

3-8

(1)

角振動数  $\omega$  の量子的調和振動子のエネルギーは  $n \in \mathbb{N}$  を用いて  $\hbar\omega(n + 1/2)$  なので

$$\begin{aligned}
 Z_1 &= \sum_n e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})} \\
 &= e^{-\beta\hbar\omega/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n} \\
 &= e^{-\beta\hbar\omega/2} \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}
 \end{aligned} \tag{1}$$

(2)

$\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$  ( $n_i \in \mathbb{Z}$ ) を用いて

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} \mathbf{n} \tag{2}$$

(3)

$\omega = v|\mathbf{k}|$  と (2) の結果から

$$|\mathbf{n}| = \frac{L\omega}{2\pi v} \tag{3}$$

したがって角振動数が  $\omega$  以下の状態数  $N(\omega)$  は  $L$  に対して格子間隔が十分小さい時半径  $L\omega/2\pi v$  の球の体積で近似できるので

$$\begin{aligned}
 N(\omega) &= \frac{4}{3}\pi \frac{L^3\omega^3}{8\pi^3v^3} \\
 &= \frac{V\omega^3}{6\pi^2v^3}
 \end{aligned} \tag{4}$$

状態密度  $D_v(\omega)$  は  $N(\omega)$  を微分し

$$\begin{aligned}
 D_v(\omega) &= \frac{d}{d\omega} N(\omega) \\
 &= \frac{V\omega^2}{2\pi^2v^3}
 \end{aligned} \tag{5}$$

(4)

$$\begin{aligned}\int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega &= N(\omega_D) \\ 3N &= \frac{V\omega_D^3}{6\pi^2} \left( \frac{1}{v_l^3} + \frac{1}{v_t^3} \right)\end{aligned}\tag{6}$$

したがって

$$\begin{aligned}\frac{9N\omega^2}{\omega_D^3} &= \frac{9N\omega^2}{3N} \\ &= \frac{\frac{V}{6\pi^2} \left( \frac{1}{v_l^3} + \frac{1}{v_t^3} \right)}{\omega_D^3} \\ &= \frac{\omega^2 V}{2\pi^2} \left( \frac{1}{v_l^3} + \frac{1}{v_t^3} \right) = D(\omega)\end{aligned}\tag{7}$$

(5)

$$\begin{aligned}F &= -k_B T \sum_k \log Z_1(\omega_k) \\ &= k_B T \sum_k \left( \frac{\hbar\omega_k}{2k_B T} + \log \left( 1 - e^{-\hbar\omega_k/k_B T} \right) \right)\end{aligned}\tag{8}$$

角振動数  $\omega$  から  $\omega + d\omega$  の間にある状態数は  $D(\omega)d\omega$  なので  $\omega_k$  に関する和は積分に書き換えられ

$$\begin{aligned}F &= k_B T \int_0^\infty d\omega D(\omega) \left( \frac{\hbar\omega}{2k_B T} + \log \left( 1 - e^{-\hbar\omega/k_B T} \right) \right) \\ &= \frac{9Nk_B T}{\omega_D^3} \int_0^\infty d\omega \omega^2 \left( \frac{\hbar\omega}{2k_B T} + \log \left( 1 - e^{-\hbar\omega/k_B T} \right) \right)\end{aligned}\tag{9}$$

$\omega$  の範囲は 0 から  $\omega_D$  で全ての状態数を網羅しているので

$$F = \frac{9Nk_B T}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} d\omega \omega^2 \left( \frac{\hbar\omega}{2k_B T} + \log \left( 1 - e^{-\hbar\omega/k_B T} \right) \right)\tag{10}$$

(6)

エネルギー  $E$  は  $E = \partial(\beta F)/\partial\beta$  なので

$$\begin{aligned}E &= \frac{\partial}{\partial\beta} \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} d\omega \omega^2 \left( \frac{\hbar\omega}{2} + \log \left( 1 - e^{-\hbar\omega\beta} \right) \right) \\ &= \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} d\omega \omega^2 \left( \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \right)\end{aligned}\tag{11}$$

(7)

$$\begin{aligned}
C_V &= \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} d\omega \frac{\partial}{\partial T} \omega^2 \left( \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \right) \\
&= \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\omega_D} d\omega \omega^2 \frac{\hbar\omega}{k_B T^2} \frac{\hbar\omega e^{\hbar\omega/k_B T}}{(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^2}
\end{aligned} \tag{12}$$

ここで  $\hbar\omega/k_B T = t$ ,  $\hbar\omega_D/k_B = \Theta_D$  とすると

$$\begin{aligned}
C_V &= \frac{9N}{\omega_D^3} \int_0^{\Theta_D/T} dt k_B \frac{k_B^3 T^3}{\hbar^3} t^4 \frac{e^t}{(e^t - 1)^2} \\
&= 3Nk_B \frac{3T^3}{\Theta_D^3} \int_0^{\Theta_D/T} dt \frac{t^4 e^t}{(e^t - 1)^2} \\
&= 3Nk_B f\left(\frac{\Theta_D}{T}\right)
\end{aligned} \tag{13}$$

ここで  $f(x) = 3/x^3 \int_0^x dt t^4 e^t / (e^t - 1)^2$  とした.

(8)

$T \gg \theta_D$  のとき被積分項が  $t^4 e^t / (e^t - 1)^2 \sim t^2$  とできることから

$$\begin{aligned}
f(x) &\sim \frac{3}{x^3} \int_0^x dt t^2 \\
&= 1
\end{aligned} \tag{14}$$

したがって

$$C_V = 3Nk_B \tag{15}$$

(9)

$T \ll \theta_D$  のとき  $x \rightarrow \infty$  より積分公式

$$\int_0^x dt \frac{t^4 e^t}{(e^t - 1)^2} \sim \frac{4\pi^4}{15} \tag{16}$$

から

$$f(x) \sim 3Nk_B \frac{3T^3}{\Theta_D^3} \frac{4\pi^4}{15} \rightarrow 0 \tag{17}$$

となる.

(10)

上の結果から  $C_V$  は  $T \rightarrow 0$  で 0 に,  $T \rightarrow \infty$  で  $3Nk_B$  に漸近するとわかる. 図 1 にその概形を示す.

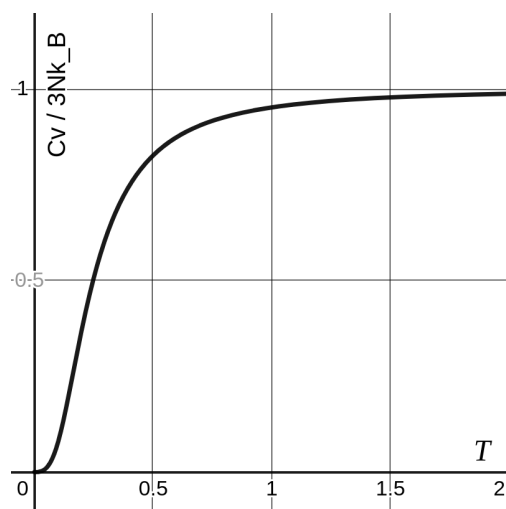


図 1  $C_V$  の概形 (Desmos 計算機にて描画)