子の自由度として、位置(運動量)とスピンの2つを考えなければならない。

この事から波動関数は、位置の自由度だけでなく、スピンも引数に含めなければならない。したがって、統計力学において状態数や分配関数の計算に考える必要がある。

スピンの性質

スピンは物理量なので、量子力学では演算子となる。これを $\hat{S} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ と書き、その固有関数を $v(s_z)$ とする。スピンの固有関数は、位置の関数では無い。

1. 角運動量 \hat{l} と同じ数学的構造: \hat{S} は物理量なので、演算子だから、

$$\hat{l}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (22)$$

$$\hat{l}_z Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar m Y_l^m(\theta, \phi) \quad \text{ただし、} -l \leq m \leq l \quad (23)$$

↓

$$\hat{S}^2 v(s_z) = \hbar^2 s(s+1) v(s_z) \quad (24)$$

$$\hat{S}_z v(s_z) = \hbar s_z v(s_z) \quad \text{ただし、} -s \leq s_z \leq s \quad (25)$$

スピンの固有関数 $v(s_z)$ は一般には \hat{S}^2 と \hat{S}_z の固有値 s と s_z の関数だが、ここでは、 s は省略して s_z の関数として書く。また、(25)式から、スピンも $2s+1$ 個に縮退していることがわかる。

2. 古典的な類推ができない。

角運動量—古典的な自由度 θ, ϕ : (10)~(12)式

↓

スピンにはこういう対応は無い。古典的な自由度は対応しない。

*3 量子力学 II 参照。

通常 1 つの粒子は s の値を 1 つしかとらない。

角運動量 例えば 1 つの電子は $l = 0, 1, 2, \dots$ どれでもとれる。

↑

スピン 電子 1/2、中性子 1/2、陽子 (水素原子の核)1/2 — フェルミ粒子
 光子 1、重水素の原子核 1(スピンの合成) — ボース粒子

ハミルトニアンに \hat{S} が含まれていない時、

→ エネルギー固有状態は、 $(2s + 1)$ 個に縮退する。

したがって、状態密度もその分増える。これは、今まで内部自由度と呼んでいた。内部状態の数 g (教科書 P135 参照) は、

$$g = 2s + 1 \quad (26)$$

特に電子は、 $s = 1/2$ だから $g = 2$ となる。

宿題 (7月1日提出)

1. (もし授業でいかなければ予習) 異核 2 原子分子 1 個の分配関数が $Z_1 = Z_G j_{rot} Z_S$ の時、1 分子あたりの比熱が $C_V = C_{V,G} + C_{V,rot} + C_{V,S}$ となることを示しなさい。添字の G, rot, S は重心、回転、スピンを表す。
2. 光子にも熱力学が成り立つとすると、光子の数は温度 T と体積 V で決まると、授業中に説明した。具体的に、与えられた T と V に対して、理想ボース気体の統計力学を使って (平均の) 粒子数を求めなさい。