

統計力学I 演習問題VI

1. (*) N 個の古典的調和振動子からなる系

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{m_i \omega_i^2 q_i^2}{2} \right\}$$

を考える。この系の分配関数を求め、自由エネルギー、内部エネルギー、熱容量を求めよ。

2. 前問の調和振動子の系を量子力学的に考えると、一つ一つの調和振動子のエネルギーは量子化され、固有エネルギーは次のように表される。

$$E = \sum_{i=1}^N \hbar \omega_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right), \quad (n_i = 0, 1, 2, \dots, \infty)$$

- (a) このとき、分配関数を求め、自由エネルギー F 、内部エネルギー U 、熱容量 C の表式を求めよ。
- (b) 調和振動子の系について、一般に

$$\frac{\langle p_i^2 \rangle}{2m_i} = \frac{m_i \omega_i^2 \langle q_i^2 \rangle}{2}$$

が成り立つ。その理由を説明し $\langle q_i^2 \rangle$ の表式を求めよ。

- (c) ω_i, m_i が i によらず ω, m で与えられるとき、 $k_B T \gg \hbar \omega, k_B T \ll \hbar \omega$ それぞれの場合の熱容量 C および $\langle q_i^2 \rangle$ の振る舞いを調べ、温度依存性の概略を図示せよ。

3. 次のハミルトニアンで表される N 個の非調和振動子からなる系

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{p_i^2}{2m} + \frac{K |q_i|^\alpha}{2} \right\} \quad (m, K, \alpha > 0, p_i, q_i \text{ はそれぞれの振動子の運動量と座標})$$

について、古典力学的に考えて、熱容量 C を求めよ。(ヒント：分配関数や自由エネルギーには、解析的に計算できない積分が現れるが、その値は熱容量には影響を及ぼさないことに注意せよ。)

4. (*) 3次元の結晶の格子振動による熱容量を、デバイの考え方に基づいて調べる。

- (a) 一辺 L の立方体の形をした結晶中の音波は、様々な波数ベクトル k を持ったモードの重ね合わせとして表せる。このとき k はどのような値が許されるか。ただし、境界条件は、周期境界条件を考える。

(b) 単位体積あたりの状態密度 $D(\omega)$ が

$$D(\omega) = \frac{\omega^2}{2\pi^2} \left(\frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_t^3} \right) \equiv \frac{3\omega^2}{2\pi^2 \bar{c}^3} \quad \left(\frac{3}{\bar{c}^3} = \left(\frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_t^3} \right) \right)$$

で与えられることを示せ。ただし、縦波の速度を c_l 、横波の速度を c_t とする。

(c) 結晶全体の原子数を N とすると、自由度の総数は $3N$ である。これは上で求めたモードの総数と一致しなくてはならない。このことから、許される最大の振動数 (デバイ振動数) ω_D を求めよ。

(d) この系の熱容量 C の表式を書き下せ。(積分を実行しなくてもよい)

(e) C の低温 ($k_B T \ll \hbar \omega_D$)、高温 ($k_B T \gg \hbar \omega_D$) での振る舞いを調べ、全温度領域での温度依存性の概略を図示せよ。

5. 3次元のデバイモデルの問題を境界条件を固定端にとって計算を行い、周期的境界条件の場合と結果が一致することを確かめよ。(最後まで計算をやり直す必要はない。どこまでやれば同じ結果が出ることが分かるか調べよ)

6. 1次元の結晶にデバイの考え方を適用する事を考える。ただし、原子の変位は1次元軸方向のみに起きると考えることにする。

(a) デバイ振動数 ω_D を求めよ。

(b) 熱容量 C の表式を求めよ。

(c) 熱容量の、高温 ($k_B T \gg \hbar \omega_D$)、低温 ($k_B T \ll \hbar \omega_D$) での振る舞いを調べ、全温度領域での温度依存性の概略を図示せよ。

7. 2次元の結晶にデバイの考え方を適用する事を考える。ただし、原子の変位は2次元面内だけでなく面に垂直方向にも起きるとする。

(a) デバイ振動数 ω_D を求めよ。

(b) 熱容量 C の表式を求めよ。

(c) 熱容量の、高温 ($k_B T \gg \hbar \omega_D$)、低温 ($k_B T \ll \hbar \omega_D$) での振る舞いを調べ、全温度領域での温度依存性の概略を図示せよ。

8. 固体中に、単位体積あたりの状態密度が $D(\omega) = D_0 \left(\frac{\omega}{\omega_D} \right)^{1/3}$ で与えられるような振動モードがある。このとき

(a) このモードの総数が N に等しいとしてデバイ振動数 ω_D を求めよ。

(b) このモードによる熱容量 C の表式を求めよ。

(c) 熱容量の、高温 ($k_B T \gg \hbar \omega_D$)、低温 ($k_B T \ll \hbar \omega_D$) での振る舞いを調べ、全温度領域での温度依存性の概略を図示せよ。