[解答] を赤字で 6 月 8 日に訂正しました。訂正が多くて申し訳ありません。

さらに [解答] を訂正しました。訂正箇所は青字です。本当に申し訳ありません。(6 月 8 日 16:40)

2010 年度統計力学 II 宿題 6 (5 月 27 日出題、6 月 3 日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] 状態密度 $D(\epsilon)$ が与えられているとき μ と E を T で展開して T^3 まで求めよ。授業で略した計算を補え。

[解答] 次の公式

$$\int_0^\infty X(\epsilon)f(\epsilon)d\epsilon = \widetilde{X}(\mu) + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left.\frac{dX(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon=\mu} \tag{1}$$

を使う。この公式は、T^3 まで正しい。ただし、$X(\epsilon)$ は T を含まない任意関数で

$$\widetilde{X}(\epsilon) = \int_0^\epsilon X(\epsilon')d\epsilon' \tag{2}$$

また、$f(\epsilon)$ はフェルミの分布関数を表す。

最初は、$N = \int_0^\infty D(\epsilon)f(\epsilon)d\epsilon$ を T で展開する。公式で $X(\epsilon) = D(\epsilon)$、

$$\widetilde{X}(\mu) = N(\mu) \equiv \int_0^\mu D(\epsilon')d\epsilon' \tag{3}$$

とすると、

$$\int_0^\infty D(\epsilon)f(\epsilon)d\epsilon = N(\mu) + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left.\frac{dD(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon=\mu} \tag{4}$$

次に μ を T で展開する。$\mu = \epsilon_F + C_1T + C_2T^2 + C_3T^3$ として、

$$N = N(\mu) + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left.\frac{dD(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\mu} \tag{5}$$

に代入して、T のベキの係数を計算する。

右辺 1 項目は、

$$\begin{aligned} N(\epsilon_F+C_1T+C_2T^2+C_3T^3) = N(\epsilon_F)+(C_1T+C_2T^2+C_3T^3) \left.\frac{dN(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} \\ + \frac{(C_1T+C_2T^2+C_3T^3)^2}{2} \left.\frac{d^2N(\epsilon)}{d\epsilon^2}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} \\ + \frac{(C_1T+C_2T^2+C_3T^3)^3}{3!} \left.\frac{d^3N(\epsilon)}{d\epsilon^3}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} \end{aligned} \tag{6}$$

2 項目は、T^3 までで

$$\begin{aligned} \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left.\frac{dD(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\mu} = \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left.\frac{dD(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} \\ + C_1T\frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left.\frac{d^2D(\epsilon)}{d\epsilon^2}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} \end{aligned} \tag{7}$$

2 つを合わせると、

$$\begin{aligned} N = N(\epsilon_F)+(C_1T+C_2T^2+C_3T^3) \left.\frac{dN(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} \\ + \frac{(C_1T+C_2T^2+C_3T^3)^2}{2} \left.\frac{d^2N(\epsilon)}{d\epsilon^2}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} \\ + \frac{(C_1T+C_2T^2+C_3T^3)^3}{3!} \left.\frac{d^3N(\epsilon)}{d\epsilon^3}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} \\ + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left.\frac{dD(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} + C_1T\frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left.\frac{d^2D(\epsilon)}{d\epsilon^2}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} \end{aligned} \tag{8}$$

この式は恒等式だから T のベキの係数を 0 において、C_1、C_2、C_3 を計算する。T の係数から

$$C_1 \left.\frac{dN(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} = 0 \tag{9}$$

ゆえに $C_1 = 0$

T^2 の係数から

$$C_2 T^2 \left.\frac{dN(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon = \epsilon_F} + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left.\frac{dD(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon = \epsilon_F} = 0 \tag{10}$$

ただし、$C_1 = 0$ を使った。C_2 について解くと、

$$C_2 = -\frac{\pi^2}{6}\frac{k_{\mathrm{B}}^2}{D(\epsilon_F)} \left.\frac{dD(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon = \epsilon_F} \tag{11}$$

T^3 の係数は、$C_1 = 0$ を使うと、

$$C_3 \left.\frac{dN(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon = \epsilon_F} = 0 \tag{12}$$

ゆえに $C_3 = 0$

エネルギーに付いては、$E = \int_0^\epsilon \epsilon D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon$ を T で展開する。公式で $X(\epsilon) = \epsilon D(\epsilon)$、

$$\widetilde{X}(\mu) = G(\mu) \equiv \int_0^\mu \epsilon' D(\epsilon') d\epsilon' \tag{13}$$

とすると、

$$\int_0^\infty \epsilon D(\epsilon) f(\epsilon) = G(\mu) + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left.\frac{d(\epsilon D(\epsilon))}{d\epsilon}\right|_{\epsilon = \mu} \tag{14}$$

ここで、係数を N で表す。$\mu = \epsilon_F + C_2 T^2$ を代入

$$E = G(\epsilon_F + C_2 T^2) + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left.\frac{d(\epsilon D(\epsilon))}{d\epsilon}\right|_{\epsilon = \epsilon_F + C_2 T^2} \tag{15}$$

右辺 1 項目は、

$$G(\epsilon_F + C_2 T^2) = G(\epsilon_F) + C_2 T^2 \left.\frac{dG(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon = \epsilon_F} \tag{16}$$

2 項目は、T^3 までで

$$\frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left.\frac{d(\epsilon D(\epsilon))}{d\epsilon}\right|_{\epsilon = \epsilon_F + C_2 T^2} = \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left.\frac{d(\epsilon D(\epsilon))}{d\epsilon}\right|_{\epsilon = \epsilon_F} \tag{17}$$

あわせて、

$$E = G(\epsilon_F) + C_2 T^2 \left.\frac{dG(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left.\frac{d(\epsilon D(\epsilon))}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} \tag{18}$$

さらに計算を進めると、(13) 式から

$$\frac{dG(\epsilon)}{d\epsilon} = \epsilon D(\epsilon) \tag{19}$$

また、(11) 式を代入すると、

$$C_2 T^2 \left.\frac{dG(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} = -\frac{\pi^2}{6}\frac{k_{\mathrm{B}}^2}{D(\epsilon_F)} \left.\frac{dD(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} T^2 \left.\frac{dG(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} \tag{20}$$

(19) 式を代入すると、

$$= -\frac{\pi^2}{6}\frac{k_{\mathrm{B}}^2}{D(\epsilon_F)} \left.\frac{dD(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} T^2 \epsilon_F D(\epsilon_F) \tag{21}$$

$D(\epsilon_F)$ が分母分子にあるから、

$$= -\frac{\pi^2}{6}k_{\mathrm{B}}^2 \left.\frac{dD(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} T^2 \epsilon_F \tag{22}$$

一方、

$$\frac{d(\epsilon D(\epsilon))}{d\epsilon} = D(\epsilon) + \epsilon\frac{dD(\epsilon)}{d\epsilon} \tag{23}$$

だから、(18) 式の 3 項目は、

$$\begin{aligned}\frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 &\left.\frac{d(\epsilon D(\epsilon))}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} \\ &= \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 D(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2\, \epsilon_F \left.\frac{dD(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F}\end{aligned} \tag{24}$$

全部足すと、

$$\begin{aligned}E = G(\epsilon_F) &- \frac{\pi^2}{6}k_{\mathrm{B}}^2 \left.\frac{dD(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F} T^2 \epsilon_F \\ &+ \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 D(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2\, \epsilon_F \left.\frac{dD(\epsilon)}{d\epsilon}\right|_{\epsilon\,=\,\epsilon_F}\end{aligned} \tag{25}$$

2 項目と 4 項目がキャンセルして

$$E = G(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 D(\epsilon_F) \tag{26}$$

[問題 2.] プリント「授業ノート 1」の (16) 式から (17) 式を導く条件から $\mu < 0$ を示しなさい。ただし、最低エネルギー準位は 0 とする。[*1]

[解答] 「授業ノート 1」でやったように、大分配関数は、$\Xi = \prod_k \Xi_k$ のように書ける。Ξ_k は、ボース粒子の場合、プリントの (16) 式

$$\Xi_k = \sum_{n=0}^{\infty} \left(ze^{-\beta\epsilon_k}\right)^n \tag{27}$$

で表せる。これは、無限等比級数で、収束するためには、

$$ze^{-\beta\epsilon_k} < 1 \tag{28}$$

$z = \exp[\beta\mu]$ だから、$\beta > 0$ を使って、

$$\mu - \epsilon_k < 0 \tag{29}$$

これはすべてのエネルギー準位 ϵ_k で、成り立たなければならない。
　もし、箱に入った自由粒子のようにエネルギー準位に最小がある時は、その値を ϵ_0 とすると、

$$\mu < \epsilon_0 \tag{30}$$

であれば、$\epsilon_0 \le \epsilon_k$ だから、全てのエネルギー準位で、(29) 式を満たす。問題では $\epsilon_0 = 0$ なので、$\mu < 0$ が示せる。

[*1] 黒板には赤字の部分がありませんでした。謹んで訂正致します。