統計力学演習　第10回　大正準分布・量子統計　　2012年6月26日

問題1 [熱力学の復習]

(1-1) ギブスの自由エネルギー G を、$G = E - ST + pV$ で定義する。$\mathrm{d}E = -p\mathrm{d}V + T\mathrm{d}S + \mu\mathrm{d}N$ より、$\mathrm{d}G = V\mathrm{d}p - S\mathrm{d}T + \mu\mathrm{d}N$ を示せ。

(1-2) ギブスの自由エネルギー G は、圧力 p、温度 T、粒子数 N の関数 $G = G(p, T, N)$ となる。圧力と温度を一定に保ったまま系を x 倍すると、$xG(p, T, N) = G(p, T, xN)$ となる。この両辺を x で微分して $x = 1$ とおくことにより、$G = \mu N$ を示せ。

(1-3) ギブス・デュエムの関係式 $V\mathrm{d}p = S\mathrm{d}T + N\mathrm{d}\mu$ を示せ。

(1-4) 関係式 $\mathrm{d}\left(\dfrac{pV}{T}\right) = N\mathrm{d}\left(\dfrac{\mu}{T}\right) + \dfrac{E}{T^2}\mathrm{d}T + \dfrac{p}{T}\mathrm{d}V$ を示せ。

問題2 [大正準分布]

温度 T の熱浴と接して熱平衡にある、同種粒子からなる系を考える。系は熱浴とエネルギーおよび粒子の交換を行い、系のエネルギーおよび粒子数は微視的に揺らいでいるとする。この系の化学ポテンシャルを μ とする。

系の取りうる全ての微視的状態に $n = 1, 2, 3, \cdots$ と通し番号をつけ、そのときの系のエネルギーを $E_1, E_2, E_3, \cdots,$ 系の粒子数を $N_1, N_2, N_3, \cdots$ とし、それらの実現確率を $p_1, p_2, p_3, \cdots$ とする。

束縛条件 $\displaystyle\sum_n p_n = 1, \sum_n E_n p_n = E, \sum_n N_n p_n = N$ のもとで、$\displaystyle\overline{S}(p_1, p_2, \cdots) = -\sum_n p_n \log p_n$ を最大にする条件から、大正準分布 $p_n = \dfrac{e^{-\beta(E_n - \mu N_n)}}{Z_G}$ $\left(Z_G = \displaystyle\sum_n e^{-\beta(E_n - \mu N_n)}\right)$ を導く。

(2-1) $\displaystyle g_1 = \sum_n p_n - 1,\ g_2 = \sum_n E_n p_n - E,\ g_3 = \sum_n N_n p_n - N$ とし、$h = \overline{S} - \alpha g_1 - \beta g_2 - \gamma g_3$ とする。h が極値をとる条件 $\dfrac{\partial h}{\partial p_n} = 0$ より、$p_n = \dfrac{e^{-\beta E_n} e^{-\gamma N_n}}{Z_G}$ $(Z_G = \sum_n e^{-\beta E_n} e^{-\gamma N_n})$ を示せ。

(2-2) エネルギーと粒子の期待値 E, N が大分配関数 Z_G の対数微分によって $E = -\dfrac{\partial}{\partial \beta} \log Z_G$, $N = -\dfrac{\partial}{\partial \gamma} \log Z_G$ と表されることを示せ。

(2-3) このことから、$\mathrm{d}(\log Z_G) = -E\mathrm{d}\beta - N\mathrm{d}\gamma$ がわかる。体積一定の場合 $(\mathrm{d}V = 0)$ の問題 (1-4) の式と比較することにより、$k_B T \log Z_G = pV$ および $\gamma = -\beta\mu$ を示せ。

(2-4) $p_n = \dfrac{e^{-\beta(E_n - \mu N_n)}}{Z_G}$ $\left(Z_G = \displaystyle\sum_n e^{-\beta(E_n - \mu N_n)}\right)$ を示せ。

問題 3 [ボソン・フェルミオン]

同種の（区別できない）2 粒子からなる系を考える。これら 2 粒子に（区別することはできないが、計算の便宜上）1, 2 と名前を付け、それぞれの位置座標を $\vec{r}_1, \vec{r}_2$ とする。系の波動関数を $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ とする。

量子力学の原理によると、同種の粒子は区別することができないので、粒子の名前を入れ替えても状態は変わらない。二つの波動関数が同じ状態を表すとすると、それらは比例関係にある。名前を入れ替えた波動関数は $\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ となるので、比例定数を α として $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \alpha\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ と書ける。

(3-1) $\alpha^2 = 1$ を示すことにより、$\alpha = 1, -1$ を示せ。

このことから、自然界の粒子は α の二つの値に対応して二つのグループに分けられることが分かる。$\alpha = 1$ に対応する粒子をボソン、$\alpha = -1$ に対応する粒子をフェルミオンと呼ぶ。

(3-2) 2 粒子間に相互作用がないとすると、2 粒子系の波動関数は 1 粒子波動関数の積で表される。2 粒子のそれぞれが、波動関数 ϕ_j, ϕ_k で記述される 1 粒子固有状態 j, k をとるとすると、この 2 粒子系の波動関数は $\phi_j(\vec{r}_1)\phi_k(\vec{r}_2)$ と $\phi_j(\vec{r}_2)\phi_k(\vec{r}_1)$ の重ね合わせで表される。このとき、2 粒子がボソン、フェルミオンの場合の波動関数はそれぞれ

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \propto \phi_j(\vec{r}_1)\phi_k(\vec{r}_2) + \phi_j(\vec{r}_2)\phi_k(\vec{r}_1) \qquad \text{Boson} \tag{1}$$

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \propto \phi_j(\vec{r}_1)\phi_k(\vec{r}_2) - \phi_j(\vec{r}_2)\phi_k(\vec{r}_1) \qquad \text{Fermion} \tag{2}$$

と書けることを示せ。

(3-3) フェルミオンの場合、2 粒子が同一の状態を占めることはできないこと（パウリの排他原理）を示せ。

(3-4) 1 粒子エネルギー固有状態が $j = 1, 2$ だけの 2 準位系を考え、それらのエネルギー固有値を ϵ_1, ϵ_2 とする。2 粒子が相互作用をしない同種のボソン、フェルミオンの場合の分配関数を計算せよ。