プランク振動子

前提： N個の粒子それぞれが、$n\hbar\omega$ ($n=0,1,2,\cdots$) のエネルギーを持つとする。n_i を i番目の粒子についての n とする。

① すべてのエネルギー状態 E_r は、

$$E_r = \hbar\omega(n_1+n_2+n_3+\cdots+n_N)$$

で表せる。
ボルツマン因子は、

$$e^{-\frac{E_r}{k_BT}} = e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}(n_1+n_2+\cdots+n_N)}$$
$$= e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}n_1}\times e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}n_2}\times\cdots + e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}n_N}$$

となる。

② 分配関数 Z は、すべての $(n_1,n_2,\cdots,n_N)$ の組み合わせをすべて合計することになる。

$$Z = \sum_r e^{-\frac{E_r}{k_BT}}$$
$$= \sum_r e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}(n_1+\cdots+n_n)}$$
$$= \left(\sum_{n_1=0}^{\infty} e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}n_1}\right)\times\left(\sum_{n_2=0}^{\infty} e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}n_2}\right)\times\cdots\left(\sum_{n_N=0}^{\infty} e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}n_N}\right)$$
$$= \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}n}\right)^N$$
$$= \left(\frac{1}{1-e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}}}\right)^N$$

$$Z_1 = e^0 + \underbrace{e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}}}_{r} + \left(e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}}\right)^2 + \cdots$$

無限等比級数

$$Z_1 = 1+r+r^2+r^3+\cdots$$
$$-)\ rZ_1 = r+r^2+r^3+\cdots$$
$$(1-r)Z_1 = 1 \quad \therefore Z_1 = \frac{1}{1-r}$$

③
$$A(T,V,N) = -k_BT\ln Z$$
$$= -k_BT\ln\left(\frac{1}{1-e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}}}\right)^N$$
$$= Nk_BT\ln\left(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}}\right).$$

$T\to\infty$で
$$e^{\frac{\hbar\omega}{k_BT}} \fallingdotseq 1+\frac{\hbar\omega}{k_BT}$$

④
$$E(T,V,N) = -T^2\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{A}{T}\right)$$
$$= -T^2\frac{\partial}{\partial T}\left(Nk_B\ln\left(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}}\right)\right)$$
$$= -Nk_BT^2\frac{-\frac{\hbar\omega}{k_BT^2}e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}}}{1-e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}}}$$
$$= N\hbar\omega\frac{e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}}}{1-e^{-\frac{\hbar\omega}{k_BT}}}$$

分子分母に $e^{\frac{\hbar\omega}{k_BT}}$ をかける

$$= N\hbar\omega\frac{1}{e^{+\frac{\hbar\omega}{k_BT}}-1} \sim \frac{N\hbar\omega}{\left(\frac{\hbar\omega}{k_BT}\right)} = Nk_BT$$

$$\bullet\ S(T,V,N) = -\frac{\partial A}{\partial T} = -N k_B \ln\left(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}\right) + N k_B T\, \frac{\frac{\hbar\omega}{k_B T^2}\, e^{-\cdots}}{1-e^{\cdots}}$$

$$= -N k_B \ln\left(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}\right) + N \frac{\hbar\omega}{T} \cdot \frac{e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}{1-e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}$$

$$\bullet\ C_V(T,V,N) = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T}\left(N\hbar\omega \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}-1}\right)$$

$$= N\hbar\omega\left(\frac{-\frac{\partial}{\partial T} e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}-1\right)^2}\right)$$

$$= N\hbar\omega \frac{+\frac{\hbar\omega}{k_B T^2} \cdot e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}{\left(e^{+\frac{\hbar\omega}{k_B T}}-1\right)^2}$$

$$= N k_B \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 \cdot \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}-1\right)^2}$$