

ボーズ分布関数・フェルミ分布関数の導出

全エネルギーEと全粒子数Nは

$$E = \sum_i \varepsilon_i N_i \cdots \cdots ① \quad N = \sum_i N_i \cdots \cdots ②$$

①②の条件を満たしつつエントロピーSを最大にすることを考える。

$$S = k \log W \cdots \cdots ③$$

<フェルミ粒子>

区別のつかないN個の粒子を、重なりを許さずに G_i 個の状態に N_i 個の粒子を分配する方法 P_i は

★ G_i 個の箱から N_i 個の箱を選び出す場合の数に相当する。



$$G_i! = P_i(G_i - N_i)! N_i! \quad P_i = \frac{G_i!}{(G_i - N_i)! N_i!} \quad W_f = \prod_i \frac{G_i!}{(G_i - N_i)! N_i!} \cdots \cdots ④$$

<ボーズ粒子>

区別のつかないN個の粒子を、重なりを許して G_i 個の状態に N_i 個の粒子を分配する方法 P_i は

★ N_i 個の粒子の間に $(G_i - 1)$ 個の間仕切りを置く順列の場合の数に相当する。



$$P_i(G_i - 1)! N_i! = (N_i + G_i - 1)! \quad P_i = \frac{(N_i + G_i - 1)!}{(G_i - 1)! N_i!} \quad W_b = \prod_i \frac{(N_i + G_i - 1)!}{(G_i - 1)! N_i!} \cdots \cdots ⑤$$

$$\text{スターリングの公式} \quad \log M! = M \log M - M$$

G_i と N_i は、1 より十分に大きな値であり 1 は分母、分子の計算には影響を与えないと考えられる。

<ボーズ粒子>について

$$\begin{aligned} \log W_b &= \log \prod_i \frac{(N_i + G_i - 1)!}{(G_i - 1)! N_i!} = \sum_i \{ \log(N_i + G_i - 1)! - \log(G_i - 1)! - \log N_i! \} \\ &= \sum_i \{ (N_i + G_i) \log(N_i + G_i) - (N_i + G_i) - G_i \log G_i + G_i - N_i \log N_i + N_i \} \\ &= \sum_i \{ (N_i + G_i) \log(N_i + G_i) - G_i \log G_i - N_i \log N_i \} \cdots \cdots ⑥ \end{aligned}$$

$N_i \rightarrow N_i + \delta N_i$ の変分を考える。

$$\begin{aligned} &\delta [(N_i + G_i) \log(N_i + G_i) - G_i \log G_i - N_i \log N_i] \\ &= [(\{N_i + \delta N_i\} + G_i) \log(\{N_i + \delta N_i\} + G_i) - G_i \log G_i - \{N_i + \delta N_i\} \log\{N_i + \delta N_i\}] \\ &\quad - [(N_i + G_i) \log(N_i + G_i) - G_i \log G_i - N_i \log N_i] \\ &= (\{N_i + \delta N_i\} + G_i) \log(\{N_i + \delta N_i\} + G_i) - \{N_i + \delta N_i\} \log\{N_i + \delta N_i\} - (N_i + G_i) \log(N_i + G_i) + N_i \log N_i \cdots \cdots ⑦ \\ &(\{N_i + \delta N_i\} + G_i) \log(\{N_i + \delta N_i\} + G_i) = (\{N_i + \delta N_i\} + G_i) \log(N_i + G_i + \delta N_i) \\ &= (\{N_i + \delta N_i\} + G_i) \log(N_i + G_i) \left(1 + \frac{\delta N_i}{(N_i + G_i)} \right) \\ &= (\{N_i + G_i\} + \delta N_i) \log(N_i + G_i) + (\{N_i + G_i\} + \delta N_i) \log \left(1 + \frac{\delta N_i}{(N_i + G_i)} \right) \\ &= (\{N_i + G_i\}) \log(N_i + G_i) + (\delta N_i) \log(N_i + G_i) + (N_i + G_i) \left(\frac{\delta N_i}{(N_i + G_i)} \right) + (\delta N_i) \left(\frac{\delta N_i}{(N_i + G_i)} \right) \\ &= (N_i + G_i) \log(N_i + G_i) + \delta N_i \log(N_i + G_i) + \delta N_i \cdots \cdots ⑧ \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \delta[(N_i + G_i) \log(N_i + G_i) - G_i \log G_i - N_i \log N_i] = \delta N_i \log(N_i + G_i) + \delta N_i - (N_i + \delta N_i) \log(N_i + \delta N_i) + N_i \log N_i \\
& = \delta N_i \log(N_i + G_i) + \delta N_i - (N_i + \delta N_i) \log N_i \left(1 + \frac{\delta N_i}{N_i}\right) + N_i \log N_i \\
& = \delta N_i \log(N_i + G_i) + \delta N_i - (N_i + \delta N_i) \log N_i - (N_i + \delta N_i) \log \left(1 + \frac{\delta N_i}{N_i}\right) + N_i \log N_i \\
& = \delta N_i \log(N_i + G_i) + \delta N_i - (N_i + \delta N_i) \log N_i - (N_i + \delta N_i) \left(\frac{\delta N_i}{N_i}\right) + N_i \log N_i \\
& = \delta N_i \log(N_i + G_i) + \delta N_i - N_i \log N_i - \delta N_i \log N_i - (N_i) \left(\frac{\delta N_i}{N_i}\right) - (\delta N_i) \left(\frac{\delta N_i}{N_i}\right) + N_i \log N_i \\
& = \delta N_i \log(N_i + G_i) + \delta N_i - N_i \log N_i - \delta N_i \log N_i - \delta N_i - (\delta N_i) \left(\frac{\delta N_i}{N_i}\right) + N_i \log N_i \\
& = \delta N_i \log(N_i + G_i) - \delta N_i \log N_i \\
& = \delta N_i (\log(N_i + G_i) - \log N_i) \cdots \textcircled{9}
\end{aligned}$$

$$\delta(\log W_b) = \sum_i (\log(N_i + G_i) - \log N_i) \delta N_i \cdots \textcircled{10}$$

$$\delta E = \sum_i \varepsilon_i \delta N_i = 0 \cdots \textcircled{11}$$

$$\delta N = \sum_i \delta N_i = 0 \cdots \textcircled{12}$$

⑪⑫の条件を満たしながら⑩が0でなければならないのでラグランジュの未定常数法より α 、 β を任意の定数とすると、⑩ $-\alpha \times \textcircled{12} - \beta \times \textcircled{11}$ を作ると

$$\delta(\log W_b) = \sum_i (\log(N_i + G_i) - \log N_i - \beta \varepsilon_i - \alpha) \delta N_i = 0 \cdots \textcircled{13}$$

$$(\log(N_i + G_i) - \log N_i - \beta \varepsilon_i - \alpha) = 0 \cdots \textcircled{14}$$

$$\left(\log \frac{(N_i + G_i)}{N_i} - \beta \varepsilon_i - \alpha \right) = \left(\log \left(1 + \frac{G_i}{N_i} \right) - \beta \varepsilon_i - \alpha \right) = 0$$

$$\log \left(1 + \frac{G_i}{N_i} \right) = \beta \varepsilon_i + \alpha \quad 1 + \frac{G_i}{N_i} = \exp(\beta \varepsilon_i + \alpha) \quad \frac{G_i}{N_i} = \exp(\alpha + \beta \varepsilon_i) - 1$$

$$\frac{N_i}{G_i} = \frac{1}{\exp(\alpha + \beta \varepsilon_i) - 1} \cdots \textcircled{15} \quad \text{ボーズ・アインシュタイン分布}$$

<フェルミ粒子>について

$$\log W_f = \log \prod_i \frac{G_i!}{(G_i - N_i)! N_i!} = \sum_i \{ \log G_i! - \log(G_i - N_i)! - \log N_i! \}$$

$$= \sum_i \{ G_i \log G_i - G_i - (G_i - N_i) \log(G_i - N_i) + (G_i - N_i) - N_i \log N_i + N_i \}$$

$$= \sum_i \{ G_i \log G_i - (G_i - N_i) \log(G_i - N_i) - N_i \log N_i \} \cdots \textcircled{16}$$

$$\delta[G_i \log G_i - (G_i - N_i) \log(G_i - N_i) - N_i \log N_i]$$

$$= [G_i \log G_i - (G_i - \{N_i + \delta N_i\}) \log(G_i - \{N_i + \delta N_i\}) - \{N_i + \delta N_i\} \log\{N_i + \delta N_i\}] - [G_i \log G_i - (G_i - N_i) \log(G_i - N_i) - N_i \log N_i]$$

$$\begin{aligned}
& [G_i \log G_i - (\{G_i - N_i\} - \delta N_i) \log (\{G_i - N_i\} - \delta N_i) - \{N_i + \delta N_i\} \log \{N_i + \delta N_i\}] \\
&= G_i \log G_i - (G_i - N_i) \log (G_i - N_i) \left(1 - \frac{\delta N_i}{(G_i - N_i)}\right) + \delta N_i \log (G_i - N_i) \left(1 - \frac{\delta N_i}{(G_i - N_i)}\right) - N_i \log N_i \left(1 + \frac{\delta N_i}{N_i}\right) - \delta N_i \log N_i \left(1 + \frac{\delta N_i}{N_i}\right) \\
&= G_i \log G_i - (G_i - N_i) \log (G_i - N_i) - (G_i - N_i) \log \left(1 - \frac{\delta N_i}{(G_i - N_i)}\right) + \delta N_i \log (G_i - N_i) + \delta N_i \log \left(1 - \frac{\delta N_i}{(G_i - N_i)}\right) \\
&\quad - N_i \log N_i \left(1 + \frac{\delta N_i}{N_i}\right) - \delta N_i \log N_i - \delta N_i \log \left(1 + \frac{\delta N_i}{N_i}\right) \\
&= G_i \log G_i - (G_i - N_i) \log (G_i - N_i) + (G_i - N_i) \left(\frac{\delta N_i}{(G_i - N_i)}\right) + \delta N_i \log (G_i - N_i) - \delta N_i \left(\frac{\delta N_i}{(G_i - N_i)}\right) \\
&\quad - N_i \log N_i - N_i \log \left(1 + \frac{\delta N_i}{N_i}\right) - \delta N_i \log N_i - \delta N_i \left(\frac{\delta N_i}{N_i}\right) \\
&= G_i \log G_i - (G_i - N_i) \log (G_i - N_i) + \delta N_i + \delta N_i \log (G_i - N_i) + \delta N_i \left(\frac{\delta N_i}{(G_i - N_i)}\right) - N_i \log N_i - \delta N_i - \delta N_i \log N_i - \delta N_i \left(\frac{\delta N_i}{N_i}\right) \\
&= G_i \log G_i - (G_i - N_i) \log (G_i - N_i) + \delta N_i + \delta N_i \log (G_i - N_i) - N_i \log N_i - \delta N_i \log N_i - \delta N_i \\
&= [G_i \log G_i - (G_i - N_i) \log (G_i - N_i) + \delta N_i \log (G_i - N_i) - N_i \log N_i - \delta N_i \log N_i] \\
&\delta [G_i \log G_i - (G_i - N_i) \log (G_i - N_i) - N_i \log N_i] \\
&= [G_i \log G_i - (G_i - N_i) \log (G_i - N_i) + \delta N_i \log (G_i - N_i) - N_i \log N_i - \delta N_i \log N_i] - [G_i \log G_i - (G_i - N_i) \log (G_i - N_i) - N_i \log N_i] \\
&= [\delta N_i \log (G_i - N_i) - \delta N_i \log N_i] \\
&= [\log (G_i - N_i) - \log N_i] \delta N_i \cdots \textcircled{17}
\end{aligned}$$

⑪⑫の条件を満たしながら⑩が0でなければならないのでラグランジュの未定常数法より α 、 β を任意の定数とすると、⑪ $-\alpha \times$ ⑫ $-\beta \times$ ⑩を作ると

$$\delta(\log W_f) = \sum_i (\log(G_i - N_i) - \log N_i - \beta \varepsilon_i - \alpha) \delta N_i = 0 \cdots \textcircled{18}$$

$$\log(G_i - N_i) - \log N_i - \beta \varepsilon_i - \alpha = 0 \quad \log(G_i - N_i) - \log N_i = \beta \varepsilon_i + \alpha$$

$$\log \frac{(G_i - N_i)}{N_i} = \beta \varepsilon_i + \alpha \quad \log \left(\frac{G_i}{N_i} - 1 \right) = \beta \varepsilon_i + \alpha \quad \frac{G_i}{N_i} - 1 = \exp[\beta \varepsilon_i + \alpha] \quad \frac{G_i}{N_i} = \exp[\beta \varepsilon_i + \alpha] + 1$$

$$\frac{N_i}{G_i} = \frac{1}{\exp[\alpha + \beta \varepsilon_i] + 1}$$

フェルミ・ディラック分布