2005年度統計力学II 宿題11 (6月27日出題、7月4日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題1.] デバイモデル (10.51) で、エネルギーが高温では T に、低温では T^4 に比例することを示せ。

[解答] デバイ模型におけるフォノンのエネルギーは、P159 の (10.49) に (10.51) を代入して

$$E = \int_0^{\omega_D} \hbar\omega \frac{9N}{\omega_D^3}\omega^2 \frac{1}{\exp[\beta\hbar\omega]-1}d\omega \tag{1}$$

$x = \beta\hbar\omega$ に変数変換して

$$= \int_0^{\beta\hbar\omega_D} k_{\mathrm{B}}Tx\frac{9N}{\omega_D^3}\left(\frac{k_{\mathrm{B}}Tx}{\hbar}\right)^2 \frac{1}{e^x-1}\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar}dx \tag{2}$$

$$= (k_{\mathrm{B}}T)^4\frac{9N}{\hbar^3\omega_D^3}\int_0^{\beta\hbar\omega_D}\frac{x^3}{e^x-1}dx \tag{3}$$

まず低温の場合から考えると、β は大きいので、積分の上限を無限大に出来る。

$$E \approx (k_{\mathrm{B}}T)^4\frac{9N}{\hbar^3\omega_D^3}\int_0^{\infty}\frac{x^3}{e^x-1}dx \tag{4}$$

P158 の注から

$$= (k_{\mathrm{B}}T)^4\frac{9N}{\hbar^3\omega_D^3}\frac{\pi^4}{15} \tag{5}$$

これは T^4 に比例する。

次に高温の場合は、

$$f(y) = \int_0^{y}\frac{x^3}{e^x-1}dx \tag{6}$$

として、$f(y)$ をテーラー展開する。

$$f'(x) = \frac{x^3}{e^x - 1} \tag{7}$$

$$f''(x) = \frac{3x^2}{e^x - 1} - \frac{x^3 e^x}{(e^x - 1)^2} \tag{8}$$

$$f'''(x) = \frac{6x}{e^x - 1} - \frac{3x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} - \frac{3x^2 e^x + x^3 e^x}{(e^x - 1)^2} + 2\frac{x^3 e^{2x}}{(e^x - 1)^3} \tag{9}$$

したがって、$f(0) = f'(0) = f''(0) = 0$ で、

$$f'''(0) = \frac{6x}{x} - \frac{3x^2}{x^2} - \frac{3x^2}{x^2} + 2\frac{x^3}{x^3} = 2 \tag{10}$$

だから

$$f(x) = \frac{x^3}{3!} f'''(0) + \cdots = \frac{x^3}{3} + \cdots \tag{11}$$

(3) 式に代入して

$$E \approx (k_{\mathrm{B}}T)^4 \frac{9N}{\hbar^3 \omega_D^3} \frac{(\beta\hbar\omega_D)^3}{3} = 3Nk_{\mathrm{B}}T \tag{12}$$

[問題 2.](10.51) はどういう考えに基づいているかを説明しなさい。特に ω が小さいところでは厳密なことを示せ。(文献を調べよ。)

[解答] まず、ω が小さいところでは厳密なことをしめす。ω が小さいところでは結晶を連続弾性体と見なせ、変位は連続体の波として伝わる。ただし、結晶に端があれば、全ての波長の波が存在できるわけではなく、光の時と同様、波数ベクトル $\mathbf{k}$ は、

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}\mathbf{n} \qquad n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{13}$$

となる。さらに、波の状態は $\mathbf{n}$ だけでは指定できない。弾性波は、縦波 1 つと、横波 2 つの種類があるので、それを指定するのに、x を使う、

$$x = 1 \qquad \text{縦波} \tag{14}$$

$$x = 2 \qquad \text{横波 1} \tag{15}$$

$$x = 3 \qquad \text{横波 2} \tag{16}$$

フォノンの粒子数は、P146(10.2) を使って、

$$N = \sum_{\mathbf{n},x} \frac{1}{\exp[\beta\hbar\omega_{\mathbf{n},x}] - 1} \tag{17}$$

ただし、振動数 $\omega_{\mathbf{n},x}$ は、$\mathbf{n}$ だけでなく x にもよる。

$$= \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{\exp[\beta\hbar\omega_{\mathbf{n},1}] - 1} + \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{\exp[\beta\hbar\omega_{\mathbf{n},2}] - 1} + \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{\exp[\beta\hbar\omega_{\mathbf{n},3}] - 1} \tag{18}$$

V 無限大で

$$= \int_0^\infty \frac{d\mathbf{n}}{\exp[\beta\hbar\omega_{\mathbf{n},1}] - 1} + \int_0^\infty \frac{d\mathbf{n}}{\exp[\beta\hbar\omega_{\mathbf{n},2}] - 1} + \int_0^\infty \frac{d\mathbf{n}}{\exp[\beta\hbar\omega_{\mathbf{n},3}] - 1} \tag{19}$$

$$\begin{aligned} &= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_0^\infty \frac{4\pi k^2 dk}{\exp[\beta\hbar\omega_{k,1}] - 1} \\ &+ \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_0^\infty \frac{4\pi k^2 dk}{\exp[\beta\hbar\omega_{k,2}] - 1} + \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int_0^\infty \frac{4\pi k^2 dk}{\exp[\beta\hbar\omega_{k,3}] - 1} \end{aligned} \tag{20}$$

$\omega_{k,n}$ と k の関係は音波の分散関係から、

$$\omega_{k,1} = c_l k \tag{21}$$

$$\omega_{k,2/3} = c_t k \tag{22}$$

ゆえに

$$k^2 dk = \left(\frac{\omega_{k,1}}{c_l}\right)^2 \frac{d\omega_{k,1}}{c_l} = \left(\frac{\omega_{k,2/3}}{c_t}\right)^2 \frac{d\omega_{k,2/3}}{c_t} \tag{23}$$

だから、

$$\begin{aligned} N = \frac{L^3}{2\pi^2} \Bigg(&\int_0^\infty \frac{1}{\exp[\beta\hbar\omega_{k,1}] - 1} \frac{\omega_{k,1}^2}{c_l^3} d\omega_{k,1} \\ &+ \int_0^\infty \frac{1}{\exp[\beta\hbar\omega_{k,2}] - 1} \frac{\omega_{k,2}^2}{c_t^3} d\omega_{k,2} + \int_0^\infty \frac{1}{\exp[\beta\hbar\omega_{k,3}] - 1} \frac{\omega_{k,3}^2}{c_t^3} d\omega_{k,3} \Bigg) \end{aligned} \tag{24}$$

積分変数は勝手に変えられるので、3 つとも ω にすると

$$= \frac{V}{2\pi^2}\int_0^\infty \frac{1}{\exp[\beta\hbar\omega]-1}\left(\frac{\omega^2}{c_l^3}+2\frac{\omega^2}{c_t^3}\right)d\omega \tag{25}$$

したがって、弾性体の状態密度は、厳密に

$$D(\omega) = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{1}{c_l^2}+2\frac{1}{c_t^2}\right)\omega^2 \tag{26}$$

一般の結晶でも ω が小さいところでは成り立つ。

しかし、弾性体の状態密度は、$\omega \to \infty$ で発散してしまう。現実の結晶では、振動の自由度は有限なので、これはおかしい。そこで、デバイ模型では、$\omega = \omega_D$ で急に $D(\omega) = 0$ になるようにする。ω_D は一般に成り立つ関係式

$$\int_0^\infty D(\omega)d\omega = 3N \tag{27}$$

から決める。この式は、状態密度を全部の振動数で積分すれば、全ての自由度の数になることを使っている。結晶の振動子の場合、3 次元であれば、$3N$ 個ある。