

数式処理—アインシュタイン結晶—

Copyright ©2006 by Shigeto R. Nishitani

▼ 課題1:状態和の導出

アインシュタインモデルから固体の比熱を計算する。アインシュタイン結晶での系全体のエネルギーは

$$E_i = \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

で求められる。この E_i を用いると、系全体の状態和は

$$Z = \left[\sum_{i=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right) \right]^{3N} = \left\{ \frac{\exp\left(-\frac{\hbar\omega}{2kT}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right)} \right\}^{3N}$$

となる。最後の式を導け。

▼ 課題2:自由エネルギーの導出

状態和からヘルムホルツの自由エネルギー F 、エネルギー E 、比熱 C などは

$$F = -kT \ln(Z)$$

$$E = kT^2 \frac{d}{dT} \ln(Z)$$

$$C = \frac{d}{dT} E$$

で求められる。先程の状態和を入れて、表式を求めよ。

▼ 課題3:自由エネルギー等の図の描画

自由エネルギー曲線は適当に規格化することによって以下ようになる。これを参考に、エネルギー、比熱の図を描画せよ。

> `plot(-T*ln(exp(-1/2/T)/(1-exp(-1/T))),T=0..5);`

