61908697 佐々木良輔

3-8

(1)

角振動数 ω 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

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

(2)

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

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

(3)

$\omega = v|\boldsymbol{k}|$ と (2) の結果から

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

したがって角振動数が ω 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

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

(4)

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

したがって

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

(5)

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

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

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

ω の範囲は 0 から ω_D で全ての状態数を網羅しているので

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

(6)

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

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

(7)

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

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

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

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

(8)

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

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

したがって

$$
C_V = 3Nk_B \qquad (15)
$$

(9)

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

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

から

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

となる.

(10)

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

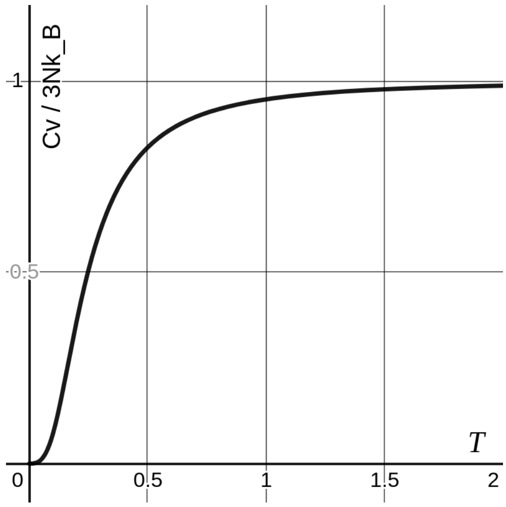

図 1　C_V の概形 (Desmos 計算機にて描画)