

11.1 内部エネルギー・熱容量

	$\frac{mU}{RT}$	$\frac{mC}{R}$	適用温度領域
並進	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	古典極限 (除: 極低温)
回転 (n_r : 回転自由度)	$\frac{n_r}{2}$	$\frac{n_r}{2}$	古典極限 (除: 極低温)
1つの振動 $\left(x = \frac{h\nu}{k_B T}\right)$	$\frac{x}{e^x - 1}$	$\frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2}$	全域
	0	0	$T \rightarrow 0$ 低温のみ
	1	1	$T \rightarrow \infty$ (古典極限) 高温のみ

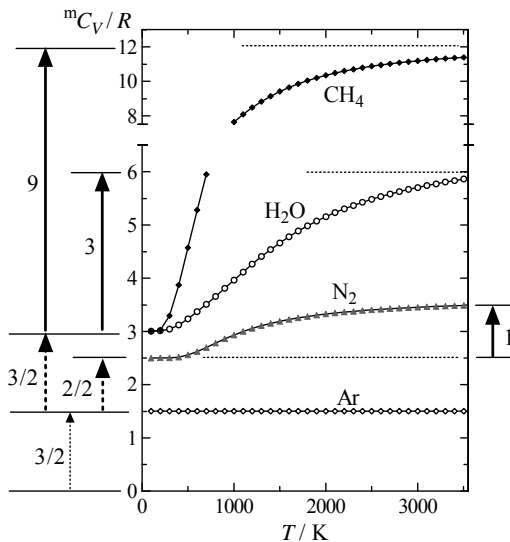
(参考)

単原子固体	(Einstein 模型)	$\frac{3x}{e^x - 1}$	$\frac{3x^2 e^x}{(e^x - 1)^2}$	Δ 近似
	(Dulong-Petit 則)	3	3	$T \rightarrow \infty$ (古典極限) Δ 近似

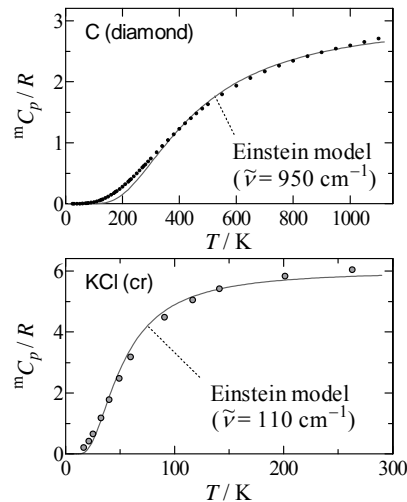
11.4 エントロピー

	mS/R
並進	$\frac{5}{2} + \ln q_{\text{trans}}^\circ - \ln \frac{p}{k_B T}$, あるいは $\frac{3}{2} \ln \frac{m}{\text{amu}} + \frac{5}{2} \ln \frac{T}{\text{K}} - \ln \frac{p}{\text{bar}} - 1.1517$
回転 (n_r : 回転自由度)	$\frac{n_r}{2} + \ln q_{\text{rot}}$ q_{rot} は回転分配関数: $q_{\text{rot}}^{2D} = \frac{k_B T}{\sigma B}$ または $q_{\text{rot}}^{3D} = \frac{n_{\text{isom}} \pi^{1/2}}{\sigma} \left(\frac{k_B T}{A} \frac{k_B T}{B} \frac{k_B T}{C} \right)^{1/2}$
1つの振動 $\left(x = \frac{h\nu}{k_B T}\right)$	$\frac{x}{e^x - 1} - \ln(1 - e^{-x})$
電子状態	$\ln g_{\text{elec}}$

11.2 気体のモル熱容量



11.3 固体のモル熱容量



11.5 他の熱力学関数

エンタルピー	$H - H(0) = U - U(0) + pV$
ヘルムホルツエネルギー	$A - A(0) = U - U(0) - TS$
ギブスエネルギー	$G - G(0) = H - H(0) - TS$