2008 年度統計力学 II 宿題 5 (5 月 21 日日出題、5 月 28 日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] ① 先週と同じ状態密度 ($D(\epsilon) = VD_0\epsilon^n$) で E と PV の関係を求めなさい。[*1]
② μ を T で展開して T^2 まで求めよ。授業で省略した計算を補うこと。

[解答]① 教科書 P137 の (9.19) 式の $gD(\epsilon)$ に $VD_0\epsilon^n$ を代入する。

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

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

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

$[\cdots]$ は、$\epsilon = 0$ で、$\epsilon^{n+1}(n > -1)$ のために 0、$\epsilon \to \infty$ は、$e^{-\beta\epsilon} \to 0$ で 0 になる。

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

$\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$ だから

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

$x = \beta\epsilon$ に変数変換すると、

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

$$= VD_0\frac{(k_{\mathrm{B}}T)^{n+2}}{n+1}\int_0^\infty \frac{x^{n+1}}{z^{-1}e^x+1}dx \tag{6}$$

[*1] 問題にあらわに書きませんでしたが、温度 T は必ずしも零度とは限りません。$T \geq 0$ で求めて下さい。$T = 0$ だと思って計算した方は申し訳ありませんでした。

フェルミ-ディラック積分 (9.21) を使うと、

$$= VD_0 \frac{(k_{\mathrm{B}}T)^{n+2}}{n+1} \Gamma(n+2) f_{n+2}(z) \tag{7}$$

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

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

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

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

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

フェルミ-ディラック積分 (9.21) を使うと、

$$= VD_0 (k_{\mathrm{B}}T)^{n+2} \Gamma(n+2) f_{n+2}(z) \tag{11}$$

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

[別解] フェルミ-ディラック積分を使わなくても、直接 (4) 式と (9) 式を比べて、$E = (n+1)PV$ は導ける。

②教科書 P137(9.23) 式

$$\frac{N}{V} = \frac{g}{\lambda_T^3} f_{3/2}(z) \tag{13}$$

だから、P141 の $f_{3/2}(z)$ の展開式を使って、

$$\frac{N}{V} = \frac{g}{\lambda_T^3} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} (\ln z)^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \frac{1}{(\ln z)^2} + \cdots \right] \tag{14}$$

$\ln z = \mu/(k_{\mathrm{B}}T)$ だから、

$$= \frac{g}{\lambda_T^3} \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{\mu}{k_{\mathrm{B}}T} \right)^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\mu} \right)^2 + \cdots \right] \tag{15}$$

変形して、

$$\left(\frac{\mu}{k_\mathrm{B}T}\right)^{3/2} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}\frac{\lambda_T^3}{g}\frac{N}{V}\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{\mu}\right)^2+\cdots\right]^{-1} \tag{16}$$

両辺を 2/3 乗

$$\frac{\mu}{k_\mathrm{B}T} = \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\frac{\lambda_T^3}{g}\frac{N}{V}\right)^{2/3}\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{\mu}\right)^2+\cdots\right]^{-2/3} \tag{17}$$

$\mu = C_0 + C_1T + C_2T^2 + \cdots$ を両辺に代入して、T のベキの係数を比べる。

$$\begin{aligned}
&C_0 + C_1T + C_2T^2 + \cdots \\
&= k_\mathrm{B}T\left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\frac{\lambda_T^3}{g}\frac{N}{V}\right)^{2/3} \\
&\times\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(k_\mathrm{B}T\right)^2\left(C_0+C_1T+C_2T^2+\cdots\right)^{-2}+\cdots\right]^{-2/3} &\quad(18) \\
&= k_\mathrm{B}T\left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\frac{\lambda_T^3}{g}\frac{N}{V}\right)^{2/3} \\
&\times\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{C_0}\right)^2\left(1+\frac{C_1}{C_0}T+\frac{C_2}{C_0}T^2+\cdots\right)^{-2}+\cdots\right]^{-2/3} &\quad(19) \\
&= k_\mathrm{B}T\left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\frac{\lambda_T^3}{g}\frac{N}{V}\right)^{2/3} \\
&\times\left[1+\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{C_0}\right)^2\left(1-2\frac{C_1}{C_0}T+T^3\text{ の項}+\cdots\right)+\cdots\right]^{-2/3} &\quad(20) \\
&= k_\mathrm{B}T\left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\frac{\lambda_T^3}{g}\frac{N}{V}\right)^{2/3}\left[1-\frac{2}{3}\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{C_0}\right)^2+T^3\text{ の項}+\cdots\right] &\quad(21)
\end{aligned}$$

$\lambda_T = h/\sqrt{2\pi m k_{\mathrm{B}} T}$ だから、

$$k_{\mathrm{B}}T\left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\frac{\lambda_T^3}{g}\frac{N}{V}\right)^{2/3} = k_{\mathrm{B}}T\left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4g}\frac{N}{V}\right)^{2/3}\frac{h^2}{2\pi m k_{\mathrm{B}}T} \tag{22}$$

$$= \frac{(2\pi)^2\hbar^2}{2\pi m}\left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4g}\frac{N}{V}\right)^{2/3} \tag{23}$$

$$= \frac{4\pi\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4g}\frac{N}{V}\right)^{2/3} \tag{24}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\left(4^{3/2}\pi^{3/2}\frac{3\sqrt{\pi}}{4g}\frac{N}{V}\right)^{2/3} \tag{25}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\left(8\pi^2\frac{3}{4g}\frac{N}{V}\right)^{2/3} \tag{26}$$

教科書 (9.14) 式からこれは、 ϵ_F と等しい事が分かる。したがって、

$$C_0 + C_1 T + C_2 T^2 + \cdots = \epsilon_F\left[1 - \frac{2}{3}\frac{\pi^2}{8}\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{C_0}\right)^2 + T^3\text{ の項} + \cdots\right] \tag{27}$$

ゆえに、$C_0 = \epsilon_F$、$C_1 = 0$、

$$C_2 = -\frac{\pi^2}{12}\frac{k_{\mathrm{B}}^2}{\epsilon_F} \tag{28}$$

[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、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

$$\sum_k \longrightarrow g\int d\mathbf{k}\left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \tag{29}$$

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、$dk_x dk_y$ を、3 次元だと $dk_x dk_y dk_z$ 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 (9.2) を波数空間の積分に直すと、$d = 2$、$g = 2$、$A = L^2$ なので、

$$N = 2\int d\mathbf{k}\frac{A}{(2\pi)^2}f(\epsilon) \tag{30}$$

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、

$$N = 2\frac{A}{(2\pi)^2}\int_0^\infty kdk\int_0^{2\pi} d\theta f(\epsilon) \tag{31}$$

$f(\epsilon)$ は、θ に依らないから、

$$N = 2\frac{A}{(2\pi)^2}\int_0^\infty kdk2\pi f(\epsilon) \tag{32}$$

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、

$$N = 4\pi\frac{A}{(2\pi)^2}\int_0^{k_F} kdk \tag{33}$$

$$= 4\pi\frac{A}{(2\pi)^2}\frac{k_F^2}{2} = 2\pi\frac{A}{(2\pi)^2}k_F^2 \tag{34}$$

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、

$$E = 2\int d\mathbf{k}\frac{A}{(2\pi)^2}\epsilon f(\epsilon) \tag{35}$$

N と同様に

$$E = 4\pi\frac{A}{(2\pi)^2}\int_0^\infty kdk\epsilon f(\epsilon) \tag{36}$$

絶対零度で

$$E = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{k_F} \epsilon k dk \tag{37}$$

$\epsilon = \hbar^2 k^2/2m$ を代入して

$$E = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} k dk = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{k_F^4}{4} \tag{38}$$

$\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2/2m$ を使うと、

$$E = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \epsilon_F \frac{k_F^2}{4} \tag{39}$$

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

$$E = \frac{N}{2} \epsilon_F \tag{40}$$

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

$$\begin{aligned}
N &= \int_{-\infty}^{\infty} D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon && (41) \\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \int_0^{\infty} f(\epsilon) d\epsilon && (42) \\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \int_0^{\mu - 2k_{\mathrm{B}}T} d\epsilon + \int_{\mu-2k_{\mathrm{B}}T}^{\mu+2k_{\mathrm{B}}T} \left(\frac{1}{2} - \frac{\epsilon - \mu}{4k_{\mathrm{B}}T} \right) d\epsilon \right\} && (43) \\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \mu - 2k_{\mathrm{B}}T + \left[\frac{1}{2}\epsilon - \frac{(\epsilon-\mu)^2}{8k_{\mathrm{B}}T} \right]_{\mu-2k_{\mathrm{B}}T}^{\mu+2k_{\mathrm{B}}T} \right\} && (44) \\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \mu - 2k_{\mathrm{B}}T + \frac{1}{2} \times 4k_{\mathrm{B}}T - \frac{(2k_{\mathrm{B}}T)^2 - (2k_{\mathrm{B}}T)^2}{8k_{\mathrm{B}}T} \right\} && (45) \\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \mu && (46)
\end{aligned}$$

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

$$
\begin{aligned}
E &= \int_{-\infty}^{\infty} D(\epsilon)\epsilon f(\epsilon) d\epsilon && (47)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\int_0^{\infty} \epsilon f(\epsilon) d\epsilon && (48)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\int_0^{\mu-2k_\mathrm{B}T} \epsilon d\epsilon + \int_{\mu-2k_\mathrm{B}T}^{\mu+2k_\mathrm{B}T} \epsilon\left(\frac{1}{2}-\frac{\epsilon-\mu}{4k_\mathrm{B}T}\right) d\epsilon\right\} && (49)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\int_0^{\mu-2k_\mathrm{B}T} \epsilon d\epsilon \right.\\
&\quad \left. + \int_{\mu-2k_\mathrm{B}T}^{\mu+2k_\mathrm{B}T} \{(\epsilon-\mu)+\mu\}\left(\frac{1}{2}-\frac{\epsilon-\mu}{4k_\mathrm{B}T}\right) d\epsilon\right\} && (50)
\end{aligned}
$$

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

$$
E = \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{(\mu-2k_\mathrm{B}T)^2}{2} + \int_{-2k_\mathrm{B}T}^{2k_\mathrm{B}T}(\delta\epsilon+\mu)\left(\frac{1}{2}-\frac{\delta\epsilon}{4k_\mathrm{B}T}\right) d\delta\epsilon\right\} \tag{51}
$$

2 項目の積分は奇関数は、0 だから、

$$
\begin{aligned}
E &= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{(\mu-2k_\mathrm{B}T)^2}{2} + \int_{-2k_\mathrm{B}T}^{2k_\mathrm{B}T}\left(\frac{\mu}{2}-\frac{\delta\epsilon^2}{4k_\mathrm{B}T}\right) d\delta\epsilon\right\} && (52)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{(\mu-2k_\mathrm{B}T)^2}{2} + 2\left[\frac{\mu}{2}\delta\epsilon-\frac{\delta\epsilon^3}{12k_\mathrm{B}T}\right]_0^{2k_\mathrm{B}T}\right\} && (53)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{(\mu-2k_\mathrm{B}T)^2}{2} + \mu(2k_\mathrm{B}T) - \frac{(2k_\mathrm{B}T)^3}{6k_\mathrm{B}T}\right\} && (54)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{\mu^2}{2} + \left(2-\frac{4}{3}\right)(k_\mathrm{B}T)^2\right\} && (55)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{\mu^2}{2} + \frac{2}{3}(k_\mathrm{B}T)^2\right\} && (56)
\end{aligned}
$$

後は、教科書 P220 の解答の通り、微分すれば定積比熱が出る。