熱統計力学演習II

6 調和振動子

6.1 格子比熱 (Einstein 模型)

N個の独立した調和振動子

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left[\frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q_i^2 \right]$$

について考えよう。

- (a) 古典論的に考えて、内部エネルギーE、エントロピーS、比熱Cを求めよ。
- (b) 量子論的に考えて、内部エネルギーE、エントロピーS、比熱Cを求めよ。また、比熱Cの高温、低温での振舞いを調べよ。

6.2 格子比熱 (Debye 模型)

固体中の格子振動は音波として伝搬する。等方的な系では、縦波 (伝搬速度 v_l) と、2つの独立な横波のモード (伝搬速度はともに v_t) が可能であり、それらの波の振動数は、波数ベクトル \mathbf{k} を用いて、それぞれ $\omega = v_l |\mathbf{k}|$ 、および、 $\omega = v_t |\mathbf{k}|$ と表される。このような分散をもつ調和振動子のエネルギー固有値は

$$E(\lbrace n_{\mathbf{k}s}\rbrace) = \sum_{\mathbf{k},s} \hbar \omega_{\mathbf{k}s} \left(n_{\mathbf{k}s} + \frac{1}{2} \right), \quad n_{\mathbf{k}s} = 0, 1, 2, \cdots$$

で与えられる。ここで、sは上記3つのモードを表す。

(a) 固体の体積を V、全原子数を N として、振動数が ω と $\omega+d\omega$ の間 にある状態の数 $D(\omega)d\omega$ を求めよ。

(b) 格子振動の振動数には上限が存在し、振動モードの総数は、格子振動の自由度の数となる。すなわち、

$$\int_{0}^{\omega_{D}} D(\omega)d\omega = 3N \tag{6.1}$$

このことを用いて、 $D(\omega)$ を ω_D を用いて表せ。 ω_D を Debye 振動数 という。

- (c) このモデルにおける固体の定積比熱 C を求め、高温、低温での振る舞いを調べよ。また、前間の Einstein 模型と比較せよ。
- (d) 一般化して、d 次元における格子比熱の低温 $(T \ll \omega_D)$ での温度依存性を調べよ。

6.3 空洞輻射

体積Vの箱の中にある電磁波が温度Tの熱浴と平衡にある場合について考える。箱の中の電磁波は分散関係 $\omega_k = ck$ (c は光速) をもつ振動子の集まりとみなすことができる。しかし、Debye 模型の場合と違い、縦波は存在せず、振動モードに上限はつかない。

- (a) 単位体積当りの状態密度 $D(\omega)$ を求めよ。
- (b) エネルギー密度 $u(\omega)$ の振動数分布を求めよ。
- (c) 波長 λ についての分布に変換し、高温長波長極限での分布を求めよ。
- (d) 全エネルギー密度uが T^4 に比例することを示せ。