2006 年度統計力学 II 宿題 9 (6 月 14 日出題、6 月 21 日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] 授業で導いた光子の $D(\omega)$ を使って、体積 V の箱に閉じ込めた光子の全エネルギーを計算しなさい。

[解答] 光子は化学ポテンシャル μ が 0 の理想ボース気体と考えられるので、教科書 P47 の (10.7) 式で $z=1$ を代入した式によりエネルギーは計算できる。

$$E=\int_0^\infty \frac{\epsilon D(\epsilon)}{\exp[\beta\epsilon]-1}d\epsilon \tag{1}$$

ϵ を ω に変数変換する。ϵ〜$\epsilon+d\epsilon$ の状態の数と ω〜$\omega+d\omega$ の状態の数は同じだから、$D(\epsilon)d\epsilon=D(\omega)d\omega$ が成り立つ。ただし、$\epsilon=\hbar\omega$、$d\epsilon=\hbar d\omega$ とする。これより

$$E=\int_0^\infty \frac{\hbar\omega D(\omega)}{\exp[\beta\hbar\omega]-1}d\omega \tag{2}$$

$D(\omega)=V\omega^2/(\pi^2c^3)$ を代入すると

$$=\int_0^\infty \frac{V\omega^2}{\pi^2c^3}\frac{\hbar\omega}{\exp[\beta\hbar\omega]-1}d\omega \tag{3}$$

$$=\frac{V}{\pi^2c^3}\int_0^\infty \frac{\hbar\omega^3}{\exp[\beta\hbar\omega]-1}d\omega \tag{4}$$

$x=\beta\hbar\omega$ に変数変換すると、

$$=\frac{V}{\pi^2c^3}\int_0^\infty \frac{(k_{\mathrm{B}}T)^3x^3}{\hbar^2}\frac{1}{\exp[x]-1}\frac{k_{\mathrm{B}}T\,dx}{\hbar} \tag{5}$$

P158 の注から、

$$=\frac{V}{\hbar^3\pi^2c^3}(k_{\mathrm{B}}T)^4\times\frac{\pi^4}{15}=\frac{\pi^2Vk_{\mathrm{B}}^4}{15\hbar^3c^3}T^4 \tag{6}$$

光子のエネルギーは T^4 に比例するというシュテファン-ボルツマン則が導ける。

[問題 2.] 教科書 P159(10.51) 式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。(文献を調べても良いが、参考にした文献は明記する事。)

[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、

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}\mathbf{n} \qquad n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{7}$$

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、

$$x = 1 \qquad \text{縦波} \tag{8}$$

$$x = 2 \qquad \text{横波 1} \tag{9}$$

$$x = 3 \qquad \text{横波 2} \tag{10}$$

フォノンの粒子数は、P146(10.2) を使って、

$$N = \sum_{\mathbf{n},x} \frac{1}{\exp[\beta\hbar\omega_{\mathbf{n},x}] - 1} \tag{11}$$

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

$$= \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{\exp[\beta\hbar\omega_{\mathbf{n},1}] - 1} + \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{\exp[\beta\hbar\omega_{\mathbf{n},2}] - 1} + \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{\exp[\beta\hbar\omega_{\mathbf{n},3}] - 1} \tag{12}$$

V 無限大で

$$= \int_0^\infty \frac{D_1(\omega_1)d\omega_1}{\exp[\beta\hbar\omega_1] - 1} + \int_0^\infty \frac{D_2(\omega_2)d\omega_2}{\exp[\beta\hbar\omega_2] - 1} + \int_0^\infty \frac{D_3(\omega_3)d\omega_3}{\exp[\beta\hbar\omega_3] - 1} \tag{13}$$

$D_x(\omega_x)$ は、光子の時と同じ計算で求められるが、今の場合は 3 つの独立な成分を別々に扱っているから、2 倍はしなくて良い。また、$\omega_{k,n}$ と k の関係は音波の分散関係から、

$$\omega_1 = c_l k \tag{14}$$

$$\omega_2 = c_t k \tag{15}$$

$$\omega_3 = c_t k \tag{16}$$

ゆえに

$$D_1(\omega_1) = \frac{V\omega_1^2}{2\pi^2 c_l^3} \tag{17}$$

$$D_2(\omega_2) = \frac{V\omega_2^2}{2\pi^2 c_t^3} \tag{18}$$

$$D_3(\omega_3) = \frac{V\omega_3^2}{2\pi^2 c_t^3} \tag{19}$$

だから、

$$N = \int_0^\infty \frac{V\omega_1^2}{2\pi^2 c_l^3} \frac{d\omega_1}{\exp[\beta\hbar\omega_1] - 1} \int_0^\infty \frac{V\omega_2^2}{2\pi^2 c_t^3} \frac{d\omega_2}{\exp[\beta\hbar\omega_2] - 1} + \int_0^\infty \frac{V\omega_3^2}{2\pi^2 c_t^3} \frac{d\omega_3}{\exp[\beta\hbar\omega_3] - 1} \tag{20}$$

積分変数は勝手に変えられるので、3 つとも ω にすると

$$= \frac{V}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{1}{\exp[\beta\hbar\omega] - 1} \left(\frac{\omega^2}{c_l^3} + 2\frac{\omega^2}{c_t^3} \right) d\omega \tag{21}$$

したがって、弾性体の状態密度は、厳密に

$$D(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{1}{c_l^2} + 2\frac{1}{c_t^2} \right) \omega^2 \tag{22}$$

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

$$\int_0^\infty D(\omega) d\omega = 3N \tag{23}$$

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。