

[4]

(→ 例 §4.4)

量子論的な結果によつて、単振子の
 ような運動もエネルギーの値は離散的
 になる E_n しかとらへない。

$$E_n \equiv n \text{ 個 } \omega \quad (n=0, 1, 2, \dots)$$

とある。(フォノン振動子)

(* 通常の単振子から)

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \text{ 個 } \omega$$

(1) 白い玉 M 個
 赤い玉 $N-1$ 個) を順番に並べる。



$$M = n_1 + n_2 + n_3 + \dots + n_N$$

N 個の整数の和を表す
 場合の数。

白い玉, 赤い玉, それぞれを区別しなるとは、
 場合の数は、

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

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

$$\doteq k_B \left((M+N) \ln(M+N) - M \ln M - N \ln N \right)$$

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

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

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

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

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

$$\text{or} \quad e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} = \frac{E + N\hbar\omega}{E} = 1 + \frac{N\hbar\omega}{E}$$

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

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

(4) 図1-12をみて下さい。

$$\star T \rightarrow \infty \text{ で } \frac{\hbar\omega}{k_B T} \rightarrow 0$$

$$\xi = 2 \text{ で}$$

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

これを代入

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

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

[1]の結果と一致!

古典論では比熱は $N k_B$ で定数

量子論 " " T の関数。

$T \rightarrow \infty$ で古典論と一致

cf. マンディンガの「統計力学」

\star 2-15をみる。

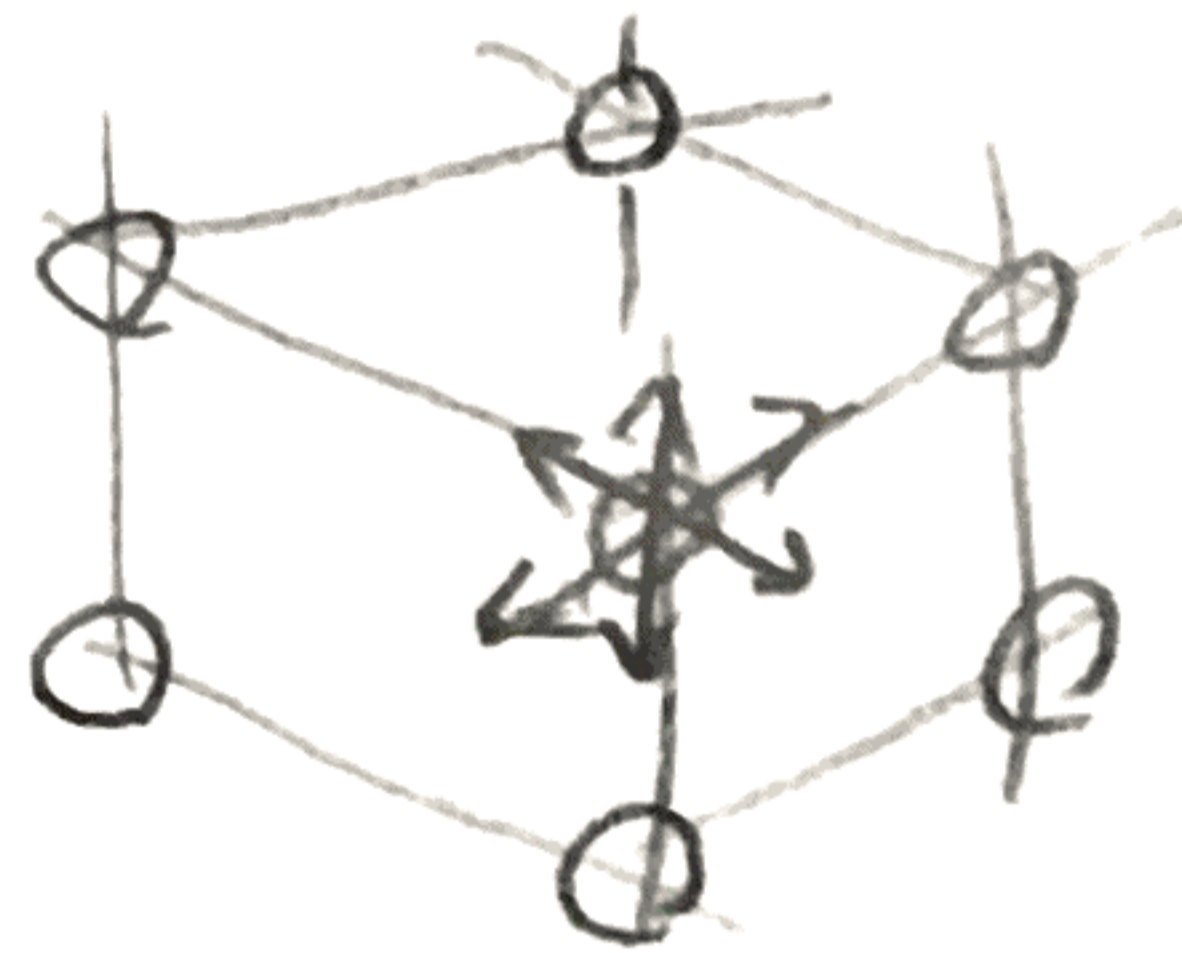
$$\frac{\partial E}{\partial T} \rightarrow 0 \quad (T \rightarrow 0)$$

熱容量がゼロになる。

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

$$\frac{\partial E}{\partial T} = Nk_B$$

★ この結果は意義深い。



結晶中の粒子の運動は、決り、その位置の周囲での振動でありと与えられる。単純なモデルとして、これらの振動を単振動とみれば可。

↓

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 $3N$ に置きかえて
比熱は、

$$\begin{aligned} 3Nk_B &= 3n N_A k_B && \leftarrow \text{アボガドロ数} \\ &= 3nR && \leftarrow \text{物質量 (mol)} \\ &&& \leftarrow \text{気体定数} \end{aligned}$$

となる。実際、固体の比熱は $3R$ に近い。