2006 年度統計力学 II 宿題 4 (5 月 10 日出題、5 月 17 日提出) 解答

担当 吉森 明

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

[訂正] D_0 は、体積 V に比例するとして下さい。体積に依存しないと思われた方、申し分けありませんでした。

[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。

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

$n = 1/2$ の時と同様、部分積分すると、$n > -1$ だから、

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

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

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

$\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$ だから

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

$x = \beta\epsilon$ に変数変換すると、

$$= D_0 \int_0^\infty \frac{(k_{\mathrm{B}}T)^{n+1}x^{n+1}}{n+1}\frac{1}{z^{-1}e^x + 1}k_{\mathrm{B}}Tdx \tag{5}$$

$$= D_0\frac{(k_{\mathrm{B}}T)^{n+2}}{n+1}\int_0^\infty \frac{x^{n+1}}{z^{-1}e^x + 1}dx \tag{6}$$

フェルミ-ディラック積分 (9.21) を使うと、

$$= D_0 \frac{(k_{\mathrm{B}}T)^{n+2}}{n+1}\Gamma(n+2) f_{n+2}(z) \tag{7}$$

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

$$E = \int_0^\infty \frac{\epsilon D_0 \epsilon^n}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1} d\epsilon \tag{8}$$

$$= D_0 \int_0^\infty \frac{\epsilon^{n+1}}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1} d\epsilon \tag{9}$$

PV と同じように $x = \beta\epsilon$ に変数変換し、$z = \exp[\beta\mu]$ すると、

$$= D_0 \int_0^\infty \frac{(k_{\mathrm{B}}T)^{n+1}\epsilon^{n+1}}{e^x z^{-1}+1} k_{\mathrm{B}}T dx \tag{10}$$

フェルミ-ディラック積分 (9.21) を使うと、

$$= D_0 (k_{\mathrm{B}}T)^{n+2}\Gamma(n+2) f_{n+2}(z) \tag{11}$$

$$= (n+1)PV \tag{12}$$

[別解] フェルミ-ディラック積分を使わなくても、直接 (6) 式と (11) 式を比べて、$E = (n+1)PV$ は導ける。

[問題 2.] 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、4 月 26 日出題の宿題 1 と同じだが、ここでは、教科書の P220 の解答の方法で説明する。
[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、

$$N = 2\frac{A}{(2\pi)^2}\int_0^\infty kdk2\pi f(\epsilon) \tag{16}$$

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

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

$\epsilon = \hbar^2 k^2/2m$ を代入して

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

$\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2/2m$ 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、

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

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、

$$I = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}} \frac{\sqrt{2m}}{2\hbar\sqrt{\epsilon}} d\epsilon F(\epsilon) = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^\infty \frac{m}{\hbar^2} d\epsilon F(\epsilon) \tag{28}$$

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

$$D(\epsilon) = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \frac{m}{\hbar^2} = \frac{Am}{\pi\hbar^2} \tag{29}$$

[**問題**] 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

$$\begin{aligned}
N &= \int_{-\infty}^{\infty} D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon & (30)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \int_0^\infty f(\epsilon) d\epsilon & (31)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \int_0^{\mu - 2k_{\mathrm{B}}T} d\epsilon + \int_{\mu - 2k_{\mathrm{B}}T}^{\mu + 2k_{\mathrm{B}}T} \left(\frac{1}{2} - \frac{\epsilon - \mu}{4k_{\mathrm{B}}T} \right) d\epsilon \right\} & (32)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \mu - 2k_{\mathrm{B}}T + \left[\frac{1}{2}\epsilon - \frac{(\epsilon - \mu)^2}{8k_{\mathrm{B}}T} \right]_{\mu - 2k_{\mathrm{B}}T}^{\mu + 2k_{\mathrm{B}}T} \right\} & (33)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \mu - 2k_{\mathrm{B}}T + \frac{1}{2} \times 4k_{\mathrm{B}}T - \frac{(2k_{\mathrm{B}}T)^2 - (2k_{\mathrm{B}}T)^2}{8k_{\mathrm{B}}T} \right\} & (34)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \mu & (35)
\end{aligned}$$

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

$$
\begin{aligned}
E &= \int_{-\infty}^{\infty} D(\epsilon)\epsilon f(\epsilon) d\epsilon && (36)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \int_0^{\infty} \epsilon f(\epsilon) d\epsilon && (37)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \int_0^{\mu-2k_{\mathrm{B}}T} \epsilon d\epsilon + \int_{\mu-2k_{\mathrm{B}}T}^{\mu+2k_{\mathrm{B}}T} \epsilon \left(\frac{1}{2} - \frac{\epsilon-\mu}{4k_{\mathrm{B}}T} \right) d\epsilon \right\} && (38)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \int_0^{\mu-2k_{\mathrm{B}}T} \epsilon d\epsilon \right. \\
&\qquad \left. + \int_{\mu-2k_{\mathrm{B}}T}^{\mu+2k_{\mathrm{B}}T} \{(\epsilon-\mu)+\mu\} \left(\frac{1}{2} - \frac{\epsilon-\mu}{4k_{\mathrm{B}}T} \right) d\epsilon \right\} && (39)
\end{aligned}
$$

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

$$
E = \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \frac{(\mu-2k_{\mathrm{B}}T)^2}{2} + \int_{-2k_{\mathrm{B}}T}^{2k_{\mathrm{B}}T} (\delta\epsilon+\mu) \left(\frac{1}{2} - \frac{\delta\epsilon}{4k_{\mathrm{B}}T} \right) d\delta\epsilon \right\} \qquad (40)
$$

2 項目の積分は奇関数は、0 だから、

$$
\begin{aligned}
E &= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \frac{(\mu-2k_{\mathrm{B}}T)^2}{2} + \int_{-2k_{\mathrm{B}}T}^{2k_{\mathrm{B}}T} \left(\frac{\mu}{2} - \frac{\delta\epsilon^2}{4k_{\mathrm{B}}T} \right) d\delta\epsilon \right\} && (41)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \frac{(\mu-2k_{\mathrm{B}}T)^2}{2} + 2 \left[\frac{\mu}{2}\delta\epsilon - \frac{\delta\epsilon^3}{12k_{\mathrm{B}}T} \right]_0^{2k_{\mathrm{B}}T} \right\} && (42)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \frac{(\mu-2k_{\mathrm{B}}T)^2}{2} + \mu(2k_{\mathrm{B}}T) - \frac{(2k_{\mathrm{B}}T)^3}{6k_{\mathrm{B}}T} \right\} && (43)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \frac{\mu^2}{2} + \left(2 - \frac{4}{3} \right) (k_{\mathrm{B}}T)^2 \right\} && (44)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \frac{\mu^2}{2} + \frac{2}{3} (k_{\mathrm{B}}T)^2 \right\} && (45)
\end{aligned}
$$