物理工学専攻院試解答集
2024 年度物理学第 3 問

政岡凜太郎

以下で $C = (\partial U/\partial T)$ は指定された振動子系の全熱容量とする。固体の単位質量あたりの格子比熱は、得られた C を固体の質量で割ったものである。体積や振動数は温度に依存しないものとして微分する。

[1] 古典的な 1 次元調和振動子

[1.1] 分配関数

M 個の振動子は独立なので、まず 1 個の位相空間積分 z_{cl} を計算する。運動量と位置の積分を分け、問題文のガウス積分を使うと

$$z_{\mathrm{cl}} = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\, e^{-\beta p^2/(2m)}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\, e^{-\beta m\omega^2 x^2/2} \tag{1}$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}}\sqrt{\frac{2\pi}{\beta m\omega^2}} = \frac{1}{\beta\hbar\omega}. \tag{2}$$

従って

$$\boxed{Z(T) = z_{\mathrm{cl}}^M = \left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar\omega}\right)^M}. \tag{3}$$

[1.2] 内部エネルギー

正準分布の関係 $U = -\partial \ln Z/\partial\beta$ に上式を代入する。$\ln Z = -M\ln(\beta\hbar\omega)$ より

$$\boxed{U = \frac{M}{\beta} = Mk_{\mathrm{B}}T}. \tag{4}$$

1 振動子に運動・位置の二つの二次項があり、各項が $k_{\mathrm{B}}T/2$ を担うという等分配則とも一致する。

[1.3] 熱容量

振動数を固定して U を温度微分すると

$$\boxed{C = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{\omega} = Mk_{\mathrm{B}}}. \tag{5}$$

[2] 単一振動数の量子的調和振動子

[2.1] 分配関数

1 振動子について $n = 0, 1, \ldots$ のボルツマン因子を和にする。$q = e^{-\beta\hbar\omega}$ は $0 < q < 1$ なので等比級数を使え、

$$z_{\mathrm{q}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{1}{2\sinh(\beta\hbar\omega/2)}. \tag{6}$$

M 個の独立なモードでは

$$\boxed{Z(T) = \left[\frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}\right]^{M}}. \tag{7}$$

[2.2] 内部エネルギー

$\ln Z = M[-\beta\hbar\omega/2 - \ln(1 - e^{-\beta\hbar\omega})]$ を β で微分すると

$$\boxed{U = M\hbar\omega\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}\right)}. \tag{8}$$

第 1 項は $T = 0$ でも残る零点エネルギー、第 2 項は熱励起のエネルギーである。

[2.3] 熱容量

$\Theta = \hbar\omega/k_{\mathrm{B}}$ を振動子の温度尺度とおくと、$\beta\hbar\omega = \Theta/T$ である。零点項は温度微分で消え、$y = \Theta/T$ について $\mathrm{d}y/\mathrm{d}T = -y/T$ を使えば

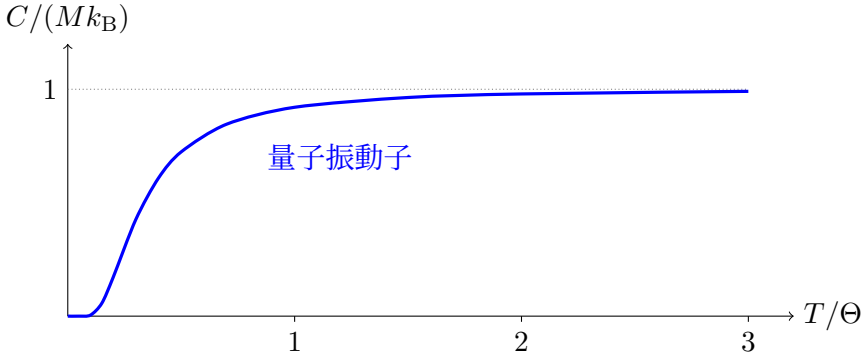
$$\boxed{C = Mk_{\mathrm{B}}\left(\frac{\Theta}{T}\right)^{2}\frac{e^{\Theta/T}}{(e^{\Theta/T} - 1)^{2}}} = Mk_{\mathrm{B}}\left[\frac{\Theta/(2T)}{\sinh(\Theta/(2T))}\right]^{2}. \tag{9}$$

[2.4] 低温・高温と概形

$T \ll \Theta$ では $e^{\Theta/T} \gg 1$、$T \gg \Theta$ では $\sinh(y/2) \sim y/2$ である。従って

$$\boxed{C \sim Mk_{\mathrm{B}}\left(\frac{\Theta}{T}\right)^{2} e^{-\Theta/T} \quad (T \ll \Theta)}, \qquad \boxed{C \longrightarrow Mk_{\mathrm{B}} \quad (T \gg \Theta)}. \tag{10}$$

低温では最初の励起に必要な有限のエネルギー $\hbar\omega$ が熱励起を抑える。図の横軸 T/Θ、縦軸 $C/(Mk_{\mathrm{B}})$ は無次元である。



[3] デバイ型の振動数分布

[3.1] 内部エネルギーと熱容量の積分

まず与えられた状態密度の規格化は

$$\int_0^{\omega_\mathrm{D}} g(\omega)\,\mathrm{d}\omega = \frac{9N}{\omega_\mathrm{D}^3}\int_0^{\omega_\mathrm{D}} \omega^2\,\mathrm{d}\omega = 3N \tag{11}$$

であり、3 次元固体の振動モード数に一致する。各周波数のモードに [2.2] の 1 振動子のエネルギーを適用して、

$$\boxed{U = \int_0^{\omega_\mathrm{D}} g(\omega)\hbar\omega\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\right]\mathrm{d}\omega}. \tag{12}$$

このうち零点エネルギーは $\frac{1}{2}\int g(\omega)\hbar\omega\,\mathrm{d}\omega = 9N\hbar\omega_\mathrm{D}/8$ であり、熱容量に寄与しない。従って、微分を積分の中に入れると

$$\boxed{C = k_\mathrm{B}\int_0^{\omega_\mathrm{D}} g(\omega)(\beta\hbar\omega)^2\frac{e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega}-1)^2}\mathrm{d}\omega}. \tag{13}$$

[3.2] 低温・高温と概形

デバイ温度 $\Theta_\mathrm{D} = \hbar\omega_\mathrm{D}/k_\mathrm{B}$ を導入し、積分変数を $x = \beta\hbar\omega$ に変える。上限は Θ_D/T、また $g(\omega)\mathrm{d}\omega = 9N(T/\Theta_\mathrm{D})^3x^2\mathrm{d}x$ なので

$$C = 9Nk_\mathrm{B}\left(\frac{T}{\Theta_\mathrm{D}}\right)^3\int_0^{\Theta_\mathrm{D}/T}\frac{x^4e^x}{(e^x-1)^2}\,\mathrm{d}x. \tag{14}$$

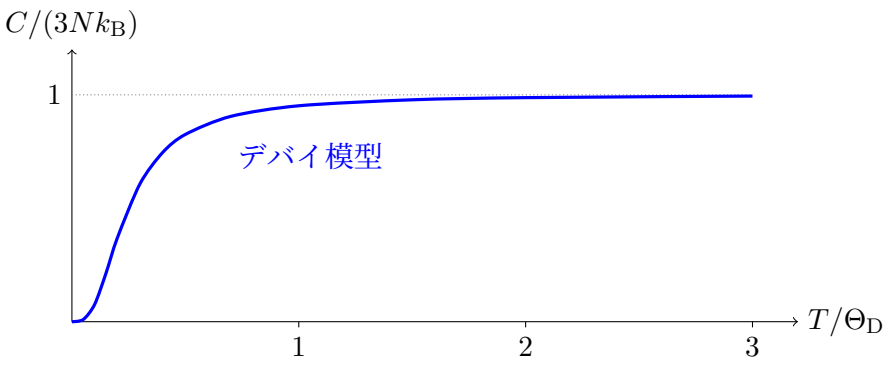
$T \ll \Theta_\mathrm{D}$ では上限が十分大きい。被積分関数は大きい x で x^4e^{-x} に近づくため、上限から先の尾部は指数的に小さく、積分の上限を無限大に延ばせる。問題文の積分値を使い、

$$\boxed{C \sim \frac{12\pi^4}{5}Nk_\mathrm{B}\left(\frac{T}{\Theta_\mathrm{D}}\right)^3 \quad (T \ll \Theta_\mathrm{D})}. \tag{15}$$

高温では全モードに k_B の熱容量が戻る。実際、$x \ll 1$ で $x^2e^x/(e^x-1)^2 \to 1$ だから、規格化したモード数を用いて

$$\boxed{C \longrightarrow 3Nk_\mathrm{B} \quad (T \gg \Theta_\mathrm{D})}. \tag{16}$$

概形は低温で原点から T^3 に沿って立ち上がり、上側の漸近値 $3Nk_\mathrm{B}$ に近づく。



[4] 3 種類の固体モデルの比較

[4.1] 同じ座標でのプロット

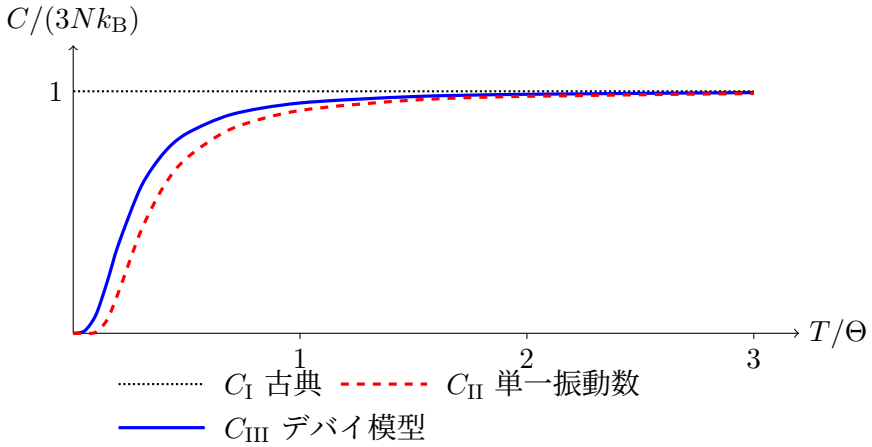
[1] と [2] の M を $3N$ に替えると、$\Theta = \hbar\omega/k_{\mathrm{B}}$ を用いて

$$C_{\mathrm{I}} = 3Nk_{\mathrm{B}}, \tag{17}$$

$$C_{\mathrm{II}} = 3Nk_{\mathrm{B}} \left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 \frac{e^{\Theta/T}}{(e^{\Theta/T}-1)^2}, \tag{18}$$

$$C_{\mathrm{III}} = 9Nk_{\mathrm{B}} \left(\frac{T}{\Theta_{\mathrm{D}}}\right)^3 \int_0^{\Theta_{\mathrm{D}}/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x-1)^2}\,\mathrm{d}x. \tag{19}$$

原題は ω と ω_{D} の比を指定していない。以下の図は比較例として $\omega = \omega_{\mathrm{D}}$、すなわち $\Theta = \Theta_{\mathrm{D}}$ と置き、縦軸を $3Nk_{\mathrm{B}}$ で割った。



[4.2] 高温での比較

$T \gg \Theta, \Theta_{\mathrm{D}}$ では各量子モードの平均エネルギーの主項が $k_{\mathrm{B}}T$ となる。従って $3N$ 個の振動モードはいずれも等分配則の値に戻り、

$$\boxed{C_{\mathrm{I}} = 3Nk_{\mathrm{B}}, \qquad C_{\mathrm{II}} \longrightarrow 3Nk_{\mathrm{B}}, \qquad C_{\mathrm{III}} \longrightarrow 3Nk_{\mathrm{B}}}. \tag{20}$$

有限の高温での近づき方も確認できる。$y^2e^y/(e^y-1)^2 = 1 - y^2/12 + O(y^4)$ を各モードに用いると

$$C_{\mathrm{II}} = 3Nk_{\mathrm{B}}\left[1 - \frac{1}{12}\left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 + O\big((\Theta/T)^4\big)\right], \qquad C_{\mathrm{III}} = 3Nk_{\mathrm{B}}\left[1 - \frac{1}{20}\left(\frac{\Theta_{\mathrm{D}}}{T}\right)^2 + O\big((\Theta_{\mathrm{D}}/T)^4\big)\right]. \tag{21}$$

後者では $g(\omega)$ による平均が $\langle\omega^2\rangle = (3N)^{-1}\int_0^{\omega_{\mathrm{D}}} g(\omega)\omega^2\,d\omega = 3\omega_{\mathrm{D}}^2/5$ であり、$1/12$ にこれを掛けて係数 $1/20$ を得る。どちらの量子曲線も古典値へ下から近づく。

[4.3] 低温での比較

古典模型を形式的に低温へ外挿すると $C_{\mathrm{I}} = 3Nk_{\mathrm{B}}$ のままであり、熱励起の量子化による凍結を表せない。一方、単一振動数の量子模型にはすべてのモードに同じ有限の励起ギャップ $\hbar\omega$ があるので

$$\boxed{C_{\mathrm{II}} \sim 3Nk_{\mathrm{B}}\left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 e^{-\Theta/T}}. \tag{22}$$

デバイ模型には $\omega \to 0$ の低周波モードが連続して存在する。温度 T で励起しやすい $\hbar\omega \lesssim k_{\mathrm{B}}T$ のモード数は $g(\omega) \propto \omega^2$ から T^3 に比例するため、

$$\boxed{C_{\mathrm{III}} \sim \frac{12\pi^4}{5} N k_{\mathrm{B}} \left(\frac{T}{\Theta_{\mathrm{D}}}\right)^3}. \tag{23}$$

したがって $T \to 0$ では両量子模型の熱容量は零になるが、デバイ模型の冪減衰は単一振動数模型の指数減衰より遅い。ここでは格子振動だけを比較している。実在の金属では電子の熱容量が低温でおおむね T に比例する場合があり、この 3 模型の式には含まれない。