

[問題 1.] 1 粒子のエネルギー固有状態が 3 個ある 3 準位系を考える。それぞれの状態のエネルギー固有値は、 $0, \epsilon, 2\epsilon (\epsilon > 0)$ で、粒子はたがいに相互作用していない理想気体とする。

- (a) 温度 T の熱溜に接しているとし、粒子がフェルミ統計、ボース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、粒子数は $N = 3$ する。
- (b) さらに、化学ポテンシャルを μ の粒子溜めに接するとして、グランドカノニカル分布の大分配関数を求めなさい。ただし、 $\mu < 0$ とする。この時、(5) 式の r' をフェルミ粒子の場合に全て書きなさい。さらに、ボース粒子の場合に、 $\epsilon = 0$ の準位には 1 つも入っていない状態の中で、全エネルギーの低いものから 9 個数えて、書きなさい。

[解答](a)

フェルミ統計 微視的状态は、3 つの準位にそれぞれ 1 個ずつ粒子が入る場合しかない。この時、エネルギーは、 3ϵ だから、

$$Z = e^{-3\beta\epsilon} \quad (1)$$

ボース統計 k 番目の準位にはいる粒子の数を n_k とし、微視的状态を、 $\{n_1, n_2, n_3\}$ であらわすと、

$$\begin{aligned} &\{3, 0, 0\}, \{2, 1, 0\}, \{1, 2, 0\}, \{2, 0, 1\}, \{1, 1, 1\}, \\ &\{0, 3, 0\}, \{0, 2, 1\}, \{1, 0, 2\}, \{0, 1, 2\}, \{0, 0, 3\} \end{aligned} \quad (2)$$

の 10 個ある。それぞれエネルギーは、

$$\begin{aligned} 0 & \quad \{3, 0, 0\} \\ \epsilon & \quad \{2, 1, 0\} \\ 2\epsilon & \quad \{1, 2, 0\}, \{2, 0, 1\} \\ 3\epsilon & \quad \{1, 1, 1\}, \{0, 3, 0\} \\ 4\epsilon & \quad \{0, 2, 1\}, \{1, 0, 2\} \\ 5\epsilon & \quad \{0, 1, 2\} \\ 6\epsilon & \quad \{0, 0, 3\} \end{aligned} \quad (3)$$

となるので、分配関数は、

$$Z = 1 + e^{-\beta\epsilon} + 2e^{-2\beta\epsilon} + 2e^{-3\beta\epsilon} + 2e^{-4\beta\epsilon} + e^{-5\beta\epsilon} + e^{-6\beta\epsilon} \quad (4)$$

(b)

フェルミ統計 「授業ノート 1」 (26) 式から、

$$\Xi = \prod_{k=1}^3 (1 + ze^{-\beta\epsilon_k}) = (1+z)(1+ze^{-\beta\epsilon})(1+ze^{-2\beta\epsilon}) \quad (5)$$

r' は (a) と同じように $\{n_1, n_2, n_3\}$ を使うと、

$$\begin{aligned} &\{0, 0, 0\}, \{0, 0, 1\}, \{0, 1, 0\}, \{0, 1, 1\}, \{1, 0, 0\}, \\ &\{1, 0, 1\}, \{1, 1, 0\}, \{1, 1, 1\} \end{aligned} \quad (6)$$

8 つある。

ボース統計 「授業ノート 1」 (28) 式から、

$$\Xi = \prod_{k=1}^3 \frac{1}{1 - ze^{-\beta\epsilon_k}} = \frac{1}{1-z} \frac{1}{1 - ze^{-\beta\epsilon}} \frac{1}{1 - ze^{-2\beta\epsilon}} \quad (7)$$

r' は、無限個あるが、 $\epsilon = 0$ の準位 (1 粒子の固有エネルギーが 0 の準位) には 1 つも入っていない状態の中で、全エネルギーの低いものから順に 9 個数えると、

$$\begin{aligned} &\{0, 0, 0\}, \{0, 1, 0\}, \{0, 2, 0\}, \{0, 0, 1\}, \\ &\{0, 3, 0\}, \{0, 1, 1\}, \{0, 4, 0\}, \{0, 2, 1\}, \\ &\{0, 0, 2\} \end{aligned} \quad (8)$$

[問題 2.] 粒子に区別がある古典力学に対応する統計に (マクスウェル-) ボルツマン統計がある。これは、粒子に番号をつけて固有状態を数え、最後に粒子数 N の $N!$ で割る。宿題 1 の 3 準位系で、カノニカル分布の分配関数 ($N = 3$) と、グランドカノニカル分布の大分配関数を求めなさい。また、粒子を区別するのにも関わらず、なぜ $N!$ で割るのか、説明しなさい。

[解答]

カノニカル分布: k 番目の粒子の準位を m_k として、微視状態を $\{m_1, m_2, m_3\}$ で表すと、

それぞれのエネルギーを持つ微視的状態の数は

$$\begin{array}{ll}
 0 & \{1, 1, 1\} \text{ で } 1 \\
 \epsilon & \{2, 1, 1\} \text{ 等 } 3 \text{ つ} \\
 2\epsilon & \{1, 2, 2\} \text{ 等 } 3 \text{ つ}, \{1, 1, 3\} \text{ 等 } 3 \text{ つ、合計 } 6 \text{ つ} \\
 3\epsilon & \{1, 2, 3\} \text{ 等 } 6 \text{ つ}, \{2, 2, 2\}、\text{合計 } 7 \text{ つ} \\
 4\epsilon & \{2, 2, 3\} \text{ 等 } 3 \text{ つ}, \{1, 3, 3\} \text{ 等 } 3 \text{ つ合計 } 6 \text{ つ} \\
 5\epsilon & \{2, 3, 3\} \text{ 等 } 3 \text{ つ} \\
 6\epsilon & \{3, 3, 3\} \text{ で } 1
 \end{array} \tag{9}$$

となるので、分配関数は、

$$Z = \frac{1}{3!} \{1 + 3e^{-\beta\epsilon} + 6e^{-2\beta\epsilon} + 7e^{-3\beta\epsilon} + 6e^{-4\beta\epsilon} + 3e^{-5\beta\epsilon} + e^{-6\beta\epsilon}\} \tag{10}$$

グランドカノニカル分布: 一般に N 個の粒子の分配関数は、

$$Z_N = \frac{1}{N!} (1 + e^{-\beta\epsilon} + e^{-2\beta\epsilon})^N \tag{11}$$

のように表されるので、大分配関数は、

$$\Xi = \sum_N z^N Z_N \tag{12}$$

から (長岡本 P193(6.93) 式。ただし、 $z = \exp[\mu/k_B T]$)、

$$\Xi = \sum_N z^N \frac{1}{N!} (1 + e^{-\beta\epsilon} + e^{-2\beta\epsilon})^N \tag{13}$$

指数関数の展開公式を使って

$$= \exp[z (1 + e^{-\beta\epsilon} + e^{-2\beta\epsilon})] \tag{14}$$

なぜ $N!$ で割るのか: カノニカル分布の場合は、量子力学の連続性を保つためだと考えられる。つまり、高温、低密度にすると、同じ準位に 2 つ以上粒子が入ることがないために、微視的状態の数が同じになり、フェルミ統計とボース統計に違いがなくなる。この場合には、粒子に番号を付け区別しても、最後に $N!$ で割れば正しい答えがでる。ただし、カノニカル分布の場合は、粒子数が固定なので、 $N!$ の項は定数となる。したがって、体積や温度で微分したとき、この定数があってもなくても答えは変わらない。

グランドカノニカルについては、量子力学との関係からの説明の他に、粒子を区別するからこそ必要な因子と考えることが出来る。その説明を知りたい人は、研究室に直接聞きに来て下さい。