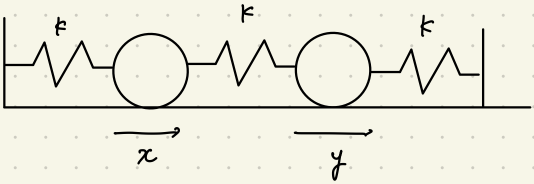
I … N モル

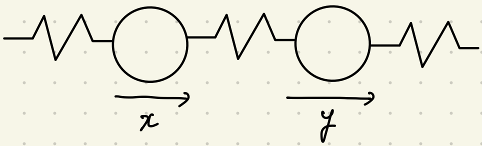


$$
\begin{cases}
m\ddot{x} = -kx + k(y-x) \\
m\ddot{y} = -k(y-x) - ky
\end{cases}
\quad \cdots ①
$$

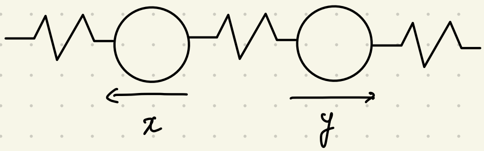
独立な2つの調和振動子を示している.

モードの形

モード1 重心が振動



モード2 相対座標が振動



この2つの状態の重ね合わせで
連成振動を記述することができる.

$$X = \frac{x+y}{2}, \quad Y = \frac{x-y}{2}$$ とおくと.

① より辺々足すと.

$$m(\ddot{x}+\ddot{y}) = -kx+ky-kx-ky-ky+kx$$
$$= -k(x+y)$$
$$m\cdot 2\ddot{X} = -k\cdot 2X$$
$$\therefore \ddot{X} = -\frac{k}{m}X = -\omega_1^2 X \quad \left(\omega_1 = \sqrt{\frac{k}{m}}\right)$$

次は ① の辺々を引くと.

$$m(\ddot{x}-\ddot{y}) = -kx+ky-kx+ky-kx+ky$$
$$= -3kx+3ky$$
$$= -3k(x-y)$$
$$m\cdot 2\ddot{Y} = -3k\cdot 2Y$$
$$\ddot{Y} = -\frac{3k}{m}Y = -\omega_2^2 Y \quad \left(\omega_2 = \sqrt{\frac{3k}{m}}\right)$$

単純な2つの独立な単振動として表せる.

$$P_1 = m\dot{X}, \quad P_2 = m\dot{Y}$$

系のハミルトニアンは.

$$\mathcal{H} = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} + \frac{m\omega_1^2 X^2}{2} + \frac{m\omega_2^2 Y^2}{2}$$

$$Z_1 = \int e^{-\frac{\mathcal{H}_1}{k_BT}} dp \int dq$$
$$= \frac{1}{h}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{P_1^2}{2mk_BT}} dP_1 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{P_2^2}{2mk_BT}} dP_2$$
$$\times \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega_1^2}{2k_BT}X^2} dX \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{m\omega_2^2}{2k_BT}Y^2} dY$$
$$= \frac{1}{h}\left(\sqrt{2mk_BT\pi}\right)^2 \sqrt{\frac{2k_B\pi T}{m\omega_1^2}} \sqrt{\frac{2k_B\pi T}{m\omega_2^2}}$$
$$= \frac{4\pi^2 k_B^2 T^2}{h\,\omega_1\omega_2}$$
$$Z_N = \frac{1}{N!}\left(\frac{4\pi^2 k_B^2 T^2}{h\,\omega_1\omega_2}\right)^N$$

$\cancel{U = \langle \mathcal{H} \rangle =}$

$$E = -\frac{\partial}{\partial\beta}\log\left[\frac{1}{N!}\left(\frac{4\pi^2}{h\beta^2\omega_1\omega_2}\right)^N\right]$$
$$= -\frac{\partial}{\partial\beta}\left[-2N\log\beta \cdots\right]$$

$$= 2N \times \frac{1}{\beta}$$

$$= 2N k_B T$$

全粒子数

$$\left(nR = N_A k_B \cdot \frac{2N}{N_A} \right)$$

$$= 2N \frac{R}{N_A} T$$

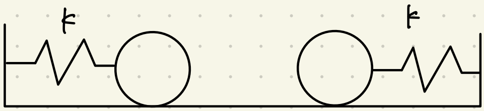
2粒子だから

$$= 2 \frac{N}{N_A} R T = nRT$$

モル比熱を求める

$$C_v = \frac{\partial}{\partial T} \frac{E}{n} = R$$

(2)



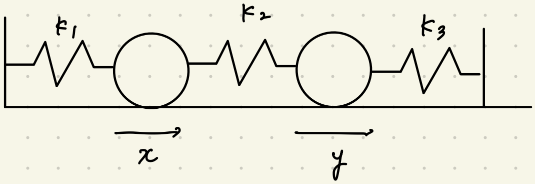
$$\mathcal{H} = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

$$Z_N = \frac{1}{N!} \left(\frac{4\pi^2}{h \beta^2 \omega^2} \right)^N$$

$$\langle \mathcal{H} \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z_N = nRT$$

$$\Rightarrow C_v = R$$

(3)



$$C_v = R$$

k や ω に依らない

主題は

エネルギー等分配則

$$(\text{ハミルトニアンの項の数}) \times \frac{1}{2} kT = E$$