量子力学　第9回課題

レポート課題

1.

アインシュタインの比熱式

$$C_V = 3N_A k_B \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 \frac{\exp(\hbar\omega/k_B T)}{(\exp(\hbar\omega/k_B T)-1)^2}$$

$T\to\infty$ の場合

$T\to\infty$ のとき $\frac{\hbar\omega}{k_B T}$ は非常に小さいので、次の近似が成り立つ

$$e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \fallingdotseq 1+\frac{\hbar\omega}{k_B T}$$

この近似を比熱式に代入すると

$$C_V \fallingdotseq 3N_A k_B \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 \cdot \frac{1+\frac{\hbar\omega}{k_B T}}{\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2} \fallingdotseq \underline{3N_A k_B} \quad \left(\because \overset{T\to\infty のとき}{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \fallingdotseq 0\right)$$

$T\to 0$ の場合

$T\to 0$ のとき $\frac{\hbar\omega}{k_B T}$ は非常に大きくなり、次の近似が成り立つ。

$$e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}-1 \fallingdotseq e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}$$

したがって、

$$C_V \fallingdotseq 3N_A k_B \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 \cdot \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}\right)^2} = 3N_A k_B \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right)^2 \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}} \xrightarrow{T\to 0} \underline{0}$$

2.

$T\to\infty$ のときの比熱の値 $C_V = 3N_A k_B$ は、熱力学の予測と一致し、アインシュタインの理論が高温で、ほとんど正しいことが理解できる。