第14回：統計集団

本日のゴール　：様々な統計集団を理解する

おさらい：
- ・Maxwell-Boltzmann分布

$$N_i \propto e^{-\frac{E_i}{kT}}$$

Newton力学の系

エネルギーで記述

- ・分配関数

$$Z = \sum_j e^{-\frac{E_j}{kT}}$$

正準集団
(Canonical ensemble)
状態の総数

正準 = canon (英) = Kanōn (ギリシア) = 定規

↓

観音菩薩

1.1) 様々な統計集団

1) ミクロカノニカル集団 (micro canonical ensemble)

- エネルギーのやりとり**不可**
- 系内の粒子の数が**一定**
- 状態が V, T で決まる

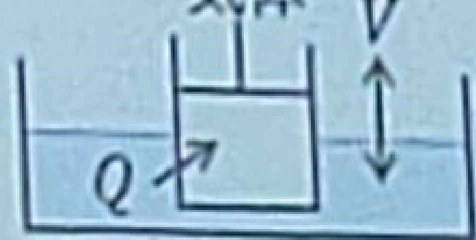
例）先週導いた統計集団（$E = 3\varepsilon_0$）

孤立系

2) カノニカル集団 (canonical ensemble)

- エネルギーのやりとり**可**
- 粒子の数が**一定**
- 温度 T が**一定**

例）ピストン



閉じた系

3) グランドカノニカル集団 (grand canonical ensemble)

- エネルギーのやりとり**可**
- 粒子のやりとりも**可**

例）化学反応

1.2)各集団の分配関数

1) ミクロカノニカル集団

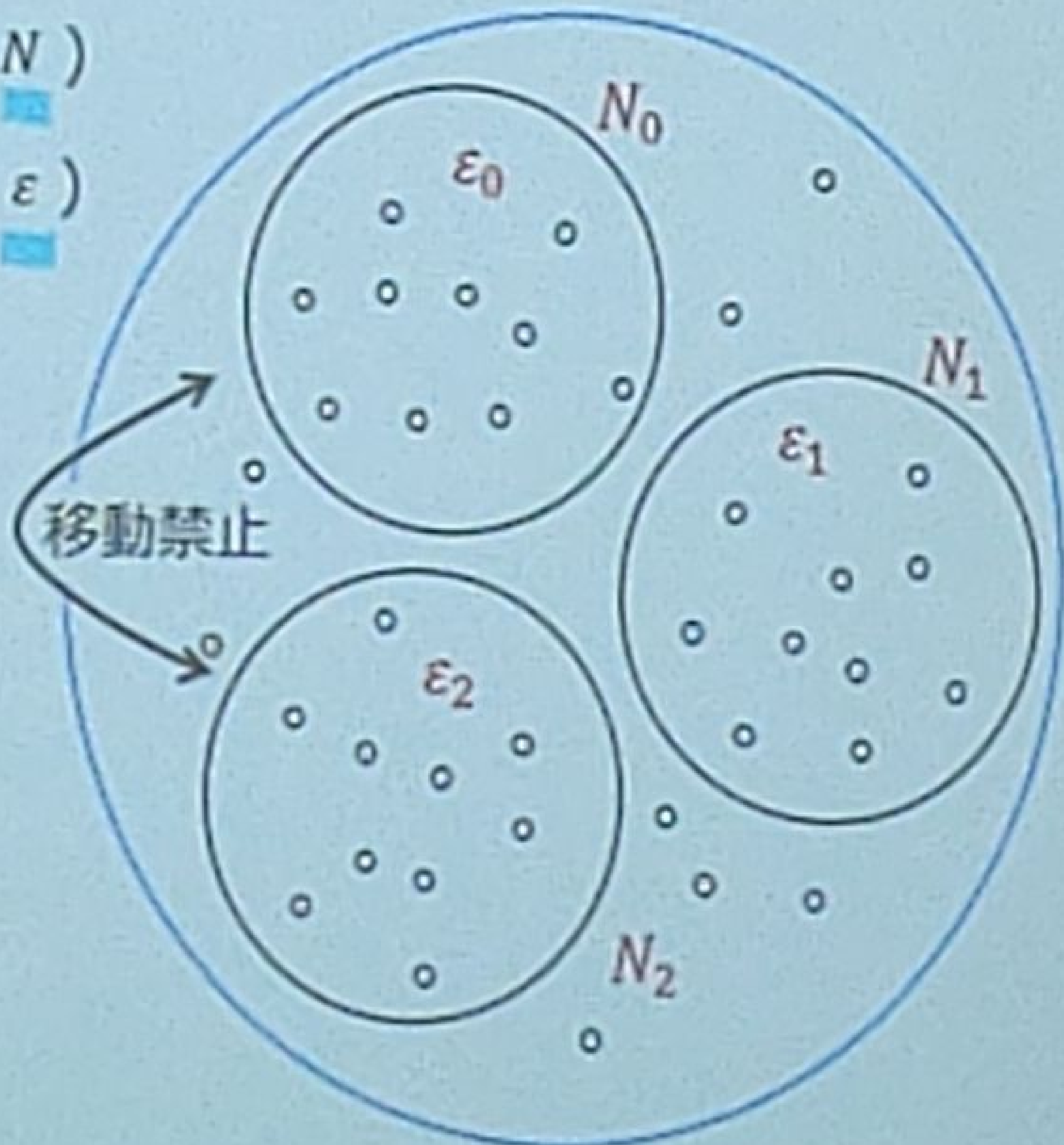
・体系(粒子)の数 ： N_j （合計 N ）

・エネルギー ： ε_j （合計 ε ）

出現確率： $f = \dfrac{e^{-\beta\varepsilon_j}}{Z}$

分配関数： $Z = \sum_j e^{-\beta\varepsilon_j}$

孤立系



合計：個数 N 個 エネルギー ε （一定）

1.2)各集団の分配関数

2) カノニカル集団

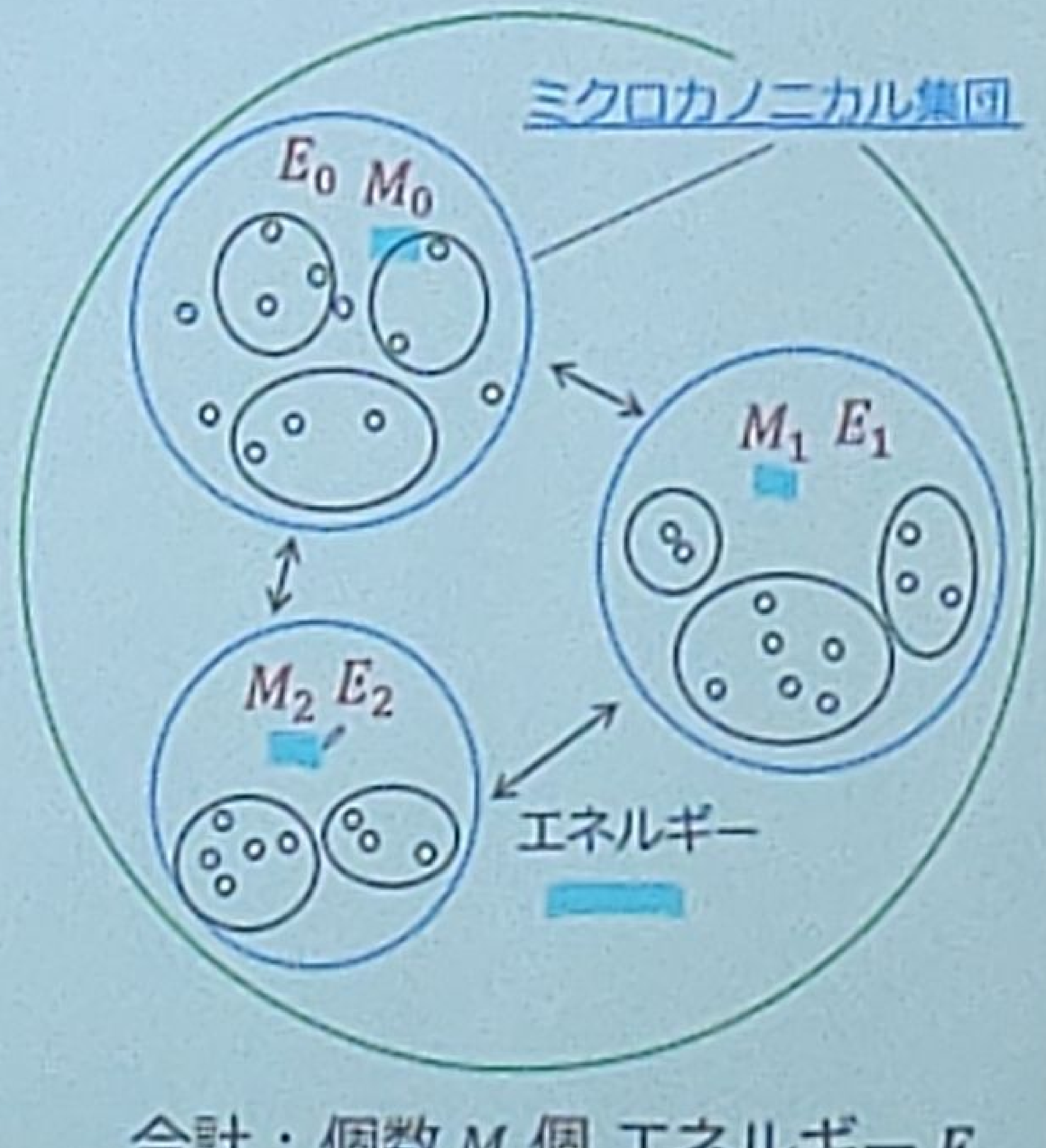
・体系(粒子)の数 ： M_j （合計 M ）

・エネルギー ： E_j （合計 E ）

出現確率： $f = \dfrac{e^{-\beta E_j}}{Z}$

分配関数： $Z = \sum_j e^{-\beta E_j}$

閉じた系



合計：個数 M 個 エネルギー E

1.2)各集団の分配関数

3) グランドカノニカル集団

開いた系

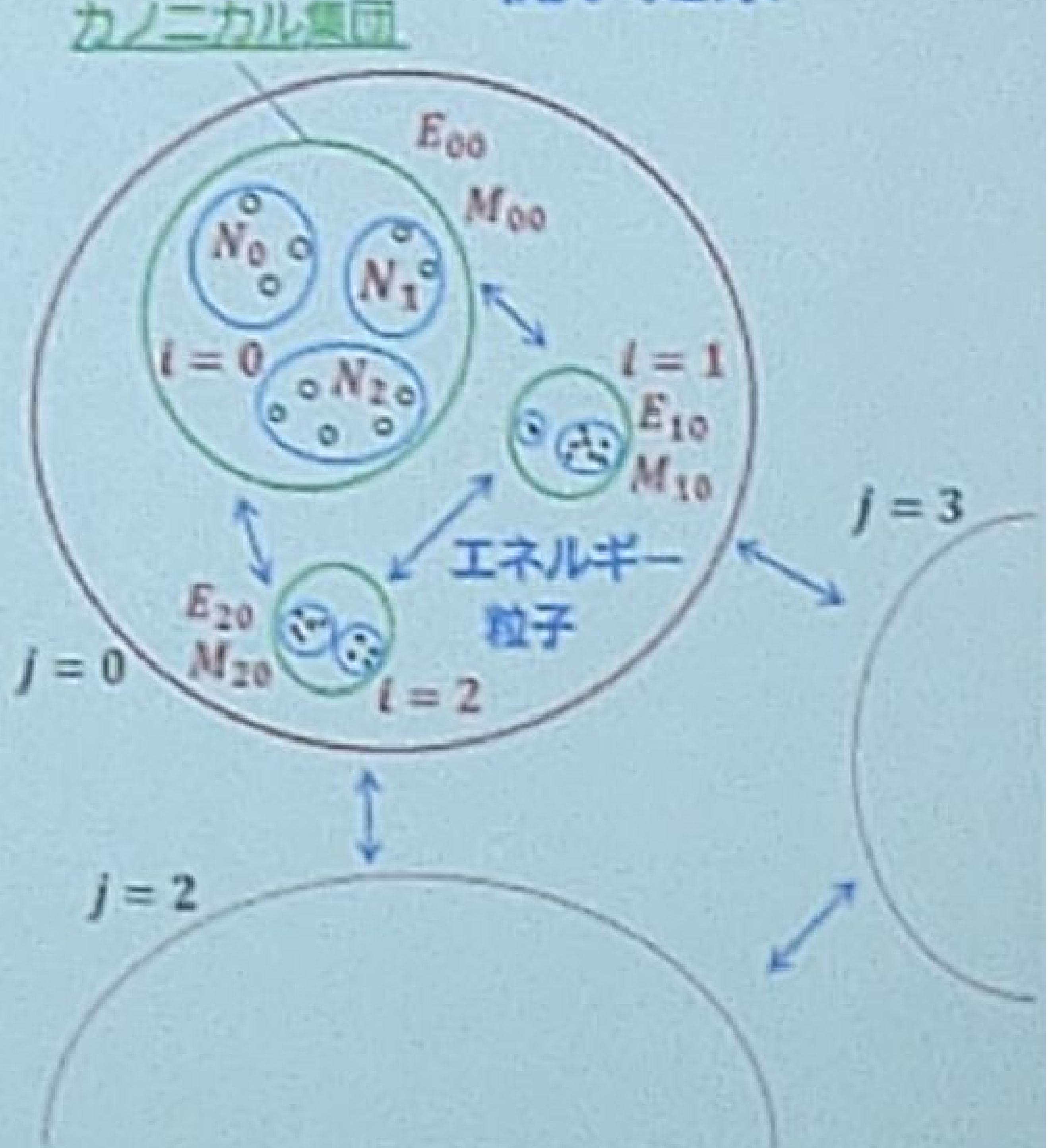
- 粒子の数　：N_i　（合計 N ）
- 体系の数　：M_{ij}　（合計 M ）
- エネルギー　：E_{ij}　（合計 E ）

出現確率：$f = \dfrac{e^{-\beta E_{ij} - \gamma N_i}}{Z}$

分配関数：$Z = \sum_j e^{-\beta E_{ij} - \gamma N_i}$

$\left(\gamma = -\dfrac{M}{kT} \qquad M = \dfrac{G}{N} \right)$

化学ポテンシャル　ギブスエネルギー



合計：個数 M 個 エネルギー E

化学反応まで取り扱える！

2.1) 量子統計

統計力学 → 量子力学へ

気体, 固体, 液体　　光, 電子

Newton力学　　量子力学

- 同じ準位に　一個しか粒子が入らない　“フェルミ粒子(Fermion)”
  (Pauliの排他原理)
- 同じ準位に　何個でも粒子が入れる　“ボーズ粒子(Boson)”

2.2) 量子統計

Fermi (1901-1954)　イタリア人

・Fermi-Dirac 統計を作った　[illegible]

・ノーベル賞(1938)　人工放射性元素

・実験, 理論両方

・フェルミ推定 (概算の達人)

Bose (1894-1974)　インド人

・Bose-Einstein 統計を作った

・超流動, 超伝導 Bose-Einstein凝縮

・理論家

Einstein (1879-1955)　ユダヤ人

・相対性理論 (特殊, 一般)

・ブラウン運動

・光量子仮説, 光電効果 (ノーベル賞 1921)

1905 奇跡の年

[illegible]

2.3) Fermi 統計, Dirac 統計

さて，ここで

・エネルギー　：ε_i

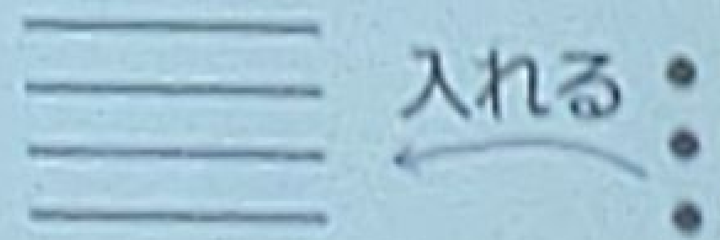
・準位の数　：g_i　とする

・粒子の数　：n_i，

例）

$g = 4$

$n = 3$



Fermi 統計

粒子の入り方

場合の数：$W = \prod_i \dfrac{g_i!}{n_i!\,(g_i - n_i)!} = \dfrac{4!}{3!\,(4-3)!}$　　4通り

Bose 統計

場合の数　$W = \prod_i \dfrac{(g_i + n_i - 1)!}{n_i!\,(g_i - n_i)!} = \dfrac{(4+3-1)!}{3!\,(4-3)!}$　　120通り

2.3) Fermi 統計, Dirac 統計

これを解くと・・（スターリングの公式，ラグランジェの未定

分布関数

Fermion： $f_F = \frac{n_i}{g_i} = \frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_i}+1}$ “フェルミ分布”

Boson ： $f_B = \frac{n_i}{g_i} = \frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_i}-1}$ “ボーズ分布”

$\beta = \frac{1}{kT}$ ：ボルツマン因

2.3) Fermi 統計, Dirac 統計

Fermi 分布, Bose分布をまとめると

$$f = \frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_i} \mp 1}$$

分母の ∓1 を無視すると,

$$\boxed{f = e^{-\alpha-\beta\varepsilon_i}}$$: "Maxwell-Boltzmann 分布"

(ただし, $\beta = \frac{1}{kT}$)

古典力学 — 量子力学

- ·Newton力学
- ·気体, 液体 etc..

- ·Fermion (電子, 陽子)
- ·Boson　(光, 波)

つながった!

2.4) 古典力学と量子統計

1700蒸気機関 → ニューコメン、ワット

状態方程式 → ボイル，シャルル

気体

カルノー	→	第一法則	エントロピー
スターリング	→	第二法則	
クラウジウス	→	第三法則	

↓

分子運動論 → アボガドロ

↓

統計力学，確率論 → マクスウェル，ボルツマン

↓

1900 量子統計，量子力学 → フェルミ，ディラック

ボーズ，アインシュタイン

↓

?

原理追求

|

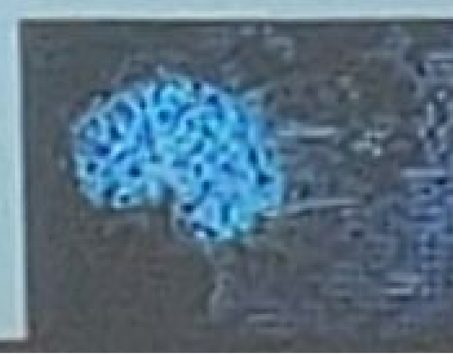
拡張

|

一般化

↓

応用



3.1) 電子物性と量子統計

電子物性 ↓

物質の機能を決定している

超重要！

例）電気伝導，動作速度，　→　次世代デバイス

（金属 / 絶縁体 / 半導体）

電子：Fermi 統計に従う

$$f = \frac{1}{e^{\alpha+\beta\varepsilon_l}+1} = \frac{1}{e^{\alpha+\frac{E_l}{kT}}+1}$$

確率

॥

状態密度（DOS）

エネルギーと温度の関数

電子状態も統計的に扱える

本日の課題

夏休みは何したい？