注意これは講義ノートではありません。計算のややこしいところだけをメモしたものです。

２-A 大分配関数と分配関数

定義：$Z_{\mathrm{G}} = \sum_{s} e^{-\beta(E_s - \mu N_s)}$ ；s は状態の番号

Z_N は粒子数 N の
カノニカル分配関数

E, N の「値」に番号を付けることにすると、

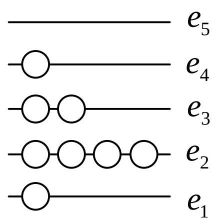
$$= \sum_{i,j} e^{-\beta(E_i - \mu N_j)} = \sum_{i,j} e^{\beta\mu N_j} e^{-\beta E_i} = \sum_{j} e^{\beta\mu N_j} \left(\sum_{i} e^{-\beta E_i} \right) = \sum_{j} e^{\beta\mu N_j} Z_{N_j} = \sum_{N} e^{\beta\mu N} Z_N$$

２-B 粒子数表示――量子統計のエッセンス

「エネルギーe_{i}を持つ粒子が n_{i} 個」というふうに状態を表す。

⇒ 粒子は全く区別しない。∴ $E = \sum_i n_i e_i$ ， $N = \sum_i n_i$

c.f. これまでの表し方「i 番目の粒子のエネルギーが e_{i} 」



状態の数 W=5 の例
$(n_1, n_2, n_3, n_4, n_5)$
$= (1, 4, 2, 1, 0)$

２-C 粒子数表示における大分配関数

$$Z_{\mathrm{G}} = \sum_{i} e^{-\beta(E_i - \mu N_i)} = \sum_{N=0,1,2,\cdots\infty} e^{\beta\mu N} Z_N = \sum_{\substack{N= \\ 0,1,2,\cdots\infty}} e^{\beta\mu N} \sum_{\substack{n_0+n_1+n_2+\cdots+n_W \\ =N}} e^{-\beta\,(n_0 e_0 + n_1 e_1 + n_2 e_2 + \cdots + n_W)}$$

二重和の取り方：N を固定して、その中で全ての組み合わせ$(n_0, n_1, n_2, \cdots)$で和を取る

⇒ 結局、全てのn_i は取り得る値全てを取るはず。

よって、$\sum_{N=0,\,1,\,2\cdots} \sum_{n_0+n_1+n_2+\cdots+n_W=N} = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \sum_{n_3} \cdots \sum_{n_W}$ として良い。

但し、W は状態の数。二準位系なら 2、調和振動子なら∞。

$$\therefore Z_{\mathrm{G}} = \sum_{n_1} e^{-\beta(e_1-\mu)n_1} \sum_{n_2} e^{-\beta(e_2-\mu)n_2} \sum_{n_3} e^{-\beta(e_3-\mu)n_3} \cdots \sum_{n_W} e^{-\beta(e_W-\mu)n_W}$$

・フェルミオン：n_i=0 ~ 1

$$Z_{\mathrm{G}} = \left(1 + e^{-\beta(e_1-\mu)}\right)\left(1 + e^{-\beta(e_2-\mu)}\right) \cdots \left(1 + e^{-\beta(e_W-\mu)}\right)$$

・ボソン：n_i=0 ~ ∞

$$Z_{\mathrm{G}} = \left(1 + e^{-\beta(e_1-\mu)} + e^{-2\beta(e_1-\mu)} + \cdots\right)\left(1 + e^{-\beta(e_2-\mu)} + e^{-2\beta(e_2-\mu)} + \cdots\right) \cdots \left(1 + e^{-\beta(e_2-\mu)} + e^{-\beta(e_W-\mu)} + \cdots\right)$$
$$= \left(1 + e^{-\beta(e_1-\mu)}\right)^{-1} \left(1 + e^{-\beta(e_2-\mu)}\right)^{-1} \cdots \left(1 + e^{-\beta(e_W-\mu)}\right)^{-1}$$

２-D 平均の粒子数――フェルミ(Fermi)分布関数とボース(Bose)分布関数

グランドカノニカル分布における全エネルギーE_s，全粒子数N_s の状態 s の出現確率

$$P_s = e^{-\beta(E_s - \mu N_s)} / Z_G$$

状態 s の粒子数表示を$(n_1, n_2, n_3, \cdots)$とすると、

$$P_s = P(n_1, n_2, n_3, \cdots) = e^{-\beta(e_1-\mu)n_1} e^{-\beta(e_2-\mu)n_2} e^{-\beta(e_3-\mu)n_3} \cdots / Z_G$$

よって、i 番目のエネルギー準位の占有数n_i の平均$\langle n_i \rangle$は、

$$\langle n_i \rangle = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \cdots \sum_{n_W} P(n_1, n_2, \cdots, n_W) n_i = \frac{\sum_{n_1} \sum_{n_2} \cdots \sum_{n_i} \cdots \sum_{n_W} e^{-\beta(e_1-\mu)n_1} e^{-\beta(e_2-\mu)n_2} \cdots e^{-\beta(e_W-\mu)n_W} n_i}{\sum_{n_1} \sum_{n_2} \cdots \sum_{n_W} e^{-\beta(e_1-\mu)n_1} e^{-\beta(e_2-\mu)n_2} \cdots e^{-\beta(e_W-\mu)n_W}}$$

$$= \frac{\sum_{n_i} e^{-\beta(e_i-\mu)n_i} n_i}{\sum_{n_i} e^{-\beta(e_i-\mu)n_i}} \quad \text{和の範囲} \begin{cases} \text{Fermion} & n_i = 0, 1 \\ \text{Boson} & n_i = 0, 1, 2 \cdots \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \left(e^{\beta(e_i-\mu)} + 1\right)^{-1} & \text{Fermion} \\ \left(e^{\beta(e_i-\mu)} - 1\right)^{-1} & \text{Boson} \end{cases}$$

2-E おまけ— 統計力学で扱うこと

(ア) 恒星の色にはなぜ赤や白、青白があるのか

(イ) 物体を熱するとなぜ、まず赤色に、ついで白色に光るのか

(ウ) 金属中の自由電子はどうやって電気を運ぶのか

(エ) 金属中の自由電子は理想気体と同じように自由に動いているのか

(オ) なぜ磁石(強磁性体)は熱すると磁石でなくなる(常磁性体)のか

(カ) 磁石の強さ(磁化)は温度によってどう変化するか

(キ) 物質はどうやって熱を貯えるのか(比熱)

(ク) 比熱は温度によって変わるのか

(ケ) 量子力学で習ったようにエネルギー準位が離散的だと統計力学は変わるか

(コ) フェルミ粒子(個々に識別できない。同じ状態を取らない)の振る舞いは？

(サ) ボース粒子(個々に識別できない。同じ状態を取る)の振る舞いは？

(シ) 古典粒子(個々にどれがどれか識別でき、同じ状態を取る)の振る舞いは？

(ス) 固体の中にある「粒子もどき」とは(フォノン、マグノン、etc.)？

(セ) ヘリウムはなぜ大気圧下ではいくら冷やしても液体(量子液体)なのか？

(ソ) スピンのエントロピー($2S+1$)は絶対零度でどうなるの？

(タ) なぜ相互作用があると難しくなるのか

(チ) 有限温度 $T>0$ で多数の粒子はどういう状態をとるか