2012 年度統計力学 II 宿題 5 (5 月 17 日出題、5 月 24 日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] 授業で略した部分積分を計算して $E = 3/2PV$ を示せ。

[解答] プリント「授業ノート 1」(25) 式と (26) から

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

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

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

準位が密に詰まっていれば

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

$\Omega = -PV$(補習ノート (101) 式) だから、

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

この式に

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

を代入すると

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

[*1] http://www.cmt.phys.kyushu-u.ac.jp/~A.Yoshimori/hoshu12.pdf

これを部分積分する。

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

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

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

$\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$ だから

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

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

$$E = \sum_l \varepsilon_l f(\varepsilon_l) \tag{10}$$

$$= \int_{-\infty}^\infty D(\varepsilon)\frac{\varepsilon}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon}+1}d\varepsilon \tag{11}$$

(5) 式を代入して

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

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

(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 $X(\varepsilon)$ について $\int_0^\infty X(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon$ を T^2 までテーラー展開しなさい。$f(\varepsilon)$ はフェルミ分布関数。

[解答] まず、

$$\widetilde{X}(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon X(\varepsilon')d\varepsilon' \tag{14}$$

とおくと、

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

であり、与式を部分積分すると、

$$\int_0^\infty X(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon = \int_0^\infty \frac{d\widetilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon}f(\varepsilon)d\varepsilon \tag{16}$$

$$= \left[\widetilde{X}(\varepsilon)f(\varepsilon)\right]_0^\infty - \int_0^\infty \widetilde{X}(\varepsilon)\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon}d\varepsilon \tag{17}$$

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

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

$-df(\varepsilon)/d\varepsilon$ を計算すると、

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

この関数は $\varepsilon = \mu$ 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、$\widetilde{X}(\varepsilon)$ を $\varepsilon = \mu$ 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、

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

これを (18) 式に代入

$$-\int_0^\infty \widetilde{X}(\varepsilon)\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon}d\varepsilon = -\int_0^\infty \left(\widetilde{X}(\mu) + (\varepsilon-\mu)\left.\frac{d\widetilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=\mu}\right.$$

$$\left. + \frac{(\varepsilon-\mu)^2}{2}\left.\frac{d^2\widetilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon^2}\right|_{\varepsilon=\mu}\right)\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon}d\varepsilon \tag{21}$$

1 項目は、

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

$-df(\varepsilon)/d\varepsilon$ は、鋭いピークの関数だから、下限を $-\infty$ にして、

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

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

2 項目は、$-df(\varepsilon)/d\varepsilon$ が $\varepsilon = \mu$ の軸に対して対称なので、0 になる。3 項目は、

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

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

$-df(\varepsilon)/d\varepsilon$ 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、

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

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

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

結局

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