平成 11 年度北海道大学大学院理学研究科
物理学専攻修士課程 (物理学分野) 入試問題

問題 T-III

この問題での調和振動子は温度 T の環境中にあるものとする。

1. １個の１次元調和振動子の Hamiltonian は、m を質量、k をバネ定数、p, q をそれぞれお互いに共役な運動量と座標とするとき、次の形である；

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}kq^2 \tag{1}$$

(1) この振動子 $N(\gg 1)$ 個からなる系が古典統計力学に従うとして、分配関数 Z は次の形に与えられることを示せ；

$$Z = \left(\frac{k_B T}{h\nu}\right)^N \ (h; \text{プランク定数},\ k_B : \text{ボルツマン定数、} 2\pi\nu \equiv \sqrt{k}m \tag{2}$$

(2) (2) 式を使用して、この系のエネルギーの平均値 E と比熱 C の温度依存性を求めよ。

2. 量子力学では１個の振動子のエネルギー固有値 ϵ_n は次の形で与えられる；

$$\epsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu \ (n = 0, 1, \cdots; \text{正整数})。 \tag{3}$$

(1) この系が量子統計に従うとして、系の分配関数を求めよ。

(2) (1) の結果を使用して、この系のエネルギーの平均値 E および比熱 C の温度依存性を求めよ。

(3) (2) で求めた比熱の温度依存性を、

$$\text{縦軸に} \frac{C}{Nk_B},\ \text{横軸に}\ x \equiv \frac{k_B T}{h\nu}$$

をとって図示せよ。図は $x = 0, \infty$ での値及び $x \to 0, x \to \infty$ での勾配が解るように書け。

3. 格子定数 b の単原子単純立方結晶を考え、その３つの結晶軸を x, y, z 軸とする。各原子の平衡位置から x 方向の微小振動を調和振動子として量子力学で扱う。結晶の１辺は M 個の原子から構成される。原子間には相互作用が働くので、各原子の微小振動からなる格子振動系は速度 v の波動となり、その波数を $\boldsymbol{k}$ とすると、振動数 ν は $2\pi\nu = v|\boldsymbol{k}|$ で与えられる。簡単のため、v は $\boldsymbol{k}$ の方向に依らないとする。$\boldsymbol{k}$ の成分 $k_i (i = x, y, z)$ は両端の原子は同じ運動をするという境界条件より次の形が得られる；

$$k_i = \pm\frac{\pi}{b}\left(\frac{n_i}{M}\right) \ (n_i = 1 \sim M; \text{整数、} N \equiv M^3)。 \tag{4}$$

(1) $M \gg 1$ であるから、k_i したがって ν は連続変数として扱える。振動数 ν が $\nu \sim \nu + \mathrm{d}\nu$ の範囲にある振動子の数、すなわち振動数分布関数を

$$g(\nu) = A\nu^s \tag{5}$$

と表した場合のベキ s を求めよ。A は分布関数の定義から得られる定数とする。

(2) この格子振動系がとることのできる最大振動数ν_Dを求めよ (簡単のため定数 A のままで計算してよい)。

(3) これまでこの問題で得られた結果を使用して、この格子振動系の比熱 Cを表す式を求めよ。

(4) 低温極限では、この格子振動系の比熱 Cは温度 Tの 3 乗に比例することを示せ。ただし、積分

$$D(a) = \int_0^a \mathrm{d}x \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} \tag{6}$$

は $a \to \infty$ としても、一定の値をとることは証明なしで使ってよい。