2005 年度統計力学 II 宿題 6 (5 月 23 日出題、5 月 30 日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] ①$D(\epsilon) = D_0\epsilon^n$ のとき、E と PV の関係を求めなさい。[*1]

[解答] ①ここでは、$D(\epsilon)$ に内部状態の数 g を含める。つまり、教科書 P137 の (9.19) 式の $gD(\epsilon)$ に $D_0\epsilon^n$ を代入する。

$$\frac{PV}{k_{\rm B}T} = \int_0^\infty D_0\epsilon^n \ln(1+ze^{-\beta\epsilon})d\epsilon \tag{1}$$

$n = 1/2$ の時と同様、部分積分すると、$n > -1$ だから、

$$PV = k_{\rm B}TD_0\left[\frac{\epsilon^{n+1}}{n+1}\ln(1+ze^{-\beta\epsilon})\right]_0^\infty - k_{\rm B}TD_0\int_0^\infty \frac{\epsilon^{n+1}}{n+1}\frac{z(-\beta)e^{-\beta\epsilon}}{1+e^{-\beta\epsilon})}d\epsilon \tag{2}$$

$[\cdots]$ は、$\epsilon = 0$ で、$n > -1$ だから 0、$\epsilon \to \infty$ は、$e^{-\beta\epsilon} \to 0$ で 0 になる。

$$PV = k_{\rm B}TD_0\beta\int_0^\infty \frac{\epsilon^{n+1}}{n+1}\frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon}+1}d\epsilon \tag{3}$$

$\beta = 1/(k_{\rm B}T), z = e^{\beta\mu}$ だから

$$= D_0\int_0^\infty \frac{\epsilon^{n+1}}{n+1}\frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1}d\epsilon \tag{4}$$

一方、P134 の (9.7) 式に $gD(\epsilon)$ に $D_0\epsilon^n$ を代入

$$E = \int_0^\infty \frac{\epsilon D_0\epsilon^n}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1}d\epsilon \tag{5}$$

$$= D_0\int_0^\infty \frac{\epsilon^{(n+1)}}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1}d\epsilon \tag{6}$$

$$= (n+1)PV \tag{7}$$

[*1] $n > -1$ を追加して下さい。

[問題 2.] 教科書演習問題 p144[5] を解きなさい。

[解答](1) 教科書 P133(9.2) 式を積分で近似して、スピンの縮退度を考えると、

$$N = 2\int_{-\infty}^{\infty} dn_x \int_{-\infty}^{\infty} dn_y f(\epsilon_{\mathbf{n}}) \tag{8}$$

ここで、$f(\epsilon)$ は、教科書 P134 の (9.4) 式で与えられるフェルミの分布関数を表す。$\mathbf{n} = (n_x, n_y)$ は、2 次元平面の正方形内に閉じこれられた自由粒子の量子数で、波数 $\mathbf{k}$ とは、$\mathbf{k} = (2\pi/L)\mathbf{n}$ で結ばれている。積分変数を $\mathbf{n}$ から $\mathbf{k}$ に変換すると、

$$= 2\frac{A}{(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y f(\epsilon_{\mathbf{k}}) \tag{9}$$

ここで、$A = L^2$ を使った。さらに、曲座標 $(k_x = k\cos\theta, k_y = k\sin\theta)$ に変換すると、

$$= 2\frac{A}{(2\pi)^2}\int_0^{\infty} kdk \int_0^{2\pi} d\theta f(\epsilon_{\mathbf{k}}) \tag{10}$$

$\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_k$ で、k にしかよらないので、

$$= 2\frac{A}{(2\pi)^2}\int_0^{\infty} kdk 2\pi f(\epsilon_k) \tag{11}$$

$$= \frac{A}{\pi}\int_0^{\infty} kdk f(\epsilon_k) \tag{12}$$

授業ではここからさらに ϵ に変数変換したが、この問題では k 積分のまま進む。絶対零度のときは、

$$N = \frac{A}{\pi}\int_0^{k_F} kdk \tag{13}$$

$$= \frac{A}{\pi}\frac{k_F^2}{2} \tag{14}$$

これを k_F で解けば、$k_F = \sqrt{2\pi N/A}$ が得られる。

　また、

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{15}$$

だから、これから

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{2\pi N}{A} = \frac{\hbar^2 \pi N}{mA} \tag{16}$$

(2) エネルギーも同様に、教科書 P133(9.3) 式を積分で近似して、

$$E = 2\int_{-\infty}^{\infty} dn_x \int_{-\infty}^{\infty} dn_y \epsilon_{\mathbf{n}} f(\epsilon_{\mathbf{n}}) \tag{17}$$

まったく同じように、積分変数を変換すると、(15) 式から

$$= \frac{A}{\pi}\int_0^{\infty} kdk \frac{\hbar k^2}{2m} f(\epsilon_k) \tag{18}$$

絶対零度では、

$$= \frac{A}{\pi}\int_0^{k_F} kdk \frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{A}{\pi}\frac{\hbar}{2m}\frac{k_F^4}{4} \tag{19}$$

これは、

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{A}{\pi}\frac{k_F^2}{2}\right)\left(\frac{\hbar}{2m}k_F^2\right) \tag{20}$$

と書き換えると、(14) 式と (15) から、$E = N\epsilon_F/2$ が示せる。

(3) $D(\epsilon)$ は、授業でやった方法で計算すると、(12) 式で k から ϵ に積分を変換する。(15) から $d\epsilon = \hbar k dk/(2m)$ だから、

$$N = \frac{A}{\pi}\int_0^{\infty} \frac{2md\epsilon}{\hbar} f(\epsilon_k) \tag{21}$$

これから、$D(\epsilon) = A(2m)/(\pi\hbar)$ となる。

(4) 教科書 P134 の (9.6) 式から、積分範囲を 3 つに分けて

$$
\begin{aligned}
N &= \int_{-\infty}^{\infty} D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon && (22)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \int_0^{\infty} f(\epsilon) d\epsilon && (23)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \int_0^{\mu - 2k_\mathrm{B}T} d\epsilon + \int_{\mu - 2k_\mathrm{B}T}^{\mu + 2k_\mathrm{B}T} \left(\frac{1}{2} - \frac{\epsilon - \mu}{4k_\mathrm{B}T} \right) d\epsilon \right\} && (24)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \mu - 2k_\mathrm{B}T + \left[\frac{1}{2}\epsilon - \frac{(\epsilon - \mu)^2}{8k_\mathrm{B}T} \right]_{\mu - 2k_\mathrm{B}T}^{\mu + 2k_\mathrm{B}T} \right\} && (25)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \mu - 2k_\mathrm{B}T + \frac{1}{2} \times 4k_\mathrm{B}T - \frac{(2k_\mathrm{B}T)^2 - (2k_\mathrm{B}T)^2}{8k_\mathrm{B}T} \right\} && (26)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \mu && (27)
\end{aligned}
$$

したがって、$\mu = \epsilon_F$ となる。

(5) エネルギーも同様に積分区間を分けて

$$
\begin{aligned}
E &= \int_{-\infty}^{\infty} D(\epsilon) \epsilon f(\epsilon) d\epsilon && (28)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \int_0^{\infty} \epsilon f(\epsilon) d\epsilon && (29)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \int_0^{\mu - 2k_\mathrm{B}T} \epsilon d\epsilon + \int_{\mu - 2k_\mathrm{B}T}^{\mu + 2k_\mathrm{B}T} \epsilon \left(\frac{1}{2} - \frac{\epsilon - \mu}{4k_\mathrm{B}T} \right) d\epsilon \right\} && (30)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \int_0^{\mu - 2k_\mathrm{B}T} \epsilon d\epsilon \right.\\
&\qquad \left. + \int_{\mu - 2k_\mathrm{B}T}^{\mu + 2k_\mathrm{B}T} \{(\epsilon - \mu) + \mu\} \left(\frac{1}{2} - \frac{\epsilon - \mu}{4k_\mathrm{B}T} \right) d\epsilon \right\} && (31)
\end{aligned}
$$

$\delta\epsilon = \epsilon - \mu$ として、2 項目の積分を変数変換、

$$
E = \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \frac{(\mu - 2k_\mathrm{B}T)^2}{2} + \int_{-2k_\mathrm{B}T}^{2k_\mathrm{B}T} (\delta\epsilon + \mu) \left(\frac{1}{2} - \frac{\delta\epsilon}{4k_\mathrm{B}T} \right) d\delta\epsilon \right\} \qquad (32)
$$

2 項目の積分は奇関数の部分が 0 だから、

$$E = \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{(\mu - 2k_{\mathrm{B}}T)^2}{2} + \int_{-2k_{\mathrm{B}}T}^{2k_{\mathrm{B}}T}\left(\frac{\mu}{2} - \frac{\delta\epsilon^2}{4k_{\mathrm{B}}T}\right) d\delta\epsilon\right\} \tag{33}$$

$$= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{(\mu - 2k_{\mathrm{B}}T)^2}{2} + 2\left[\frac{\mu}{2}\delta\epsilon - \frac{\delta\epsilon^3}{12k_{\mathrm{B}}T}\right]_0^{2k_{\mathrm{B}}T}\right\} \tag{34}$$

$$= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{(\mu - 2k_{\mathrm{B}}T)^2}{2} + \mu(2k_{\mathrm{B}}T) - \frac{(2k_{\mathrm{B}}T)^3}{6k_{\mathrm{B}}T}\right\} \tag{35}$$

$$= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{\mu^2}{2} + \left(2 - \frac{4}{3}\right)(k_{\mathrm{B}}T)^2\right\} \tag{36}$$

$$= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{\mu^2}{2} + \frac{2}{3}(k_{\mathrm{B}}T)^2\right\} \tag{37}$$