2010 年度統計力学 II 宿題 5 (5 月 20 日出題、5 月 27 日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] 授業で省略した部分を自分で計算して $E=(3/2)PV$ を示せ。

[解答] プリント「授業ノート 1」(15) 式から

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

統計力学 I プリント「統計アンサンブルのまとめ」(補習ノート*1 では J) から

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

準位が密に詰まっていれば

$$\Omega=-k_{\mathrm{B}}T\int_{-\infty}^{\infty}D(\epsilon)\ln(1+ze^{-\beta\epsilon})d\epsilon \tag{3}$$

$\Omega=-PV$(補習ノート (99) 式) だから、

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

この式に

$$D(\epsilon)=\begin{cases}\left(\dfrac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\dfrac{V}{(2\pi)^2}g\epsilon^{1/2} & \epsilon\geq 0\\ 0 & \epsilon<0\end{cases} \tag{5}$$

を代入すると

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

*1 http://www.cmt.phys.kyushu-u.ac.jp/~A.Yoshimori/hoshu10.pdf

これを部分積分する。

$$PV = k_{\mathrm{B}}T\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{V}{(2\pi)^2}g\left\{\left[\frac{2}{3}\epsilon^{3/2}\ln(1+ze^{-\beta\epsilon})\right]_0^\infty \right.$$
$$\left. -\int_0^\infty \frac{2}{3}\epsilon^{3/2}\frac{z(-\beta)e^{-\beta\epsilon}}{(1+ze^{-\beta\epsilon})}d\epsilon\right\} \qquad (7)$$

$[\cdots]$ 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。

$$PV = k_{\mathrm{B}}T\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{V}{(2\pi)^2}g\beta\int_0^\infty \frac{2}{3}\epsilon^{3/2}\frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon}+1}d\epsilon \qquad (8)$$

$\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$ だから

$$= \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{V}{(2\pi)^2}g\int_0^\infty \frac{2}{3}\epsilon^{3/2}\frac{1}{z^{-1}e^{\beta\epsilon}+1}d\epsilon \qquad (9)$$

一方、エネルギー E は、$f(\epsilon_l)$ をフェルミ分布関数とすると、

$$E = \sum_l \epsilon_l f(\epsilon_l) \qquad (10)$$
$$= \int_{-\infty}^\infty D(\epsilon)\frac{\epsilon}{z^{-1}e^{\beta\epsilon}+1}d\epsilon \qquad (11)$$

(5) 式を代入して

$$= \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{V}{(2\pi)^2}g\int_0^\infty \frac{\epsilon\epsilon^{1/2}}{z^{-1}e^{\beta\epsilon}+1}d\epsilon \qquad (12)$$
$$= \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{V}{(2\pi)^2}g\int_0^\infty \frac{\epsilon^{3/2}}{z^{-1}e^{\beta\epsilon}+1}d\epsilon \qquad (13)$$

(9) 式と (13) 式を比べれば、$E=(3/2)PV$ が示せる。

[問題 2.] T を含まない任意関数 $X(\epsilon)$ について $\int_0^\infty X(\epsilon)f(\epsilon)d\epsilon$ を T^2 までテーラー展開しなさい。ただし $f(\epsilon)$ はフェルミの分布関数。

[解答] まず、

$$\widetilde{X}(\epsilon) = \int_0^\epsilon X(\epsilon')d\epsilon' \qquad (14)$$

とおくと、

$$X(\epsilon) = \frac{d\widetilde{X}(\epsilon)}{d\epsilon} \tag{15}$$

であり、与式を部分積分すると、

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty X(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon &= \int_0^\infty \frac{d\widetilde{X}(\epsilon)}{d\epsilon} f(\epsilon) d\epsilon && (16) \\
&= \left[\widetilde{X}(\epsilon) f(\epsilon)\right]_0^\infty - \int_0^\infty \widetilde{X}(\epsilon) \frac{df(\epsilon)}{d\epsilon} d\epsilon && (17)
\end{aligned}$$

$\widetilde{X}(0) = 0$、$f(\infty) = 0$ だから

$$= -\int_0^\infty \widetilde{X}(\epsilon) \frac{df(\epsilon)}{d\epsilon} d\epsilon \tag{18}$$

$-df(\epsilon)/d\epsilon$ を計算すると、

$$-\frac{df(\epsilon)}{d\epsilon} = \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T} \frac{1}{(\exp[(\epsilon-\mu)/k_{\mathrm{B}}T]+1)(\exp[-(\epsilon-\mu)/k_{\mathrm{B}}T]+1)} \tag{19}$$

この関数は $\epsilon = \mu$ のまわりに $k_{\mathrm{B}}T$ 程度の幅のピークを持つ。したがって、$\widetilde{X}(\epsilon)$ を $\epsilon = \mu$ のまわりで展開するのは、T で展開するのと同じだから、2 次まで展開すると、

$$\widetilde{X}(\epsilon) = \widetilde{X}(\mu) + (\epsilon - \mu) \left.\frac{d\widetilde{X}(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon=\mu} + \frac{(\epsilon-\mu)^2}{2} \left.\frac{d^2\widetilde{X}(\epsilon)}{d\epsilon^2}\right|_{\epsilon=\mu} \tag{20}$$

これを (18) 式に代入

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty X(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon = -\int_0^\infty \Biggl(& \widetilde{X}(\mu) + (\epsilon-\mu) \left.\frac{d\widetilde{X}(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon=\mu} \\
& + \frac{(\epsilon-\mu)^2}{2} \left.\frac{d^2\widetilde{X}(\epsilon)}{d\epsilon^2}\right|_{\epsilon=\mu} \Biggr) \frac{df(\epsilon)}{d\epsilon} d\epsilon && (21)
\end{aligned}$$

1 項目は、

$$-\int_0^\infty \widetilde{X}(\mu)\frac{df(\epsilon)}{d\epsilon}d\epsilon = -\widetilde{X}(\mu)\int_0^\infty \frac{df(\epsilon)}{d\epsilon}d\epsilon \tag{22}$$

$-df(\epsilon)/d\epsilon$ は、鋭いピークの関数だから、加減を $-\infty$ にして、

$$= -\widetilde{X}(\mu)\int_{-\infty}^\infty \frac{df(\epsilon)}{d\epsilon}d\epsilon \tag{23}$$

$$= \widetilde{X}(\mu) \tag{24}$$

2 項目は、$-df(\epsilon)/d\epsilon$ は偶関数なので、0 になる。3 項目は、

$$-\int_0^\infty \frac{(\epsilon-\mu)^2}{2}\left.\frac{d^2\widetilde{X}(\epsilon)}{d\epsilon^2}\right|_{\epsilon=\mu}\frac{df(\epsilon)}{d\epsilon}d\epsilon \tag{25}$$

$$= -\frac{1}{2}\left.\frac{d^2\widetilde{X}(\epsilon)}{d\epsilon^2}\right|_{\epsilon=\mu}\int_0^\infty (\epsilon-\mu)^2\frac{df(\epsilon)}{d\epsilon}d\epsilon \tag{26}$$

$-df(\epsilon)/d\epsilon$ に (19) 式を代入し、積分の下限を $-\infty$ にして、公式 (例えば、岩波基礎物理学シリーズ 7「統計力学」、長岡洋介 著、岩波書店 P278(A.10)) を使えば、

$$= \frac{1}{2}\left.\frac{d^2\widetilde{X}(\epsilon)}{d\epsilon^2}\right|_{\epsilon=\mu}\frac{\pi^2}{3}(k_\mathrm{B}T)^2 \tag{27}$$

$\widetilde{X}(\epsilon)$ の定義を与える (14) 式から、

$$= \frac{1}{2}\left.\frac{dX(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon=\mu}\frac{\pi^2}{3}(k_\mathrm{B}T)^2 \tag{28}$$

結局

$$\int_0^\infty X(\epsilon)f(\epsilon)d\epsilon = \widetilde{X}(\mu) + \frac{\pi^2}{6}(k_\mathrm{B}T)^2\left.\frac{dX(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon=\mu} \tag{29}$$