1. 等方的でない 2 次元調和振動子を考え、振動数 $\nu_1 \ll \nu_2$ とする。このとき、比熱 C_v に関する以下の式を導け。

$$T \simeq T_1 : C_v = k_B\{(\frac{h\nu_1}{k_BT})^2 e^{-\frac{h\nu_1}{k_BT}} + \dots\} \tag{1}$$

$$T \simeq T_2 : C_v = k_B\{1 - \frac{1}{12}(\frac{h\nu_1}{k_BT})^2 + (\frac{h\nu_2}{k_BT})^2 e^{-\frac{h\nu_2}{k_BT}} + \dots\} \tag{2}$$

$$T \simeq T_3 : C_v = k_B\{2 - \frac{1}{21}(\frac{h\nu_2}{k_BT})^2 + \dots\} \tag{3}$$

ただし、$k_BT_1 \ll h\nu_1 \ll k_BT_2 \ll h\nu_2 \ll k_BT_3$ とする。

解答

平均エネルギーは、ヘルムホルツの自由エネルギー F を用いて、

$$\bar{\epsilon} = \frac{\partial \frac{F}{T}}{\partial \frac{1}{T}} \tag{4}$$

と表される。2 次元の調和振動子の分配関数 Z は、

$$Z = \frac{e}{N}\sum_{n_1,n_2} e^{-\frac{\epsilon_{n_1,n_2}}{k_BT}} \tag{5}$$

$$= e^{-\frac{F}{kT}} \tag{6}$$

であるから、平均エネルギーは、

$$\bar{\epsilon} = \frac{\partial}{\partial \frac{1}{T}}(-k_B \ln Z) \tag{7}$$

$$= k_BT^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} \tag{8}$$

式 (5) において、

$$\epsilon_{n_1,n_2} = (n_1 + \frac{1}{2})h\nu_1 + (n_2 + \frac{1}{2})h\nu_2 \tag{9}$$

であるから、等比級数の公式等を用いて、

$$Z = \frac{e}{N} e^{-\frac{h(\nu_1+\nu_2)}{2k_BT}} (1 - e^{-\frac{h\nu_1}{k_BT}})^{-1} (1 - e^{-\frac{h\nu_2}{k_BT}})^{-1} \tag{10}$$

これで、自然対数をとり、T で微分すると、

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{2}h(\nu_1 + \nu_2) + \frac{h\nu_1}{e^{\frac{h\nu_1}{k_BT}} - 1} + \frac{h\nu_2}{e^{\frac{h\nu_2}{k_BT}} - 1} \tag{11}$$

ここで、右辺第 2,3 項はベルヌーイ数の定義であるテイラー展開を行う。
ベルヌーイ数 B_n の定義 $\frac{x}{e^x-1}$ のテイラー展開から x を除したもので、

$$\frac{1}{e^x-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} x^{n-1} \tag{12}$$

$$= \frac{1}{x} - \frac{1}{2} + \frac{x}{12} - \frac{x^3}{720} + \dots \tag{13}$$

これにより、

$$T \simeq T_1 : \bar{\epsilon} = \frac{1}{2} h(\nu_1 + \nu_2) + h\nu_1 e^{-\frac{h\nu_1}{k_B T}} + h\nu_2 e^{-\frac{h\nu_2}{k_B T}} \tag{14}$$

$$T \simeq T_2 : \bar{\epsilon} = \frac{1}{2} h\nu_2 + k_B T + h\nu_2 e^{-\frac{h\nu_2}{k_B T}} + \frac{1}{12} \frac{(h\nu_1)^2}{k_B T} \tag{15}$$

$$T \simeq T_3 : \bar{\epsilon} = 2k_B T + \frac{1}{12} \frac{h^2(\nu_1^2 + \nu_2^2)}{k_B T} \tag{16}$$

となる。比熱は、

$$C_v = \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial T} \tag{17}$$

で与えられるから、求める式が導かれる。
この式は、高温で古典的な結果 $C_v = 2k_B$ に近づき、低温で自由度が凍結することを示している。

2.

参考文献

[1] テル・ハール, **熱統計學**, みすず書房, **1960**.