統計力学演習問題 (11)

[1] 半径 R，長さ L の円筒容器の中に，質量 m を持つ単原子分子 N 個からなる古典理想気体が入っており，温度 T の熱浴と接している。この容器を，円筒の中心軸の周りに，一定の角速度 ω で回転した。中心軸方向を z 軸に選ぶと，回転座標系でのハミルトニアンは，全軌道角運動量の z 成分

$$L_z = \sum_{j=1}^{N} (x_j p_{jy} - y_j p_{jx}) \tag{1}$$

を用いて，

$$H = \sum_{j=1}^{N} \frac{p_{jx}^2 + p_{jy}^2 + p_{jz}^2}{2m} - \omega L_z \tag{2}$$

と表せる。

(a) ハミルトニアン (2) を各運動量成分 $p_{j\eta}$ $(j = 1, 2, \cdots, N;\ \eta = x, y, z)$ について平方完成せよ。

(b) 分配関数 Z を求めよ。
ヒント：平方完成した $p_{j\eta}$ についてのガウス積分を先に実行する。残る $\boldsymbol{r}_j$ 積分は，円筒座標 $\boldsymbol{r}_j = (\rho_j \cos\varphi_j, \rho_j \sin\varphi_j, z_j)$ に移り，$\mathrm{d}^3 r_j = \rho_j \mathrm{d}\rho_j \mathrm{d}\varphi_j \mathrm{d}z_j \quad (0 \le \rho_j \le R,\ 0 \le \varphi_j \le 2\pi,\ 0 \le z_j \le L)$ を用いて積分する。

(c) 自由エネルギー F と内部エネルギー U の表式を求めよ。

[2] 前問において，位置 $\boldsymbol{r} = (x, y, z) = (\rho\cos\varphi, \rho\sin\varphi, z)$ における気体の密度演算子は，

$$n(\boldsymbol{r}) = \sum_{j=1}^{N} \delta(x - x_j)\delta(y - y_j)\delta(z - z_j) = \sum_{j=1}^{N} \frac{\delta(\rho - \rho_j)}{\rho} \delta(\varphi - \varphi_j)\delta(z - z_j) \tag{3}$$

と表せる。気体の密度 $\bar{n}(\rho) = \langle n(\boldsymbol{r}) \rangle$ を求めよ。