R2 京大 I-2A

(1)
$$Z = \frac{1}{h^{3N}} \prod_{i=1}^{3N} \iint e^{-\beta\left(\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_i^2\right)} dx_i\, dp_i$$

$$= \frac{1}{h^{3N}} \prod_{i=1}^{3N} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\frac{p_i^2}{2m}} dp_i \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta m\omega^2}{2}x_i^2} dx_i$$

$$= \frac{1}{h^{3N}} \cdot \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}N} \left(\frac{2\pi}{\beta m\omega^2}\right)^{\frac{3N}{2}} = \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega}\right)^{3N}$$

$$E = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z \propto 3Nk_BT$$

$$\therefore C = \frac{dE}{dT} = 3Nk_B$$

(2)
$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = \prod_{i=1}^{3N} \sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n_i+\frac{1}{2})} = \left[\frac{2}{sh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}\right]^{3N}$$

$$E = \frac{3N\hbar\omega}{2}\coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)$$

$$\therefore C = \frac{dE}{dT} = 3Nk_B \cdot \left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT}\right)^2 \cdot \frac{1}{sh^2\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}$$

(3) 十分高温（$k_BT \gg \hbar\omega \leftrightarrow 1 \gg \beta\hbar\omega$）

$sh^2 x \simeq x^2$ より

$$C \simeq 3Nk_B\left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT}\right)^2 \cdot \frac{1}{\left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT}\right)^2} = 3Nk_B$$

十分高温では量子化の間隔 $\hbar\omega$ が，エネルギー k_BT に比べてほぼ無視できる

⟶ 古典極限に近づき，比熱は定数となる．

十分低温（$k_BT \ll \hbar\omega \leftrightarrow 1 \ll \beta\hbar\omega$）

$$sh^2 x = \frac{e^{2x} - 2 + e^{-2x}}{4} \simeq \frac{e^{2x}}{4}$$ より．

$$C \simeq 3Nk_B\left(\frac{\hbar\omega}{2k_BT}\right)^2 \cdot \frac{1}{\frac{e^{\beta\hbar\omega}}{4}} = 3Nk_B\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)^2 e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}}$$

十分低温では比熱が指数関数的に減衰し，0に近づく。

これはエネルギー $\hbar\omega$ を超えるために，大幅に温度を上げなければならないことを示す