2013 年度統計力学 II 宿題 5 (5 月 23 日出題、5 月 30 日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] ① 5/9 の宿題 1 でエネルギーと圧力を求めよ
② 授業で略した部分積分を計算して $E = 3/2PV$ を示せ。
③ $\mu = \varepsilon_F + C_1 T + C_2 T$ としたとき、
$C_1 = 0$、$C_2 = -\frac{\pi^2}{6}\frac{k_B^2}{D(\varepsilon_F)}\frac{dD(\varepsilon)}{d\varepsilon}\Big|_{\varepsilon=\varepsilon_F}$ を授業で省いた計算を補って示せ。

[解答]① エネルギーは、

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \tag{1}$$

と書けるから、$f(\varepsilon)$ に階段関数を代入して、

$$E = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon \tag{2}$$

$D(\varepsilon)$ を代入して、

$$E = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon \frac{V}{2\pi^2 (c\hbar)^3} \varepsilon^2 d\varepsilon \tag{3}$$

$$= \frac{V}{2\pi^2 (c\hbar)^3} \frac{\varepsilon_F^4}{4} \tag{4}$$

一方、以前計算した式

$$N = \int_0^{\varepsilon_F} \frac{V}{2\pi^2 (c\hbar)^3} \varepsilon^2 d\varepsilon \tag{5}$$

$$= \frac{V}{2\pi^2 (c\hbar)^3} \frac{\varepsilon_F^3}{3} \tag{6}$$

から

$$E = \frac{3}{4} N \varepsilon_F \tag{7}$$

圧力は、以下の公式 (「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」P54 (2.75) 式、補習ノート P16(68) 式)

$$P = -\left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_{S,N} \tag{8}$$

から計算できる。ただし、S はエントロピーだが、今、$T=0$ なので、第 3 法則から $S=0$ となる。したがって、$T=0$ の時だけ特別に S 一定という条件は満たされる。つまり、

$$P = -\frac{\partial}{\partial V}\left(\frac{3}{4}N\varepsilon_F\right)\Bigg|_{N\ \text{一定}} \tag{9}$$

以前導いた

$$\varepsilon_F = \left\{6\pi^2(c\hbar)^3\frac{N}{V}\right\}^{1/3} \tag{10}$$

から ε_F は、$V^{-1/3}$ に比例するので、

$$P = \frac{1}{3}\left(\frac{3}{4}N\frac{\varepsilon_F}{V}\right) = \frac{1}{4}N\frac{\varepsilon_F}{V} \tag{11}$$

② プリント「授業ノート 1」(29) 式と (30) から

$$\Xi = \prod_l \Xi_l = \prod_l (1 + ze^{-\beta\varepsilon_l}) \tag{12}$$

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

$$\Omega = -k_{\mathrm{B}}T\ln\Xi = -k_{\mathrm{B}}T\sum_l \ln(1 + ze^{-\beta\varepsilon_l}) \tag{13}$$

準位が密に詰まっていれば

$$\Omega = -k_{\mathrm{B}}T\int_{-\infty}^{\infty} D(\varepsilon)\ln(1 + ze^{-\beta\varepsilon})d\varepsilon \tag{14}$$

[*1] http://www.cmt.phys.kyushu-u.ac.jp/~A.Yoshimori/hoshu13.pdf

$\Omega = -PV$(補習ノート (101) 式) だから、

$$PV = k_{\mathrm{B}}T\int_{-\infty}^{\infty} D(\varepsilon)\ln(1+ze^{-\beta\varepsilon})d\varepsilon \tag{15}$$

この式に

$$D(\varepsilon) = \begin{cases} \left(\dfrac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\dfrac{V}{(2\pi)^2}g\varepsilon^{1/2} & \varepsilon \geq 0 \\ 0 & \varepsilon < 0 \end{cases} \tag{16}$$

を代入すると

$$PV = k_{\mathrm{B}}T\int_0^{\infty}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{V}{(2\pi)^2}g\varepsilon^{1/2}\ln(1+ze^{-\beta\varepsilon})d\varepsilon \tag{17}$$

これを部分積分する。

$$\begin{aligned} PV = k_{\mathrm{B}}T\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{V}{(2\pi)^2}g\Bigg\{&\left[\frac{2}{3}\varepsilon^{3/2}\ln(1+ze^{-\beta\varepsilon})\right]_0^{\infty} \\ &-\int_0^{\infty}\frac{2}{3}\varepsilon^{3/2}\frac{z(-\beta)e^{-\beta\varepsilon}}{(1+ze^{-\beta\varepsilon})}d\varepsilon\Bigg\} \end{aligned} \tag{18}$$

$[\cdots]$ 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。

$$PV = k_{\mathrm{B}}T\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{V}{(2\pi)^2}g\beta\int_0^{\infty}\frac{2}{3}\varepsilon^{3/2}\frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon}+1}d\varepsilon \tag{19}$$

$\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$ だから

$$= \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{V}{(2\pi)^2}g\int_0^{\infty}\frac{2}{3}\varepsilon^{3/2}\frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon}+1}d\varepsilon \tag{20}$$

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、

$$E = \sum_l \varepsilon_l f(\varepsilon_l) \tag{21}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} D(\varepsilon)\frac{\varepsilon}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon}+1}d\varepsilon \tag{22}$$

(16) 式を代入して

$$= \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{V}{(2\pi)^2} g \int_0^\infty \frac{\varepsilon\varepsilon^{1/2}}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon}+1} d\varepsilon \tag{23}$$

$$= \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{V}{(2\pi)^2} g \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon}+1} d\varepsilon \tag{24}$$

(20) 式と (24) 式を比べれば、$E = (3/2)PV$ が示せる。

③ 次の公式

$$\int_0^\infty X(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \widetilde{X}(\mu) + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left.\frac{dX(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=\mu} \tag{25}$$

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

$$\widetilde{X}(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon X(\varepsilon') d\varepsilon' \tag{26}$$

また、$f(\varepsilon)$ はフェルミの分布関数を表す。

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

$$\widetilde{X}(\mu) = N(\mu) \equiv \int_0^\mu D(\varepsilon') d\varepsilon' \tag{27}$$

とすると、

$$\int_0^\infty D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = N(\mu) + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left.\frac{dD(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=\mu} \tag{28}$$

次に μ を T で展開する。$\mu = \varepsilon_F + C_1 T + C_2 T^2$ として、

$$N = N(\mu) + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left.\frac{dD(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon\,=\,\mu} \tag{29}$$

に代入して、T のベキの係数を計算する。

右辺 1 項目は、

$$N(\varepsilon_F + C_1T + C_2T^2) = N(\varepsilon_F) + (C_1T + C_2T^2)\left.\frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=\varepsilon_F} + \frac{(C_1T + C_2T^2)^2}{2}\left.\frac{d^2N(\varepsilon)}{d\varepsilon^2}\right|_{\varepsilon=\varepsilon_F} \tag{30}$$

2 項目は、T^2 までで

$$\frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2\left.\frac{dD(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=\mu} = \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2\left.\frac{dD(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=\varepsilon_F} \tag{31}$$

2 つを合わせると、

$$N = N(\varepsilon_F) + (C_1T + C_2T^2)\left.\frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=\varepsilon_F} + \frac{(C_1T + C_2T^2)^2}{2}\left.\frac{d^2N(\varepsilon)}{d\varepsilon^2}\right|_{\varepsilon=\varepsilon_F} + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2\left.\frac{dD(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=\varepsilon_F} \tag{32}$$

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 を計算する。T の係数から

$$C_1\left.\frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=\varepsilon_F} = 0 \tag{33}$$

ゆえに $C_1 = 0$

T^2 の係数から

$$C_2\left.\frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=\varepsilon_F} + \frac{\pi^2}{6}k_{\mathrm{B}}^2\left.\frac{dD(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=\varepsilon_F} = 0 \tag{34}$$

ただし、$C_1 = 0$ を使った。C_2 について解くと、

$$C_2 = -\frac{\pi^2}{6}\frac{k_{\mathrm{B}}^2}{D(\varepsilon_F)}\left.\frac{dD(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=\varepsilon_F} \tag{35}$$

[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、

$$\widetilde{X}(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon X(\varepsilon')d\varepsilon' \tag{36}$$

とおくと、

$$X(\varepsilon) = \frac{d\widetilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon} \tag{37}$$

であり、与式を部分積分すると、

$$\int_0^\infty X(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon = \int_0^\infty \frac{d\widetilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon}f(\varepsilon)d\varepsilon \tag{38}$$

$$= \left[\widetilde{X}(\varepsilon)f(\varepsilon)\right]_0^\infty - \int_0^\infty \widetilde{X}(\varepsilon)\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon}d\varepsilon \tag{39}$$

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

$$= -\int_0^\infty \widetilde{X}(\varepsilon)\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon}d\varepsilon \tag{40}$$

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

$$-\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{1}{k_\mathrm{B}T}\frac{1}{(\exp[(\varepsilon-\mu)/k_\mathrm{B}T]+1)(\exp[-(\varepsilon-\mu)/k_\mathrm{B}T]+1)} \tag{41}$$

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、

$$\widetilde{X}(\varepsilon) = \widetilde{X}(\mu) + (\varepsilon-\mu)\left.\frac{d\widetilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=\mu} + \frac{(\varepsilon-\mu)^2}{2}\left.\frac{d^2\widetilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon^2}\right|_{\varepsilon=\mu} \tag{42}$$

これを (40) 式に代入

$$-\int_0^\infty \widetilde{X}(\varepsilon)\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon}d\varepsilon = -\int_0^\infty \left(\widetilde{X}(\mu) + (\varepsilon-\mu)\left.\frac{d\widetilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=\mu} + \frac{(\varepsilon-\mu)^2}{2}\left.\frac{d^2\widetilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon^2}\right|_{\varepsilon=\mu}\right)\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon}d\varepsilon \quad (43)$$

1 項目は、

$$-\int_0^\infty \widetilde{X}(\mu)\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon}d\varepsilon = -\widetilde{X}(\mu)\int_0^\infty \frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon}d\varepsilon \quad (44)$$

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

$$= -\widetilde{X}(\mu)\int_{-\infty}^\infty \frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon}d\varepsilon \quad (45)$$

$$= \widetilde{X}(\mu) \quad (46)$$

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、

$$-\int_0^\infty \frac{(\varepsilon-\mu)^2}{2}\left.\frac{d^2\widetilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon^2}\right|_{\varepsilon=\mu}\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon}d\varepsilon \quad (47)$$

$$= -\frac{1}{2}\left.\frac{d^2\widetilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon^2}\right|_{\varepsilon=\mu}\int_0^\infty (\varepsilon-\mu)^2\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon}d\varepsilon \quad (48)$$

$-df(\varepsilon)/d\varepsilon$ に (41) 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、

$$= \frac{1}{2}\left.\frac{d^2\widetilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon^2}\right|_{\varepsilon=\mu}\frac{\pi^2}{3}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \quad (49)$$

$\widetilde{X}(\varepsilon)$ の定義を与える (36) 式から、

$$= \frac{1}{2} \left. \frac{dX(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=\mu} \frac{\pi^2}{3}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \tag{50}$$

結局

$$\int_0^\infty X(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \widetilde{X}(\mu) + \frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2 \left. \frac{dX(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=\mu} \tag{51}$$