[4] (→ cf. §4.4)

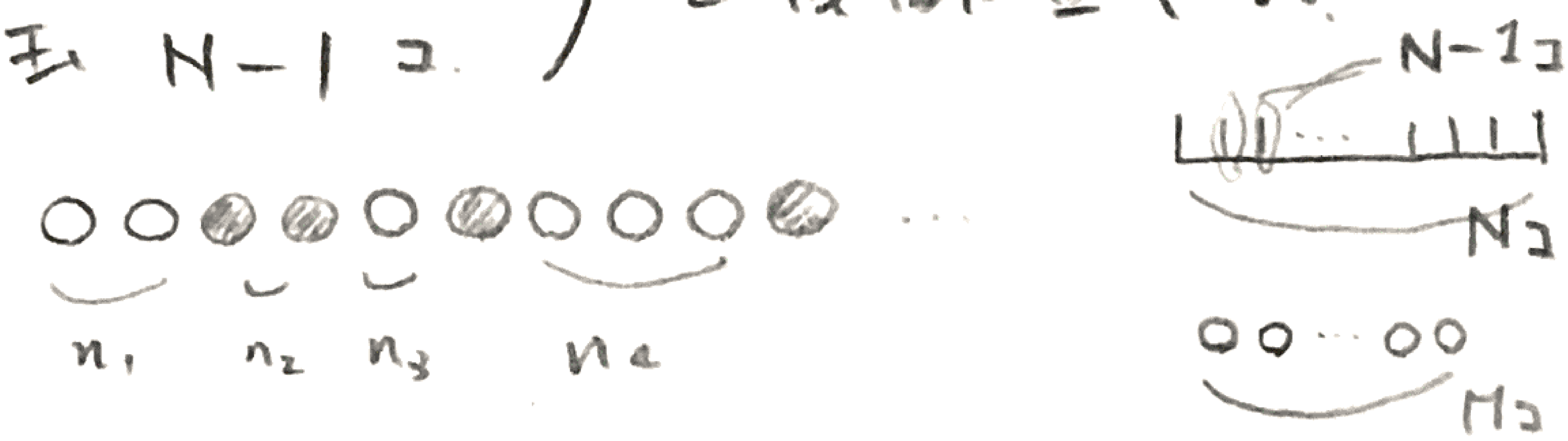
量子論的な効果によって、単振動のような運動もエネルギーの値は離散的な値 ε_n しかとらない。ここで、

$$\varepsilon_n \equiv n\hbar\omega \qquad (n=0,1,2,\cdots)$$

とする。(プランク振動子)

(※通常の単振動なら $\varepsilon_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$)

(1) 白い玉 M コ、赤い玉 $N-1$ コ を順番に並べる。



$$M = \underbrace{n_1+n_2+n_4+\cdots+n_N}$$

N個の整数の和で表す場合の数

白い玉、赤い玉それぞれを区別しないとすれば、場合の数は、

$$\frac{(M+N-1)!}{M!\,(N-1)!}$$

(2) $$S(E,N) = k_B \ln \frac{(M+N-1)!}{M!\,(N-1)!}$$

$$\fallingdotseq k_B \Big((M+N)\ln(M+N) - M\ln M - N\ln N \Big)$$

(3) $$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{1}{\hbar\omega}\frac{\partial S}{\partial M} = \frac{k_B}{\hbar\omega}\Big(\ln(M+N) + 1 - \ln M - 1\Big)$$

$$= \frac{k_B}{\hbar\omega}\ln\frac{M+N}{M} \qquad (\because \underline{\hbar\omega M = E})$$

$$= \frac{k_B}{\hbar\omega}\ln\frac{E+N\hbar\omega}{E}$$

$$= \frac{1}{T}$$

$$\therefore T = \frac{\hbar\omega}{k_B}\frac{1}{\ln\frac{E+N\hbar\omega}{E}}$$

or

$$e^{\frac{\hbar\omega}{k_BT}} = \frac{E+N\hbar\omega}{E} = 1 + \frac{N\hbar\omega}{E}$$

$$\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_BT}} - 1} = \frac{E}{N\hbar\omega}$$

$$\therefore E = \frac{N\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_BT}} - 1}$$

7/9

(4) 図にしてみて下さい。

☆ T → 大で $\frac{\hbar\omega}{k_B T} \to 0$

そこで

$$e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \sim 1 + \frac{\hbar\omega}{k_B T}$$

これを代入

$$E \sim \frac{N\hbar\omega}{\frac{\hbar\omega}{k_B T} + 1 - 1}$$

$$= N k_B T \quad //$$

[I]の結果と一致!

古典論では比熱は Nk_B で定数
量子論 〃 〃 Tの関数。
T→大で古典論と一致

cf. アインシュタインモデル

☆ちなみに

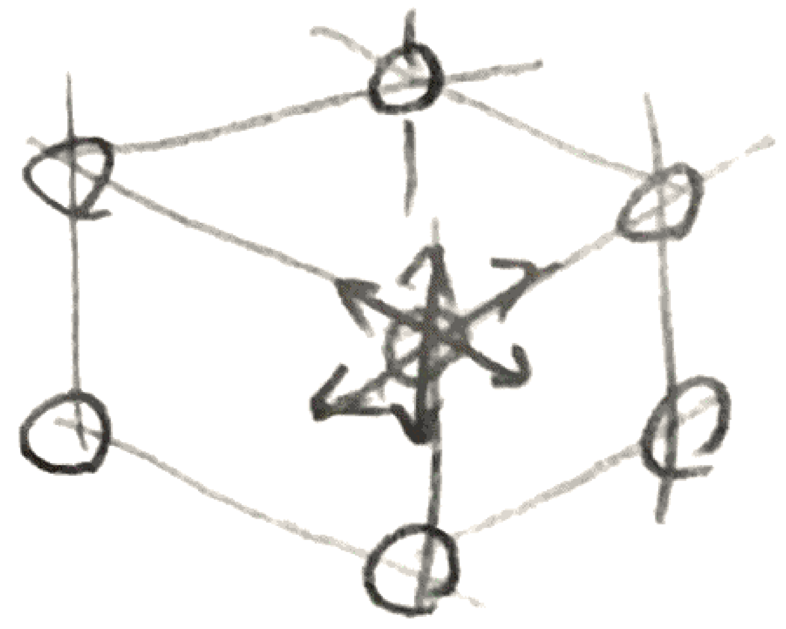
$$\frac{\partial E}{\partial T} \to 0 \quad (T \to 0)$$

熱しやすく冷めやすい

~~(6) 定積比熱は $\frac{\partial E}{\partial T}$ で与えられる。~~

$$\cancel{\frac{\partial E}{\partial T} = N k_B}$$

☆ この結果は意義深い！



結晶中の粒子の運動は、決まった位置の周囲での振動であると考えられる。
単純なモデルとして、これらの振動を単振動とみなす。

↓

N粒子に対して、3Nの単振動がある。
(x, y, z 方向)

上の結果のNを3Nに置きかえると
比熱は、

$$3Nk_B = 3nN_Ak_B$$
$$= 3nR$$

N_A ← アボガドロ数
n ← 物質量(モル)
R ← 気体定数

となる。実際、固体の比熱は3Rに近い。