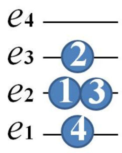
統計力学演習　第11回　ボース・フェルミ分布　　2011年7月5日

問題1　[占有数による理想量子気体の状態指定]

相互作用のない多粒子系を考える。1粒子の場合のエネルギー固有状態を $j = 1, 2, 3, \cdots$ とし、状態 j のエネルギー固有値を e_j とする。ここで、エネルギーが低い順に状態の番号付けがなされていて、縮退はないとする ($e_1 < e_2 < e_3 < \cdots$)。

粒子間に相互作用がないので、系全体のエネルギーは個々の粒子のエネルギーの単純な和になる。1番目の粒子が状態 j_1, 2番目の粒子が状態 j_2, $\cdots$, N 番目の粒子が状態 j_N にあるとすると、系全体のエネルギー E は、$E = e_{j_1} + e_{j_2} + \cdots + e_{j_N}$ となる。

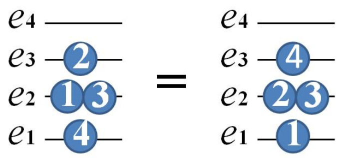
例：$N = 4, \quad (j_1, j_2, j_3, j_4) = (2, 3, 2, 1)$ のとき、$E = e_2 + e_3 + e_2 + e_1 = e_1 + 2e_2 + e_3$.



(1-1) 系の構成粒子が N 個の同種のボソン及びフェルミオンのそれぞれの場合について、基底状態エネルギー E_0 と、第一励起エネルギー E_1 を求めよ。

(1-2) 粒子数を $N = 2$ とし、1粒子固有状態は、$j = 1, 2, 3$ の3状態のみをとるとする。系の構成粒子が (a) 区別可能な粒子 (b) 同種のボソン (c) 同種のフェルミオンのそれぞれの場合について、系のとりうる微視的状態数 W を求めよ。

系が同種粒子からなるとすると粒子が区別できなくなり、粒子にどのように番号付けしても同じ状態を表すので、$j_1 \le j_2 \le j_3 \le \cdots$ が成り立つように適当に粒子の番号を入れ替えることができる。上の例で言うと、$(j_1, j_2, j_3, j_4) = (2, 3, 2, 1)$ と、これを小さい順に並び変えた $(j_1, j_2, j_3, j_4) = (1, 2, 2, 3)$ は同じ状態を表す。



このことから、系の状態を表す変数として $(j_1, j_2, \cdots, j_N)$ の代わりに、占有数 $(n_1, n_2, n_3, \cdots)$ を使ってもよいことがわかる。ここで、n_j は、j 番目の状態をとる粒子数である。上の例で言うと、$(n_1, n_2, n_3, n_4) = (1, 2, 1, 0)$ である。容易にわかるように、$(j_1, j_2, \cdots, j_N)$ と $(n_1, n_2, n_3, \cdots)$ は一対一対応している。

(1-3) $(j_1, j_2, \cdots, j_7) = (1, 2, 2, 4, 5, 5, 5)$ に対応する $(n_1, n_2, n_3, \cdots)$ を求めよ。また、$(n_1, n_2, n_3, \cdots) = (2, 0, 1, 3, 0, 0, 0, \cdots)$ に対応する $(j_1, j_2, j_3, \cdots, j_N)$ を求めよ。

(1-4) 系の全エネルギー E および全粒子数 N を n_j を用いて表せ。

$\boxed{\text{問題 2}}$ [ボース分布関数・フェルミ分布関数]

前の問題により、同種粒子からなる理想量子気体の状態は、占有数の組 $(n_1, n_2, n_3, \cdots)$ によって一意に指定されることがわかる。よって、大分配関数 Z_G を考えると、系の状態に関する和は占有数 $(n_1, n_2, n_3, \cdots)$ に関する和になり、

$$Z_G = \sum_{(n_1, n_2, \cdots)} e^{-\beta[E(n_1, n_2, \cdots) - \mu N(n_1, n_2, \cdots)]} \tag{1}$$

と書ける。ここで、$E(n_1, n_2, \cdots)$, $N(n_1, n_2, \cdots)$ は状態 $(n_1, n_2, \cdots)$ における全エネルギーと全粒子数である。

(2-1) 全問 (1-4) の結果を使うと、大分配関数 Z_G は、

$$Z_G = \sum_{(n_1, n_2, \cdots)} \prod_{j=1}^{\infty} e^{-\beta(e_j - \mu) n_j} \tag{2}$$

と書けることを示せ。

(2-2) ボソンは一つの状態 j を占める粒子数に制限はないので、$\displaystyle\sum_{n_j} = \sum_{n_j=0}^{\infty}$ となり、フェルミオンは一つの状態 j をふたつの粒子が占めることはできないので $\displaystyle\sum_{n_j} = \sum_{n_j=0}^{1}$ となる。各占有数 $n_1, n_2, \cdots$ に関する和を独立に実行することにより、

$$Z_G = \prod_{j=1}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{-\beta(e_j - \mu)}} \qquad \text{ボソン} \tag{3}$$

$$Z_G = \prod_{j=1}^{\infty} \left(1 + e^{-\beta(e_j - \mu)}\right) \qquad \text{フェルミオン} \tag{4}$$

を示せ。

(2-3) 状態 j を占める粒子数の平均値を $f_j = \langle n_j \rangle$ とする。

$$f_j = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial e_j} \log Z_G \tag{5}$$

を示せ。

(2-4) 上の式を計算することにより、

$$f_j = \frac{1}{e^{\beta(e_j - \mu)} - 1} \qquad \text{ボース分布関数} \tag{6}$$

$$f_j = \frac{1}{e^{\beta(e_j - \mu)} + 1} \qquad \text{フェルミ分布関数} \tag{7}$$

を示せ。