2007 年度統計力学 II 宿題 5 (5 月 9 日日出題、5 月 16 日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] 前週と同じ状態密度 $D(\epsilon) = VD_0\epsilon^2$ で、任意の温度での $E$ と $PV$ の関係を求めなさい。

[解答] 教科書 P137 の (9.19) 式の $gD(\epsilon)$ に $VD_0\epsilon^2$ を代入する。

$$\frac{PV}{k_{\mathrm{B}}T} = \int_0^\infty VD_0\epsilon^2 \ln(1 + ze^{-\beta\epsilon})d\epsilon \tag{1}$$

$D(\epsilon)$ が (9.10) 式の時と同様、部分積分すると、

$$PV = k_{\mathrm{B}}TVD_0 \left[\frac{\epsilon^3}{3}\ln(1 + ze^{-\beta\epsilon})\right]_0^\infty - k_{\mathrm{B}}TVD_0 \int_0^\infty \frac{\epsilon^3}{3}\frac{z(-\beta)e^{-\beta\epsilon}}{(1 + e^{-\beta\epsilon})}d\epsilon \tag{2}$$

$[\cdots]$ は、$\epsilon = 0$ で、$\epsilon^3$ のために 0、$\epsilon \to \infty$ は、$e^{-\beta\epsilon} \to 0$ で 0 になる。

$$PV = k_{\mathrm{B}}TVD_0\beta \int_0^\infty \frac{\epsilon^3}{3}\frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon} + 1}d\epsilon \tag{3}$$

$\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$ だから

$$= VD_0 \int_0^\infty \frac{\epsilon^3}{3}\frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon} + 1}d\epsilon \tag{4}$$

$x = \beta\epsilon$ に変数変換すると、

$$= VD_0 \int_0^\infty \frac{(k_{\mathrm{B}}T)^3x^3}{3}\frac{1}{z^{-1}e^x + 1}k_{\mathrm{B}}Tdx \tag{5}$$

$$= VD_0\frac{(k_{\mathrm{B}}T)^4}{3} \int_0^\infty \frac{x^3}{z^{-1}e^x + 1}dx \tag{6}$$

フェルミ-ディラック積分 (9.21) を使うと、

$$= VD_0\frac{(k_{\mathrm{B}}T)^4}{3}\Gamma(4)f_4(z) \tag{7}$$

一方、P134 の (9.7) 式に $VD_0\epsilon^2$ を代入

$$E = \int_0^\infty \frac{\epsilon V D_0 \epsilon^2}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1} d\epsilon \tag{8}$$

$$= VD_0 \int_0^\infty \frac{\epsilon^3}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1} d\epsilon \tag{9}$$

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

$$= VD_0 \int_0^\infty \frac{(k_\mathrm{B}T)^3\epsilon^3}{e^x z^{-1}+1} k_\mathrm{B}T dx \tag{10}$$

フェルミ-ディラック積分 (9.21) を使うと、

$$= VD_0(k_\mathrm{B}T)^4\Gamma(4)f_4(z) \tag{11}$$

$$= 3PV \tag{12}$$

[別解] フェルミ-ディラック積分を使わなくても、直接 (4) 式と (9) 式を比べて、$E = 3PV$ は導ける。

[問題 2.] 教科書 演習問題 P.144 [5] (1) (2) (4) (5)

[解答] 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、$\epsilon$ 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 $\epsilon$ 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 $\epsilon$ 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、

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

$\epsilon$ 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 $k, \theta$ 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、$\theta$ 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、$\epsilon_F$ 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、

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

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

$$\begin{aligned}
N &= \int_{-\infty}^{\infty} D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon && (25)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \int_0^{\infty} f(\epsilon) d\epsilon && (26)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \int_0^{\mu - 2k_\mathrm{B}T} d\epsilon + \int_{\mu - 2k_\mathrm{B}T}^{\mu + 2k_\mathrm{B}T} \left( \frac{1}{2} - \frac{\epsilon - \mu}{4k_\mathrm{B}T} \right) d\epsilon \right\} && (27)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \mu - 2k_\mathrm{B}T + \left[ \frac{1}{2}\epsilon - \frac{(\epsilon - \mu)^2}{8k_\mathrm{B}T} \right]_{\mu - 2k_\mathrm{B}T}^{\mu + 2k_\mathrm{B}T} \right\} && (28)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \mu - 2k_\mathrm{B}T + \frac{1}{2} \times 4k_\mathrm{B}T - \frac{(2k_\mathrm{B}T)^2 - (2k_\mathrm{B}T)^2}{8k_\mathrm{B}T} \right\} && (29)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \mu && (30)
\end{aligned}$$

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

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

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

$$
E = \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \frac{(\mu-2k_\mathrm{B}T)^2}{2} + \int_{-2k_\mathrm{B}T}^{2k_\mathrm{B}T} (\delta\epsilon+\mu) \left( \frac{1}{2} - \frac{\delta\epsilon}{4k_\mathrm{B}T} \right) d\delta\epsilon \right\} \tag{35}
$$

2 項目の積分は奇関数は、0 だから、

$$
\begin{aligned}
E &= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \frac{(\mu-2k_\mathrm{B}T)^2}{2} + \int_{-2k_\mathrm{B}T}^{2k_\mathrm{B}T} \left( \frac{\mu}{2} - \frac{\delta\epsilon^2}{4k_\mathrm{B}T} \right) d\delta\epsilon \right\} &(36)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \frac{(\mu-2k_\mathrm{B}T)^2}{2} + 2 \left[ \frac{\mu}{2}\delta\epsilon - \frac{\delta\epsilon^3}{12k_\mathrm{B}T} \right]_0^{2k_\mathrm{B}T} \right\} &(37)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \frac{(\mu-2k_\mathrm{B}T)^2}{2} + \mu(2k_\mathrm{B}T) - \frac{(2k_\mathrm{B}T)^3}{6k_\mathrm{B}T} \right\} &(38)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \frac{\mu^2}{2} + \left( 2 - \frac{4}{3} \right) (k_\mathrm{B}T)^2 \right\} &(39)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \frac{\mu^2}{2} + \frac{2}{3} (k_\mathrm{B}T)^2 \right\} &(40)
\end{aligned}
$$