

11章

④ $\eta^{\text{H}} \eta - H^{\text{H}} \rho = \rho \eta^{\text{H}}$ 集団 $g_{\text{e}}(T, \nabla, \mu)$

: $T \nabla M$ 級元, η^{H} State & $\eta^{\text{H}} \eta^{\text{H}}$ mixed state

Setup) 着目系: 単純系, $S = S(E \nabla N) + \mu^{\text{H}} \text{ natural val.}$

同種半径 ρ^{H} は $T \nabla$ bath ($\nabla \ll \nabla_{\text{bath}}$) の半径

セイヒツ (∇f_{fix}) .

着目系の micro state は $(E \nabla \lambda)$ で表す.

着目系の $E = E_{\nabla N}$ と定義.

$N \nabla \lambda$ の度数の同時分布を求める. 等重率は

$$P_{N\lambda} = \frac{W_b(E_t - E_{\nabla N}, N_t - N)}{W_t(E_t, N_t)} \propto W_b(E_t - E_{\nabla N}, N_t - N).$$

$$\propto \exp[S_b(E_t - E_{\nabla N}, N_t - N)].$$

$$= \exp[S_b(E_t, N_t) - BE_{\nabla N} - \Pi_N N]$$

$$\propto e^{-\beta(E_{\nabla N} - \mu N)} \quad (\beta = \frac{1}{T}, \Pi_N = -\frac{\mu}{T} \text{ を用意}).$$

規格化: $Z(\beta, \nabla, \mu) := \sum_{N\lambda} e^{-\beta(E_{\nabla N} - \mu N)}$: 大分母

$$P_{N\lambda} = \frac{1}{Z} e^{-\beta(E_{\nabla N} - \mu N)} : \eta^{\text{H}} \eta^{\text{H}} \rho^{\text{H}} \text{ 分布.}$$

• エネルギー密度と粒子密度分布

$$\lim_{T \rightarrow \infty} [P(u, n) \alpha^{t^0 - T} \text{ と頂点}] = [(u, n) \alpha e^{\beta \cdot \bar{U}}]$$

$$\hookrightarrow g_e(T, \nabla, \mu) \text{ は } u_{\nabla N} = \frac{E_{\nabla N}}{\nabla} \text{ が } \eta^{\text{H}}$$

$$(u_{\nabla N}, n) = [(u, n) \alpha e^{\beta \cdot \bar{U}}] + O(\nabla)$$

の集団.

• 已れに元の子完全分離が成り立つ.

$$\mathcal{J}(B, V, \pi_N) := [SCE, V, N] - EB - N\pi_N](B, V, \pi_N).$$

Massieu 因数.

$$= [F(B, V, N) - N\pi_N](B, V, \pi_N)$$

$$(=\mathcal{J}) \quad \Xi = e^{\mathcal{J} + o(V)} F'.$$

$$\mathcal{J}(B, V, \pi_N) = k_B \ln \Xi(\beta, V, \mu) + o(V).$$

等温等压系. $\mathcal{J} \rightarrow k_B \ln \Xi$.

同様の扱いを E からうなす.

$$\mathcal{J}(T, V, \mu) := [E(S, V, N) - ST - \mu N](T, V, \mu).$$

$$= [-T[S - BE - \pi_N N]](T, V, \mu)$$

$$= [F - \mu N](T, V, \mu).$$

$$F' \cdot \mathcal{J}(T, V, \mu) = -k_B T \ln \Xi + o(V). \quad (\text{等温等压系})$$

• 分配因数と大分配因数.

$$\Xi = \sum_{N, \lambda} e^{-\beta(E_\lambda - \mu N)} = \sum_N \sum_{\lambda}^{(V \text{ fix})} e^{-\beta(E_\lambda - \mu N)} = \sum_N e^{\beta \mu N} \sum_\lambda e^{-\beta E_\lambda}$$

$$\therefore \Xi = \sum_N e^{\beta \mu N} Z(\beta, V, N).$$

積分布可: 和 $\sum N = 1$ ($\ll N$) かつ $\sum \Xi = \text{定数}$.

$$\Xi(\beta, V, \mu) = \frac{1}{\Delta N} \int e^{\beta \mu N} Z dN \sim e^{o(V)} \int e^{\beta \mu N} Z dN$$

(Laplace 变形)

• 相互作用ありもする (p>1=1+角2の3)

Setup) 同種粒子、相互作用なし、古典粒子系

3次元状態を固定: $\lambda = ((r_1, p_1), \dots, (r_N, p_N))$

$$E_{\nabla N \lambda} = \sum_{k=1}^N \epsilon(r_k, p_k)$$

$$\Xi = \prod_{k=1}^N \frac{1}{N!} \int_{\nabla r_k \in \nabla} \int \frac{dr_k dp_k}{(2\pi\hbar)^3} \dots \int_{\nabla r_N \in \nabla} \int \frac{dr_N dp_N}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\beta(\frac{1}{k}\epsilon(r_k, p_k) - \mu N)}$$

$$= \prod_{k=1}^N \frac{1}{N!} \left[\int_{\nabla r_k \in \nabla} \int \frac{dr_k dp_k}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\beta(\epsilon(r_k, p_k) - \mu)} \right]^N$$

$= \Xi$

$$\Xi = e^{\mu N} \Xi = e^{\mu N} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{2m\pi}{\beta} \right)^3$$

$$\text{F'1. } \Xi = \prod_{k=1}^N \frac{1}{N!} \left(e^{\mu N} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{2m\pi}{\beta} \right)^3 \right)^N$$

$$= \exp \left[e^{\mu N} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{2m\pi}{\beta} \right)^3 \right]$$

$$V = \alpha^3 N.$$

$$J = -k_B T \ln \Xi = -k_B T \left[e^{\mu N} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{2m\pi}{\beta} \right)^3 \right] + o(V)$$

\Rightarrow Legendre tr. (= F'1)

$$F(T, V, N) = J + \mu N = -k_B T \left[e^{\mu N} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{2m\pi}{\beta} \right)^3 \right] + \mu N$$

$$N = -\frac{\partial J}{\partial \mu} = \beta e^{\mu N} \cdot \underbrace{\left(\frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{2m\pi}{\beta} \right)^3 \right)}_{\propto \alpha} k_B T = \alpha e^{\mu N} \quad \therefore \mu = \frac{1}{\beta} \ln \frac{N}{\alpha}$$

$$\therefore F(T, V, N) = -k_B T \left[\frac{N}{\alpha} \right] + \frac{N}{\beta} \ln \frac{N}{\alpha}$$

$$= -\frac{N}{\beta} + \frac{N}{\beta} \ln \frac{N}{\alpha} = N k_B T \left(\ln \frac{N}{\alpha} - 1 \right)$$

$$(1) F_0(T_0, V_0, N_0) = N_0 k_B T_0 \left[\ln \frac{N_0}{V_0} (2\pi\hbar)^3 \left(\frac{\beta}{2m\pi} \right)^{3/2} - 1 \right] \approx \frac{N_0}{V_0} k_B T_0$$

$$\frac{F(T, V, N)}{N k_B T} + \frac{F_0}{N_0 k_B T_0} = \ln \left(\frac{N}{N_0} \right) \left(\frac{V_0}{V} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2}$$

L2, (10.89) 一致。

(V $\propto \frac{1}{T^{3/2}}$)

• Gibbs 集団の統合.

Setup) $S = S(E, X_1, \dots, X_t)$ の natural val. α 単純系

$\tau_m(x_t) \in \Sigma_{\text{自然数}}$, 平衡状態 $(T, P_1, \dots, P_m, X_{m+1}, \dots, X_t)$

2nd 指定 η_t .

2nd 指定 η_t

$\exists \text{ D STATE}(X_{m+1}, \dots, X_t, \Lambda^t)$ 2nd 指定 η_t と Λ^t .

$$\left\{ \begin{array}{l} H^{st} := H - \sum_{k=1}^m P_k X_k \quad (P_k = \frac{\partial E}{\partial X_k}(S, \dots)) \\ H_{X_{m+1}, \dots, X_t, \Lambda^t}^{st} := [\exists \text{ D STATE}(X_{m+1}, \dots, \Lambda^t) | \text{ 2nd 指定 } H^{st} \text{ と } \Lambda^t] \end{array} \right.$$

を η_t .

Def 11.1

$T, P_1, \dots, P_m, X_{m+1}, \dots, X_t, \Sigma_{\text{自然数}}$ の 統計集団.

: ens $(T, P_1, \dots, P_m, X_{m+1}, \dots, X_t)$

a 分配函数 Σ

$$Y(T, P_1, \dots, P_m, X_{m+1}, \dots, X_t) := \sum \exp [-\beta H_{X_{m+1}, \dots, X_t, \Lambda^t}^{st}]$$

指定 η_t = 状態 α の 出現確率 η_t^α

$$P_\alpha = \frac{1}{Y} \exp [-\beta H_{X_{m+1}, \dots, X_t, \Lambda^t}^{st}]$$

2nd 指定.

Thm. 11.3

$\vec{\eta}$ を η .

$Y(T, P_1, \dots, P_m, X_{m+1}, \dots, X_t)$: $\vec{\eta}$ の 自然数度数と可完全な下限函数.

$Y(\beta \pi_1, \dots, \beta \pi_m, X_{m+1}, \dots, X_t)$: Y_α は $\int d\pi^\alpha - \frac{1}{\beta} \ln Y$.

$\Sigma \eta^\alpha = \vec{\eta}_s$

$$Y(\vec{\eta}) = -k_B T (\ln Y + o(\nabla))$$

$$Y(\vec{\eta}_s) = k_B (\ln Y + o(\nabla)) : \text{Massieu fun.}$$

(2章) 相互作用を有する古典粒子系の局所物理量の分布

① E等分布則 (27D)

Setup) 古典N粒子系, $f=3$ 自由度

Theorem 1.1

古典系 ($=\text{A}^{112}$, $\langle g(p) \rangle = \underline{\langle g(p) \rangle_{\text{ideal}}}$)

$T=\text{hbar}/k$ で $\langle g(p) \rangle_{\text{ideal}}$ が gas として期待する値
($V=0$)

Prf.

$$H = \sum_{i=1}^f \frac{p_i^2}{2m_i} + V(q) \quad \text{ただし } (q = q_1, \dots, q_f \text{ の組})$$

$$\langle g(p) \rangle = \frac{\int e^{-\beta H} g(p) dq_1 dq_2 \dots dq_f \frac{1}{(2\pi\hbar)^f} \frac{1}{M}}{\int e^{-\beta H} dq_1 dq_2 \dots dq_f \frac{1}{(2\pi\hbar)^f} \frac{1}{M}}$$

$$= \frac{\int e^{-\frac{1}{T} \frac{p_i^2}{2m_i}} g(p) dp \int e^{-\beta V} dq}{\int e^{\frac{1}{T} \frac{p_i^2}{2m_i}} dp \int e^{-\beta V} dq} \quad \square$$

Theorem 1.2

古典系 ($=\text{A}^{112}$, 平衡状態 $T=1$)

(1自由度系 $T=1$ の運動E) $= \frac{1}{2} k_B T$; 工学的等分配則.

証明

Prf.

$$g(p) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} \quad \text{ただし}$$

$$\left\langle \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} \right\rangle = \frac{1}{\left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^f}\right)} \int e^{-\frac{1}{T} \frac{p_i^2}{2m_i}} \cdot \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} dp_1 \dots dp_f$$

$$\begin{aligned} & \langle p_1(p) \rangle \\ &= \int e^{-\beta H} (f+g) dp_1 dp_2 \dots dp_f \\ &= \int e^{-\beta H} (f+g) dp_1 dp_2 \dots dp_f \\ &= \langle f \rangle + \langle g \rangle \end{aligned}$$

$$= \alpha \int \dots \int e^{-\frac{1}{2m_1} \left(\frac{p_1^2}{2m_1} + \dots + \frac{p_f^2}{2m_f} + \dots \right)} dp_1 \dots$$

$$= \alpha \int \dots \int e^{-\frac{1}{2m_1} \frac{p_1^2}{2m_1}} \cdot \frac{p_1^2}{2m_1} + \dots = \left\langle \frac{p_1^2}{2m_1} \right\rangle f$$

$$\left\langle \frac{p_i^2}{2m_i} \right\rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m_1} \right\rangle f.$$

$$\text{左側の式} \quad \frac{(\frac{2m_T}{\beta})^{f-1}}{\int e^{-\frac{\beta p_f^2}{2m_f}} dp_f}$$

$$(\frac{p_i^2}{2m_i}) = \frac{\int \frac{p_i^2}{2m_i} e^{-\frac{\beta p_i^2}{2m_i}} dp_i}{(\sqrt{\frac{2m_i}{\beta}})^f}$$

$$x_i = \sqrt{\frac{\beta}{2m_i}}, p_i \in x_i^f,$$

$$= \frac{\int \frac{\beta}{2m_i} \frac{1}{\beta} e^{-x_i^2} dx_i \sqrt{\frac{2m_i}{\beta}}}{(\sqrt{\frac{2m_i}{\beta}})^f} = \frac{1}{2\beta}$$

F.2.

$$\left\langle \frac{p_i^2}{2m_i} \right\rangle = \frac{f}{2\beta} = \frac{f}{2} k_B T \quad \square$$

ex. 単原子 ideal gas, 古典气体 at T

$$V(S) = 0$$

$$E = \left\langle \frac{p_i^2}{2m_i} \right\rangle = \frac{3N}{2} k_B T$$

定積熱容量 C_V, Z

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{V,N} = \frac{3}{2} k_B N, \quad C_V = C_V / (N/N_A) = \frac{3}{2} k_B N_A = \frac{3}{2} R$$

→ 3rd law と矛盾; 低温で古典近似が破綻する。

④ Maxwell の速度分布

def.

運動量 $p = p_1 \dots p_f$ の f 次元密度 $P(p)$ を

$$P(p) dp = P(p_1 \dots p_f) dp_1 \dots dp_f$$

$$:= \text{Prob}[p \in [p_1, p_1 + dp_1], \dots, [p_f, p_f + dp_f]]$$

左側の式

$$P(p) = \frac{e^{-\beta \frac{p^2}{2m}}} {\int e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} dp} = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\beta}{2m}} \pi e^{-\beta \frac{p^2}{2m}}$$

左側の運動量成分 p_i 互いに独立

$$p_i(p_i) = \sqrt{\frac{\beta}{2m_i}} \pi e^{-\beta \frac{p_i^2}{2m_i}}$$

左側の運動量密度をもつ分布。

速度分布(=密度):

$$P_j^v(v_j) dv_j = P_j^p(p_j) dp_j \quad \text{F'1'}$$

$$P_j^v(v_j) = m P_j^p(p_j) = \sqrt{\frac{m_j}{2\pi k_B T}} e^{-\frac{mv_j^2}{2k_B T}}$$

同種粒子の3方向の速度分布を合計

$$P^v(v) dv_x dv_y dv_z = \text{Prop}[v \in [v_x, v_x + dv_x], \dots] \quad \text{E 2 8 2'}$$

$$P^v(v) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} e^{-\frac{1}{2} m v^2 / k_B T} \quad (v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)$$

$$d^3v = 4\pi v^2 dv \quad \text{E 11 3 2'}$$

$$P^v(v) dv = \text{Prop}[v \in [v, v + dv]] = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} v^2 e^{-\frac{1}{2} m v^2 / k_B T}$$

: Maxwell の速度分布. ; 古典系ではこの形が成立立
(gas, liq, solid).

v

Thm. 12.4.

local 物理量 Σ 2D area Σ " $\bar{R}_L(T)$ " 平均化 ($T = \text{常数}$ & SM 2"

2D で精度が取まる.

$(g' \in Q)$

で $\Sigma g = g' \cdot 2\pi \int v^2 e^{-\frac{1}{2} m v^2 / k_B T} \Sigma_{j=1}^N \delta_{g'_j, g_j}$ local

f. 2. $M_g = \sum_j e^{-\frac{1}{2} m g_j^2 / k_B T} \delta_{g'_j, g_j}$, $D_g = \sum_j e^{-\frac{1}{2} m g_j^2 / k_B T} \delta_{g'_j, g_{j+1}}$ は相加物理量,

$\sim O(N)$ の差 $\Sigma M_g - \bar{R}_L(T)$. M_g/N の密度も取まる.

逆変換は精度が足りない.

Thm. 12.5

local 物理量 (分布関数も SM で取まる).

$$f(v, v + dv) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \mathbb{1}(w_k \in [v, v + dv]),$$

$$\propto P^v(v) dv_x dv_y dv_z$$

とある. f : 相対度数分布. f は相加物理量密度.

① Virial 定理.

Def. 12.1

$$f(t) \text{ の} \bar{\tau} \text{ 時間平均: } \bar{f} := \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(t) dt$$

$$\text{virial: } V(t) := \sum_{i=1}^f q_i p_i$$

$$\overline{\frac{dV}{dt}} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \frac{dV}{dt} dt = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} (V(T) - V(0)) = 0$$

(∵ V が有界)

Theorem 12.6

$$H(q, p) = \sum_{i=1}^f \frac{p_i^2}{2m_i} + U(q)$$

\therefore 五典系で Virial 定理が有界なとき. $U(q) = U_{\text{int}} + U_{\text{wall}}$

$$2 \overline{\sum_i \frac{p_i^2}{2m_i}} = \overline{\sum_i q_i \frac{\partial U_{\text{int}}}{\partial q_i}} + \overline{\sum_i q_i \frac{\partial U_{\text{wall}}}{\partial q_i}} : (\text{Pf. a virial thm.})$$

Pf.

$$\frac{dU}{dt} = \sum_{i=1}^f (q_i p_i + p_i q_i) = \sum_i \left(+ \frac{\partial H}{\partial p_i} p_i - \frac{\partial H}{\partial q_i} q_i \right)$$

$$= \sum_i \left(\frac{p_i^2}{m_i} - \left(\frac{\partial U_{\text{int}}}{\partial q_i} + \frac{\partial U_{\text{wall}}}{\partial q_i} \right) q_i \right)$$

時間平均では左辺 = 0 す.

$$2 \overline{\sum_i \frac{p_i^2}{2m_i}} = \overline{\sum_i \left(q_i \frac{\partial U_{\text{int}}}{\partial q_i} + q_i \frac{\partial U_{\text{wall}}}{\partial q_i} \right)} \quad \square$$

Theorem 12.7

同様の假定で、virial V が有界なとき state で

$$PV = Nk_B T - \frac{1}{3} \left\langle \sum_i g_i \frac{\partial U_{int}}{\partial g_i} \right\rangle. : \text{証明する} \text{ virial thm.}$$

Prf.

e.g. 1. 題.

一般に $\bar{O} = O + \sigma(D)$ で表す。(IIC) が成立する。

以下 a virial thm とする。

$$2 \left\langle \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} \right\rangle = \left\langle \sum_i g_i \frac{\partial U_{int}}{\partial g_i} \right\rangle + \left\langle \sum_i g_i \frac{\partial U_{wall}}{\partial g_i} \right\rangle. - \textcircled{P}$$

$$\begin{aligned} &= - \left\langle \sum_{k=1}^N l_k \cdot f_k^{wall} \right\rangle \quad (f_k^{wall} = -\frac{\partial U}{\partial l_k}) \\ &= - \left\langle \sum_{k \in \partial D} l_k \cdot f_k^{wall} \right\rangle. \quad (\partial D: 壁面) \end{aligned}$$

$\partial D \equiv (1) \cup (2) \cup (3) \cup (4)$ の微小面 (中心座標 l_k , area: dA , f_k^{wall} の法線ベクトル dA)

l_k (軸), $(\text{部面}) = (\text{微小面} \text{ 面近に} \text{ 及び} \text{ 粒子})$

$(\text{軸} \wedge \text{部面})$

を ΔA とし $l_k \sim \Delta A$

$$(\text{部面}) = -l_k \cdot \left\langle \sum_{k \in \partial D} f_k^{wall} \right\rangle =: -l_k \cdot \underline{df}$$

注目面 ΔA に着目系の粒子は及ばない。

着目系が普通の gas, fluid では $df \parallel dA$.

$P: (\text{着目系} \text{ に} \text{ 及び} \text{ ない}) \rightarrow p \cdot \Sigma \Delta A. df = -P dA$.

J. 2. (部面) = $P l_k \cdot dA$.

$$\text{全微小面} = \text{軸} \cup \text{部面} \cup \text{着目系} \text{ に} \text{ 及び} \text{ ない} \text{ 面} \therefore \star = \int_{\partial D} P l_k \cdot dA = \int_{\partial D} P (D \cdot l_k) dD$$

$$= 3PV$$

$$\textcircled{P} \quad aT + D = 3Nk_B T \quad (\text{E 等分配則}), J. 2, \textcircled{P}, 1. 2$$

$$3Nk_B T = \left\langle \sum_i g_i \frac{\partial U_{int}}{\partial g_i} \right\rangle + 3PV \quad \square.$$

• Virial theorem: $\nabla U_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial U_{\text{int}}}{\partial r_i}$ (ideal gas \rightarrow $U_{\text{int}} = 0$)

(假定): $U_{\text{int}}(r_1, \dots, r_N) \propto \frac{1}{r_1 r_2 \dots r_N}$ (勢函数): $U_{\text{int}}(x_1, \dots, x_N) = \lambda^N U_{\text{int}}(y_1, \dots, y_N)$

$$\left(\text{ex. } U_{\text{int}} \propto \sum_{i,j} |r_i - r_j|^2 \right)$$

$$\text{Euler's method: } \sum_i \delta_i \frac{\partial U_{\text{int}}}{\partial r_i} = \lambda U_{\text{int}} \quad (\lambda \text{ は } \epsilon \text{ と } \lambda = 1/\epsilon \lambda + \epsilon)$$

$$\text{Virial theorem: } P_V = N k_B T - \frac{1}{3} \langle U_{\text{int}} \rangle \quad (1)$$

$$\text{エネルギーの平衡値: } E = \left\langle \frac{P_V^2}{2m} \right\rangle + \langle U_{\text{int}} \rangle = \frac{3}{2} N k_B T + \langle U_{\text{int}} \rangle \quad (2)$$

①, ② が

$$P_V = N k_B T - \frac{1}{3} \left(E - \frac{3}{2} N k_B T \right) \quad (\text{相互作用による勢函数の式})$$

下記の式

• 五典力学 I = 格子力学

setup) 質点系が壁に衝突するとき、

力の関係 $F_{\text{ext}} \approx F_{\text{int}}$ すなはち $U_{\text{wall}}(r) \approx U_{\text{int}}$

$r_1^\circ, \dots, r_N^\circ$: $U(r) = U_{\text{int}}(r) + U_{\text{wall}}(r)$ が最小となる位置 (力学的平衡)

または格子点

$Q_i^\circ = r_i^\circ - r_i^\circ$: 平衡位置からずれ。

計算式

$$U_{\text{min}} = U_0 + \sum_i \frac{\partial U}{\partial Q_i} (Q_i^\circ) + \frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial^2 U}{\partial Q_i^2} Q_i^\circ + \dots = (Q_1^\circ \dots Q_N^\circ) \cdot \frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial^2 U}{\partial Q_i^2} + U_0$$

$$= \sum_i \frac{\partial U}{\partial Q_i} Q_i^\circ + \frac{1}{2} \sum_i \frac{\partial^2 U}{\partial Q_i^2} Q_i^\circ + \dots \hookrightarrow U_{\text{int}} + U_{\text{wall}} \approx 2 \sum_i \frac{\partial U}{\partial Q_i} Q_i^\circ.$$

前回の結果と一致する。

力学的 Virial theorem の確認

$$\begin{aligned} \left\langle \sum_i \delta_i \frac{\partial U}{\partial \delta_i} \right\rangle &= \left\langle \sum_i (Q_i^\circ + q_i^\circ) \frac{\partial U}{\partial Q_i} \right\rangle = \underbrace{\left\langle \sum_i Q_i^\circ \frac{\partial U}{\partial Q_i} \right\rangle}_{= 2 \langle U \rangle} + q_i^\circ \underbrace{\left\langle \sum_i \frac{\partial U}{\partial Q_i} \right\rangle}_{= 0 \text{ (平均)}} \\ &= 2 \langle U \rangle \end{aligned}$$

$$\langle U \rangle = \left\langle \frac{1}{2} \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} \right\rangle = \frac{3}{2} N k_B T \quad \therefore E = \langle k \rangle + \langle U \rangle = 3 N k_B T.$$

$$T=2, \text{ 定積元の熱 } C_V = \frac{N_A}{N} \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{V,N} = 3 k_B N_A = 3 R.$$

: Dulong-Petit's law

13章

• Hilbert Sp.

: 内積が定義される完備な複素線形空間.

Axiom: 内積

(1) $\langle \psi, \psi' \rangle \in \mathbb{H}$. a 内積 $\langle \psi' | \psi \rangle$ は $(1) \sim (3)$ を満たす.

(1) $\langle \psi | \psi' \rangle = \langle \psi' | \psi \rangle^*$

(2) $\langle \psi | \psi \rangle \geq 0$, norm: $\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$

(3) $\langle \psi | (c_1 \phi) + c_2 \phi' \rangle = c_1 \langle \psi | \phi \rangle + c_2 \langle \psi | \phi' \rangle$. (分配法則)

• CONS: basis が直交.

$\langle \psi, \psi' \rangle \neq 0, \langle \psi' | \psi \rangle = 0$.

• \mathbb{H} の次元: (組み合せの数).

Theorem

有限次元 \mathbb{H} は $n = \dim \mathbb{H}$ の \mathbb{C}^n と一対一に対応する.

• cut off (= finite PDE).

: 相加物理量密度 ρ 下で $\int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) \Psi^*(\mathbf{r})$ state の計算. (2) で物理量の結果は $\int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) \Psi^*(\mathbf{r})$ となる.

(\because subspace の dim = effective dim \mathcal{E}_{eff}).

\rightarrow 1) ρ が Ψ の値を変更する形で cutoff. 結果は \mathcal{E}_{eff} :

renormalization

• TPL 2ⁿ $\dim \mathcal{H} = \infty$ と矛盾

Thm. 13.5

量子力学系: $\dim \mathcal{H} = 2^N \rightarrow \infty$

...

射線(ray).

QM, Regi



量子系 a pure state if $\{ e^{i\theta} | \psi \rangle \mid \theta \in \mathbb{R} \}$ 2ⁿ 矢量子.

$| \psi \rangle$: 頻繁化 $= 2^n$.

重叠共役: Hermite 共役

・演算子:

$$|\hat{A}\phi\rangle := \hat{A}|\phi\rangle, \langle \hat{A}\phi| := (\hat{A}|\phi\rangle)^+ = (A|\phi\rangle)^+$$

$H \sim C^n$ 时, 线性演算子と行列と同一視される.

$$\rightarrow (\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}, (\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger F^\dagger$$

$$\langle \hat{A}^\dagger \phi | = (\hat{A}^\dagger |\phi\rangle)^+ = (\hat{A}^\dagger |\phi\rangle)^+ = \langle \phi | \hat{A}$$

$$\therefore \langle \hat{A}^\dagger \phi | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{A} \psi \rangle \leftarrow + \text{if } C^n \text{ is Hermitian 共役 } T^\dagger, T = \pi^n$$

H は π^n + a def. に F は

\hat{A}^\dagger : \hat{A} a adjoint ope.

\hookrightarrow hermitian matrix $\stackrel{\text{def}}{\Rightarrow} a_{ijk} = (a_{ki})^*$ for all i, k.

i=対称, H は $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ すなはち \hat{A} は自己共役 ope. とする.

QM, Reg. 2

量子系 a 可觀測量は自己共役 ope. 2ⁿ と.

e.v. a 組合せ if max 2ⁿ $\dim \mathcal{H} \neq 2^n$.

Thm. 13.2

self-adjoint spec a は π^n 1 π^n e.v. (対称) 1 π^n e.v. 1 π^n

直交了.

\rightarrow e.v. a 集合を CONS とする.

• スペクトル分解.

\hat{A} : 離散スペクトルな \Rightarrow Self-adjoint op.

e.v. a は対応する e.vec. $(\phi_a^1, \dots | \phi_a^{m_a} \rangle)$ (m_a : 次元度).

規範直交: $\langle \phi_a^l | \phi_a^{l'} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{aa'}$.

したがって, $\hat{A} = \sum_a a \hat{P}(a) = \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} a |\phi_a^l \rangle \langle \phi_a^l|$. すなはち: スペクトル分解.

Prf.

$\forall (\phi) \in \mathcal{H}$ とある. $(\phi) = \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} c_a^l |\phi_a^l \rangle$. と書く.

$\hat{P}(a) := \sum_{l=1}^{m_a} |\phi_a^l \rangle \langle \phi_a^l|$: proj. op.

と書く.

$\hat{P}(a)|\phi\rangle = \sum_{l=1}^{m_a} c_a^l (\phi_a^l)$ ($c_a^l = \langle \phi_a^l | \phi \rangle$).

(dim $\mathcal{H}_a = m_a$).

\mathcal{H}_a : e.v. a に対する e.vec. $T = \text{cons.}$ の subspace と書く.
 $\rightarrow \hat{P}(a)$ は \mathcal{H}_a の部分空間である.

したがって, $\hat{A} = \sum_a \sum_{a'} (a|x_a|\hat{A}|a'x_{a'}\rangle) = \sum_a \sum_{a'} a' |a x_a a' x_{a'}\rangle = \sum_a a |a x_a\rangle$
 $= F |F\rangle = T |T\rangle$.

• Self-adjoint op. \hat{A} の $f(\hat{A})$ は

$\hat{f}(\hat{A}) := \sum_a f(a) \hat{P}(a) = \sum_a \sum_{l=1}^{m_a} f(a) |\phi_a^l \times \phi_a^l|$.
 と定義する.

Q.M. Reg. 3

実験 (: 量子力学の問題に対する \hat{A} の独立性: $T = (T_n)$ の誤差)

$n = 1, 2, \dots$ は T の行の番号, (1) ~ (4) が T の列の番号.

(1) λ は \hat{A} の固有値 \Rightarrow λ は \hat{A} の e.v. (λ ではない).

(2) λ は \hat{A} の e.v. \Rightarrow λ は \hat{A} の固有値 \Rightarrow λ は \hat{A} の e.v.

(3) 相対誤差は $N \rightarrow \infty$ で一定となる.

(4) λ の収束値. $P(a) := \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} [N \otimes T (E_i \text{の値}) = a T \otimes T (E_i \text{の値})]$
 $= \langle \psi | \hat{P}(a) | \psi \rangle$; Born's 法則 (物理的).

- observable \hat{A} a 17a e.v.n. $a_1 = \hat{E}_{\text{vec.1}}$ e.vec.17 \hat{A} a 17x1 " $a_1 = \hat{E}_{\text{f}, T=\text{state.}} - \hat{E}_{1, 2}$ a state 2117 他 a observable a 17x1 - $\hat{E}_{1, 2} = \hat{E}_{\text{f}, 2, 17811}$

- 同種粒子則形成多粒子系。量子論：1粒子系から多粒子系を構成する。

- 1半3子系

∇ : finite volume, \hat{H}_1 : $\nabla \neq 0$ (e.g. $\text{curl } \nabla = 0$)

\hat{H}_1 : $\nabla \neq 0$ (e.g. $\text{curl } \nabla = 0$)

$\{\varphi_0, \dots\} : \hat{H}_1 \text{ a F.e.s.}$

$\Rightarrow \{\varphi_0\}$.

$$|\psi_3\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle \quad |\psi_4\rangle = \sum_{j=1}^2 |\psi_j\rangle + |\psi_{j+2}\rangle$$

$\{(\phi_i)\}_{i \in I}$ a cons.

連續空間 $T_0'' \in \dim H_1 = \infty$ $T_0'' \text{ pt}$,

$\dim [(E \leq \varepsilon_{\text{cutoff}})] = \# \{ P \in U = H, \text{a subspace} \} \propto V$

- ### · 多粒子状态 ·

從而有 $\Gamma \vdash a$ Hilbert Sp. 且 many. 三構成。

：（精子狀態） $(q_0), \dots, (q_v), \dots$ 在生殖子期時 \dots, h_v, \dots 或精子子期時
生殖子期時多精子狀態之採用。占角數之分。

$$|n\rangle = (n_0, \dots) \in \mathbb{Z}, |m\rangle = (m_0, \dots) \leftarrow (\#3 \neq \text{def} \langle \varphi_0 \rangle, \langle \varphi_1 \rangle, \dots \in$$

Ex. $\{m\}$ e cons qd Hilbert Sp. e Hilbert.

Fock basis

2. 何意の多様子 state $|\Psi\rangle$ は

$$|\Psi\rangle = \sum_n \Psi_n |n\rangle$$

2. 何意の

(effective)

$$\cdot H_a = \hbar \omega$$

E.v. $\leq D_{\text{cutoff}}$ の E.S. が CONS としに SP. とす。

$$\dim [(\text{有限の } T = \text{ 何らかの subspace})] = \Omega(D_{\text{cutoff}}, D, D_n)$$

$$\propto e^{\alpha D} (\alpha > 0)$$

Then, χ^0 線形定理。

$$n + 1 (= \hbar \omega) = n_1, n_2, n_3, \dots$$

$$n_v = 0, 1, \dots : \chi^0 = \pi^n (2\pi\hbar)^n \frac{\hbar}{2} \text{ と } ; \text{ Fermi 線形定理.}$$

$$n_v = 0, 1, \dots : \chi^0 = \pi^n (2\pi\hbar)^n \frac{\hbar}{2} \text{ と } ; \text{ Bose 線形定理.}$$

ある χ^0 と χ^1 の関係。

(H_a e.v. (= F.P.R. の χ^0), 位相不變性 \Rightarrow 物理法則 χ^1 不變

$\Rightarrow \chi^1$: 位相不變性 \Rightarrow 物理法則 χ^1) .

$$\chi^0 = \left[\begin{array}{c} \chi^0_1 \\ \vdots \\ \chi^0_n \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{array} \right] = \left(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n \right)$$

$$= \left[\begin{array}{c} \chi^1_1 \\ \vdots \\ \chi^1_n \end{array} \right]$$

$$= \left[\begin{array}{c} \chi^1_1 \\ \vdots \\ \chi^1_n \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{array} \right] = \left(\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n \right)$$

$$\dim = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \dim [\chi^0, \chi^1] = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \dim [\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n]$$

$$= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \dim [\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n]$$

14章 相互作用による同種粒子系の量子統計力学

- 相互作用による同種粒子系

$H = Fock Sp.$ など

(分子状態 $| \psi_0 \rangle$, $E_{e.v.} = E_0 + E_1 \leq \dots$)

等々 $| \Psi \rangle = | n_0 \dots \rangle$, $E_{e.v.} = E_0 = \sum E_{n_i}$

- 自由粒子 (分子状態)

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^f \frac{\hat{p}_i^2}{2m} \quad (f=3N), \quad \hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i$$

$$\hat{H}_i = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$$

Schrödinger 表現 \hat{E} の $\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \dots \right)$

2D 空間 $B.C.$ は 2 方向で ψ が 2π ずつ変化する periodic B.C. など

$$\rightarrow \psi_{ik} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_x x}, \quad \varepsilon_{ik} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

※ $x \in [0, L]$ の範囲: $\psi_{ik}(x) = \psi_{ik}(x+L) = \psi_{ik}(x)$ である

$$k_x = \frac{n}{L}, \quad n = 1, 2, \dots, V = (k_x, \alpha), \quad (\alpha = 0, 1)$$

- (粒子状態密度)

$$w[\varepsilon - \frac{\Delta \varepsilon}{2}, \varepsilon + \frac{\Delta \varepsilon}{2}] : \varepsilon_0 \in [\varepsilon - \frac{\Delta \varepsilon}{2}, \varepsilon + \frac{\Delta \varepsilon}{2}] \text{ で } |\psi_0\rangle \text{ が 1 個 ある}$$

$$:= \sum_{ik} \frac{1}{V} (| \psi_{ik} \rangle \langle \psi_{ik} |)$$

: w は $\eta < \alpha$ の物理的範囲で $w \propto V^{-1}$ である ($V \rightarrow \infty$ の場合)

$$D(\varepsilon) := \lim_{\Delta \varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta \varepsilon} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} w[\varepsilon - \frac{\Delta \varepsilon}{2}, \varepsilon + \frac{\Delta \varepsilon}{2}] : \text{(粒子状態密度)}$$

$$\therefore w \sim V D(\varepsilon) \Delta \varepsilon \quad (\varepsilon \in \mathbb{R})$$

• $\text{LT}^{\text{II}} = \text{和の積分} (= \text{2次元の公式})$

$$\text{計算 LT}^{\text{II}} = 1 : \frac{1}{V} \sum_{\varepsilon} g(\varepsilon) \quad (\text{LT}^{\text{I}} \text{ と LT}^{\text{II}} \text{ は } \sim \text{ です}).$$

$\varepsilon < a$ の場合、 $g(\varepsilon)$ は 運続する $\delta(\varepsilon)$ の $\varepsilon = \varepsilon_0$ で $\delta(\varepsilon)$.

$\rightarrow \varepsilon_0$ の附近では $g(\varepsilon)$ の値は $\int_{-\infty}^{\varepsilon_0} g(\varepsilon) d\varepsilon$.

J.2.

$$\frac{1}{V} \sum_{\varepsilon} g(\varepsilon) \approx \frac{1}{V} \sum_{\text{有限の } \varepsilon} g(\varepsilon) \omega\left[\varepsilon - \frac{\Delta\varepsilon}{2}, \varepsilon + \frac{\Delta\varepsilon}{2}\right] \approx \sum_{\text{有限の } \varepsilon} g(\varepsilon) D(\varepsilon) d\varepsilon.$$

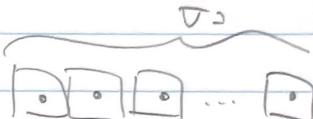
$$\sim \int_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon) D(\varepsilon) d\varepsilon \quad (\text{有限の } d\varepsilon \rightarrow 0 \text{ で } \int_{-\infty}^{\infty} g(\varepsilon) d\varepsilon).$$

$$\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 \sim \varepsilon = 1 \sim k \text{ 附近}.$$

Q14.3.

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \sum_{\varepsilon} g(\varepsilon) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int g(\varepsilon) d^3 k = \frac{1}{(2\pi)^3} \int g(\varepsilon_k) \cdot 4\pi k^2 dk.$$

$$= \frac{1}{2\pi^2} \int g(\varepsilon_k) k^2 dk$$



例14.1. 2準位系の面積.

$\varepsilon_a, \varepsilon_b \rightarrow$ 2準位系の面積 LT^{II} は $\varepsilon_a, \varepsilon_b$ の間の面積 $= \frac{1}{2} \times \text{幅} \times \text{高さ}$ ($\rightarrow \text{面積} = \varepsilon_a - \varepsilon_b$).

$$\omega\left[\varepsilon - \frac{\Delta\varepsilon}{2}, \varepsilon + \frac{\Delta\varepsilon}{2}\right] = \begin{cases} \nabla & (\varepsilon = \varepsilon_a, \varepsilon_b) \\ 0 & (\text{otherwise}). \end{cases}$$

$\varepsilon_a, \varepsilon_b$ の間の面積 $\frac{1}{2\Delta\varepsilon} \times \text{幅} \times \text{高さ} = \frac{1}{2} \times \text{幅} \times (\varepsilon_b - \varepsilon_a)$.

$D = \delta$ 内蔵 ε の範囲 $\varepsilon_a, \varepsilon_b$ の間の面積

$$D(\varepsilon) = \delta(\varepsilon - \varepsilon_a) + \delta(\varepsilon - \varepsilon_b)$$

$\varepsilon_a, \varepsilon_b$ の間の面積

④ $\gamma^{\prime\prime} = \Gamma^{\prime\prime}$ の $1/\gamma_{\text{FL}}$ 集団. 2) 不分配函数と算出.

三つ目大気の不分配 (γ, n).

$$\text{不分配函数} \quad \Xi = \sum_{n_1} e^{-\beta(E_n - \mu)} = \sum_m e^{-\beta(E_m - \mu)} = \sum_{n_0} \dots e^{-\beta(E_n - \mu)}$$

($\gamma = \gamma^{\prime\prime}, \mu = \mu^{\prime\prime}, E = E^{\prime\prime}$ は G で, γ は $T^{\prime\prime}$).

$\sum_v \xi_v n_v$ \hookrightarrow 単位性より, $\sum_v \xi_v n_v = \sum_v \xi_v$ 結果を得られる.

$$\Xi = \prod_{n_0} \prod_{n_1} \dots e^{-\beta(E_n - \mu)} = (\prod_{n_0} e^{-\beta(E_0 - \mu)}) \dots (\underbrace{\prod_{n_0} e^{-\beta(E_n - \mu)}}_{=: \Xi_v}) \dots$$

f. 2.

$$\Xi_v := \prod_{n_0} e^{-\beta(E_v - \mu)} = \begin{cases} 1 + e^{-\beta(E_v - \mu)} & (\text{fermion}) \\ \frac{1}{1 - e^{-\beta(E_v - \mu)}} & (\text{boson}) \end{cases}$$

$E_1 < E_0$

$\rightarrow \mu < E_0$, $\mu > E_1$. ($\gamma \neq 2^{\prime\prime} \neq 0$)

$$\Xi = \prod_v \Xi_v$$

• 粒子数期待値.

$$\langle n_v \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_{n_0} h_0 e^{-\beta(E_n - \mu)} = \frac{1}{\prod_v \Xi_v} \left(\sum_n e^{-\beta(E_n - \mu)} \right) \left(\sum_{n_1} h_1 e^{-\beta(E_1 - \mu)} \right) \dots$$

$$= \frac{1}{\Xi_v} \sum_{n_1} h_1 e^{-\beta(E_1 - \mu)}$$

$$= \begin{cases} \frac{1}{1 + e^{-\beta(E_1 - \mu)}} \sum_{n_1=0}^1 n_1 e^{-\beta(E_1 - \mu)} & : \text{fermion.} \end{cases}$$

$$\left(1 - e^{-\beta(E_1 - \mu)} \right) \sum_{n_1=0}^{\infty} n_1 e^{-\beta(E_1 - \mu)} & : \text{boson.}$$

$$= \begin{cases} \frac{e^{-\beta(E_1 - \mu)}}{1 + e^{-\beta(E_1 - \mu)}} & = \frac{1}{e^{\beta(E_1 - \mu)} + 1} \\ \left(1 - e^{-\beta(E_1 - \mu)} \right) \frac{e^{\beta(E_1 - \mu)}}{\left(1 - e^{\beta(E_1 - \mu)} \right)^2} & = \frac{e^{-\beta(E_1 - \mu)}}{1 - e^{-\beta(E_1 - \mu)}} \end{cases}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\alpha n} = \frac{1}{1 - e^{-\alpha}} \quad (\alpha > 0).$$

$$= \frac{1}{e^{\beta(E_1 - \mu)} \pm 1} \quad (+: \text{fermion}, -: \text{boson}).$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \alpha^n e^{-\alpha n}$$

$$= \frac{e^{-\alpha}}{(1 - e^{-\alpha})^2} \quad \therefore \langle n_v \rangle = \frac{1}{e^{\beta(E_v - \mu)} \pm 1} = f_{\pm}(E_v)$$

fermion 量子. $n_v = 0, 1$ 且し. $0 \leq \langle n_v \rangle \leq 1$.

\rightarrow fermi 分布 $\pm e^{\beta(E_v - \mu)} > 0$ 且し. これは $T=0$.

boson 量子. $n_v \geq 0$ 以上 且し. $T=0$ 时 $\langle n_v \rangle \geq 0$.

$T=0$, $E_v - \mu < 0$ の場合 $\langle n_v \rangle < 0$ となる $\frac{1}{e^{\beta(E_v - \mu)}} \rightarrow 0$, $T=0$, $E_v > \mu$.

- $E, N \in \langle n_v \rangle$ の計算方法 (期待値は TDLC で計算, 値は漸近)

エネルギー密度

$$U = \frac{E}{V} = \frac{1}{V} \sum_v E_v \langle n_v \rangle = \frac{1}{V} \sum_v \frac{E_v}{e^{\beta(E_v - \mu)} + 1}$$

粒子数

$$N = \frac{N}{V} = \frac{1}{V} \sum_v \frac{1}{e^{\beta(E_v - \mu)} + 1}$$

- 古典近似: 量子性が無視できる場合: $\forall v, e^{\beta(E_v - \mu)} \gg 1$ 且し, $\langle n_v \rangle \ll 1$ のとき. これは,

$$\langle n_v \rangle \approx e^{-\beta(E_v - \mu)} : \text{Boltzmann 分布.}$$

- 古典近似が成立する条件式の導出.

古典的粒子 \Rightarrow [自由度 $k, E, \omega \perp k_B T$]

3 量子化粒子 打算 ω を λ_T で置き換える.

$$\frac{\hbar^2}{2cm} \cdot \left(\frac{2\pi}{\lambda_T} \right)^2 \approx \frac{1}{2} k_B T. \quad \therefore \lambda_T \approx \sqrt{\frac{2\pi \hbar^2}{mk_B T}} : \text{量子的 de Broglie 波長}$$

$$\lambda_T = \frac{h}{mk_B T}$$

$$\approx \frac{h}{mk_B T}$$

$$(n^2) \approx$$

$\tilde{\tau}_{\text{ideal}}$

④ Fermi 分布, fermion gas

$$\text{実験状況) } n = \frac{c_{\text{N}}}{V} = \text{const.} > 0. \quad (T \rightarrow 0, \text{ 2}^{\text{nd}} \text{ law of T})$$

\hookrightarrow 独立性 (T, V, N) の自然法則 (ce).

(計算の方)

P, T, 2nd law of therm.

① e.g. state n_i (T, V, M) 2nd law に従うと仮定, ϵ_i を採用.

② $n_{\text{eg}} = \langle n_i \rangle \propto \epsilon_i^2, n_{\text{eg}} = n_{\text{eg}}(T, V, M) \propto \epsilon_i^2$

③ $n_{\text{eg}} \propto \epsilon_i^2 \propto \epsilon_i^2 \propto \mu(T, V, M) \propto \epsilon_i^2$.

④ 量子力学も T, V, M の関数として従うとする.

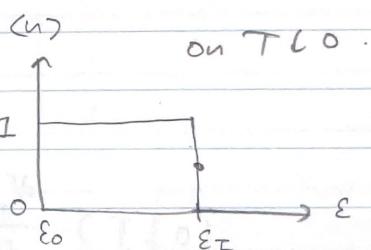
• fermion が a 部子系の占有状態基準: $\epsilon_F := \lim_{T \rightarrow 0} \mu$; Fermi energy

• 温度換算: $(E_{\text{差}})/k_B =: (\text{対応する温度}) \propto \text{4}^{\frac{1}{2}}$.

$$k_B \sim 10^{-4} \text{ K} \quad \left(\begin{array}{l} \text{E自由度} \\ \text{度数} = 3 \text{ at } 0 \text{ K} \end{array} \right) \quad \left(\begin{array}{l} T_{\text{deg}} \\ T = 0 \text{ fix} \end{array} \right)$$

$$T_F := \frac{1}{k_B} (\epsilon_F - \epsilon_0), \quad \text{積層温度 (degenerate Temperature).}$$

• 絶対零度範囲 ($T \leq 0$).



$$\lim_{T \rightarrow 0} f_F(E) = \begin{cases} 1 & (E < \epsilon_F) \\ \frac{1}{2} & (E = \epsilon_F) \\ 0 & (E_F < E) \end{cases}$$

\therefore $E \leq \epsilon_F$ の電子状態は

$$|\Psi_g\rangle = (1, \dots, 1, 0, \dots) \quad \leftarrow \text{多電子系の G.S.} \\ \therefore \epsilon_v > \epsilon_F \text{ の電子}$$

(+?)

$\leftarrow T=0, \epsilon_v = \epsilon_F \text{ の状態が 2^{\text{nd}} \text{ law に従う} \right)$

$$|\Psi_g'\rangle = (1, 1, \dots, 1, 0, \dots)$$

$$|\Psi_g''\rangle = (1, 1, \dots, 1, 1, 0, \dots)$$

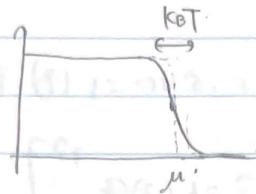
$$\epsilon = \epsilon_F$$

a mixed state である.

• $T \ll T_F$ 且 $\varepsilon \gtrsim \mu$.

(分布函数) $|\beta(\varepsilon - \mu)| \gg 1$, $\tau_{\beta}(\varepsilon) = \pi^{1/2}, e^{\beta(\varepsilon-\mu)} \ll 1, e^{\beta(\varepsilon-\mu)} \gg 1$
 $T \downarrow 0$, 以 μ 为先决条件 (Fermi Level)

$|\beta(\varepsilon - \mu)| \approx 1 \quad \because |\varepsilon - \mu| \approx k_B T$. $\varepsilon \gtrsim T \downarrow 0$ 且 $\mu \approx \varepsilon_F$.



$T \ll T_F$ ($= \pi^{1/2}$) 且 $T \approx \mu \approx \varepsilon_F$.

• Ideal Fermi gas.

$\frac{N}{V}$ fix 且 T 为上下的 ε 时 $f_+(\varepsilon)$ 的性质

\rightarrow 固定 T 且 ε_F 为常数, $\frac{N}{V}$ fix 且 $T \approx \mu$ 为常数.

$$\frac{N}{V} = \frac{1}{V} \sum_k \int_{\text{BZ}} f_+(\varepsilon_k)$$

f_+ 为连续, $T \downarrow 0$ 为发散 (T < μ), 和为 $\frac{N}{V}$ 分为 2 份.

$$n := \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{N}{V} = \int_0^\infty f_+(\varepsilon) D(\varepsilon) d\varepsilon.$$

(P) $T \downarrow 0$ 且 $\varepsilon \gtrsim \mu$.

f_+ 为 Step func. 且 $\mu \rightarrow \varepsilon_F$. 且 ε_F .

$$n = \int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon) d\varepsilon.$$

$$= \frac{2}{3} \varepsilon_F D(\varepsilon_F) = (2s+1) \frac{\int_{2m}^{\varepsilon_F} \varepsilon^{3/2} d\varepsilon}{3 \pi^2 h^3} \quad (T \downarrow 0).$$

$$\therefore \varepsilon_F = \left(\frac{\sqrt{3} \pi^2 h^3 n}{(2s+1) m^{3/2} f_2} \right)^{2/3} = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{6 \pi^2 n}{(2s+1)} \right)^{2/3}.$$

$\lim_{T \downarrow 0} \mu$

$2^{3/2}$

$\sqrt{2}^3$