(イ) $0 < T \ll T_F$

$$n \simeq \int_0^{\mu} D(\varepsilon)\,d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} D'(\mu)\cdot(k_B T)^2 \quad \text{(Sommerfeld formula)}$$

(Prf : 略).

(ロ) (イ) について、いま n fix より、

$$\int_0^{\varepsilon_F} D(\varepsilon)\,d\varepsilon \doteqdot \int_0^{\mu} D(\varepsilon)\,d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} D'(\mu)\,(k_B T)^2.$$

$$\therefore \int_{\mu}^{\varepsilon_F} D(\varepsilon)\,d\varepsilon \doteqdot \frac{\pi^2}{6} D'(\mu)\,(k_B T)^2.$$

$T \ll T_F$ では $\mu \simeq \varepsilon_F$ より、$\mu = \varepsilon_F - \delta$ ($|\delta| \ll \varepsilon_F$) とすると、

$$D(\varepsilon_F)\,\delta \simeq \frac{\pi^2}{6} D'(\varepsilon_F)\cdot(k_B T)^2. \quad \therefore \delta \simeq \frac{\pi^2}{6}\frac{D'(\varepsilon_F)}{D(\varepsilon_F)}(k_B T)^2.$$

$D'(\varepsilon) = A\cdot\frac{1}{2\sqrt{\varepsilon}}$

$D(\varepsilon) = A\cdot\sqrt{\varepsilon}.$

$$\therefore \delta \simeq \frac{\pi^2}{12}\,\varepsilon_F\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2.$$

これより、$\mu \simeq \varepsilon_F\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{T}{T_F}\right)^2\right]$ (n fix かつ $T \ll T_F$).

- 高温領域での μ.

setup) $e^{\beta(\varepsilon_\nu - \mu)} \gg 1$ (Boltzmann 分布).

このときの密度は $n = \int_0^{\infty} \frac{1}{1+e^{+\beta(\varepsilon-\mu)}} D(\varepsilon)\,d\varepsilon = \int_0^{\infty} e^{-\beta(\varepsilon-\mu)} D(\varepsilon)\,d\varepsilon$

$$= (2s+1)\cdot\frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\,e^{\beta\mu}\sqrt{\frac{\pi(k_B T)^3}{4}}$$

これが、
低温の結果と等しいから、$e^{-\beta\mu} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}\left(\frac{T}{T_F}\right)^{3/2}$ — ③

$T \gg T_F$ となり、μ が負となって、古典近似できるようになる。

$\varepsilon_F = \varepsilon_F(n)$ を代入して ③ から T_F を消去すると、

$$\mu = -k_B T\left[\ln\left(\frac{T^{3/2}}{n}\right) + \text{const.}\right]$$

・低温における Ideal fermion gas の E, と C_V

$$\frac{\langle E\rangle}{V} = \frac{1}{V}\sum_{\sigma}\sum_{k} \varepsilon_k f_+(\varepsilon_k).$$

$$u := \lim_{V\to\infty}\frac{\langle E\rangle}{V} = \int_0^\infty \varepsilon f_+(\varepsilon) D(\varepsilon)\, d\varepsilon.$$

から、$u = u(T)$ を考えてみたい。

(ア) $T \downarrow 0$ のとき、$u \to u_0$ とおくと、 $\alpha = \frac{(2s+1)m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}$

$$u_0 = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon = \alpha\int_0^{\varepsilon_F}\varepsilon^{3/2} d\varepsilon = \frac{2}{5}\alpha\,\varepsilon_F^{5/2} = \frac{\sqrt{2}(2s+1)m^{3/2}\varepsilon_F^{5/2}}{5\pi^2\hbar^3}$$

$(f_+ = 1)$.

(イ) $0 < T \ll T_F$ のとき.

① 直観的な説明: $u \fallingdotseq u_0 +$ (k_BT 程度の粒子状態が変化) × (k_BT 程度の εが増加)

$\simeq u_0 + a\cdot T^2$ $(a>0)$. (n fix, $0<T\ll T_F$)

よって、

$$C_V = \left(\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial T}\right)_{N,V} = V\left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_n \propto T.$$

これより、$T\to 0$ で $C_V \to 0$ (3rd law と合致).

↪ $\mu - k_BT \lesssim \varepsilon \lesssim \mu + k_BT$ の fermion しか動かれないことが原因

: ほかの粒子の自由度は死んでいる (Fermi degeneracy).

ある程度.

② 厳密な解.

Sommerfeld formula を $g = \varepsilon$ (εD) として用いると、

$$\cancel{u = \int_0^\infty \varepsilon \frac{D}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} d\varepsilon = \int_0^\mu \varepsilon d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2 + O(T^3)}$$

$$\cancel{= \frac{\mu^2}{2} + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2 \simeq \frac{\varepsilon_F^2}{2}\left[1-\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{T}{T_F}\right)^2\right]^2 + \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2}$$

$\varepsilon_F = k_BT_F$

より、

$$\cancel{C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{V,N} = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_n = \varepsilon_F^2\left[1-\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{T}{T_F}\right)^2\right]\cdot\left(-\frac{\pi^2}{6}\frac{T}{T_F^2}\right) + \frac{\pi^2}{3}(k_B^2 T)}$$

$$= k_B^2\left\{\left[1-\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{T}{T_F}\right)^2\right]\left(-\frac{\pi^2}{6}T\right) + \frac{\pi^2}{3}T\right\} = k_B^2\left[\frac{\pi^2}{6}T + \frac{\pi^4}{72}\frac{T^3}{T_F^2}\right]$$

Topological Science and Technology
Applied Physics, Hokkaido University

DATE

No.

$g=\varepsilon D$ として Sommerfeld を用いる：

$D=\alpha\sqrt{\varepsilon}$.

$$u=\int_0^\infty f_+\cdot \varepsilon D\,d\varepsilon \simeq \int_0^\mu \varepsilon D(\varepsilon)\,d\varepsilon+\frac{\pi^2}{6}(\varepsilon D)'(\mu)\cdot(k_BT)^2$$

$$=\int_0^{\varepsilon_F}\varepsilon D\,d\varepsilon-\varepsilon_F D(\varepsilon_F)\delta+\frac{\pi^2}{6}\left[\mu D'(\mu)+D(\mu)\right](k_BT)^2$$

$\varepsilon^{3/2}$

$$=u_0+\frac{\pi^2}{6}D(\varepsilon_F)\cdot(k_BT)^2$$

$$\therefore\ C_V=\underline{V\cdot\frac{\pi^2}{3}D(\varepsilon_F)\cdot k_B^2T}\ (\propto T).$$

- 高温における E, C_V

$T\gg T_F$ においては Boltzmann 分布がつかえる。

$$u=\int_0^\infty \varepsilon\cdot e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}D(\varepsilon)\,d\varepsilon\quad(\text{classical})$$

これは，$u=-\left(\frac{\partial n}{\partial\beta}\right)_{V,\mu}+\mu n$　$\therefore\left(\frac{\partial n}{\partial\beta}\right)_{V,\mu}=\mu n-u$.

$$(\text{左辺})=\alpha\cdot\frac{\partial}{\partial\beta}\left(e^{\beta\mu}\cdot\beta^{-3/2}\right)=\alpha\cdot\left(\mu e^{\beta\mu}\cdot\beta^{-3/2}-\frac{3}{2}e^{\beta\mu}\cdot\beta^{-5/2}\right).$$

$$=\mu n-\frac{n}{\beta}\frac{3}{2}\quad(\text{classical})$$

これより，$u=\frac{3n}{2\beta}=\frac{3}{2}nk_BT$. (classical).

→ 比熱はこれらで発散していない：P.T. していない。全 T で gas である。

15章.

◎ Bose分布と ideal boson gas

setup) N fix.

μ: T = T のときの化学ポテンシャル.

μ': T'(<T) 〃

$\mu, \mu' < \varepsilon_0$ の温度のとき. もし $\mu' \leq \mu$ とすると,

$$\forall \nu, \quad \frac{1}{e^{\beta'(\varepsilon_\nu - \mu')}-1} \leq \frac{1}{e^{\beta'(\varepsilon_\nu - \mu)}-1} < \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\nu - \mu)}-1}$$ となってしまう.

よって, $n = \frac{\sum \langle n_\nu \rangle}{V}$ = fix にするには, $\mu' > \mu$ になるしかない.

∴ T の上昇に対して μ は単調減少する. (at. $\mu < \varepsilon_0$ の温度)

・T を下げていく ($\mu \uparrow \varepsilon_0$ へ).

このとき, $\lim_{\mu \uparrow \varepsilon_0} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_0 - \mu)}-1} \to \infty$? 注意が必要

setup). スピンなし (S=0). ideal boson gas.

$$n = \frac{1}{V}\sum_k \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)}-1} \to \int_0^\infty f_-(\varepsilon)\, D(\varepsilon)\, d\varepsilon \quad (V \to \infty).$$

↳ これから, $\mu = \mu(T, n)$ を求める.

・高温領域 ($\varepsilon_0 - \mu \geq \Theta(V^0)$.) の ideal boson gas.

$$\langle n_\nu \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\nu - \mu)}-1} \leq \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_\nu - \varepsilon_0 + \Theta(V^0))}-1} \leq \frac{1}{e^{\beta\Theta(V^0)}-1} \leq \frac{1}{\Theta(V^0)} = \Theta(V^0)$$

$(\varepsilon_\nu - \varepsilon_0 \geq 0)$.

・μ が十分低いとき, : Boltzmann 分布が有効.

→ 高温低密度では fermion. boson も classical ideal gas.

・低温領域

(i) 低温かつ $\varepsilon_0-\mu \simeq O(V^0)$ のとき.

$$n=\int_0^\infty f_-(\varepsilon)D(\varepsilon)\,d\varepsilon = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1}\,d\varepsilon.$$

数値的に解ける. $T_c < T$ なら $\varepsilon_0-\mu \simeq O(V^0)$ となることがわかる.

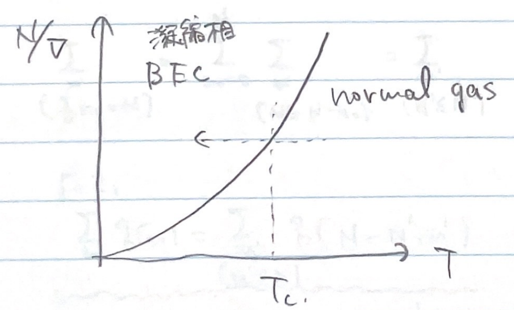
(ii) もっと低温のとき: $\varepsilon_0-\mu \simeq O(V^0)$, $\mu\uparrow\varepsilon_0$ (いま $\varepsilon_0=0$ より $\mu\uparrow 0$).
がおこりうること) (粒子 G.S. にマクロな数の粒子が占める.

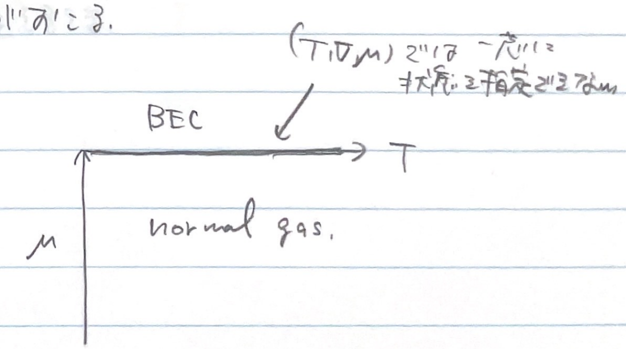
: $\lim_{V\to\infty}\frac{\langle n_0\rangle}{V} > 0$: Bose-Einstein 凝縮.

転移温度: $T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{k_B m\,\zeta(3/2)^{2/3}}n^{2/3}$ 以下

(ただし $\zeta(z) := \frac{1}{\Gamma(z)}\int_0^\infty \frac{x^{z-1}}{e^x-1}\,dx$ $(\mathrm{Re}\,z>1)$.
ガンマ関数
$\zeta(3/2)\simeq 2.6$.)

・定性的には T を下げていくと, $\mu\uparrow\varepsilon_0$ となって, $T=T_c$ となると, $\mu=\varepsilon_0=0$ となって, BEC がおこる.





● BECの計算.

・カノニカル集団の適用.

状態指定は $(V, \mathbb{n})$ でよい.

$$\sum_{\lambda} = \sum_{\substack{\mathbb{n} \\ (\sum n_\nu = N \text{ で fix})}}$$

$$\frac{\langle n_0 \rangle}{V} = \frac{1}{Z_1} \sum_{\substack{\mathbb{n} \\ (\sum n_\nu = N)}} e^{-\beta E_{\mathbb{n}}} \frac{n_0}{V}$$ ← 発散しないが和が独立じゃないから, 計算がムズい

・工夫.

$\mathbb{n} = (n_0, \mathbb{n}')$, $\mathbb{n}' := (n_1, \cdots)$, とおくと,

$$N = n_0 + N', \quad N' := \sum_{\nu \geq 1} n_\nu = \sum_{\substack{k \\ (k>0)}} n_k$$

このとき, 任意関数 $g(\mathbb{n})$

$$g(\mathbb{n}) = g(n_0, \mathbb{n}') = g(N - N', \mathbb{n}')$$

→ ミクロ状態は $(T, V, N, \overset{\lambda}{\mathbb{n}'})$ で指定される.

・自由粒子のエネルギー

$$E_{\mathbb{n}} = (N - N')\varepsilon_0 + \sum_{\nu \geq 1} \varepsilon_\nu n_\nu = N\varepsilon_0 + E_{\mathbb{n}'} \quad \left(E_{\mathbb{n}'} := \sum_{\nu \geq 1} (\varepsilon_\nu - \varepsilon_0) n_\nu\right)$$

・N fixで $g(\mathbb{n})$ を $\mathbb{n}$ について和をとるとき.

$$\sum_{\substack{\mathbb{n} \\ (\sum n_\nu = N)}} = \sum_{n_0 = 0}^{N} \sum_{\substack{\mathbb{n}' \\ (N' = N - n_0)}} = \sum_{\substack{\mathbb{n}' \\ (N' \leq N)}}$$

よって,

$$\underbrace{\sum_{\mathbb{n}} g(\mathbb{n}) = \sum_{\substack{\mathbb{n}' \\ (N' \leq N)}} g(N - N', \mathbb{n}').}$$

ex. $g(\mathbb{n}) = e^{-\beta E_{\mathbb{n}}} = e^{-\beta\{(N-N')\varepsilon_0 + \sum_{\nu \geq 1} n_\nu \varepsilon_\nu\}} = e^{-\beta\{N\varepsilon_0 + \sum_{\nu \geq 1}(\varepsilon_\nu - \varepsilon_0) n_\nu\}}$

$= e^{-\beta N \varepsilon_0} e^{-\beta E_{\mathbb{n}'}}$ のとき.

$$Z_1 = \sum_{\mathbb{n}} e^{-\beta E_{\mathbb{n}}} = e^{-\beta N \varepsilon_0} \sum_{\substack{\mathbb{n}' \\ (N' \leq N)}} e^{-\beta E_{\mathbb{n}'}}$$

◎ $\frac{\langle n_0\rangle}{V}$ の計算. $\left(n := \frac{N}{V}\right)$

$$\frac{\langle n_0\rangle}{V} = \sum_{\substack{\{n\}\\(N\,\mathrm{fix})}} \frac{1}{Z} e^{-\beta E_{\{n\}}} \frac{n_0}{V} = \sum_{\{n\}} \frac{1}{Z} e^{-\beta E_{\{n\}}} \cdot \frac{N-N'}{V} = \sum_{\{n\}} \frac{e^{-\beta E_{\{n\}}}}{Z}\left(n - \frac{N'}{V}\right)$$

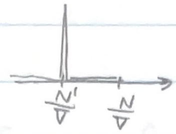
$$= n - \frac{\langle N'\rangle}{V}$$

として、$\frac{\langle N'\rangle}{V}$ を計算すればよい。

$$\frac{\langle N'\rangle}{V} = \frac{1}{Z}\sum_{\{n\}} e^{-\beta E_{\{n\}}} \frac{N'}{V} = \frac{\sum\limits_{\{n'\}}^{N'\mathrm{fix}} e^{-\beta E_{\{n'\}}} \frac{N'}{V}}{\sum\limits_{\substack{\{n'\}\\(N'\mathrm{fix})}} e^{-\beta E_{\{n'\}}}}$$

• $T < T_c$ のとき.

N'は相加量. → マクロに定まる.



$\frac{\partial}{\partial(\beta\varepsilon_1)} \ln\left(\sum_{n_1} e^{-\beta\varepsilon_1 n_1}\right)$

その他の状態は TDLで カクリツ的にとらない.

よって、

$$\sum_{\substack{\{n'\}\\(N'\mathrm{fix})}} \longrightarrow \underbrace{\sum_{\{n'\}} = \sum_{n_0}\sum_{n_1}\cdots}\ \ \text{for } T < T_c.$$

これは TDLで きまったN'になるような和である.

∴ $T<T_c$ では N' fixの情報は n_0 の方にあるので和から消せる.

$\sum_{n_1}$

$\alpha = -\beta\varepsilon_1 n_1$

e

よって、

$$\frac{\langle N'\rangle}{V} = \frac{1}{\sum_{\{n'\}} e^{-\beta E_{\{n'\}}}} \sum_{\{n'\}} e^{-\beta E_{\{n'\}}}\frac{N'}{V}$$ としてよい。

◎ 具体的な計算.

$x + x^2 + \cdots = \frac{1}{1-x}$

$\varepsilon_0 = 0$ とする. ∴ $E_{\{n'\}} = \sum_{\nu\ge1}\varepsilon_\nu n_\nu = \sum_{k\,(k>0)} \varepsilon_k n_k$.

$$\frac{\langle N'\rangle}{V} = \frac{1}{V}\,\frac{\sum_{n_1}\sum_{n_2}\cdots e^{-\beta\varepsilon_1 n_1} e^{-\beta\varepsilon_2 n_2}\cdots (n_1+n_2+\cdots)}{\sum_{n_1}\sum_{n_2}\cdots e^{-\beta\varepsilon_1 n_1}e^{-\beta\varepsilon_2 n_2}\cdots}$$

$e^\alpha + e^{2\alpha}2 + \cdots = A$

$$= \frac{1}{V}\left[\frac{\sum_{n_1} e^{-\beta\varepsilon_1 n_1} n_1}{\sum_{n_1} e^{-\beta\varepsilon_1 n_1}} + \cdots\right] = \frac{1}{V}\left[\frac{1}{e^{\beta\varepsilon_1}-1} + \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_2}-1}+\cdots\right]$$
$(T<T_c)$.

$e^{2\alpha}+\cdots = Ae^\alpha$

$(1-e^\alpha)A = e^\alpha + e^{2\alpha} + \cdots = \frac{1}{1-e^\alpha}$

$$-\left\{\begin{array}{l} A = e^\alpha + 2e^{2\alpha} + \cdots \\ e^\alpha A = \qquad\quad e^{2\alpha} + \cdots \end{array}\right.$$

$$\frac{1}{1-e^{-\alpha}} \cdot e^\alpha \frac{1}{1-e^\alpha} \cdot (1-e^\alpha) = \boxed{\frac{1}{e^{-\alpha}-1}}$$

$$(1-e^\alpha)A = e^\alpha + e^{2\alpha} + \cdots = e^\alpha \cdot \frac{1}{1-e^\alpha} \qquad A = \cancel{\frac{1}{1-e^\alpha}\cdot\frac{1}{e^{-\alpha}-1}} =$$

各項のTDLでのふるまいをみる.

$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, \cdots)\ (n_x \in \mathbb{Z})$, $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ より. $\varepsilon_\nu \geq \Theta(1/L^2)$ である.

$$\frac{1}{V}\frac{1}{e^{\beta\varepsilon_\nu}-1} \leq \frac{1}{V}\frac{1}{e^{\beta\Theta(1/L^2)}-1} \leq \frac{1}{V}\frac{1}{\beta\Theta(1/L^2)} \xrightarrow[(L\to\infty)]{} \infty$$

よって, 和→積分にして,

$$\lim_{V\to\infty}\frac{\langle N'\rangle}{V} = \lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\sum_{\substack{\mathbf{k}\\(k>0)}}\frac{1}{e^{\beta\varepsilon_k}-1} = \int_0^\infty \frac{D(\varepsilon)}{e^{\beta\varepsilon}-1}d\varepsilon.$$

ε=0で
これは収束する.

$$\left(\int \frac{D(\varepsilon)}{e^{\beta\varepsilon}-1}d\varepsilon \propto \int\frac{\sqrt{\varepsilon}}{\varepsilon}d\varepsilon = \int\frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}d\varepsilon \propto \sqrt{\varepsilon}.\right)$$

$$\lim_{V\to\infty}\frac{\langle N'\rangle}{V} = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3\beta^{3/2}}\int_0^\infty\frac{\sqrt{x}}{e^x-1}dx = \zeta\left(\frac{3}{2}\right)\left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$

よって,

$$\lim_{V\to\infty}\frac{\langle n_0\rangle}{N} = n - \zeta\left(\frac{3}{2}\right)\left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}.$$

となる. BECがおこる条件は $\lim_{V\to\infty}\frac{\langle n_0\rangle}{N} > 0$ $\therefore n > \zeta\left(\frac{3}{2}\right)\left(\frac{mk_BT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}.$

転移温度は $n = \zeta\left(\frac{3}{2}\right)\left(\frac{mk_BT_c}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}.$

これより.

$$\lim_{V\to\infty}\frac{\langle n_0\rangle}{V} = \begin{cases} 0 & (T > T_c) \\ \left[1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}\right]n & (T_c \geq T). \end{cases}$$

◎ 有限温度で $O(V)$コの粒子が $|\varphi_0\rangle$ を占有するか?

温度をわずかに正にする：粒子は $\varepsilon_l - \varepsilon_0 \lesssim k_B T$

それがNより少ない $\Rightarrow$ $O(V)$コの粒子は $|\varphi_0\rangle$ のまま (BEC)

大雑把には $N' \simeq V\, D(k_B T)\, k_B T \simeq V \left(\frac{m k_B T}{\hbar^2}\right)^{3/2}$

$\Rightarrow V \left(\frac{m k_B T_c}{\hbar^2}\right)^{3/2} \simeq N$

までは $O(V)$コの粒子が $|\varphi_0\rangle$ となる

(2次元, 1次元なら $\varepsilon \downarrow 0$ で $D \downarrow 0$ とならない. $\Rightarrow$ $\varepsilon \lesssim k_B T$ に十分な粒子がいる.

$\rightarrow$ 有限TではBECはない.

・$T \leq T_c$ でのエネルギー密度 (カノニカル集団で).

$$\frac{\langle E \rangle}{V} = \frac{1}{Z} \sum_{\substack{m \\ (N\,fix)}} e^{-\beta E_m} \frac{E_m}{V} = \frac{1}{V} \frac{\sum_{n_1}\sum_{n_2}\cdots e^{-\beta\varepsilon_1 n_1} e^{-\beta\varepsilon_2 n_2}\cdots (n_1 + n_2 + \cdots)}{\sum_{n_1}\sum_{n_2}\cdots e^{-\beta\varepsilon_1 n_1} e^{-\beta\varepsilon_2 n_2}\cdots}$$

$$= \frac{1}{V}\left[\frac{\varepsilon_1}{e^{-\beta\varepsilon_1} - 1} + \cdots\right] \quad \text{for } T < T_c$$

$$u = \lim_{V\to\infty} \frac{\langle E \rangle}{V} = \lim_{V\to\infty} \frac{1}{V} \sum_{\substack{k \\ (k>0)}} \frac{\varepsilon_k}{e^{\beta\varepsilon_k} - 1} = \int_0^\infty \frac{\varepsilon D(\varepsilon)}{e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon \quad \text{for } T < T_c$$

$dE = TdS - pdV$

$$= \frac{3}{2} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} (k_B T)^{5/2} \propto T^{5/2}$$

$dF = -SdT + pdV$

よって, 定積熱容量は

$$C_V = \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}\right)_{NV} \propto T^{3/2}.$$

$S = -\frac{\partial F}{\partial T}$

エントロピーは

$C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T}(F + TS)$

$$S(T, V, N) = S(T_0, V, N) + \int_{T_0}^{T} \frac{C_V(T, V, N)}{T} dT = S(T_0, V, N) + \alpha \int_{T_0}^{T} T^{1/2} dT$$

$$= S(T_0, V, N) + \alpha \cdot \frac{2}{3}\left(T^{3/2} - T_0^{3/2}\right) \xrightarrow[(T \to 0)]{} \frac{2}{3}\alpha' \cdot T^{3/2}$$

$$= \frac{5}{2} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) k_B \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} (k_B T)^{3/2} \cdot V$$

$F = -V \zeta(5/2) \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} (k_B T)^{5/2}$. $\therefore \mu = \frac{\partial F}{\partial N} = 0$ $\leftarrow$ 凝縮相 $(T < T_c)$ のとくちょう

⑩ 光子気体.

質量のない bosonの扱い...

① スピンは1だが、スピンだけが異なる状態は2コ ($\alpha = \pm 1$).

② 1粒子状態は古典電磁場での固有mode.

③ periodic. b.c. では $\nu = (\mathbf{k}, \alpha)$ でラベルできる. $\omega_k = c|\mathbf{k}|$

④ 電磁場のエネルギーは $E_n = \sum_{\substack{\mathbf{k},\alpha \\ (k>k_*)}} n_{\mathbf{k}\alpha}\cdot\hbar\omega_k$

⑤ $n_{\mathbf{k}\alpha}$: 光子数.

⑥ $E_n = 0, \hbar\omega_k, \cdots$ ← 量子化された.

⑦ 光子気体のHilbert Sp.はFock Sp.

⑧ TDLで $k\to 0$ なるmodeは非物理的 ⇝ $O(V^0)$のcutoff k_* を導入. $k \le k_*$は排除して $k > k_*$ のみをみる. ← 高Eのみをみる.
物理量は $\lim_{k_*\to 0}\lim_{V\to\infty}\hat{O}$ とする. 先にTDLをとる.

⑨ Nは自然な変数でない → (E, V)で状態を指定できる

・1粒子状態密度は

k空間において, $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ ごとに2コある

∴ $\tilde{D}(k)\,dk = \lim_{dk\to 0}\frac{1}{dk}\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\cdot 2\frac{4\pi k^2}{(2\pi/L)^3}dk = \frac{k^2}{\pi^2}$

これより,

$\tilde{D}(k)dk = D(\varepsilon)d\varepsilon$, $\varepsilon_k = c\hbar k$ だから, $D(\varepsilon) = \tilde{D}\cdot\frac{dk}{d\varepsilon} = \frac{k^2}{\pi^2 c\hbar}$ $\quad \left(k = \frac{\varepsilon_k}{c\hbar}\right)$

$$= \frac{1}{\pi^2 c\hbar}\cdot\left(\frac{\varepsilon}{c\hbar}\right)^2 = \frac{\varepsilon^2}{\pi^2 c^3\hbar^3}$$

・光子気体のキホン関係式

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = \sum_{\nu=1}\cdots e^{-\beta[E_1+\cdots]} = \prod_{\mathbf{k},\alpha}\frac{1}{1-e^{-\beta\hbar\omega_k}}$$

$$\therefore \frac{1}{V}\ln Z = -\frac{1}{V}\sum_{\substack{\mathbf{k},\alpha \\ (k>k_*)}}\ln\left(1-e^{-\beta\hbar\omega_k}\right).$$

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\ln Z = -\int_{\varepsilon_{k_*}}^{\infty}\ln\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)D(\omega)\,d\omega$$

・$\frac{1}{V}F(T,V) = -\frac{\pi^2}{45c^3\hbar^3}(k_BT)^4$

$\varepsilon = c\hbar\omega$

($\because$ $D(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^2}{\pi^2c^3\hbar^3}$, $D(\varepsilon)d\varepsilon = D(\omega)d\omega$ より.

$\left(D(\omega) = D(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{d\omega} = \frac{\varepsilon^2}{\pi^2c^3\hbar^3}\cdot\hbar = \frac{(\hbar\omega)^2\cdot\hbar}{\pi^2c^3\hbar^3} = \frac{\omega^2}{\pi^2c^3} \text{ だから}, \right)$

$\omega = c|k|$

$\varepsilon = \hbar c k$
$= \hbar c \frac{\omega}{c}$
$= \hbar\omega$

$$\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\ln Z = -\int_{\varepsilon_{k*}}^{\infty}\ln(1-e^{-\beta\varepsilon})d\varepsilon \cdot D(\varepsilon)$$

$$= -\int_{\varepsilon_{k*}}^{\infty}\ln(1-e^{-\beta\varepsilon})\cdot\frac{\varepsilon^2}{\pi^2c^3\hbar^3}d\varepsilon$$

$\beta\varepsilon = x$ とおくと, $\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\ln Z = -\int_{\frac{x_*}{\beta}}^{\infty}\ln(1-e^{-x})\cdot\frac{\frac{x^2}{\beta^2}}{\pi^2c^3\hbar^3}\frac{dx}{\beta}$

$$= \frac{-1}{\pi^2c^3\hbar^3\beta^3}\int_{\frac{x_*}{\beta}}^{\infty}\ln(1-e^{-x})\cdot x^2dx$$

$f'g$
$= fg$
$- fg'$

部積分は $\int_{\frac{x_*}{\beta}}^{\infty}\ln(1-e^{-x})\cdot x^2dx = \underbrace{\left[\frac{x^3}{3}\ln(1-e^{-x})\right]_{\frac{x_*}{\beta}}^{\infty}}_{=0} - \int_{\frac{x_*}{\beta}}^{\infty}\frac{x^3}{3}\cdot\frac{e^{-x}dx}{1-e^{-x}}$

$$= -\int\frac{x^3}{3}\cdot\frac{dx}{e^x-1} = -\frac{1}{3}\Gamma(4)\cdot\zeta(4) = -\frac{1}{3}\cdot 3!\,\zeta(4) = -2\cdot\frac{\pi^4}{90}$$

よって.

$$-\frac{1}{\beta}\lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\ln Z = \frac{-\pi^4}{45}\cdot\frac{1}{\pi^2c^3\hbar^3\beta^4} = -\frac{\pi^2}{45c^3\hbar^3}(k_BT)^4 \;\Big)$$

・エントロピー密度

$$\frac{S}{V} = -\frac{1}{V}\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{4\pi^2k_B^4}{45Vc^3\hbar^3}T^3$$

・エネルギー密度

$$\frac{E}{V} = \frac{1}{V}(F+TS) = \frac{1}{V}\cdot\frac{\pi^2k_B^4T^4}{c^3\hbar^3}\left(\frac{4}{45} - \frac{1}{45}\right) = \frac{\pi^2(k_BT)^4}{15c^3\hbar^3}$$

・Planckの輻射公式

電磁場が

$\omega_k \in [\omega - \frac{\Delta\omega}{2}, \omega + \frac{\Delta\omega}{2}]$ に含まれるエネルギー密度 $u(\omega)d\omega$ は

$$u(\omega) := \lim_{\Delta\omega \downarrow 0} \frac{1}{\Delta\omega} \lim_{V\to\infty} \frac{1}{V} (\omega_k \text{が} \quad \text{となるエネルギー})$$

(T, V) のみを指定：CEを使うが、$\mu = 0$ としたGCEでも同じ。

→ Bose分布で $\mu = 0$ として、

$$\langle n_{k\sigma} \rangle = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_k} - 1}$$

となる。よって、固有modeのエネルギー密度は

$$u(\omega) = \lim_{\Delta\omega\downarrow 0} \frac{1}{\Delta\omega} \lim_{V\to\infty} \frac{1}{V} \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1} V D(\omega) \Delta\omega = \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1} D(\omega)$$

$$= \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\beta\hbar\omega}-1}$$ ：Planckの輻射公式

→ $\hbar\omega_{pk} \simeq 2.82 k_B T$

高温範囲（$\hbar\omega \ll k_B T$）では

← 線形：エネルギー発散してしまう。

$$u(\omega) \simeq \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{1}{\beta\hbar\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \cdot k_B T =: u_{cl}(\omega)$$ ：Rayleigh-Jeansの法則

⑩ 格子振動

単位胞（unit cell）がならんで格子をくむ。QMでは量子化してphononという

微小振動なら原子間振動を2次でうちきってよい。（調和近似）

・unit cellが1つのatomからなるとき

固有modeは k でラベルづけ。振動方向は あるkにおいて k に平行（縦モード）

〃垂直（横〃　）×2

の3つ。$\alpha = 1, 2, 3$ とする。

⇝ 固有modeは (k, α) で指定できる。

→ これは $k \to 0$ で $\omega \to 0$ に向かう：音響phonon

$f^{\omega}(k)$ $= \int F(t) e^{-i\omega t} dt$ $= \int \frac{e^{-(k+i\omega)r}}{r} dr$

・unit cellが複数のatomからなるとき
: unit cell中で、重心の位置は変わらずに原子たちが振動しているとき
: 光学phononが存在する．これは $k \to 0$ でも $\omega \neq 0$ である．
光学phononはunit cell中の原子数でわかれる．
固有modeの個数は
音響phononは3コ，光学phononは3N−3コ．（N：構成原子数）．

16章．

Def 16.1

物理系のstate：同じ仕方で用意されたstateは同じstate．
state自体はその用意の仕方のこと．
「複数のstatesがどんな実験でも区別できない」⇒「これらは同じstates」

$\sum_{\alpha} \frac{1}{x} e^{-\beta\varepsilon_\alpha}$

$\sum_{\alpha} e^{-\beta\varepsilon_{\alpha}}$

Def 16.2

Stateの表現は写像で行う：状態ωが与えられたとすると，
$\omega : A \mapsto \{P(a)\}$
（A：可カンソク量）．（$\{P(a)\}$：Aのカクリツ分布．）

Def 16.3

$\omega, \omega', \omega''$：状態
$\{P_\omega(a)\}, \{P_{\omega'}(a)\}, \{P_{\omega''}(a)\}$：測定値aの分布．

「ωはω'とω''のmixed state 混合状態である」 ← ωはω'とω''に凸分解できるという．凸結合．
def ⟺「$\exists \omega', \omega'', \tau, \forall a. P_\omega(a) = \tau P_{\omega'}(a) + (1-\tau) P_{\omega''}(a)$ が成立．」 $(0<\tau<1)$
※ ω', ω'', τ は全observableで共通でないとダメ．

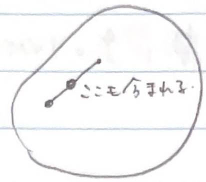
mixed stateでないstateをpure stateとよぶ．

すべてのmixed stateをpure stateまで分解できる．

Thm.16.1

物理的なstateの集合 $\mathcal{S}$ は凸集合.

集合の端点：どんな線分をひいても
それが端にきてしまうような点.



Thm.16.2

$\mathcal{S}$ の端点は pure state である. それ以外の点は mixed state である.

ex16.4.

・$\dim\mathcal{H}=2$ の $\mathcal{H}$ で記述できる Quantum states の集合 $\mathcal{S}$ を
Bloch球という. 球の表面上の点はすべて端点

・mixed state の表現

$\dim\mathcal{H}=d$ の $\mathcal{H}$内の 状態ベクトル $|\psi\rangle$ について,

$\hat{\rho} := |\psi\rangle\langle\psi|$; 密度ope. 密度行列 という.

Thm of math 16.1

Trの巡回不変性.

M_1 : $n_1\times n_2$ 行列, ..., M_m : $n_m\times n_1$ 行列 のとき.

$$\mathrm{Tr}[\hat{M}_1\cdots\hat{M}_m]=\mathrm{Tr}[\hat{M}_m\hat{M}_1\cdots\hat{M}_{m-1}]$$

が成立.

・Bornのカクリツ規則のかきかえ

$$: P(a)=\langle\psi|\hat{P}(a)|\psi\rangle=\mathrm{Tr}[\langle\psi|\hat{P}(a)|\psi\rangle]=\mathrm{Tr}[|\psi\rangle\langle\psi|\hat{P}(a)]$$
$$=\mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{P}(a)]$$

Thm of math 16.2

任意の CONS $\{|n\rangle\}$ について、$\sum_{n=1}^{d}|n\rangle\langle n| = \hat{I}$: 完全性関係 が成立。

Thm of math 16.3

任意の CONS $\{|n\rangle\} = |1\rangle \cdots |d\rangle$ について、

$$\mathrm{Tr}\hat{M} = \mathrm{Tr}[\hat{M}\hat{I}] = \mathrm{Tr}[\hat{M}\sum_{n=1}^{d}|n\rangle\langle n|] = \mathrm{Tr}[\sum_{n=1}^{d}\langle n|\hat{M}|n\rangle]$$

$$= \sum_{n=1}^{d}\langle n|\hat{M}|n\rangle \quad (\mathrm{Tr}\langle\psi|\hat{P}|\psi\rangle = \langle\psi|P|\psi\rangle \leftarrow 1\times1 \text{行列だから。})$$

- 1コのスピン系

状態ベクトル $|\phi^{z}_{\pm1}\rangle$ （$\hat{z}$ の e.v. ±1 に属する固有ベクトル）.

任意 observable $\hat{A}$ (e.v. a) を測定するときの確率分布 $P_{\pm z}(a)$ は

$$P_{\pm z}(a) = \mathrm{Tr}[|\phi^{z}_{\pm1}\rangle\langle\phi^{z}_{\pm1}|\hat{P}(a)]$$

setup). ex. app1: 確率 $\cos^2\frac{\theta}{2}$ で $|\phi^{z}_{+1}\rangle$ に用意。
$\sin^2\frac{\theta}{2}$ で $|\phi^{z}_{-1}\rangle$ 〃

このときの $\hat{A}$ の測定データの分布は

$$P_1(a) = \cos^2\frac{\theta}{2}P_{+z}(a) + \sin^2\frac{\theta}{2}P_{-z}(a).$$

$$= \cos^2\frac{\theta}{2}\mathrm{Tr}[|\phi^{z}_{+1}\rangle\langle\phi^{z}_{+1}|\hat{P}(a)] + \sin^2\frac{\theta}{2}\mathrm{Tr}[|\phi^{z}_{-1}\rangle\langle\phi^{z}_{-1}|\hat{P}(a)]$$

$$= \mathrm{Tr}[\underbrace{\{\cos^2\frac{\theta}{2}|\phi^{z}_{+1}\rangle\langle\phi^{z}_{+1}| + \sin^2\frac{\theta}{2}|\phi^{z}_{-1}\rangle\langle\phi^{z}_{-1}|\}}_{=:\hat{\rho}_1}\hat{P}(a)]$$

$|\pm\theta\rangle := \cos\frac{\theta}{2}|\phi^{2}_{+1}\rangle \pm \sin\frac{\theta}{2}|\phi^{2}_{-1}\rangle$: 重ね合わせ (superposition).

($\theta \neq$ 整数 $\times \pi$)

pure state : pure state の重ね合わせも pure state.

状態が $|\pm\theta\rangle$ のとき、任意 observable $\hat{A}$ の測定値 a の分布は

$$P_{\pm\theta}(a) = \mathrm{Tr}\left[|\pm\theta\rangle\langle\pm\theta|\hat{P}(a)\right]$$

である。

setup : app. 2. 確率 $1/2$ で $|+\theta\rangle$ を用意、

" $|-\theta\rangle$ "

この分布は

$$P_2(a) = \frac{1}{2}P_{+\theta}(a) + \frac{1}{2}P_{-\theta}(a) \quad \leftarrow \tau = 1/2 \text{ の mixed state.}$$

である。密度 ope. は

$$\hat{\rho}_2 := \frac{1}{2}|+\theta\rangle\langle+\theta| + \frac{1}{2}|-\theta\rangle\langle-\theta|$$

となる。

これらに対し、$\hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_2$ である。

(∵

$$|\pm\theta\rangle\langle\pm\theta| = \cos^2\frac{\theta}{2}|\phi^{2}_{+1}\rangle\langle\phi^{2}_{+1}| + \sin^2\frac{\theta}{2}|\phi^{2}_{-1}\rangle\langle\phi^{2}_{-1}|$$
$$\pm \cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}|\phi^{2}_{+1}\rangle\langle\phi^{2}_{-1}| \pm \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}|\phi^{2}_{-1}\rangle\langle\phi^{2}_{-1}|.$$

より、

$$\hat{\rho}_2 = \cancel{\tfrac{1}{4}}\cos^2\frac{\theta}{2}|\phi^{2}_{+1}\rangle\langle\phi^{2}_{+1}| + \sin^2\frac{\theta}{2}|\phi^{2}_{-1}\rangle\langle\phi^{2}_{-1}| = \hat{\rho}_1 \quad \square\,)$$

ρ だと同じ state なのが

よって、$P_1(a) = P_2(a)$ for all $\hat{A}$ and a ← 見やすい。

Thm. 16.4

$\hat{\rho}$は次をみたす.

① $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$

② $\mathrm{Tr}[\hat{\rho}] = 1$

③ $\langle\phi|\hat{\rho}|\phi\rangle \geq 0$ for 任意ベクトル$|\phi\rangle$.

Prf. pure stateへの分解.

① $\hat{\rho}^\dagger = \sum_j r_j (|\psi_j\rangle\langle\psi_j|)^\dagger = \sum_j r_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j| = \hat{\rho}$

② $\mathrm{Tr}[\hat{\rho}] = \mathrm{Tr}[\sum_j r_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|] = \sum_j r_j$ を $\mathrm{Tr}[\langle\psi_j|\psi_j\rangle] = \sum_j r_j \langle\psi_j|\psi_j\rangle$

$= \sum_j r_j = 1$.

③ $\langle\phi|\hat{\rho}|\phi\rangle = \sum_j r_j \langle\phi|\psi_j\rangle\langle\psi_j|\phi\rangle = \sum_j r_j |\langle\psi_j|\phi\rangle|^2 \geq 0$. □

・干渉項.

$\theta = \frac{\pi}{2}$のとき. $\hat{X}$ (スピンx成分) は

$\hat{\rho}_1$: $\langle X\rangle = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_1 \hat{X}] = \frac{1}{2}\langle\phi_{+1}^z|\hat{X}|\phi_{+1}^z\rangle + \frac{1}{2}\langle\phi_{-1}^z|\hat{X}|\phi_{-1}^z\rangle = 0$

$(1,0)\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$

$(1,0)\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

$(1,0)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$

$|+\theta\rangle$: $\langle X\rangle = \langle+\theta|\hat{X}|+\theta\rangle = \frac{1}{2}(\langle\phi_{+1}^z|\hat{X}|\phi_{+1}^z\rangle + \langle\phi_{+1}^z|\hat{X}|\phi_{-1}^z\rangle + \cdots)$

$= 1$ // この項でかわる.

・pure state. mixed stateの判別.

① $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$

② $\mathrm{Tr}[\hat{\rho}^2] = 1$.

がどちらか成立すれば pure stateである.

17章

・mc の density ope.

S の natural var. が E, V, N の単純系

ミクロ state は (V, N, λ) として、$E_{VN\lambda}$ がエネルギー ← E.e.s. : e.vec. $|\Phi_{VN\lambda}\rangle$ とする

おいて、$\hat{\rho}(E, V, N) = \frac{1}{W(E,V,N)} \sum_{\lambda\,(E-\Delta E_- < E_{VN\lambda} \le E+\Delta E_+)} |\Phi_{VN\lambda}\rangle\langle\Phi_{VN\lambda}|$: ミクロカノニカル Gibbs state.

規格化定数

$= \frac{1}{W(E)} \sum_{\lambda\,(\because)} |\Phi_\lambda\rangle\langle\Phi_\lambda|$

特徴

① density ope. の thm をみたす.

$\mathrm{Tr}[\sum_\lambda |\Phi_\lambda\rangle\langle\Phi_\lambda|] = \sum_{\lambda\,(\;)} \mathrm{Tr}[|\Phi_\lambda\rangle\langle\Phi_\lambda|] = \sum_{\lambda\,(\;)} 1 = W(E, V, N).$

② ミクロにも定常 (マクロにも定常). (e.g. state には マクロに定常の要求のみなので過剰).

時間発展で $|\Phi_\lambda\rangle \to e^{-\frac{iE_\lambda}{\hbar}t}|\Phi_\lambda\rangle$ となるが

$$|\Phi_\lambda\rangle\langle\Phi_\lambda| \to e^{-\frac{iE_\lambda}{\hbar}t} \cdot e^{\frac{iE_\lambda}{\hbar}t} |\Phi_\lambda\rangle\langle\Phi_\lambda| = |\Phi_\lambda\rangle\langle\Phi_\lambda|.$$

・ce の density ope.

↳ given の V, N をもつ /E 2 のミクロ状態が $P_\lambda(\beta, V, N)$ で含まれる. ens.

$\rightsquigarrow \hat{\rho}(\beta, V, N) = \frac{1}{Z(\beta, V, N)} \sum_{\lambda\,(V,N\,\mathrm{fix})} e^{-\beta E_{VN\lambda}} |\Phi_{VN\lambda}\rangle\langle\Phi_{VN\lambda}|$: カノニカル Gibbs state.

$= \frac{1}{Z(\beta, V, N)} e^{-\beta \hat{H}_{VN}} \doteq \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta\hat{H}}$ (*).

$\left(\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}}] = \sum_\lambda e^{-\beta E_\lambda} \mathrm{Tr}[|\Phi_\lambda\rangle\langle\Phi_\lambda|] = \sum_\lambda e^{-\beta E_\lambda} = Z. \right)$

(∵ (*) について, $\lambda = (n, l)$, ただし $l = 1, 2, \dots, m_n$ (m_n : 縮退度)

E.e.v. を E_n, E.e.vec. を $|\Phi_n^l\rangle$ とかく.

つまり, $\sum_\lambda = \sum_n \sum_{l=1}^{m_n}$ となるから,

$\hat{P}(a) := \sum_{l=1}^{m_a} |\Phi_a^l\rangle\langle\Phi_a^l|$

$\hat{\rho}(\beta) = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_n \sum_{l=1}^{m_n} e^{-\beta E_n} |\Phi_n^l\rangle\langle\Phi_n^l| = \frac{1}{Z(\beta)} \sum_n e^{-\beta E_n} \hat{P}(E_n).$

$= \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta\hat{H}}$ $\left(\because f(\hat{A}) := \sum_a f(a) \hat{P}(a) \right).$)

・ gc の density ope.

ce と同様に、

$$\hat{\rho}(\beta, V, \mu) = \frac{1}{\Xi(\beta, V, \mu)} \sum_N \sum_\lambda e^{-\beta(E_\lambda - \mu N)} |\Phi_{VN\lambda}\rangle\langle\Phi_{VN\lambda}|$$

$$= \frac{1}{\Xi} \sum_N e^{-\beta(\hat{H} - \mu N)}$$

$$\cdot \mathrm{Tr}\left[\sum_N e^{-\beta(\hat{H} - \mu N)}\right] = \mathrm{Tr}\left[\sum_N \sum_\lambda e^{-\beta(E_\lambda - \mu N)} |\Phi_{VN\lambda}\rangle\langle\Phi_{VN\lambda}|\right]$$

$$= \sum_N \sum_\lambda e^{-\beta(E_\lambda - \mu N)} \mathrm{Tr}\left[|\Phi_{VN\lambda}\rangle\langle\Phi_{VN\lambda}|\right] = \Xi(\beta, V, N)$$ より、$\frac{1}{\Xi}$ は規格化定数。

● 数演算子を用いた表現

↳ 粒子数 N の $\mathcal{H}$ sp. 上の ope. $\hat{H}_{VN}$ → Fock sp. 上の ope. $\hat{H}_V$ へかきかえ。
(Hilbert sp. を拡大)

(準備) $|n\rangle$: 任意 Fock basis.

数 ope : $\hat{n}_\nu |n\rangle = n_\nu |n\rangle$ なる self adjoint ope $\hat{n}_\nu$ を def.

また、$\hat{N} := \sum_\nu \hat{n}_\nu$ とすると、

$$\hat{N}|n\rangle = \left(\sum_\nu \hat{n}_\nu\right)|n\rangle = \sum_\nu \hat{n}_\nu |n\rangle = \sum_\nu n_\nu |n\rangle = N|n\rangle$$

となるから、この $\hat{n}_\nu$ で N は Fock sp. 上の ope.

多くの場合 $[\hat{N}, \hat{H}_V] = 0$ ⇒ e. vec. を同時 e. vec. にとる。 $|\Phi_{VN\lambda}\rangle$

→ $\hat{N}$ の値を 1 つにまとめると、density ope は ~~me, ce~~ の同じ形になる。

gc へとまとめ

$$\hat{\rho}(\beta, V, \mu) := \frac{1}{\Xi(\beta, V, \mu)} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}$$

同様に、$\Xi(\beta, V, \mu) = \mathrm{Tr}\left[e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})}\right]$

• 相互作用なし同種粒子系.

$\hat{H}_V = \sum_m E_m |m\rangle\langle m| = \sum_\nu \varepsilon_\nu \hat{n}_\nu$

e.g.1. 光子気体のGibbs state.

$\nu = (\mathbf{k}, \alpha)$, $\varepsilon_\nu = \hbar\omega_k = \hbar \cdot c|\mathbf{k}|$, (T, V) で eq. state を指定.

このdensity ope. より

$$\hat{\rho}(\beta, V) = \frac{1}{Z(\beta, V)} \exp\Big[-\beta \sum_{\substack{\mathbf{k},\alpha \\ (k>k_*)}} \hbar\omega_k \hat{n}_{\mathbf{k}\alpha}\Big]$$

$$= \prod_{\substack{\mathbf{k},\alpha \\ (k>k_*)}} (1 - e^{-\beta\hbar\omega_k}) e^{-\beta\hbar\omega_k \hat{n}_{\mathbf{k}\alpha}}$$

を示す.

$\hat{\rho}$ から Planckの公式を求める.

$\omega_k \in (\omega - \frac{\Delta\omega}{2}, \omega + \frac{\Delta\omega}{2}]$ にする.

エネルギー密度は

$$\cancel{\langle u \rangle = \lim_{\Delta\omega\downarrow 0} \frac{1}{\Delta\omega} \lim_{V\uparrow\infty} \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{k},\alpha \\ \omega_k \in (\omega - \frac{\Delta\omega}{2}, \omega + \frac{\Delta\omega}{2}]}} \langle \hat{\rho}\, \hbar\omega_k \hat{n}_{\mathbf{k},\alpha} \rangle}$$

$$\cancel{= \lim_{\Delta\omega\downarrow 0} \frac{1}{\Delta\omega} \lim_{V\uparrow\infty} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k},\alpha} \langle \prod_{\substack{\mathbf{k},\alpha \\ (k>k_*)}} (1 - e^{-\beta\hbar\omega_k}) e^{-\beta\hbar\omega \hat{n}_{\mathbf{k}\alpha}} \cdot \hbar\omega_k \hat{n}_{\mathbf{k},\alpha} \rangle}$$

$$\cancel{= \quad '' \quad \sum \prod \hbar\omega_k (1 - e^{-\beta\hbar\omega_k}) \langle e^{-\beta\hbar\omega_k \hat{n}_{\mathbf{k},\alpha}} \hat{n}_{\mathbf{k},\alpha} \rangle}$$

$$\cancel{= \quad '' \quad \sum \prod \hbar\omega_k (1 - e^{-\beta\hbar\omega_k})}$$

$$\frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}$$

$$\cancel{= \lim_{\Delta\omega\downarrow 0} \frac{1}{\Delta\omega} \lim_{V\uparrow\infty} \frac{1}{V} \cdot \prod \hbar\omega_k (1 - e^{-\beta\hbar\omega_k}) \cdot \langle e^{-\beta\hbar\omega_k \hat{n}_{\mathbf{k}\alpha}} \hat{n}_{\mathbf{k},\alpha} \rangle \cdot V D(\omega)\Delta\omega}$$

$e^{-\alpha a} a$

$=$

$$\mathrm{Tr}\Big[\hat{\rho} \sum_{\omega_k - \frac{\Delta\omega}{2} < \omega_k \le \omega + \frac{\Delta\omega}{2}} \hbar\omega_k \hat{n}_{\mathbf{k}\alpha}\Big] = \sum_{\omega_k} \mathrm{Tr}[\hat{\rho}\hat{n}_{\mathbf{k}\alpha}]\, \hbar\omega_k = \sum_{\omega_k} \hbar\omega_k \mathrm{Tr}[\hat{\rho}]\, \mathrm{Tr}[\hat{n}]$$

$$\langle u \rangle = \lim_{\Delta\omega\downarrow 0} \frac{1}{\Delta\omega} \lim_{V\uparrow 0} \frac{1}{V} \mathrm{Tr}\Big[\rho \sum \hbar\omega_k \hat{n}_{\mathbf{k}\alpha}\Big]$$

e.g.2 ideal Fermi gas の Gibbs state.

$\nu = (\mathbf{k}, \sigma)$. $\varepsilon_\nu = \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ としたものが $\hat{H}_0$

eq. state は (T, V, μ) で指定. → ge の density ope. に入れる:

$$\hat{\rho}(\beta, V, \mu) = \frac{1}{\Xi(\beta, V, \mu)} \exp\left[-\beta \sum_{k\sigma} (\varepsilon_k - \mu) \hat{n}_{k\sigma}\right].$$

$$= \prod_{k,\sigma} \frac{1}{1 + e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}} e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)\hat{n}_{k\sigma}}$$

・磁性体のカンタンなモデルの Gibbs State.

$\hat{M}$: 全磁化を表す ope. $[\hat{M}, \hat{H}_N] = 0$

↳ 全スピンの和にたん例

setup) 量子スピン系とする. → $V = $ const. より. S の natural var. は (E, N, M).

$\mu_0 = 1$ とする.

$\hat{M}$ を(の値) 1つきめて me の density ope. は

$$\hat{\rho} = \frac{1}{W(E, N, M)} \sum_{\substack{\lambda \\ (E - \Delta E_- < E_{NM\lambda} \le E + \Delta E_+)}} |\Phi_{NM\lambda}\rangle\langle\Phi_{NM\lambda}|$$

となる. ge のときは

→ $\hat{H}^{\text{eff}}$; effective な Hamiltonian.

$$\hat{\rho}(\beta, N, h) = \frac{1}{\Xi(\beta, N, h)} e^{-\beta(\hat{H}_N - h \cdot \hat{M})}.$$

・ideal Fermi gas の磁性.

スピンのみがジバと相互作用する.

: [1つの e^- の磁気モーメントの z 成分] $= -\sigma\mu_B$. $(\sigma = \pm 1)$ ← Bohr 磁子.

1粒子 e.v. E は $\varepsilon_{k\sigma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \sigma\mu_B h$

仮定) $\mu_B |h| \ll \varepsilon_F$

$m = -\mu_B(n_+ - n_-)$. ($n_\pm$: $\sigma = \pm 1$ を占有する e^- の数密度)

これより、

$\langle m\rangle = -\mu_B\left(\langle n_+\rangle - \langle n_-\rangle\right)$.

である。ここで

相が平衡より

$\langle n_\pm\rangle = \frac{1}{V}\sum_{k} f_+(\varepsilon_{k\pm})$.　（$\sigma=+1$ と $\sigma=-1$ の化学ポテンシャルが同じ）

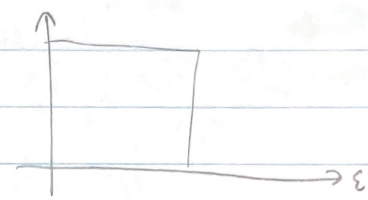
$$= \int_0^\infty f_+(\varepsilon \mp \mu_B h)\,\frac{D(\varepsilon)}{2}\,d\varepsilon.$$

スピンを考慮して、
$2S+1=2$ で割る。

より、

$$\langle m\rangle = \mu_B \int_0^\infty \left[f_+(\varepsilon-\mu_B h) - f_+(\varepsilon+\mu_B h)\right]\frac{D(\varepsilon)}{2}\,d\varepsilon,$$

カンタンのため $T\downarrow 0$ となると、



$\langle m\rangle = \underbrace{\mu_B^2 h D(\varepsilon_F)}_{\propto\sqrt{\varepsilon_F}}$.

よって、

$$\chi_T = \lim_{h\to 0}\left(\frac{\partial\langle m\rangle}{\partial h}\right) = \mu_B^2 D(\varepsilon_F).$$