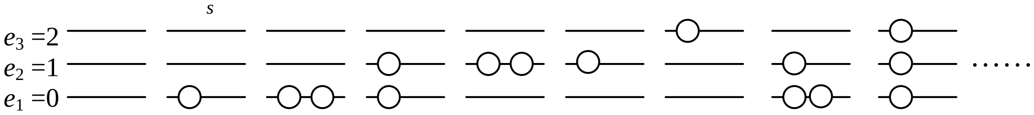
注意 これは講義ノートではありません。計算のややこしいところだけをメモしたものです。

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」に付けた番号



s =1	2	3	4	5	6	7	8	9	……	(順番のつけ方は適当)
E =0	0	0	1	2	1	2	1	3	……	
N =0	1	2	2	2	1	1	3	3	……	

E, N の「値」に番号を付けることにすると、

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

（Z_N は粒子数 N のカノニカル分配関数）

（つまり、 $E=0$ を E_0、$E=1$ を E_1、$N=0$ を N_0 などと番号を付けた）

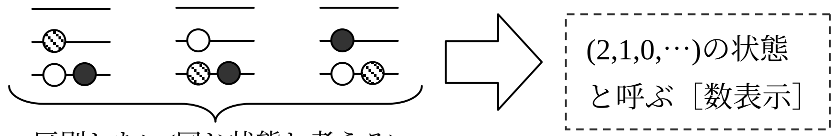
2-B 粒子数表示——量子統計のエッセンス

「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。

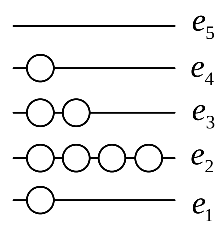
⇒ 個々の粒子は全く区別しない。

⇒ n_{i} を状態 e_{i} の占有数 と呼ぶ

⇔ これまでの表し方「i 番目の粒子のエネルギーが e_{i}」



区別しない(同じ状態と考える)



もっと粒子数が多い「状態」の例(W=5, N=8)

$\left(n_1, n_2, n_3, n_4, n_5 \cdots\right) = \left(1, 4, 2, 1, 0 \cdots\right)$

2-C 粒子数表示における大分配関数

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

但し、$E = \sum_i n_i e_i$, $N = \sum_i n_i$

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$(n_1, n_2, \cdots)$で和を取る

その後で、N について和を取る

⇒ 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。扱う問題によって異なる。例）二準位系＝2、調和振動子＝∞。

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

世の中に存在する二種類の粒子について具体的に Z_{G} を計算してみる

・フェルミオンの場合：占有数 $n_i = 0 \sim 1$

［パウリの排他律のために、同じ状態を一つの粒子しか占有できない］

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

・ボソンの場合：占有数$n_i = 0 \sim \infty$

［パウリの排他律が効かないので、同じ状態をいくつもの粒子が占有できる］

※注意―識別不能とした古典的な粒子とも性質が異なる。

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

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

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

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

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

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、

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

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

２-E おまけ― 統計力学 II 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) なぜ粒子間に相互作用があると問題が難しくなるのか
(チ) 有限温度 T>0 で多数の粒子はどういう状態をとるか
⇔量子力学では答えられない問題