2009 年度統計力学 II 宿題 5 (5 月 27 日日出題、6 月 3 日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] T $\neq 0$ で (9.25) 式を導け

[解答] プリント「授業ノート 1」(15) 式から

$$\Xi = \prod_l \Xi_l = \prod_l (1 + z e^{-\beta \epsilon_l}) \tag{1}$$

教科書 P81(5.19) 式から

$$J = -k_{\mathrm{B}} T \ln \Xi = -k_{\mathrm{B}} T \sum_l \ln(1 + z e^{-\beta \epsilon_l}) \tag{2}$$

準位が密に詰まっていれば

$$J = -k_{\mathrm{B}} T \int_0^\infty g D(\epsilon) \ln(1 + z e^{-\beta \epsilon}) d\epsilon \tag{3}$$

教科書 P10 表 1.1 から $J = -PV$ だから、

$$PV = k_{\mathrm{B}} T \int_0^\infty g D(\epsilon) \ln(1 + z e^{-\beta \epsilon}) d\epsilon \tag{4}$$

$D(\epsilon)$ に (9.10) 式を代入すると

$$= k_{\mathrm{B}} T \int_0^\infty 2\pi g V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \sqrt{\epsilon} \ln(1 + z e^{-\beta \epsilon}) d\epsilon \tag{5}$$

部分積分すると、

$$\frac{PV}{k_{\mathrm{B}} T} = 2\pi g V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \left\{ \left[\frac{2}{3} \epsilon^{3/2} \ln(1 + z e^{-\beta \epsilon}) \right]_0^\infty - \int_0^\infty \frac{2}{3} \epsilon^{3/2} \frac{z(-\beta) e^{-\beta \epsilon}}{(1 + z e^{-\beta \epsilon})} d\epsilon \right\} \tag{6}$$

$[\cdots]$ は、$\epsilon = 0$ で、$\epsilon^{3/2}$ のために 0、$\epsilon \to \infty$ は、$e^{-\beta \epsilon} \to 0$ で 0 になる。

$$PV = 2 k_{\mathrm{B}} T \pi g V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \beta \int_0^\infty \frac{2}{3} \epsilon^{3/2} \frac{1}{z^{-1} e^{\beta \epsilon} + 1} d\epsilon \tag{7}$$

$\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$ だから

$$= 2\pi g V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{2}{3}\epsilon^{3/2} \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon}+1} d\epsilon \tag{8}$$

$x = \beta\epsilon$ に変数変換すると、

$$= 2\pi g V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{2}{3}x^{3/2}(k_{\mathrm{B}}T)^{3/2} \frac{1}{z^{-1}e^{x}+1} k_{\mathrm{B}}T dx \tag{9}$$

$$= 2\pi g V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \frac{2}{3}(k_{\mathrm{B}}T)^{5/2} \int_0^\infty \frac{x^{3/2}}{z^{-1}e^{x}+1} dx \tag{10}$$

フェルミ-ディラック積分 (9.21) と熱ド・ブロイ波長 $\lambda_T = h/\sqrt{2\pi m k_{\mathrm{B}}T}$ および $\Gamma(5/2) = 3\sqrt{\pi}/4$ を使えば、

$$PV = \frac{g}{\lambda_T^3} V k_{\mathrm{B}} T f_{5/2}(z) \tag{11}$$

が示せる。

一方、授業で説明したように P134 の (9.7) 式に g をかけたものに (9.10) 式を代入すると、

$$E = 2\pi g V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\epsilon\epsilon^{1/2}}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1} d\epsilon \tag{12}$$

$$= 2\pi g V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2}}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1} d\epsilon \tag{13}$$

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

$$= 2\pi g V \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{(k_{\mathrm{B}}T)^{3/2}x^{3/2}}{e^{x}z^{-1}+1} k_{\mathrm{B}}T dx \tag{14}$$

$$\tag{15}$$

圧力と同じようにフェルミ-ディラック積分 (9.21) と熱ド・ブローイ波長、$\Gamma(5/2)$ の値を使うと、

$$E = \frac{3}{2}\frac{g}{\lambda_T^3} V k_{\mathrm{B}} T f_{5/2}(z) \tag{16}$$

(11) 式と (16) 式から (9.25) 式が示せる。

[別解] フェルミ-ディラック積分を使わなくても、直接 (8) 式と (13) 式を比べて、(9.25) 式は導ける。

[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、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

$$\sum_k \longrightarrow g \int d\mathbf{k} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^d \tag{17}$$

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、

$$N = 2 \int d\mathbf{k} \frac{A}{(2\pi)^2} f(\epsilon) \tag{18}$$

ϵ は、$\epsilon = \hbar^2 k^2/2m$ 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、

$$N = 2 \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^\infty k dk \int_0^{2\pi} d\theta f(\epsilon) \tag{19}$$

$f(\epsilon)$ は、θ に依らないから、

$$N = 2 \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^\infty k dk 2\pi f(\epsilon) \tag{20}$$

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、

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

$$= 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \frac{k_F^2}{2} = 2\pi \frac{A}{(2\pi)^2} k_F^2 \tag{22}$$

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

(2) エネルギーは、教科書 P133 の (9.3) 式だから、

$$E = 2 \int d\mathbf{k} \frac{A}{(2\pi)^2} \epsilon f(\epsilon) \tag{23}$$

N と同様に

$$E = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} k dk \epsilon f(\epsilon) \tag{24}$$

絶対零度で

$$E = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{k_F} \epsilon k dk \tag{25}$$

$\epsilon = \hbar^2 k^2/2m$ を代入して

$$E = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} k dk = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{k_F^4}{4} \tag{26}$$

$\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2/2m$ を使うと、

$$E = 4\pi \frac{A}{(2\pi)^2} \epsilon_F \frac{k_F^2}{4} \tag{27}$$

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

$$E = \frac{N}{2} \epsilon_F \tag{28}$$

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

$$
\begin{aligned}
N &= \int_{-\infty}^{\infty} D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon && (29)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \int_0^{\infty} f(\epsilon) d\epsilon && (30)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \int_0^{\mu - 2k_\mathrm{B}T} d\epsilon + \int_{\mu-2k_\mathrm{B}T}^{\mu+2k_\mathrm{B}T} \left(\frac{1}{2} - \frac{\epsilon - \mu}{4k_\mathrm{B}T} \right) d\epsilon \right\} && (31)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \mu - 2k_\mathrm{B}T + \left[\frac{1}{2}\epsilon - \frac{(\epsilon-\mu)^2}{8k_\mathrm{B}T} \right]_{\mu-2k_\mathrm{B}T}^{\mu+2k_\mathrm{B}T} \right\} && (32)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \mu - 2k_\mathrm{B}T + \frac{1}{2} \times 4k_\mathrm{B}T - \frac{(2k_\mathrm{B}T)^2 - (2k_\mathrm{B}T)^2}{8k_\mathrm{B}T} \right\} && (33)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \mu && (34)
\end{aligned}
$$

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

$$
\begin{aligned}
E &= \int_{-\infty}^{\infty} D(\epsilon) \epsilon f(\epsilon) d\epsilon && (35)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \int_0^{\infty} \epsilon f(\epsilon) d\epsilon && (36)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \int_0^{\mu - 2k_\mathrm{B}T} \epsilon d\epsilon + \int_{\mu-2k_\mathrm{B}T}^{\mu+2k_\mathrm{B}T} \epsilon \left(\frac{1}{2} - \frac{\epsilon - \mu}{4k_\mathrm{B}T} \right) d\epsilon \right\} && (37)\\
&= \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \int_0^{\mu - 2k_\mathrm{B}T} \epsilon d\epsilon \right.\\
&\qquad \left. + \int_{\mu-2k_\mathrm{B}T}^{\mu+2k_\mathrm{B}T} \{(\epsilon - \mu) + \mu\} \left(\frac{1}{2} - \frac{\epsilon - \mu}{4k_\mathrm{B}T} \right) d\epsilon \right\} && (38)
\end{aligned}
$$

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

$$
E = \frac{Am}{\pi\hbar^2} \left\{ \frac{(\mu - 2k_\mathrm{B}T)^2}{2} + \int_{-2k_\mathrm{B}T}^{2k_\mathrm{B}T} (\delta\epsilon + \mu) \left(\frac{1}{2} - \frac{\delta\epsilon}{4k_\mathrm{B}T} \right) d\delta\epsilon \right\} \tag{39}
$$

2 項目の積分は奇関数は、0 だから、

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

$$= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{(\mu - 2k_{\mathrm{B}}T)^2}{2} + 2\left[\frac{\mu}{2}\delta\epsilon - \frac{\delta\epsilon^3}{12k_{\mathrm{B}}T}\right]_0^{2k_{\mathrm{B}}T}\right\} \tag{41}$$

$$= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{(\mu - 2k_{\mathrm{B}}T)^2}{2} + \mu(2k_{\mathrm{B}}T) - \frac{(2k_{\mathrm{B}}T)^3}{6k_{\mathrm{B}}T}\right\} \tag{42}$$

$$= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{\mu^2}{2} + \left(2 - \frac{4}{3}\right)(k_{\mathrm{B}}T)^2\right\} \tag{43}$$

$$= \frac{Am}{\pi\hbar^2}\left\{\frac{\mu^2}{2} + \frac{2}{3}(k_{\mathrm{B}}T)^2\right\} \tag{44}$$

後は、教科書 P220 の解答の通り、微分すれば定積比熱が出る。