中間テストは 12 月 5 日、先端研 403N 教室で行います.

統計力学演習 No.7 理想フェルミ気体（パウリ常磁性、高温展開）　令和元年 11 月 21 日

問 1. No. 3 の**問 5** の 2 原子分子が電気的に分極しており、原子 1 が電荷 $-q$ を、原子 2 が電荷 $+q$ を持っているとすると、この分子の電気双極子モーメントは $\boldsymbol{\mu} = q\boldsymbol{r}$ である。この分子を一様な電場 $\boldsymbol{E}$ 中に置くと静電エネルギー $-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{E}$ が生ずる。電場が z 軸方向を向いているとすると、1 個の分子のハミルトニアンは、重心座標 $\boldsymbol{r}_{\rm G}$ についての運動は除くとして

$$\mathcal{H}(\theta,\varphi;p_\theta,p_\varphi) = \frac{{p_\theta}^2}{2I} + \frac{{p_\varphi}^2}{2I\sin^2\theta} - \mu E\cos\theta$$

となる。

(a) 古典近似のもとで 1 個の分子の分配関数 z を計算し、これから No. 3 の**問 5** と同様に、この分子が N 個あるときのヘルムホルツの自由エネルギー F を求めよ (分子間の相互作用は十分弱いとする)。

(b) 単位体積あたりの分子数を n $(= N/V)$ とすると、単位体積あたりの電気分極 P_E が $P_E = -V^{-1}(\partial F/\partial E)$ で与えられることに注意して、P_E を求めよ。また、温度 T の関数としてこれを図示せよ。

問 2. パウリ常磁性

磁場中の自由電子は運動エネルギーに加え、その磁化軸方向のスピンの成分 $s_z = \pm 1/2$ に応じたエネルギー $\pm\mu_{\rm B}H$ を持つ。自由電子を理想フェルミ気体と仮定して、常磁性帯磁率を求めよう。

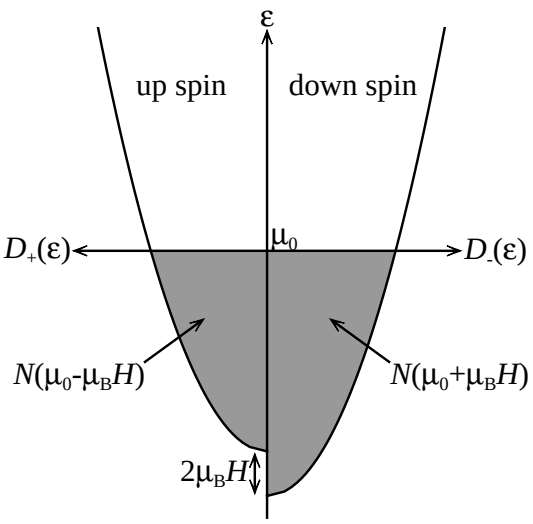
(a) まず絶対零度での帯磁率 χ について考える。磁場ゼロのとき、エネルギー ε 以下にあるスピン当たりの状態数を $N(\varepsilon)$ とすると、絶対零度の化学ポテンシャルを μ_0 として、スピンの向きが $s_z = \pm 1/2$ である電子数 $N_\pm$ は、$N_\pm = N(\mu_0 \mp \mu_{\rm B}H)$ と表される。さらに全電子数を $N_{\rm tot}$、磁化を M とすると

$$N_{\rm tot} = N_+ + N_-, \quad M = -\mu_{\rm B}(N_+ - N_-)$$

であることに注意して、絶対零度での単位体積あたりの帯磁率が

$$\chi(0) = \frac{1}{V}\lim_{H\to 0}\frac{M}{H} = \frac{2\mu_{\rm B}^2}{V}D(\mu_0) = \frac{3}{2}n{\mu_{\rm B}}^2/\mu_0$$

となることを示せ。ただし、n は単位体積当たりの電子数、$D(\varepsilon)$ は磁場ゼロのときのスピン当たりの状態密度である。



(b) 一般の温度のときは、スピンの向きが $s_z = \pm 1/2$ である電子数 $N_\pm$ は、$f(\varepsilon)$ をフェルミ分布関数とすると

$$N_\pm = \int_{\pm\mu_{\rm B}H}^{\infty} D(\varepsilon \mp \mu_{\rm B}H)f(\varepsilon)d\varepsilon$$

となる。(a) と同様の考えによって、帯磁率が

$$\chi(T) = \frac{2\mu_{\mathrm{B}}^2}{V}\int_0^\infty D'(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$$

で与えられることを示せ。

(c) (b) の結果と No.6 の問 **5**(a) の低温展開の式を用いて、縮退が強い場合 ($T \ll \mu_0/k_{\mathrm{B}}$)

$$\chi(T) = \frac{3}{2}\frac{n\mu_{\mathrm{B}}^2}{\mu_0}\left\{1 - \frac{\pi^2}{12}\frac{(k_{\mathrm{B}}T)^2}{\mu_0^2} + \cdots\right\}$$

と書けることを示せ。また、縮退が弱い場合 ($T \gg \mu_0/k_{\mathrm{B}}$) は、フェルミ分布関数が $f(\varepsilon) \sim e^{-(\varepsilon-\mu)\beta}$ と近似できることを用いて、帯磁率が以下のように、キュリーの法則に従うことを示せ。

$$\chi(T) = \frac{n\mu_{\mathrm{B}}^2}{k_{\mathrm{B}}T}$$

なぜ、低温での帯磁率が

$$\frac{\chi(0)}{\chi(T)} \sim \frac{3}{2}\frac{(k_{\mathrm{B}}T)}{\mu_0}$$

のように、縮退が弱い高温領域でのキュリーの法則に比べ小さくなるのか理由を説明せよ。

問 3. 理想量子気体について、常に $pV = (2/3)E$ が成り立つことを示せ。

問 4. 理想フェルミ気体の高温展開

$\mu < 0$ のとき、関数 $g(\varepsilon) = A\varepsilon^\alpha$ に対して、

$$\int_0^\infty \frac{g(\varepsilon)}{e^{(\varepsilon-\mu)\beta}+1}\,d\varepsilon = \frac{A\Gamma(\alpha+1)}{\beta^{\alpha+1}}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}e^{n\beta\mu}}{n^{\alpha+1}}$$

となることを示せ。ただし、$\Gamma(z)$ は、ガンマ関数で

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1}e^{-t}\,dt$$

と表される。この結果を用いて、理想フェルミ気体について、縮退の弱い場合（$T \gg \mu_0/k_{\mathrm{B}}$）に、以下の式を導け。$n$ は単位体積当たりの粒子数。（ヒント: No.6 の問 **4** のように逐次近似法を用いると良い。）

$$\exp(-\mu/k_{\mathrm{B}}T) = \frac{(2\pi m k_{\mathrm{B}}T)^{3/2}}{nh^3}\left\{1 - \frac{1}{2^{3/2}}\frac{nh^3}{(2\pi m k_{\mathrm{B}}T)^{3/2}} + \ldots\right\}$$

$$E = \frac{3}{2}Nk_{\mathrm{B}}T\left\{1 + \frac{1}{2^{5/2}}\frac{nh^3}{(2\pi m k_{\mathrm{B}}T)^{3/2}} + \ldots\right\}$$

問 5. 2 次元理想フェルミ気体の化学ポテンシャル

密度、すなわち単位面積あたりの粒子数を n、粒子の持つ内部自由度 (縮重度) を g とする 2 次元理想フェルミ気体の化学ポテンシャル $\mu(T)$ は

$$\mu(T) = k_{\mathrm{B}}T\log\left[\exp\left(\frac{2\pi n\hbar^2}{mgk_{\mathrm{B}}T}\right) - 1\right]$$

と表されることを示せ。高温、低温領域で $\mu(T)$ はどのように表されるか？また、$\mu(T)$ を温度の関数として図示せよ。

問 6. 熱電子

金属中の伝導電子は理想フェルミ気体とみなして良い場合が多い。電子が金属内に束縛されているのは、金属中でのフェルミ準位 μ_0（0K での化学ポテンシャル）が外界のポテンシャルより仕事関数 ϕ だけ低いためである。有限温度ではフェルミ分布に従って、高いエネルギーを持つ粒子も存在し、金属表面から抜け出すこともできる。この、熱電子によって生ずる電流密度が $T^2 \exp(-\phi/k_{\mathrm{B}}T)$ に比例することを示せ（Richardson-Dashman の式）。また、その係数を評価せよ。ϕ は通常数 eV であることに注意せよ。