8223036 乗山 淳 量子力学 第11回 課題

1、1モルの2原子分子の回転による比熱が高温極限でRとなることを証明せよ。

分配関数 $Z = z^{N_A}$

$$z = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp\left(-\frac{l(l+1)\hbar^2\beta}{2I}\right)$$

$$z = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp\left(-\frac{l(l+1)\hbar^2\beta}{2I}\right)$$

βが十分小さいとすると、zのlに関する和は積分で表すことができる。

よって

$$z \fallingdotseq \int_0^{\infty} (2l+1) \exp\left(-\frac{l(l+1)\hbar^2\beta}{2I}\right) dl$$

$x = l(l+1)$ とすると $\frac{dx}{dl} = 2l+1 \Leftrightarrow dl = \frac{1}{2l+1} dx$

よって

$$z \fallingdotseq \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{x\hbar^2\beta}{2I}\right) dx$$

$$z \fallingdotseq \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{x\hbar^2\beta}{2I}\right) dx = \lim_{a\to\infty} \int_0^{a} \exp\left(-\frac{x\hbar^2\beta}{2I}\right) dx$$

$$= \lim_{a\to\infty} \left[-\frac{2I}{\hbar^2\beta} \exp\left(-\frac{x\hbar^2\beta}{2I}\right)\right]_0^a$$

$$= \lim_{a\to\infty} \left(-\frac{2I}{\hbar^2\beta} \exp\left(-\frac{a\hbar^2\beta}{2I}\right) + \frac{2I}{\hbar^2\beta}\right)$$

$$= \frac{2I}{\hbar^2\beta}$$

$$-\frac{\partial}{\partial\beta} \log \frac{2I}{\hbar^2\beta}$$

$(\log x)'$

$\frac{1}{x}$

エネルギー $E = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln z \fallingdotseq -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln \frac{2I}{\hbar^2\beta}$

$$= -\frac{\left(\frac{2I}{\hbar^2\beta}\right)'}{\frac{2I}{\hbar^2\beta}} = -\frac{\left(-\frac{2I}{\hbar^2\beta^2}\right)}{\frac{2I}{\hbar^2\beta}} = \frac{2I}{\hbar^2\beta^2} \times \frac{\hbar^2\beta}{2I}$$

$$= \frac{1}{\beta}$$

$$= k_B T \quad \left(\beta = \frac{1}{k_B T}\right) \ (\beta: 逆温度)$$

エネルギー等分配則に従い、各自由度が寄与するエネルギーは $\frac{1}{2}k_BT$ であり、2つの回転自由度が存在するため

比熱 $C_V = \frac{dE}{dT} = 2 \cdot \frac{1}{2}R = \underline{R}$

よって証明された。

(k_B: ボルツマン定数)

(分子1つあたりの気体定数 $k_B = \frac{R}{N_A}$)

2. エネルギー等分配則をもとに、比熱がRになる理由を述べよ。

エネルギー等分配則より、各自由度が等しくエネルギーを分配する。

高温極限では各自由度が $\frac{1}{2}k_BT$ のエネルギーを持つ。

2原子分子の回転は2つの自由度を持つ。それぞれの自由度は $\frac{1}{2}k_BT$ のエネルギーを持つので

全エネルギーは

$$2 \times \frac{1}{2}k_BT = k_BT$$

比熱 C_V はエネルギーの温度微分なので

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = k_B = R$$

よって比熱がRとなる。