2013年度統計力学II 宿題2 (4月25日出題、5月2日提出) 解答

担当 吉森 明

[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、ボーズ統計に従う場合の**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　微視的状態は、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、

$$Z = e^{-3\beta\epsilon} \tag{1}$$

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

$$\begin{gathered} \{3,0,0\}, \quad \{2,1,0\}, \quad \{1,2,0\}, \quad \{2,0,1\}, \quad \{1,1,1\}, \\ \{0,3,0\}, \quad \{0,2,1\}, \quad \{1,0,2\}, \quad \{0,1,2\}, \quad \{0,0,3\} \end{gathered} \tag{2}$$

の 10 個ある。それぞれエネルギーは、

$$\begin{array}{cc} 0 & \{3,0,0\} \\ \epsilon & \{2,1,0\} \\ 2\epsilon & \{1,2,0\},\{2,0,1\} \\ 3\epsilon & \{1,1,1\},\{0,3,0\} \\ 4\epsilon & \{0,2,1\},\{1,0,2\} \\ 5\epsilon & \{0,1,2\} \\ 6\epsilon & \{0,0,3\} \end{array} \tag{3}$$

となるので、分配関数は、

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

(b)

フェルミ統計　「授業ノート 1」(26) 式から、

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

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

$$\begin{array}{l} \{0,0,0\},\quad \{0,0,1\},\quad \{0,1,0\},\quad \{0,1,1\},\quad \{1,0,0\}, \\ \{1,0,1\},\quad \{1,1,0\},\quad \{1,1,1\} \end{array} \tag{6}$$

8 つある。

ボース統計　「授業ノート 1」(28) 式から、

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

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、

$$\begin{array}{l} \{0,0,0\},\quad \{0,1,0\},\quad \{0,2,0\},\quad \{0,0,1\}, \\ \{0,3,0\},\quad \{0,1,1\},\quad \{0,4,0\},\quad \{0,2,1\}, \\ \{0,0,2\} \end{array} \tag{8}$$

[問題 2.] 粒子に区別がある古典力学に対応する統計に**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

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

となるので、分配関数は、

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

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、

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

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、$z = \exp[\mu/k_{\mathrm{B}}T]$)、

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

指数関数の展開公式を使って

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

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。