東京大学 平成28年 物理学専攻 院試 解答例

ミヤネ

最終更新：2023 年 8 月 21 日

目次

1 数学パート 2
問題 1: 線形代数 2
問題 2: 微分方程式 4

2 物理パート 6
問題 1: 量子力学 6
問題 2: 力学，統計力学 8

1　数学パート

第1問

1. (i) (a) $\det A = \det B = 1$で，$\det AB = (\det A)(\det B)$なので

$$\det M_n = \det A \cdots \det A \det B \cdots \det B = 1 \tag{1.1.1}$$

です．

(b) A, Bはorthogonalなので，M_nも．trは転置をとっても変わらないので．

(c) 例えば

$$M_n = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \tag{1.1.2}$$

とおいてみましょう．$\det M_n = 1$より逆行列が決まり，それらを足せばOK．

(ii) $M_n^T = M_{n-2}^T M_{n-1}^T$に右から$M_{n-1}$をかければ

$$M_{n-2}^T = (M_n)^{-1} M_{n-1} \tag{1.1.3}$$

です．また，$M_{n+1} = M_n M_{n-1}$より

$$M_{n+1} + (M_{n-2})^{-1} = M_n M_{n-1} + (M_n)^{-1} M_{n-1} = (\mathrm{tr}\, M_n) M_{n-1} \tag{1.1.4}$$

となります．また，両辺のtrをとれば

$$x_{n+1} = x_{n-2} = x_n x_{n-1} \tag{1.1.5}$$

となり，$x_{n+1} = x_n x_{n-1} - x_{n-2}$が示されます．

(iii) $x_{n+2} = x_{n+1} x_n - x_{n-1}$を代入すると

$$\begin{aligned} I_n &= (x_{n+1} x_n - x_{n-1})^2 + x_{n+1}^2 + x_n^2 - (x_{n+1} x_n - x_{n-1}) x_{n+1} x_n \\ &= x_{n+1}^2 + x_n^2 + x_{n-1}^2 - x_{n+1} x_n x_{n-1} = I_{n-1} \end{aligned} \tag{1.1.6}$$

となることがわかります．また，$\mathrm{tr}\, M_0 = \sqrt{2}, \mathrm{tr}\, M_1 = \sqrt{3}, \mathrm{tr}\, M_2 = (\sqrt{6} - \sqrt{2})/2$なので，計算すれば

$$I_n = 2 + 3\sqrt{2} - 2\sqrt{3} - 3\sqrt{6} \tag{1.1.7}$$

となります．

2. (i) $0, \pm\sqrt{2b_1 b_2}$.

(ii) 仮に$v_1 = 0$だとしましょう．すると，固有ベクトル$\boldsymbol{v}$の固有値をλとすれば，$C\boldsymbol{v} = \lambda \boldsymbol{v}$より連立方程式

$$\begin{cases} b_1 v_2 = 0 \\ b_2 v_3 = \lambda v_2 \\ b_2 v_2 + b_3 v_4 = \lambda v_3 \\ \vdots \\ b_i v_i + b_{i+2} v_{i+3} = \lambda v_{i+2} \\ \vdots \\ b_{N-3} v_{N-3} + b_{N-1} v_N = \lambda v_{N-1} \\ b_{N-1} v_{N-1} = \lambda v_N \end{cases} \tag{1.1.8}$$

が従います．第1,2式から$v_2, v_3 = 0$となりますが，漸化式から$v_4, \cdots, v_{N-1} = 0$となることが決まってしまい，最終式より$v_N = 0$となって自明な解となります．よって，$v_1 \neq 0$です．

(iii) 逆に$v_1 \neq 0$なら，

$$\begin{cases} b_1 v_2 = \lambda v_1 \\ b_1 v_1 + b_2 v_3 = \lambda v_2 \\ \vdots \\ b_i v_i + b_{i+2} v_{i+3} = \lambda v_{i+2} \\ \vdots \\ b_{N-3} v_{N-3} + b_{N-1} v_N = \lambda v_{N-1} \\ b_{N-1} v_{N-1} = \lambda v_N \end{cases} \tag{1.1.9}$$

という連立方程式を考えることになりますが，v_1が決まれば$\boldsymbol{v}$の残りの成分が決まってくることがわかります．このことから，ある固有値に対して対応する固有ベクトルが1対1に決まってくることがわかります[*1]．したがって，縮退がないので固有値は全て異なります．

[*1] 固有ベクトルを固有値から決定するときは，スカラー倍の不定性があったことを思い出すと，その不定性を殺す操作とv_1の値を決める操作が対応します．そして，今回はv_1を決めると固有ベクトルが1つに定まります．

第2問

1. (i) 変数分離すれば

$$\frac{1}{f}\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}t^2} = \frac{1}{g}\frac{\mathrm{d}^2 g}{\mathrm{d}x^2} - \lambda^2 =: \Lambda \tag{1.2.1}$$

となります．$g(x) = \cos kx$より，$\Lambda = -(k^2 + \lambda^2)$となっているので

$$\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}t^2} = -(k^2 + \lambda^2) f \tag{1.2.2}$$

を解けばよいことになります．初期条件は$f(0) = 1, \dot{f}(0) = 0$なので$f(t) = \cos\sqrt{k^2 + \lambda^2}t$が解です．よって，

$$y(x, t) = \cos\sqrt{k^2 + \lambda^2}t \cos kx \tag{1.2.3}$$

がもとめる解です．

(ii) 前問の解は

$$y(x, t) = \frac{1}{2}\cos\left[kx + \sqrt{k^2 + \lambda^2}t\right] + \frac{1}{2}\cos\left[kx - \sqrt{k^2 + \lambda^2}t\right] \tag{1.2.4}$$

となりますが，これで分解できてます．

2. (i) $\mathrm{d}u/\mathrm{d}x$ をかけると

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right)^2 + \lambda^2\left(\frac{1}{2}u^4 - u^2\right)\right] = 0 \tag{1.2.5}$$

となるので，これを積分して$(\mathrm{d}u/\mathrm{d}x)^2$についてもとめると

$$\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right)^2 = \lambda^2(u^4 - u^2 - 2A'/\lambda^2) \tag{1.2.6}$$

となります．なおA'は積分定数．$-2A'/\lambda^2$をまとめてAとおけば

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} = \pm\lambda\sqrt{u^4 - 2u^2 + A} \tag{1.2.7}$$

です．

(ii) $x \to \infty$で$u^2 = 1, u' = 0$とすれば

$$A = 1 \tag{1.2.8}$$

なので，積分すれば[*2]

$$\log\frac{1+u}{1-u} = \pm 2\lambda x + C \tag{1.2.9}$$

となります．境界条件$u(0) = 0$より$C = 0$となるので

$$u(x) = \frac{e^{\pm 2\lambda x} - 1}{e^{\pm 2\lambda x} + 1} \tag{1.2.10}$$

が解です．

---

*2 境界条件$|u(x)| \leq 1$はこのとき効いてきます．

(iii) $(u+z)^3 \sim u^3 + 3u^2 z$で十分なら

$$\left[-\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}x^2} + 2\lambda^2(u^3 - u)\right] + \left[\frac{\partial^2 z}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 z}{\partial x^2} + 2\lambda^2(3u^2 z - z)\right] = 0 \tag{1.2.11}$$

なので，第1項は消えて

$$\frac{\partial^2 z}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 z}{\partial x^2} + 2\lambda^2(3u^2 z - z) = 0 \tag{1.2.12}$$

がzが満たすべき方程式です．

(iv) 素直に代入してみると

$$-\omega^2 \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} - \frac{\mathrm{d}^3 u}{\mathrm{d}x^3} + 2\lambda^2\left(3u^2 \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} - \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right) = 0 \tag{1.2.13}$$

となります．問題文の式(3)を微分してみると

$$\frac{\mathrm{d}^3 u}{\mathrm{d}x^3} = 2\lambda^2\left(3u^2 \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} - \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right) \tag{1.2.14}$$

となっているので，(1.2.13)に代入すると，なんと第3項がちょうど消えて

$$-\omega \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} = 0 \tag{1.2.15}$$

となります．よって，$\omega = 0$とすれば，z_0は解になっています[*3]．

[*3] tについての依存性も完全に消えてしまいますが．

2　物理パート

第1問

1. 次の交換関係と反交換関係は既知とします：
$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma,\ \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}. \tag{2.1.1}$$
計算すれば
$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z,\ [H, S_z] = 0 \tag{2.1.2}$$
です．
2. $D^\dagger D = 2mH$なので．
3. Dとσ_zの反交換関係は
$$\{D, \sigma_z\} = p_x\{\sigma_x, \sigma_z\} + p_y\{\sigma_y, \sigma_z\} = 0 \tag{2.1.3}$$
なので，第1式はOK．第2式は
$$D^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_x p_y \sigma_x \sigma_y + p_y p_x \sigma_y \sigma_x \tag{2.1.4}$$
ですが，後ろの項は
$$\begin{cases} p_x p_y = -\hbar^2 \dfrac{\partial^2}{\partial x \partial y} + e^2 A_x A_y - i\hbar e \dfrac{\partial A_y}{\partial x} - i\hbar e A_y \dfrac{\partial}{\partial x} - i\hbar e A_x \dfrac{\partial}{\partial y} \\ p_y p_x = -\hbar^2 \dfrac{\partial^2}{\partial x \partial y} + e^2 A_x A_y - i\hbar e \dfrac{\partial A_x}{\partial y} - i\hbar e A_x \dfrac{\partial}{\partial y} - i\hbar e A_y \dfrac{\partial}{\partial x} \end{cases} \tag{2.1.5}$$
より[*4]
$$[p_x, p_y] = -i\hbar e \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) = -i\hbar e B_z(x, y) \tag{2.1.6}$$
となるので，
$$p_x p_y \sigma_x \sigma_y + p_y p_x \sigma_y \sigma_x = [p_x, p_y]\sigma_x \sigma_y = \hbar e B_z \sigma \tag{2.1.7}$$
です[*5]．したがって，
$$\frac{1}{2m} D^2 = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{\hbar e B_z(x, y)}{2m}\sigma_z = H \tag{2.1.8}$$
となります．

---

*4 $p_x p_y$を計算するときには少し注意が必要で
$$\begin{aligned} p_x p_y &= \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + eA_x \right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} + eA_y \right) \\ &= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + e^2 A_x A_y - i\hbar \frac{\partial}{\partial x} A_y - i\hbar e A_x \frac{\partial}{\partial y} \\ &= -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + e^2 A_x A_y - i\hbar e \frac{\partial A_y}{\partial x} - i\hbar e A_y \frac{\partial}{\partial x} - i\hbar e A_x \frac{\partial}{\partial y} \end{aligned}$$
のようになります．

*5 $\sigma_i \sigma_j = i\varepsilon_{ijk}\sigma_k + \delta_{ij}$より，$\sigma_x \sigma_y = i\sigma_z$です．

4. $\langle\Phi_n|\Phi_n\rangle, \langle\Psi_n|\Psi_n\rangle > 0$なので
$$E_n = \frac{\langle\Phi_n|\Phi_n\rangle}{2m\langle\Psi_n|\Psi_n\rangle} > 0 \tag{2.1.9}$$
です．固有値については，HとDは可換なので，$H|\Phi_n\rangle = DH|\Psi_n\rangle = E_n|\Phi_n\rangle$です．また，
$$\sigma_z|\Phi_n\rangle = -D\sigma_z|\Psi_n\rangle = (-1)|\Phi_n\rangle \tag{2.1.10}$$
なので，固有値は-1です．
5. $E=0$なら$\langle\Phi|\Phi\rangle = 0$です．よって，
$$D|\Psi\rangle = |\Phi\rangle = 0 \tag{2.1.11}$$
です．また，
$$D = p_x\sigma_x + p_y\sigma_y = -\begin{pmatrix} 0 & \hbar\left(i\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}\right) + e\left(\frac{\partial\rho}{\partial y} + i\frac{\partial\rho}{\partial x}\right) \\ \hbar\left(i\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y}\right) + e\left(\frac{\partial\rho}{\partial y} - i\frac{\partial\rho}{\partial x}\right) & 0 \end{pmatrix} \tag{2.1.12}$$
なので，$D|\Psi\rangle = 0$を計算してみると
$$\frac{\partial f_\uparrow}{\partial x} + i\frac{\partial f_\uparrow}{\partial y} = 0,\ \frac{\partial f_\downarrow}{\partial x} - i\frac{\partial f_\downarrow}{\partial y} = 0 \tag{2.1.13}$$
となっています．これは$w = x+iy, \bar{w} = x-iy$に対して，$f_\uparrow = f_\uparrow(w), f_\downarrow = f_\downarrow(\bar{w})$であれば，成立する式になっています．例えば
$$\frac{\partial f_\uparrow}{\partial x} + i\frac{\partial f_\uparrow}{\partial y} = f' + i\cdot(if') = 0 \tag{2.1.14}$$
でしょう．
6. 前問より，$E-0$なら
$$\psi_\uparrow = f_\uparrow(x+iy)\exp\left[\frac{e}{\hbar}\rho(x,y)\right],\ \psi_\downarrow = f_\downarrow(x-iy)\exp\left[-\frac{e}{\hbar}\rho(x,y)\right] \tag{2.1.15}$$
です．束縛状態では$r\to\infty$のときに$\psi\to 0$でないといけませんが，スピン上向きの波動関数$\psi_\uparrow$は0になりません．よって，束縛状態ならスピン上向きの成分は0です．また，スピン下向きの波動関数は
$$\begin{aligned}\psi_\downarrow &= f_\downarrow(\bar{w})\exp\left[-\frac{ebR^2}{4\hbar} - \frac{ebR^2}{2\hbar}\log\frac{r}{R}\right] \\ &= f_\downarrow(\bar{w})\exp\left[-\frac{ebR^2}{4\hbar}\right]\left(\frac{|\bar{w}|}{R}\right)^{-ebR^2/2\hbar}\end{aligned} \tag{2.1.16}$$
となります．ここで$n := ebR^2/2\hbar$とおくと，
$$f_\downarrow(\bar{w}) = a_0 + a_1\bar{w} + a_2\bar{w}^2 + \cdots a_{n-1}\bar{w}^{n-1} + \cdots \tag{2.1.17}$$
と展開できますが，$f_\downarrow$の最高次が$\bar{w}^n$よりも大きいと$f_\downarrow|\bar{w}|^{-n}$が$r\to$で0に収束してくれません．したがって，$f_\downarrow$の最高次は$n-1$で，一次独立なものも$n-1$つあります．つまり，一次独立なものは
$$\frac{ebR^2}{2\hbar} - 1 \tag{2.1.18}$$
つです．

第2問

1. 古典論の分配関数は

$$Z[\beta] = \frac{1}{h}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1\ \exp\left[-\beta\left(\frac{1}{2m}p_1^2 + \frac{m\omega^2}{2}(x_1-a)^2\right)\right] = \frac{1}{h}\cdot\frac{2\pi}{\beta\omega} \tag{2.2.1}$$

です．よって，

$$U = -\frac{\partial}{\partial\beta}\log Z[\beta] = k_BT,\ C = \frac{\partial U}{\partial T} = k_B \tag{2.2.2}$$

となります．また，x_1の平均ですが

$$\langle x_1\rangle = \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_1\ x_1\exp\left[-\frac{\beta m\omega^2}{2}(x_1-a)^2\right]}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_1\ \exp\left[-\frac{\beta m\omega^2}{2}(x_1-a)^2\right]} = a \tag{2.2.3}$$

となります[*6]．同様にして，分散を計算すれば

$$\begin{aligned}\sigma_1^2 &= \langle x_1^2\rangle - \langle x_1\rangle^2 \\ &= \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_1\ x_1^2\exp\left[-\frac{\beta m\omega^2}{2}(x_1-a)^2\right]}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_1\ \exp\left[-\frac{\beta m\omega^2}{2}(x_1-a)^2\right]} - a^2 = \frac{k_BT}{m\omega^2}\end{aligned} \tag{2.2.4}$$

となります．

2. 分配関数は

$$Z_Q[\beta] = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} = \frac{1}{2\sinh(\beta\hbar\omega/2)} \tag{2.2.5}$$

なので，

$$U_Q = -\frac{\partial}{\partial\beta}\log Z = \frac{\hbar\omega}{2}\coth(\beta\hbar\omega/2),\ C_Q = \frac{\partial U_Q}{\partial T} = \frac{\hbar^2\omega^2}{4k_BT^2}\cdot\frac{1}{\sinh^2(\hbar\omega/2k_BT)} \tag{2.2.6}$$

となります．また，$X_1 \coloneqq x_1 - a$に対して

$$\langle n|X_1|n\rangle = 0 \tag{2.2.7}$$

なので，

$$\langle X_1\rangle = \frac{1}{Z_Q[\beta]}\sum_{n=0}^{\infty}\langle n|X_1|n\rangle\, e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} = 0 \tag{2.2.8}$$

です．よって，$\langle x_1\rangle = a$です．同様に考えれば

$$\begin{aligned}\langle n|X_1^2|n\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}(\sqrt{n}\,\langle n-1| + \sqrt{n+1}\,\langle n+1|)(\sqrt{n}\,|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle) \\ &= \frac{1}{m\omega^2}\cdot\hbar\omega^2\left(n+\frac{1}{2}\right)\end{aligned} \tag{2.2.9}$$

[*6] 平行移動して積分すればよいです．

なので

$$\begin{aligned}\langle X_1^2\rangle &= \frac{1}{Z_Q[\beta]}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{m\omega^2}\cdot\hbar\omega^2\left(n+\frac{1}{2}\right)e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\cosh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT}\right)\end{aligned} \tag{2.2.10}$$

より，$\langle X_1^2\rangle = \langle x_1^2\rangle - a^2 = \langle x_1^2\rangle - \langle x_1\rangle^2$なので

$$\sigma^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\cosh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT}\right) \tag{2.2.11}$$

です．内部エネルギーは，高温$k_BT \gg \hbar\omega$では

$$U_Q \sim \frac{\hbar^2\omega^2}{4k_BT^2}\cdot\frac{4k_B^2T^2}{\hbar^2\omega^2} = k_BT = C \tag{2.2.12}$$

で古典論に一致し，低温$k_BT \ll \hbar\omega$では

$$U_Q \sim \frac{\hbar^2\omega^2}{4k_BT^2}\cdot 0 = 0 \tag{2.2.13}$$

となります．

3. この系の運動方程式は

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{pmatrix} = -\omega^2\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{pmatrix} \tag{2.2.14}$$

なので，その係数行列

$$A := \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \tag{2.2.15}$$

の固有値を考えてみることにしましょう．まずは，対角成分を除いた行列

$$B := \begin{pmatrix} 0 & -1 & & & \\ -1 & 0 & -1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -1 & 0 & -1 \\ & & & -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{2.2.16}$$

の固有値を考えます．すると，この行列の固有値と固有ベクトルは

$$\lambda_i = -2\cos\left(\frac{i\pi}{N+1}\right),\ (u_i)_j = \sin\left(\frac{ij\pi}{N+1}\right) \tag{2.2.17}$$

であることがわかります[*7]．実際に，例えば$B\boldsymbol{u}_i$の第2成分を見てみると

$$-\sin\left(\frac{i\pi}{N+1}\right) - \sin\left(\frac{3i\pi}{N+1}\right) = -2\cos\left(\frac{i\pi}{N+1}\right)\sin\left(\frac{2i\pi}{N+1}\right) \tag{2.2.18}$$

[*7] 固有ベクトルのほうの添え字がやかましいかもしれませんが，iが固有値のindexで，jはcomponentsのindexです．

となっています[*8]．したがって，$\boldsymbol{u}_i$はAの固有ベクトルでもあります．なぜなら，

$$A\boldsymbol{u}_i = (2+B)\boldsymbol{u}_i = (2-\lambda_i)\,\boldsymbol{u}_i \tag{2.2.19}$$

だからです．したがって，$\omega^2 A$の固有値は

$$\omega^2\left(2-2\cos\left(\frac{i\pi}{N+1}\right)\right) \tag{2.2.20}$$

であり，これがω_l^2です．

4. 変数を

$$\begin{cases} X_1 = x_1 - a \\ \quad\vdots \\ X_i = x_i - x_{i-1} - a \\ \quad\vdots \\ X_N = a(N+1) - X_N \end{cases} \tag{2.2.21}$$

と変換すれば，ハミルトニアンは

$$H = \sum_{i=1}^{N}\left[\frac{1}{2m}p_i^2 + \frac{m\omega^2}{2}X_i^2\right] \tag{2.2.22}$$

と書き換えることができます．このとき，系が分離できているので，設問1.と同様の議論をすればよいでしょう．ωの依存性がなかったので，

$$C_1 = k_B. \tag{2.2.23}$$

5. 粒子lの分配関数は

$$Z_Q^{(l)}[\beta] = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega_l(n+1/2)} \tag{2.2.24}$$

と書けるので，設問2.と同様にして比熱は

$$C_{1Q}^l = \frac{\hbar^2\omega_l^2}{4k_BT^2}\cdot\frac{1}{\sinh^2(\hbar\omega_l/2k_BT)} \tag{2.2.25}$$

ともとまります．よって，平均をとれば

$$C_{1Q} = \frac{1}{N}\sum_{l=1}^{N}\frac{\hbar^2\omega_l^2}{4k_BT^2}\cdot\frac{1}{\sinh^2(\hbar\omega_l/2k_BT)} \tag{2.2.26}$$

ですが，$x_l := \hbar\omega/k_BT$とすれば

$$C_{1Q} = k_B\cdot\frac{1}{N}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{x_l^2e^x}{(e^x-1)^2} \tag{2.2.27}$$

となります．今は高温極限$|x_{l+1}-x_l| \ll 1$と$N \gg 1$の状況を考えているので，

$$C_{1Q} = \frac{k_B}{\Delta x}\cdot\frac{\Delta x}{N}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{x_l^2e^{x_l}}{(e^{x_l}-1)^2} \sim \frac{2k_B}{\Delta x}\int_0^{\infty}\mathrm{d}x\frac{x^2e^x}{(e^x-1)^2} \tag{2.2.28}$$

[*8] もちろん，もっと一般にできます．

です．ここで，

$$\Delta x = \frac{\hbar}{k_B T}\Delta\omega \sim \frac{\hbar\omega}{k_B T} \tag{2.2.29}$$

なので

$$C_{1Q} = \frac{\pi^2 k_B^2}{3\hbar\omega}T \tag{2.2.30}$$

となり，$b=1, A=\pi^2 k_B^2/3\hbar\omega$です．

補足

- あまり運動方程式とかにまじめに言及してなかったので．まず，この系のラグランジアンは

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}_1^2 - \frac{m\omega^2}{2}(x_1-a)^2 + \frac{1}{2}m\dot{x}_2^2 - \frac{m\omega^2}{2}(x_2-x_1-a)^2 + \cdots \tag{2.2.31}$$

で与えられます．したがって，x_iに共役運動量は

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i \tag{2.2.32}$$

です．このことから，運動方程式はEuler-Lagramgeから

$$m\ddot{x}_i + m\omega^2(2x_i - x_{i+1} - x_{i-1}) = 0 \tag{2.2.33}$$

であることがわかります．また，ハミルトニアンは

$$H = \sum_i p_i\dot{q}_i - L \tag{2.2.34}$$

で与えられますが，これを計算すればちゃんと今回のハミルトニアンになっています．