数式処理ー熱膨張ー

熱膨張

熱膨張(thermal expansion)は原子間ポテンシャルの*3*次以上の項によって現れる(キッテル著 固体物理学入門 宇 野良清他訳，丸善1978.)．平衡点からの原子の変位xのポテンシャルエネルギーを

$$U(x) = c\,x^2 - g\,x^3$$

と取る．2次までの項では古典的な調和振動子を表し，熱膨張は現れない．x^3の項は原子間相互作用の非対称性を表し，この項が熱膨張係数と直接かかわってくる．

有限温度での平均の変位は，ボルツマン分布関数を計算することで求まる．平均の位置xは，熱力学的な確率で重みづけられ

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x \exp(-\beta U(x))\, dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\beta U(x))\, dx} \quad (1)$$

で計算できる．ここで$\beta = \frac{1}{k_B T}$である．この積分を実行すると

$$\langle x \rangle = \frac{3g}{4\beta c^2}$$

となる．この式を導け．

ヒント

ここでは先ず近似によって式を簡単化する．これはTaylor展開ですぐに求まる．ただし，ポテンシャルエネルギーの項で2次の項はそのまま残し，3次以上を展開すること．そうすると（1）式の分母の被積分関数は

```
> f1:=(1+beta*g*x^3)/exp(beta*c*x^2);
```

$$f1 := \frac{1 + \beta g x^3}{e^{\beta c x^2}} \qquad (1.1.1.1)$$

となることが導かれる．後は，鉄則に示した積分を参照せよ．