8223036　栗山淳
熱力学　第 13 講
①2 準位系の平均のエネルギーと比熱を求めよ。

今，N 個の独立な粒子からなる系を考え，各々の粒子は$-\varepsilon_0$と$+\varepsilon_0$の 2 つのエネルギー準位しか取らないものとする。これを 2 準位系という。1 つの粒子に対する分配関数Z_1は$Z_1 = \sum E_j e^{-\frac{E_j}{kT}} = e^{-\frac{\varepsilon_0}{kT}} + e^{+\frac{\varepsilon_0}{kT}}$となる。

ヒント

・平均のエネルギー$\langle \mathrm{E} \rangle = \frac{-\partial \log Z}{\partial \beta}$

・比熱は$C_v = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial E}{\partial \beta}\right)\left(\frac{\partial \beta}{\partial T}\right)$で与えられる。

・$coshx = e^x + e^{-x}$などの双曲線関数を適宜利用。

〈解答〉
2 準位系での分配関数は$Z = \sum E_j e^{-\beta\varepsilon_0} = e^{-\beta\varepsilon_0} + e^{+\beta\varepsilon_0}$である。

平均のエネルギーは$\langle \mathrm{E} \rangle = \frac{-\partial \log Z}{\partial \beta}$のように表すことができるのでこの式の Z に分配関数を代入すると次のようになる。

$$\langle \mathrm{E} \rangle = \frac{-\partial \log Z}{\partial \beta}$$

$$= -\frac{1}{Z}\left(\frac{\partial Z}{\partial \beta}\right)$$

$$= -\frac{1}{e^{-\beta\varepsilon_0} + e^{+\beta\varepsilon_0}} \cdot \frac{\partial}{\partial \beta}\left(e^{-\beta\varepsilon_0} + e^{+\beta\varepsilon_0}\right)$$

$$= -\frac{\varepsilon_0\left(e^{\beta\varepsilon_0} - e^{-\beta\varepsilon_0}\right)}{e^{\beta\varepsilon_0} + e^{-\beta\varepsilon_0}}$$

双曲線関数$tanhx = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$より，

$$-\frac{\varepsilon_0\left(e^{\beta\varepsilon_0} - e^{-\beta\varepsilon_0}\right)}{e^{\beta\varepsilon_0} + e^{-\beta\varepsilon_0}} = -\varepsilon_0 tanh\beta\varepsilon_0$$

$$= -\varepsilon_0 \tanh\left(\frac{\varepsilon_0}{kT}\right)$$

次に比熱を求める。比熱は次のような式で求めることができる。

$$C_v = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial E}{\partial \beta}\right)\left(\frac{\partial \beta}{\partial T}\right)$$

と表される。

$\beta = \frac{1}{kT}$より，

$$\left(\frac{\partial \beta}{\partial T}\right) = -\frac{1}{kT^2}$$

$$\left(\frac{\partial E}{\partial \beta}\right) = \frac{\partial}{\partial \beta}(-\varepsilon_0 tanh\beta\varepsilon_0)$$

$$= -\frac{\varepsilon_0^2}{\cosh^2 \beta\varepsilon_0}$$

よって，

$$C_v = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right)_V = \left(\frac{\partial E}{\partial \beta}\right)\left(\frac{\partial \beta}{\partial T}\right)$$

$$= -\frac{\varepsilon_0^2}{\cosh^2 \beta\varepsilon_0} \cdot -\frac{1}{kT^2}$$

$$= \frac{1}{kT^2}\frac{\varepsilon_0^2}{\cosh^2 \beta\varepsilon_0}$$

この比熱は 1 つの粒子に対する比熱なので N 個の独立な粒子からなる系で比熱を考えると上記の比熱の値に N を掛ける必要がある。よって求める比熱は次のようになる。

$$\frac{N}{kT^2}\frac{\varepsilon_0^2}{\cosh^2 \beta\varepsilon_0}$$