2004年度統計力学II 宿題6 (5月24日出題、5月31日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題] 教科書P144演習問題[5] (ただし、2次元平面内の1辺Lの正方形の中に閉じ込められているとする。$A = L^2$)

[解答] (1)から(3)までは、2通りの解法を示す。

授業でやった解き方 ((3)から解く方法)

(3) 2次元をxy平面としてハミルトニアンは、

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) \tag{1}$$

と書ける。固有関数$\phi_E(x, y)$の境界条件は、周期的で、

$$\phi_E(x + L, y) = \phi_E(x, y + L) = \phi_E(x, y) \tag{2}$$

この境界条件の元で、$\hat{H}\phi_E(x, y) = E\phi_E(x, y)$をとくと、3次元のときと同様に固有値は、$k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$として、

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \tag{3}$$

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}\mathbf{n} \qquad (n_x, n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \tag{4}$$

つまり、固有状態は、波数k_x, k_yの2次元空間に、$2\pi/L$の間隔で並ぶ。したがって、状態数$\Sigma(\epsilon)$は、この波数空間における半径$\sqrt{2m\epsilon/\hbar^2}$の円内の点の数で表される。ただし、スピンの縮退度は2なので、1つの点に2個の状態が含まれている[1]。$A = L^2$だから、

$$\Sigma(\epsilon) = 2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \pi \left(\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}\right) \tag{5}$$

$$= \frac{A}{2\pi}\frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \tag{6}$$

[1] 教科書P135では、$D(\epsilon)$を、スピンの縮退度gを含めずに定義したが、ここでは含めて定義する。

$D(\epsilon) = d\Sigma(\epsilon)/d\epsilon$だから、

$$D(\epsilon) = \frac{A}{2\pi}\frac{2m}{\hbar^2} = \frac{Am}{\pi\hbar^2} \tag{7}$$

(1) 教科書(9.12)式から($g=2$は、$D(\epsilon)$に含まれている)

$$N = \int_0^{\epsilon_F} D(\epsilon)d\epsilon = \frac{Am}{\pi\hbar^2}\int_0^{\epsilon_F} d\epsilon = \frac{Am}{\pi\hbar^2}\epsilon_F \tag{8}$$

逆に解くと、

$$\epsilon_F = \frac{\pi\hbar^2}{Am}N \tag{9}$$

$k_F = \sqrt{2m\epsilon_F/\hbar^2}$だから、

$$k_F = \sqrt{\frac{2\pi}{A}N} \tag{10}$$

(2) 教科書(9.13)式から

$$E = \int_0^{\epsilon_F} D(\epsilon)\epsilon d\epsilon = \frac{Am}{\pi\hbar^2}\int_0^{\epsilon_F} \epsilon d\epsilon = \frac{Am}{\pi\hbar^2}\frac{\epsilon_F^2}{2} \tag{11}$$

(9)式を代入して、

$$E = \frac{Am}{2\pi\hbar^2}\left(\frac{\pi\hbar^2 N}{Am}\right)^2 = \frac{\pi\hbar^2 N^2}{2Am} = \frac{\epsilon_F N}{2} \tag{12}$$

教科書P220の解答のやり方

((1)と(2)を$D(\epsilon)$を使わずに解く方法)

[考え方] $D(\epsilon)$は、そもそも教科書P133の(9.2)式や(9.3)式の$\sum_k$を、ϵの積分に置き換えたときに出てくるものだった。この因子が必要なのは、横軸にϵをとったとき、固有状態が等間隔に並んでいないためだ。

$\sum_k$を積分に直すのは、特にϵを積分変数にする必要はないので、ここでは、波数の積分を考える。波数空間では、固有状態は、$2\pi/L$の等間隔で並んでいるので、単に

$$\sum_k \longrightarrow g\int d\mathbf{k}\left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \tag{13}$$

とすれば良い。ただし、dは空間の次元を表していて、2次元だと$d=2$で、3次元だと$d=3$になる。$d\mathbf{k}$は、2次元だと、dk_xdk_yを、3次元だと$dk_xdk_ydk_z$を表す。gは、内部自由度(スピン)の縮退度を表す。

[解答](1) 教科書P133の(9.1)を波数空間の積分に直すと、$d=2$、$g=2$、$A=L^2$なので、

$$N = 2\int d\mathbf{k}\frac{A}{(2\pi)^2}f(\epsilon) \tag{14}$$

ϵは、$\epsilon = \hbar^2k^2/2m$で、波数の絶対値$k=\sqrt{k_x^2+k_y^2}$と結ばれている。積分変数をk_x, k_yから、極座標k, θに変換すると、

$$N = 2\frac{A}{(2\pi)^2}\int_0^\infty kdk\int_0^{2\pi} d\theta f(\epsilon) \tag{15}$$

$f(\epsilon)$は、θに依らないから、

$$N = 2\frac{A}{(2\pi)^2}\int_0^\infty kdk 2\pi f(\epsilon) \tag{16}$$

絶対零度のときは、$k>k_F$で$f(\epsilon)=0$、$k<k_F$で$f(\epsilon)=1$だから、

$$N = 4\pi\frac{A}{(2\pi)^2}\int_0^{k_F} kdk \tag{17}$$

$$= 4\pi\frac{A}{(2\pi)^2}\frac{k_F^2}{2} = 2\pi\frac{A}{(2\pi)^2}k_F^2 \tag{18}$$

k_Fについて解けば、$k_F = \sqrt{2\pi N/A}$となり、ϵ_Fも$\epsilon_F = \hbar^2k_F^2/2m = \hbar^2\pi N/Am$。

(2) エネルギーは、教科書P133の(9.3)式だから、

$$E = 2\int d\mathbf{k}\frac{A}{(2\pi)^2}\epsilon f(\epsilon) \tag{19}$$

Nと同様に

$$E = 4\pi\frac{A}{(2\pi)^2}\int_0^\infty kdk\epsilon f(\epsilon) \tag{20}$$

絶対零度で

$$E = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{k_F} \epsilon k dk \tag{21}$$

$\epsilon = \hbar^2 k^2/2m$ を代入して

$$E = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} k dk = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{k_F^4}{4} \tag{22}$$

$\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2/2m$ を使うと、

$$E = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \epsilon_F \frac{k_F^2}{4} \tag{23}$$

(1) の結果 $N = 2\pi k_F^2 A/(2\pi)^2$ から、

$$E = \frac{N}{2} \epsilon_F \tag{24}$$

(3) 教科書の解答は、$\Sigma(\epsilon)$ を使っているが、ここでは、別解として、積分変数の変換を使う。

話を一般的にするために、任意の ϵ の関数、$F = F(\epsilon)$ を考える。この $F(\epsilon)$ は、例えば、$f(\epsilon)$ や $\epsilon f(\epsilon)$ などを表す。この $F(\epsilon)$ を波数で積分すると、

$$I = 2 \int d\mathbf{k} \frac{A}{(2\pi)^2} F(\epsilon) \tag{25}$$

$F(\epsilon) = f(\epsilon)$ のとき、$I = N$ で、$F(\epsilon) = \epsilon f(\epsilon)$ ならば、$I = E$ になる。問題 (1) と (2) でやったのと同じように極座標に変換すると、

$$I = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} k dk F(\epsilon) \tag{26}$$

ここで、積分変数を ϵ に変換することを考える。

$$I = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} k(\epsilon) \frac{dk}{d\epsilon} d\epsilon F(\epsilon) \tag{27}$$

$k(\epsilon)=\sqrt{2m\epsilon/\hbar^2}$、$dk/d\epsilon=\sqrt{2m}/(2\hbar\sqrt{\epsilon})$ だから、

$$\begin{aligned}
I &= 4\pi\frac{A}{(2\pi)^2}\int_0^\infty\sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}}\frac{\sqrt{2m}}{2\hbar\sqrt{\epsilon}}d\epsilon F(\epsilon) \quad (28)\\
&= 4\pi\frac{A}{(2\pi)^2}\int_0^\infty\frac{m}{\hbar^2}d\epsilon F(\epsilon) \quad (29)
\end{aligned}$$

$I=\int D(\epsilon)F(\epsilon)d\epsilon$だから、

$$D(\epsilon)=4\pi\frac{A}{(2\pi)^2}\frac{m}{\hbar^2}=\frac{Am}{\pi\hbar^2} \quad (30)$$

[宿題] 3 次元の場合にもこのような考えで状態密度が出せるかどうか、確かめなさい。

残りの問題は、教科書の解答どおりϵ積分で考える。
(4) 教科書P134 の (9.6) 式から、積分範囲を3 つに分けて

$$\begin{aligned}
N &= \int_{-\infty}^\infty D(\epsilon)f(\epsilon)d\epsilon \quad (31)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\int_0^\infty f(\epsilon)d\epsilon \quad (32)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\int_0^{\mu-2k_\mathrm{B}T}d\epsilon+\int_{\mu-2k_\mathrm{B}T}^{\mu+2k_\mathrm{B}T}\left(\frac{1}{2}-\frac{\epsilon-\mu}{4k_\mathrm{B}T}\right)d\epsilon\right\} \quad (33)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\mu-2k_\mathrm{B}T+\left[\frac{1}{2}\epsilon-\frac{(\epsilon-\mu)^2}{8k_\mathrm{B}T}\right]_{\mu-2k_\mathrm{B}T}^{\mu+2k_\mathrm{B}T}\right\} \quad (34)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\mu-2k_\mathrm{B}T+\frac{1}{2}\times 4k_\mathrm{B}T-\frac{(2k_\mathrm{B}T)^2-(2k_\mathrm{B}T)^2}{8k_\mathrm{B}T}\right\} \quad (35)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\mu \quad (36)
\end{aligned}$$

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

$$E = \int_{-\infty}^\infty D(\epsilon)\epsilon f(\epsilon)d\epsilon \quad (37)$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\int_0^\infty \epsilon f(\epsilon)d\epsilon && (38)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\int_0^{\mu-2k_\mathrm{B}T}\epsilon d\epsilon + \int_{\mu-2k_\mathrm{B}T}^{\mu+2k_\mathrm{B}T}\epsilon\left(\frac{1}{2}-\frac{\epsilon-\mu}{4k_\mathrm{B}T}\right)d\epsilon\right\} && (39)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\int_0^{\mu-2k_\mathrm{B}T}\epsilon d\epsilon\right.\\
&\quad \left.+\int_{\mu-2k_\mathrm{B}T}^{\mu+2k_\mathrm{B}T}\{(\epsilon-\mu)+\mu\}\left(\frac{1}{2}-\frac{\epsilon-\mu}{4k_\mathrm{B}T}\right)d\epsilon\right\} && (40)
\end{aligned}
$$

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

$$
E = \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{(\mu-2k_\mathrm{B}T)^2}{2} + \int_{-2k_\mathrm{B}T}^{2k_\mathrm{B}T}(\delta\epsilon+\mu)\left(\frac{1}{2}-\frac{\delta\epsilon}{4k_\mathrm{B}T}\right)d\delta\epsilon\right\} \tag{41}
$$

2項目の積分は奇関数は、0だから、

$$
\begin{aligned}
E &= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{(\mu-2k_\mathrm{B}T)^2}{2} + \int_{-2k_\mathrm{B}T}^{2k_\mathrm{B}T}\left(\frac{\mu}{2}-\frac{\delta\epsilon^2}{4k_\mathrm{B}T}\right)d\delta\epsilon\right\} && (42)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{(\mu-2k_\mathrm{B}T)^2}{2} + 2\left[\frac{\mu}{2}\delta\epsilon-\frac{\delta\epsilon^3}{12k_\mathrm{B}T}\right]_0^{2k_\mathrm{B}T}\right\} && (43)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{(\mu-2k_\mathrm{B}T)^2}{2} + \mu(2k_\mathrm{B}T)-\frac{(2k_\mathrm{B}T)^3}{6k_\mathrm{B}T}\right\} && (44)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{\mu^2}{2} + \left(2-\frac{4}{3}\right)(k_\mathrm{B}T)^2\right\} && (45)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{\mu^2}{2} + \frac{2}{3}(k_\mathrm{B}T)^2\right\} && (46)
\end{aligned}
$$