

9.6 調和振動子 (古典)

熱学・統計力学要論 (2016)

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。

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

- 分配関数

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

1自由度古典調和振動子の分配関数

$$Z = \frac{1}{\hbar\omega\beta} \quad (3)$$

- エネルギー
(9.5.8) より

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

(9.4.10) より , $\langle p^2/2m \rangle = k_B T/2$ だったから ,

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

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 .

⇒ 独立な $3N$ 個の調和振動子 .

式 (3) より ,

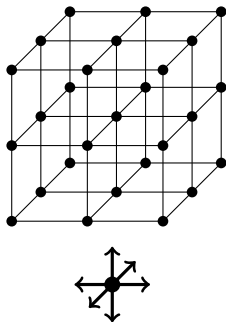
$$Z = \left(\frac{1}{\hbar\omega\beta} \right)^{3N} . \quad (6)$$

式 (4) と同様にして , エネルギーは ,

$$\langle E \rangle = 3Nk_B T . \quad (7)$$

(定積) 熱容量は , ($U = \langle E \rangle$)

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



モル比熱は，

デュロン-プティ (Dulong-Petit) の法則

$$c_V = 3R \simeq 3 \times 8.31 \text{ J/mol} \cdot \text{K} \simeq 6 \text{ cal/mol} \cdot \text{K}. \quad (9)$$

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．)