9.6 調和振動子 (古典)

熱学・統計力学要論 (2015)

田中担当クラス
http://www-het.phys.sci.osaka-u.ac.jp/~tanaka/teaching.html

第 9 章 統計力学の考え方

1 次元，1 粒子

1 個の調和振動子を考える．

$$E(q,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \,. \tag{1}$$

- **分配関数**

$$Z = \int e^{-\beta E(q,p)} \frac{dqdp}{2\pi\hbar} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta p^2}{2m}} dp \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta}{2} m\omega^2 q^2} dq \,. \tag{2}$$

1 自由度古典調和振動子の分配関数

$$Z = \frac{1}{\hbar\omega\beta} \tag{3}$$

- **エネルギー**
  (9. 5. 8) **より**

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z = \frac{\partial}{\partial \beta} \log \hbar\omega\beta = \frac{1}{\beta} = k_B T \tag{4}$$

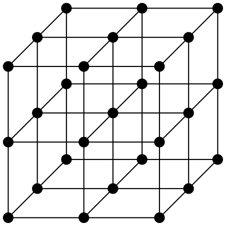
(9. 4. 10) **より，** $\langle p^2/2m \rangle = k_B T/2$ **だったから，**

$$\left\langle \frac{1}{2} m\omega^2 q^2 \right\rangle = \frac{1}{2} k_B T . \quad \textbf{(エネルギー等分配則)} \tag{5}$$

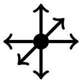
固体の比熱

N 個の原子が 3 次元の結晶構造を成している (固体のモデル)．

各原子は格子点のまわりで微小振動する．
$\Rightarrow$ 独立な $3N$ 個の調和振動子．
式 (3) より，



$$Z = \left(\frac{1}{\hbar\omega\beta}\right)^{3N} . \tag{6}$$



式 (4) と同様にして，エネルギーは，

$$\langle E\rangle = 3Nk_B T . \tag{7}$$

(定積) 熱容量は，$(U = \langle E\rangle)$

$$C = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = 3Nk_B = 3nR . \tag{8}$$

モル比熱は，

デュロン–プティ (Dulong–Petit) の法則

$$c_V = 3R \simeq 3 \times 8.31\,\mathrm{J/mol \cdot K} \simeq 6\,\mathrm{cal/mol \cdot K}\,. \tag{9}$$

物質の種類，温度に依存しない．高温で成立．
(低温で小さくなり，物質に依存．)