巨視的物質の運動エネルギー

Yukimi Goto

2020 年 10 月 21 日

N 個の電子を一辺 L の箱に閉じこめて，その運動エネルギーを調べる．パウリ原理から，N 個の自由電子の基底エネルギーは，一粒子運動エネルギーの固有値を小さいものから順番に N 個足したものである．つまり正整数 $n_{i,j}$ について $p_j = 2\pi(n_{1,j}^2 + n_{2,j}^2 + n_{3,j}^2)^{1/2}/L$ であれば， $p_1 \le p_2 \le \cdots \le p_N$ について $\varepsilon_{\mathrm{GS}} = \sum_{j=1}^{N} \hbar^2 p_j^2/(2m)$ とできる．電子の数はつぎのようにかける：

$$\sum_{p_j \le \varepsilon_{\mathrm{F}}} 1 = N.$$

ここで ε_{F} はフェルミ・エネルギーで，和は $p_j \le \varepsilon_{\mathrm{F}}$ なる状態の和を表す． 電子は半径 ε_{F} の球（フェルミ球）に閉じこめられているとみてもよい．いま巨視的な系を考えたいので，$N \to \infty$ のふるまいをみる．電子密度を ρ で表しこれを一定とすれば，$N = \rho L^3 \to \infty$ の極限で

$$\rho = \frac{N}{L^3} = L^{-3} \sum_{p_j \le \varepsilon_{\mathrm{F}}} 1 \to \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{p \le \varepsilon_{\mathrm{F}}} d^3p = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} \varepsilon_{\mathrm{F}}^3,$$

あるいは $\varepsilon_{\mathrm{F}} = (6\pi^2\rho)^{1/3}$ がわかる．一方，単位体積あたりの運動エネルギーを考えて，同様に $N \to \infty$ とすると

$$L^{-3} \sum_{p_j \le \varepsilon_{\mathrm{F}}} \frac{\hbar^2 p_j^2}{2m} \to \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\hbar^2}{2m} \int_{p \le \varepsilon_{\mathrm{F}}} d^3p\, p^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{3}{5} (6\pi^2)^{2/3} \rho^{5/3}.$$

よって，全空間での運動エネルギーをこれの積分とみれば

$$\varepsilon_{\mathrm{GS}} \sim \frac{\hbar^2}{2m} \frac{3}{5} (6\pi^2)^{2/3} \int_{\mathbb{R}^3} \rho(x)^{5/3}\, dx$$

を得る．これは Thomas-Fermi 近似での運動エネルギーで，$N \to \infty$ の極限でこの近似は正当化できる [1, Thm. 12.12]．

参考文献

[1] E. H. Lieb and M. Loss, *Analysis*, Second Edition, American Mathematical Society, Providence, (2001).

[2] 江沢洋,「物理的直観と数学–電子が無数にある系の量子力学」，江沢洋・上條隆志 編『江沢洋選集 IV 物理学と数学』日本評論社.（2019）

[3] 田崎晴明,『統計力学 I，II』，培風館.（2008）

[4] 中嶋貞雄，豊沢豊，阿部龍蔵,『物性 II』，新装版現代物理学の基礎７，岩波書店.（2012）