統計力学演習問題解答 (13)

[1]

相互作用のない系のハミルトニアンは以下のように与えられる．

$$\hat{H}_0 = \sum_{j=1}^{N} \left[\frac{\boldsymbol{p}_j^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}_j) \right]$$

このハミルトニアンは粒子の添字を入れ替える任意の置換演算子

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & N \\ p_1 & p_2 & \cdots & p_N \end{pmatrix}$$

に対して可換である．

$$\hat{H}_0 \hat{P} = \hat{P} \hat{H}_0$$

例えば $N = 2$ の 2 粒子系については，以下のように示すことができる．

$$\hat{P}_{12} \hat{H}_0 \hat{P}_{12}^{-1} = \left[\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_2^2}{2m} + \frac{\hat{\boldsymbol{p}}_1^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}_2) + U(\boldsymbol{r}_1) \right] \hat{P}_{12} \hat{P}_{12}^{-1} = \hat{H}_0$$

$\hat{P}_{12} = (1\ 2)$ は粒子の添字 $1, 2$ を入れ替える互換である．任意の置換演算子についてもハミルトニアンにおける和の順序を変えるのみであり，ハミルトニアンそのものは不変に保つ．よって，$\hat{P}$ と $\hat{H}_0$ は同時対角化可能である．

そこで，まず，互換 $\hat{P}_{12}$ の固有値を求める．$\hat{P}_{12}^2$ は明らかに恒等演算子であるから，$\hat{P}_{12}$ の固有値を σ とすると，$\sigma^2 = 1$ となり，$\sigma = \pm 1$ が示される．このことと,「任意の置換が互換の積として表すことができ，その互換の数の偶奇はその置換に固有である」という定理を用いることによって，$\hat{P}$ の固有値 σ^P は

$$\sigma^P = \begin{cases} 1 & \text{：偶置換} \\ \sigma & \text{：奇置換} \end{cases}$$

となることが結論づけられる．

$\hat{P}$ と $\hat{H}_0$ は同時対角化可能であることから，$\hat{P}$ と $\hat{H}_0$ の同時固有関数となるような波動関数 $\Phi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)$ を考える．

$$\hat{P} \Phi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) = \sigma^P \Phi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)$$
$$\hat{H}_0 \Phi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) = E_\nu \Phi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)$$

ここで，E_ν は N 粒子系の量子数が ν であるときの全エネルギーである．$\Phi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)$ が $\hat{P}$ と $\hat{H}_0$ の同時固有関数であるためには，一粒子波動関数の積で表し，さらに置換対称性を持つ形にする必要がある．

$$\Phi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) = \frac{A_N}{N!} \sum_{\hat{P}} \sigma^P \langle x_1 | k_{p_1} \rangle \langle x_2 | k_{p_2} \rangle \cdots \langle x_N | k_{p_N} \rangle$$

ただし，一粒子ハミルトニアンの固有値問題

$$\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + U(\boldsymbol{r}) \right] \varphi_k(x) = \varepsilon_k \varphi_k(x)$$

が解けたとし，その固有関数 $\varphi_k(x) = \langle k|x\rangle$ が完全規格直交性を満たすものと仮定する．$\Phi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)$ が $\hat{H}_0$ の固有関数であることは，以下のように示すことができる．

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_0\Phi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) &= \frac{A_N}{N!}\sum_{\hat{P}}\sigma^P(\varepsilon_{k_{p_1}} + \varepsilon_{k_{p_2}} + \cdots + \varepsilon_{k_{p_N}})\langle x_1|k_{p_1}\rangle\langle x_2|k_{p_2}\rangle\cdots\langle x_N|k_{p_N}\rangle \\
&= \frac{A_N}{N!}\sum_{\hat{P}}\sigma^P(\varepsilon_{k_1} + \varepsilon_{k_2} + \cdots + \varepsilon_{k_N})\langle x_1|k_{p_1}\rangle\langle x_2|k_{p_2}\rangle\cdots\langle x_N|k_{p_N}\rangle \\
&= (\varepsilon_{k_1} + \varepsilon_{k_2} + \cdots + \varepsilon_{k_N})\Phi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)
\end{aligned}
$$

よって，全エネルギー E_ν は

$$
E_\nu = \sum_{j=1}^{N}\varepsilon_{k_j}
$$

のように一粒子エネルギー ε_{k_j} の和で正しく表される．また，$\Phi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)$ が $\hat{P}$ の固有関数であることは，例えば $N = 3$ における波動関数 $\Phi_\nu(x_1, x_2, x_3)$ が，次の二つの循環置換 $\hat{P}_a = (1\ 3)$（奇置換），$\hat{P}_b = (1\ 3\ 2)$（偶置換）についての固有関数となっていることを，置換を直接波動関数に作用させることによって

$$
\hat{P}_a\Phi_\nu(x_1, x_2, x_3) = \sigma\Phi_\nu(x_1, x_2, x_3), \quad \hat{P}_b\Phi_\nu(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \Phi_\nu(x_1, x_2, x_3)
$$

となることが確認できる．

今考えている系はフェルミ粒子系 $(\sigma = -1)$ であるから，波動関数は

$$
\begin{aligned}
\Phi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) &= \frac{A_N}{N!}\sum_{\hat{P}}(-1)^P\langle x_1|k_{p_1}\rangle\langle x_2|k_{p_2}\rangle\cdots\langle x_N|k_{p_N}\rangle \\
&= \frac{A_N}{N!}\det\begin{bmatrix}\langle x_1|k_1\rangle & \cdots & \langle x_1|k_N\rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle x_N|k_1\rangle & \cdots & \langle x_N|k_N\rangle\end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

と表すことができる．フェルミ粒子系の規格化定数 A_N は，k_j が全て異なることに注意すると，以下のように計算できる．

$$
\begin{aligned}
1 &= \int dx_1\cdots\int dx_N|\Phi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N)|^2 \\
&= \frac{(A_N)^2}{(N!)^2}\sum_{\hat{P}}\sum_{\hat{P}'}(-1)^{P+P'}\prod_{j=1}^{N}\langle k_{p'_j}|k_{p_j}\rangle \\
&= \frac{(A_N)^2}{(N!)^2}\sum_{\hat{P}}\sum_{\hat{P}'}(-1)^{P+P'}\prod_{j=1}^{N}\delta_{p'_jp_j} \\
&= \frac{(A_N)^2}{(N!)^2}\sum_{\hat{P}}1 \\
&= \frac{(A_N)^2}{N!}
\end{aligned}
$$

よって，$A_N = \sqrt{N!}$ と求まり，相互作用のない N 個の同種フェルミ粒子系の波動関数が

$$
\Phi_\nu(x_1, x_2, \cdots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\det\begin{bmatrix}\langle x_1|k_1\rangle & \cdots & \langle x_1|k_N\rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle x_N|k_1\rangle & \cdots & \langle x_N|k_N\rangle\end{bmatrix}
$$

と書けることが示された．

[2]

(a) $E = \sum_k \varepsilon_k n_k, \quad N = \sum_k n_k$.

(b) フェルミ統計は置換に対して反対称 (＝奇置換で波動関数が符号を変える)，ボーズ統計は置換に対して対称 (＝奇置換でも波動関数は符号を変えない).

(c) 粒子のスピンの大きさを s とすると，$s = 1/2, 3/2, \cdots$ の同種粒子系がフェルミ統計に，$s = 0, 1, \cdots$ の同種粒子系がボーズ統計に従う.

(d) フェルミ統計は $n_k = 0, 1$，ボーズ統計は $n_k = 0, 1, 2, 3, \cdots$.