

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。

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

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

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

ただし、 $k_B T_1 \ll h\nu_1 \ll k_B T_2 \ll h\nu_2 \ll k_B T_3$ 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、

$$\bar{\epsilon} = \frac{\partial F}{\partial \frac{1}{T}} \quad (4)$$

と表される。2次元の調和振動子の分配関数 Z は、

$$Z = \frac{e}{N} \sum_{n_1, n_2} e^{-\frac{\epsilon_{n_1, n_2}}{k_B T}} \quad (5)$$

$$= e^{-\frac{F}{k_B T}} \quad (6)$$

であるから、平均エネルギーは、

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

$$= k_B T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} \quad (8)$$

式(5)において、

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

であるから、等比級数の公式等を用いて、

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

これで、自然対数を取り、 T で微分すると、

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

ここで、右辺第 2,3 項はテイラー展開不可なのでローラン展開を行う。

ローラン展開

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

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

ただし、 B_n はベルヌーイ数である。これにより、

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

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

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

となる。比熱は、

$$C_v = \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial T} \quad (17)$$

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, 熱統計学, みすず書房, 1960.