

統計力学の基礎

pp.74 ~ pp.80

電子 $\rightarrow$ フェルミ粒子 フェルミ分布に従う
 光子 $\rightarrow$ ボース粒子 ボース分布に従う

フェルミ粒子とボース粒子

フェルミ粒子

N 個の粒子に対して、それぞれの座標 $r_1 \sim r_N$ を考えると、
 それに対する波動関数は $\psi(r_1, r_2, \dots, r_j, \dots, r_N)$ と書ける

このような波動関数に対し、ある2個 i と j の座標を入れかえたとき
 $\psi(\dots, r_i, \dots, r_j, \dots) = -\psi(\dots, r_j, \dots, r_i, \dots)$ となる粒子がある。

それをフェルミ粒子といい、このような性質を反称性という

もし位置を入れ替えたときに符号が変わらないとすると、
 波動関数は等しく、入れ替え元2つも同座標にあることになる

$\Rightarrow$ 完全に同じ状態の粒子が2つあることになる。
 なので電子がそうになってしまうとパウリの排他律に反するので、

電子はフェルミ粒子である。

ボース粒子

逆に $\psi(\dots, r_i, \dots, r_j, \dots) = \psi(\dots, r_j, \dots, r_i, \dots)$ となる粒子もあり、
 それをボース粒子といい、波動関数がこのような性質を対称性という

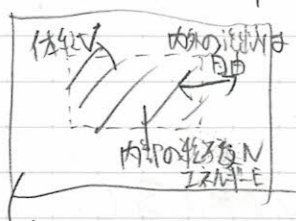
ボース粒子は上記の通り完全に同じ状態の粒子が2つあることを許容する
 エネルギーである光子は重複していても問題ないので、

光子はボース粒子である

フェルミ粒子とボース粒子でスピンの値が変わる

$$\begin{cases} \text{フェルミ粒子} : S = \frac{1}{2} \\ \text{ボース粒子} : S = 1 \end{cases}$$

グランドカノニカル 標準正規分布



系全体で温度 T
化学ポテンシャル μ

グランドカノニカル分布: ある変数 X に対して確率 P が

$$P(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{X^2}{2}}$$

これを左上の図のような熱力学系に落としこくと、

$$P(E, N) = \frac{1}{\Xi(T, \mu)} e^{-\frac{E - \mu N}{k_B T}}$$

という形になる。(k_B : ボルツマン定数)

$\Xi(T, \mu)$: 大分配関数、 P の正規化のための関数 ($\sum P = 1$ になる)

系内の粒子 N 個の状態をベクトル $n = (n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_N)$ で表すとして、

フェルミ粒子は $n_i = 0 / 1$ のどちらか
ボース粒子は $n_i = 0, 1, 2, \dots$ と 0 が自然数

ところで、粒子数は全部で N と決まっているので $N = \sum_{i=1}^{\infty} n_i$

また、粒子ごとのエネルギー ϵ_i として、 $E = \sum_{i=1}^{\infty} \epsilon_i n_i$

系に含まれる粒子の総数が入っている確率は、(天気に $i=1 \sim N$ で打ち切ってはならず、)

$$P = \frac{1}{\Xi(T, \mu)} \sum e^{-\frac{1}{k_B T} \sum_{i=1}^{\infty} (\epsilon_i - \mu) n_i}$$

と、ある粒子に対して総和をとったもの

$\Rightarrow \sum P = 1$ とするため、大分配関数は

$$\Xi(T, \mu) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum e^{-\frac{1}{k_B T} \sum_{i=1}^{\infty} (\epsilon_i - \mu) n_i} = \sum_{n_1} e^{-\frac{(\epsilon_1 - \mu) n_1}{k_B T}} \sum_{n_2} e^{-\frac{(\epsilon_2 - \mu) n_2}{k_B T}} \dots$$

フェルミ粒子の場合、 $n_i = 0 / 1$ なので、

$$\Xi(T, \mu) = (1 + e^{-\frac{\epsilon_1 - \mu}{k_B T}}) (1 + e^{-\frac{\epsilon_2 - \mu}{k_B T}}) \dots = \prod_{i=1}^{\infty} (1 + e^{-\frac{\epsilon_i - \mu}{k_B T}})$$

ボース粒子の場合、 $n_i = 0, 1, 2, \dots$ なので、

$$\Xi(T, \mu) = \left(\frac{1}{1 - e^{-\frac{\epsilon_1 - \mu}{k_B T}}} \right) \left(\frac{1}{1 - e^{-\frac{\epsilon_2 - \mu}{k_B T}}} \right) \dots = \prod_{i=1}^{\infty} \frac{1}{1 - e^{-\frac{\epsilon_i - \mu}{k_B T}}}$$

($1 + e^{-\frac{\epsilon_1 - \mu}{k_B T}} + e^{-\frac{\epsilon_1 - \mu}{k_B T}} + \dots = \frac{1}{1 - e^{-\frac{\epsilon_1 - \mu}{k_B T}}}$)

これらを展開すると、 j 番目の状態を占有する粒子数の期待値は

フェルミ粒子の場合 $\langle n_j \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_j - \mu}{k_B T}} + 1}$

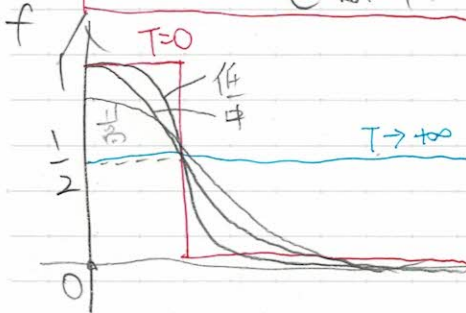
ボース粒子の場合 $\langle n_j \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_j - \mu}{k_B T}} - 1}$

フェルミ分布

フェルミ粒子の期待値から、フェルミ粒子があるエネルギー ϵ の状態を占有する確率は

$$f(\epsilon, T) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}} + 1}$$

フェルミ分布またはフェルミ-ディラック分布で表せる。



$T=0$ のとき、フェルミ分布は

$$f = \begin{cases} 1 & (\epsilon < \mu) \\ 0 & (\epsilon > \mu) \end{cases}$$

と極端な形となる。

T が大きくなるにつれて分布はゆるやかになり、
仮に $T \rightarrow \infty$ とすると常に $1/2$ となる。

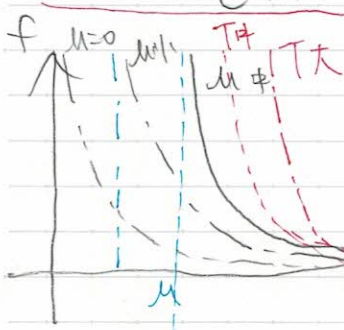
高温になればなるほど、高エネルギーにある状態を占有する確率が減る。

ボース分布

同様に、ボース粒子があるエネルギー ϵ の状態を占有する粒子数は

$$f(\epsilon, T) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}} - 1}$$

ボース分布またはボース-アインシュタイン分布で表せる。



$\epsilon = \mu$ となった時点で f が発散するのと、
確率が負をとることはありえないので、
 f は $\epsilon > \mu$ の領域でのみ定義される。

化学ポテンシャル μ に近いほど存在数は高く、
高エネルギーにあるほど存在数は減っていく。

ところで、 $(\epsilon - \mu) \gg k_B T$ の近似をしたとき、フェルミ分布もボース分布も

$$f = e^{-\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}}$$

と変形できる。これを特にボルツマン分布という。