

2014 年度統計力学 II 宿題 5 (5 月 15 日出題、5 月 22 日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題 1.] ① 5/8 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。

[解答]① エネルギーは、

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

と書けるから、 $f(\varepsilon)$ に階段関数を代入して、

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

$D(\varepsilon)$ を代入して、

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

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

一方、以前計算した式

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

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

から

$$E = \frac{3}{4} N \varepsilon_F \quad (7)$$

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)

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

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、

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

以前導いた

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

から ε_F は、 $V^{-1/3}$ に比例するので、

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

② プリント「授業ノート 1」(29) 式と (30) から

$$\Xi = \prod_l \Xi_l = \prod_l (1 + z e^{-\beta \varepsilon_l}) \quad (12)$$

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

$$\Omega = -k_B T \ln \Xi = -k_B T \sum_l \ln(1 + z e^{-\beta \varepsilon_l}) \quad (13)$$

準位が密に詰まっていれば

$$\Omega = -k_B T \int_{-\infty}^{\infty} D(\varepsilon) \ln(1 + z e^{-\beta \varepsilon}) d\varepsilon \quad (14)$$

$\Omega = -PV$ (補習ノート (101) 式) だから、

$$PV = k_B T \int_{-\infty}^{\infty} D(\varepsilon) \ln(1 + z e^{-\beta \varepsilon}) d\varepsilon \quad (15)$$

^{*1} <http://www.cmt.phys.kyushu-u.ac.jp/~A.Yoshimori/hoshu13.pdf>

この式に

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

を代入すると

$$PV = k_B T \int_0^\infty \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{V}{(2\pi)^2} g \varepsilon^{1/2} \ln(1 + z e^{-\beta\varepsilon}) d\varepsilon \quad (17)$$

これを部分積分する。

$$PV = k_B T \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{V}{(2\pi)^2} g \left\{ \left[\frac{2}{3} \varepsilon^{3/2} \ln(1 + z e^{-\beta\varepsilon}) \right]_0^\infty - \int_0^\infty \frac{2}{3} \varepsilon^{3/2} \frac{z(-\beta)e^{-\beta\varepsilon}}{(1 + z e^{-\beta\varepsilon})} d\varepsilon \right\} \quad (18)$$

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

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

$\beta = 1/(k_B T)$ だから

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

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、

$$E = \sum_l \varepsilon_l f(\varepsilon_l) \quad (21)$$

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

(16) 式を代入して

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

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

(20) 式と (24) 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、

$$\tilde{X}(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon X(\varepsilon')d\varepsilon' \quad (25)$$

とおくと、

$$X(\varepsilon) = \frac{d\tilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon} \quad (26)$$

であり、与式を部分積分すると、

$$\int_0^\infty X(\varepsilon)f(\varepsilon)d\varepsilon = \int_0^\infty \frac{d\tilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon} f(\varepsilon)d\varepsilon \quad (27)$$

$$= \left[\tilde{X}(\varepsilon)f(\varepsilon)\right]_0^\infty - \int_0^\infty \tilde{X}(\varepsilon) \frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (28)$$

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

$$= - \int_0^\infty \tilde{X}(\varepsilon) \frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (29)$$

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

$$-\frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{1}{k_B T} \frac{1}{(\exp[(\varepsilon - \mu)/k_B T] + 1)(\exp[-(\varepsilon - \mu)/k_B T] + 1)} \quad (30)$$

この関数は $\varepsilon = \mu$ のまわりに $k_B T$ 程度の幅のピークを持つ。したがって、 $\tilde{X}(\varepsilon)$ 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、

$$\tilde{X}(\varepsilon) = \tilde{X}(\mu) + (\varepsilon - \mu) \left. \frac{d\tilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=\mu} + \frac{(\varepsilon - \mu)^2}{2} \left. \frac{d^2\tilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon^2} \right|_{\varepsilon=\mu} \quad (31)$$

これを (29) 式に代入

$$\begin{aligned} - \int_0^\infty \tilde{X}(\varepsilon) \frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon = & - \int_0^\infty \left(\tilde{X}(\mu) + (\varepsilon - \mu) \left. \frac{d\tilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=\mu} \right. \\ & \left. + \frac{(\varepsilon - \mu)^2}{2} \left. \frac{d^2\tilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon^2} \right|_{\varepsilon=\mu} \right) \frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (32) \end{aligned}$$

1 項目は、

$$- \int_0^\infty \tilde{X}(\mu) \frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon = -\tilde{X}(\mu) \int_0^\infty \frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (33)$$

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

$$= -\tilde{X}(\mu) \int_{-\infty}^\infty \frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (34)$$

$$= \tilde{X}(\mu) \quad (35)$$

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、

$$- \int_0^\infty \frac{(\varepsilon - \mu)^2}{2} \left. \frac{d^2\tilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon^2} \right|_{\varepsilon=\mu} \frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (36)$$

$$= -\frac{1}{2} \left. \frac{d^2\tilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon^2} \right|_{\varepsilon=\mu} \int_0^\infty (\varepsilon - \mu)^2 \frac{df(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (37)$$

$-df(\varepsilon)/d\varepsilon$ に (30) 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、

$$= \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 \tilde{X}(\varepsilon)}{d\varepsilon^2} \right|_{\varepsilon=\mu} \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 \quad (38)$$

$\tilde{X}(\varepsilon)$ の定義を与える (25) 式から、

$$= \frac{1}{2} \left. \frac{dX(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=\mu} \frac{\pi^2}{3} (k_B T)^2 \quad (39)$$

結局

$$\int_0^\infty X(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \tilde{X}(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \left. \frac{dX(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=\mu} \quad (40)$$