東北大天文学専攻H20年、物理問題[3]

update: 2017 Aug. 19, author: Sho K. NAKAMURA

[1] カノニカル分布における色々な量

(a)

$$\begin{aligned} Z_1 &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\epsilon_n} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta h\nu(n+1/2)} = e^{-\beta h\nu/2}\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta h\nu n} \underbrace{=}_{\text{無限等比級数の和の公式より}} e^{-\beta h\nu/2}\frac{1}{1-e^{-\beta h\nu}} = \frac{1}{e^{\beta h\nu/2}-e^{-\beta h\nu/2}} \\ &= \frac{1}{2\sinh\frac{\beta h\nu}{2}} \end{aligned} \tag{1}$$

途中、$\beta = 1/(k_B T)$ と置いた。エネルギー ϵ_n の確率 P_n は

$$P_n = \frac{1}{Z_1}e^{-\beta\epsilon_n} = 2\sinh\frac{\beta h\nu}{2}e^{-\beta h\nu(n+1/2)} \tag{2}$$

$$\begin{aligned} <\epsilon> &= \sum_{n=0}^{\infty}\epsilon_n P_n \underbrace{=}_{(2)} \sum_{n=0}^{\infty} h\nu(n+1/2)\ 2\sinh\frac{\beta h\nu}{2}e^{-\beta h\nu(n+1/2)} = 2\sinh\frac{\beta h\nu}{2}\sum_{n=0}^{\infty}h\nu(n+1/2)e^{-\beta h\nu(n+1/2)} \\ &= 2\sinh\frac{\beta h\nu}{2}\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{\partial}{\partial\beta}e^{-\beta h\nu(n+1/2)}\right) = -2\sinh\frac{\beta h\nu}{2}\frac{\partial}{\partial\beta}\sum_{n=0}^{\infty}e^{-\beta h\nu(n+1/2)} = -2\sinh\frac{\beta h\nu}{2}\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{e^{-\beta h\nu/2}}{1-e^{-\beta h\nu}} \\ &= -2\sinh\frac{\beta h\nu}{2}\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{1}{e^{\beta h\nu/2}-e^{-\beta h\nu/2}} = -2\sinh\frac{\beta h\nu}{2}\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{1}{2\sinh\frac{\beta h\nu}{2}} = \sinh\frac{\beta h\nu}{2}\frac{\cosh\frac{\beta h\nu}{2}}{\sinh^2\frac{\beta h\nu}{2}}\frac{h\nu}{2} = \frac{h\nu}{2}\coth\frac{\beta h\nu}{2} \end{aligned} \tag{3}$$

(b)

$$\begin{aligned} <\epsilon^2> &= \sum_{n=0}^{\infty}\epsilon_n^2 P_n \underbrace{=}_{(2)} 2\sinh\frac{\beta h\nu}{2}\sum_{n=0}^{\infty}\{h\nu(n+1/2)\}^2 e^{-\beta h\nu(n+1/2)} = 2\sinh\frac{\beta h\nu}{2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}e^{-\beta h\nu(n+1/2)} \\ &= 2\sinh\frac{\beta h\nu}{2}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\frac{1}{2\sinh\frac{\beta h\nu}{2}} = -\sinh\frac{\beta h\nu}{2}\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{\cosh\frac{\beta h\nu}{2}}{\sinh^2\frac{\beta h\nu}{2}}\frac{h\nu}{2} = \frac{h^2\nu^2}{4}\frac{\cosh^2\frac{\beta h\nu}{2}+1}{\sinh^2\frac{\beta h\nu}{2}} \\ &= \frac{h^2\nu^2}{4}\coth^2\frac{\beta h\nu}{2} + \frac{h^2\nu^2}{4}\frac{1}{\sinh^2\frac{\beta h\nu}{2}} \end{aligned} \tag{4}$$

よってゆらぎは

$$<\Delta\epsilon^2> = <\epsilon^2> - <\epsilon>^2 = \frac{h^2\nu^2}{4}\frac{1}{\sinh^2\frac{\beta h\nu}{2}} \tag{5}$$

である。

(c)

$x \ll 1$ のとき、$\sinh x \simeq x, \cosh x \simeq 1$ より

$$<\epsilon> \simeq \frac{h\nu}{2}\frac{2}{\beta h\nu} = k_B T \tag{6}$$

$$< \Delta\epsilon^2 > \simeq \frac{h^2\nu^2}{4}\frac{4}{\beta^2 h^2 \nu^2} = k_B^2 T^2 \tag{7}$$

[2] N 個の原子からなる 1 次元結晶体

(a) j 番目の調和振動子 1 個の与える平均のエネルギーは (3) 式より

$$< \epsilon_j > = \frac{h\nu_j}{2}\coth\frac{\beta h\nu_j}{2} = \frac{hc_s}{2L}j\coth\frac{\beta hc_s}{2L}j \tag{8}$$

よってこの合計である系全体のエネルギーは

$$< U > = \sum_{j=1}^{N} < \epsilon_j > = \sum_{j=1}^{N}\frac{h\nu_j}{2}\coth\frac{\beta h\nu_j}{2} = \frac{hc_s}{2L}\sum_{j=1}^{N} j\coth\frac{\beta hc_s}{2L}j \tag{9}$$

(b)

$$C_V = \left(\frac{\partial < U >}{\partial T}\right)_{V,N} = \frac{\partial\beta}{\partial T}\frac{\partial < U >}{\partial\beta} = -\frac{1}{k_B T^2}\sum_{j=1}^{N}\frac{h\nu_j}{2}\frac{\partial}{\partial\beta}\coth\frac{\beta h\nu_j}{2} = k_B\beta^2\sum_{j=1}^{N}\frac{h^2\nu_j^2}{4}\frac{1}{\sinh^2\frac{\beta h\nu_j}{2}} \tag{10}$$

(i) $h\nu_N \ll k_B T$(高温極限) のとき、$\beta h\nu_1 < \beta h\nu_2 < \cdots < \beta h\nu_N \ll 1$ より

$$C_V \simeq k_B\beta^2\sum_{j=1}^{N}\frac{h^2\nu_j^2}{4}\frac{4}{\beta^2 h^2\nu_j^2} = k_B\sum_{j=1}^{N}1 = Nk_B \tag{11}$$

(ii) $h\nu_N \gg k_B T$ かつ $h\nu_1 \ll k_B T$(低温極限) のとき、$\nu_j = jc_s/L$ より $[\nu, \nu + d\nu]$ にある状態数は

$$g(\nu)d\nu = \frac{d\nu}{c_s/L} = \frac{L}{c_s}d\nu \tag{12}$$

で表現される。よって

$$C_V = k_B\beta^2\sum_{j=1}^{N}\frac{h^2\nu_j^2}{4}\frac{1}{\sinh^2\frac{\beta h\nu_j}{2}} \longrightarrow k_B\beta^2\frac{L}{c_s}\int_{\nu_1}^{\nu_N}\frac{h^2\nu_j^2}{4}\frac{1}{\sinh^2\frac{\beta h\nu_j}{2}}d\nu \tag{13}$$

$\beta h\nu \equiv x$ とおくと、低温極限の定義より $\beta h\nu_1 \ll 1$ かつ $\beta h\nu_N \gg 1$ 、$d\nu = dx/(\beta h)$ より

$$C_V \simeq \frac{k_B\beta^2 L}{c_s}\int_0^\infty\frac{1}{\beta h}\frac{x^2}{4\beta^2}\frac{dx}{\sinh^2\frac{x}{2}} = \frac{k_B L}{c_s\beta h}\int_0^\infty\frac{x^2}{(e^{x/2} - e^{-x/2})^2}dx = \frac{k_B L}{c_s\beta h}\int_0^\infty\frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2}dx = \frac{k_B L}{c_s\beta h}\frac{\pi^2}{3} \tag{14}$$

(c)

高温極限では、1 自由度あたり $k_B T/2$ のエネルギーが分配される。1 粒子にある自由度は位置と運動量の 2 自由度であるから、N 粒子系では 2N の自由度がある。よってエネルギー等分配則から導き出される系のエネルギー及び定積比熱は

$$< U > \simeq N k_B T \implies C_V = \frac{\partial < U >}{\partial T} = N k_B \tag{15}$$

となり、確かに (11) 式と一致する。

(d)

$h\nu \ll k_B T$ のとき、粒子は適当な $k_B T$ に相当する分だけエネルギー準位を変化させることができる。しかし、$h\nu \gg k_B T$ のときには、うまくエネルギー準位にのるような $k_B T$ でなければならないため、C_V が異なる。

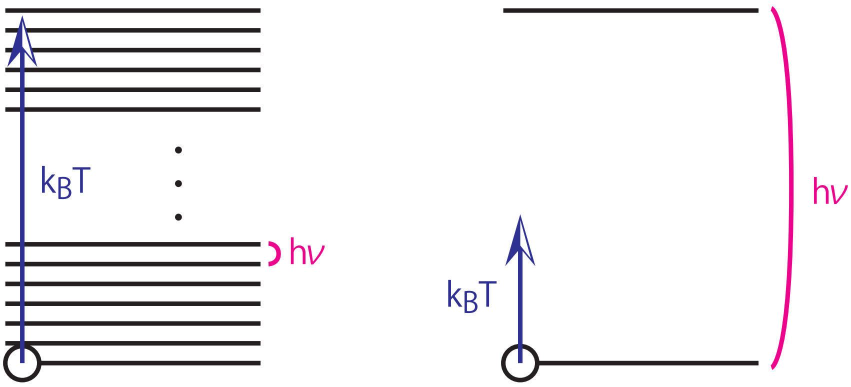

fig 1: 左：$h\nu \ll k_B T$ のとき、右：$h\nu \gg k_B T$ のとき

(e)

あるエネルギー ϵ_j でいる確率を

$$P_j = \frac{1}{Z} e^{-\beta\epsilon_j} \ (Z = \sum_j e^{-\beta\epsilon_j}) \tag{16}$$

とする。

$$< U > = \sum_j \epsilon_j P_j = -\frac{1}{Z} \sum_j \frac{\partial}{\partial\beta} e^{-\beta\epsilon_j} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial\beta} \sum_j e^{-\beta\epsilon_j} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial\beta} \tag{17}$$

$$< U^2 > = \sum_j \epsilon_j^2 P_j = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial\beta^2} \tag{18}$$

$$\begin{aligned} < \Delta U^2 > &= < U^2 > - < U >^2 = \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial\beta^2} - \frac{1}{Z^2}\left(\frac{\partial Z}{\partial\beta}\right)^2 = \frac{\partial}{\partial\beta}\left(\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta}\right) = -\frac{\partial}{\partial\beta} < U > = -\frac{\partial T}{\partial\beta}\frac{\partial < U >}{\partial T} = -\frac{\partial T}{\partial\beta} C_V \\ &= k_B T^2 C_V \end{aligned} \tag{19}$$

導出の方法から、これは任意の温度に対して成り立つ。