

6-1

この問題での分配関数は  $Z = (1 + e^{-\beta\varepsilon})^N$  なので大分配関数  $\Xi$  は

$$\begin{aligned}\Xi &= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} (1 + e^{-\beta\varepsilon})^N \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} (e^{\beta\mu} (1 + e^{-\beta\varepsilon}))^N \\ &= \frac{1}{1 - e^{\beta\mu} (1 + e^{-\beta\varepsilon})}\end{aligned}\tag{1}$$

したがってグランドポテンシャル  $\Omega$  は

$$\Omega = \frac{1}{\beta} \log(1 - e^{\beta\mu} (1 + e^{-\beta\varepsilon}))\tag{2}$$

粒子数の期待値  $\langle N \rangle$  は

$$\begin{aligned}\langle N \rangle &= -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \\ &= -\frac{1}{\beta} \frac{-\beta e^{\beta\mu} (1 + e^{-\beta\varepsilon})}{1 - e^{\beta\mu} (1 + e^{-\beta\varepsilon})} \\ &= \frac{e^{\beta\mu} (1 + e^{-\beta\varepsilon})}{1 - e^{\beta\mu} (1 + e^{-\beta\varepsilon})}\end{aligned}\tag{3}$$

これを用いて化学ポテンシャル  $\mu$  は

$$\begin{aligned}\langle N \rangle (1 - e^{\beta\mu} (1 + e^{-\beta\varepsilon})) &= e^{\beta\mu} (1 + e^{-\beta\varepsilon}) \\ e^{\beta\mu} &= \frac{\langle N \rangle}{1 + \langle N \rangle} \frac{1}{1 + e^{-\beta\varepsilon}}\end{aligned}\tag{4}$$

ここで  $\langle N \rangle \gg 1$  とすると

$$\mu = -\frac{1}{\beta} \log(1 + e^{-\beta\varepsilon})\tag{5}$$

またグランドポテンシャルはルジャンドル変換

$$\Omega = F - \mu N\tag{6}$$

によって定義されるので, 自由エネルギー  $F$  は

$$\begin{aligned}
 F &= \Omega + \mu N \\
 &= \frac{1}{\beta} \log(1 - e^{\beta\mu}(1 + e^{-\beta\epsilon})) - \frac{1}{\beta} \log(1 + e^{-\beta\epsilon}) \langle N \rangle \\
 &= -\frac{1}{\beta} (\log \langle N \rangle - \log(e^{\beta\mu}(1 + e^{-\beta\epsilon}))) - \frac{1}{\beta} \langle N \rangle \log(1 + e^{-\beta\epsilon})
 \end{aligned} \tag{7}$$

ここで  $e^{\beta\mu}(1 + e^{-\beta\epsilon}) = 1$  なので

$$F = -\frac{1}{\beta} \log \langle N \rangle - \frac{1}{\beta} \langle N \rangle \log(1 + e^{-\beta\epsilon}) \tag{8}$$

さらに  $F$  は示量性の変数なので  $O(N)$  以下の項を捨てると

$$F = -\frac{1}{\beta} \langle N \rangle \log(1 + e^{-\beta\epsilon}) \tag{9}$$

$$= -k_B T \langle N \rangle \log(1 + e^{-\beta\epsilon}) \tag{10}$$

これはミクロカノニカル及ぼカノニカルアンサンブルで得られた結果と一致する.

## 6-2

この問題での分配関数は  $Z = 1/N!(1/\hbar\omega\beta)^N$  なので大分配関数  $\Xi$  は

$$\begin{aligned}
 \Xi &= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\beta\mu N} \frac{1}{N!} \left( \frac{1}{\hbar\omega\beta} \right)^N \\
 &= \exp \left( \frac{e^{\beta\mu}}{\hbar\omega\beta} \right)
 \end{aligned} \tag{11}$$

ここでテイラー展開の表式を用いた. したがってグランドポテンシャル  $\Omega$  は

$$\begin{aligned}
 \Omega &= -\frac{1}{\beta} \log \Xi \\
 &= -\frac{1}{\beta} \frac{e^{\beta\mu}}{\hbar\omega\beta}
 \end{aligned} \tag{12}$$

粒子数の期待値  $\langle N \rangle$  は

$$\langle N \rangle = -\frac{\partial \Xi}{\partial \mu} = \frac{e^{\beta\mu}}{\hbar\omega\beta} \tag{13}$$

したがって化学ポテンシャル  $\mu$  は

$$\mu = \frac{1}{\beta} \log(\langle N \rangle \hbar\omega\beta) \tag{14}$$

以上から自由エネルギー  $F$  は

$$\begin{aligned} F &= \Omega + \mu N \\ &= -\frac{1}{\beta} \frac{e^{\beta\mu}}{\hbar\omega\beta} + \mu \frac{e^{\beta\mu}}{\hbar\omega\beta} \\ &= \frac{N}{\beta} (\log(N\hbar\omega\beta) - 1) \end{aligned} \tag{15}$$

また同じ問題をカノニカルアンサンブルで考えると

$$\begin{aligned} F &= -\frac{1}{\beta} \log \frac{\left(\frac{1}{\hbar\omega\beta}\right)^N}{N!} \\ &= -\frac{1}{\beta} (\log \frac{1}{\hbar\omega\beta} - N \log N - N) \\ &= \frac{N}{\beta} (\log(N\hbar\omega\beta) - 1) \end{aligned} \tag{16}$$

となり一致する.