統計力学演習問題解答 (11)

[1]

(a) 各運動量成分について平方完成すると，以下のように書ける．

$$
\begin{aligned}
H &= \sum_{j=1}^{N} \frac{p_{ix}^2 + p_{jy}^2 + p_{jz}^2}{2m} - \sum_{j=1}^{N} (\omega x_j p_{jy} - \omega y_j p_{jx}) \\
&= \sum_{j=1}^{N} \left[\frac{(p_{jx} + m\omega y_j)^2}{2m} + \frac{(p_{jy} - m\omega x_j)^2}{2m} + \frac{p_{jz}^2}{2m} - \frac{m\omega^2}{2}(x_j^2 + y_j^2) \right]
\end{aligned}
$$

(b) 分配関数 Z を計算する．

$$
\begin{aligned}
Z &= \frac{1}{N!} \prod_{j=1}^{N} \int \frac{d^3 r_j d^3 p_j}{(2\pi\hbar)^3} \mathrm{e}^{-\beta H} \\
&= \frac{1}{N!} \prod_{j=1}^{N} \int d^3 r_j \mathrm{e}^{\beta \frac{m\omega^2}{2}(x_j^2 + y_j^2)} \prod_{j=1}^{N} \int \frac{d^3 p'_j}{(2\pi\hbar)^3} \mathrm{e}^{-\beta \frac{p'^2_j}{2m}}
\end{aligned}
$$

ここで，$p'_{jx} = p_{jx} + m\omega y_j$，$p'_{jy} = p_{jy} - m\omega x_j$，$p'_{jz} = p_{jz}$ と変数変換した．積分を実行すると

$$
\int \frac{d^3 p'_j}{(2\pi\hbar)^3} \mathrm{e}^{-\beta \frac{p'^2_j}{2m}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2}
$$

$$
\int d^3 r_j \mathrm{e}^{\beta \frac{m\omega^2}{2}(x_j^2 + y_j^2)} = \pi R^2 L \frac{2}{\beta m \omega^2 R^2} \left(\mathrm{e}^{\beta \frac{m\omega^2 R^2}{2}} - 1 \right)
$$

であるから

$$
Z = \frac{1}{N!} \left[\pi R^2 L \frac{2kT}{m\omega^2 R^2} \left(\mathrm{e}^{\frac{m\omega^2 R^2}{2kT}} - 1 \right) \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right]^N
$$

と計算できる．

(c) Helmholtz の自由エネルギー F と内部エネルギー U は Stirling の公式 $\ln N! \approx N \ln N - N$ を用いて

$$
\begin{aligned}
F &= -\frac{1}{\beta} \ln Z \\
&\approx -NkT \left[\frac{3}{2} \ln \frac{mkT}{2\pi\hbar} + \ln \frac{\pi R^2 L}{N} + 1 + \ln \frac{2kT}{m\omega^2 R^2} \left(\mathrm{e}^{\frac{m\omega^2 R^2}{2kT}} - 1 \right) \right] \\
U &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z \\
&\approx \frac{5}{2} NkT - NkT \frac{m\omega^2 R^2}{2kT} \frac{\mathrm{e}^{\frac{m\omega^2 R^2}{2kT}}}{\mathrm{e}^{\frac{m\omega^2 R^2}{2kT}} - 1}
\end{aligned}
$$

と計算することができる．

[2]

$\langle n(\boldsymbol{r})\rangle = \bar{n}(\rho)$ は以下のように求めることができる．

$$
\begin{aligned}
\langle n(\boldsymbol{r})\rangle &= \frac{1}{N!}\prod_{j=1}^{N}\int \frac{d^3r_j d^3p_j}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\mathrm{e}^{-\beta H}}{Z}n(\boldsymbol{r}) \\
&= \frac{1}{Z}\frac{1}{N!}\prod_{j=1}^{N}\int d^3r_j \mathrm{e}^{\beta\frac{m\omega^2}{2}(x_j^2+y_j^2)}n(\boldsymbol{r})\prod_{j=1}^{N}\int \frac{d^3p'_j}{(2\pi\hbar)^3}\mathrm{e}^{-\beta\frac{p'^2_j}{2m}} \\
&= \frac{1}{Z}\frac{1}{N!}\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}}\left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3N/2}\left(\prod_{j=1}^{N}\int_0^R d\rho_j\int_0^{2\pi}\rho_j d\varphi_j\int_0^L dz_j \mathrm{e}^{\beta\frac{m\omega^2}{2}\rho_j^2}\right) \\
&\quad\times\left[\sum_{j=1}^{N}\frac{\delta(\rho-\rho_j)}{\rho}\delta(\varphi-\varphi_j)\delta(z-z_j)\right] \\
&= N\int_0^R d\rho_1\int_0^{2\pi}\rho_1 d\varphi_1\int_0^L dz_1\frac{\delta(\rho-\rho_1)}{\rho}\delta(\varphi-\varphi_1)\delta(z-z_1)\mathrm{e}^{\beta\frac{m\omega^2}{2}\rho_1^2} \\
&\quad\times\left[\int_0^R d\rho_1\int_0^{2\pi}\rho_1 d\varphi_1\int_0^L dz_1 \mathrm{e}^{\beta\frac{m\omega^2}{2}\rho_1^2}\right]^{-1} \\
\bar{n}(\rho) &= \frac{N}{\pi R^2 L}\frac{m\omega^2R^2}{2kT}\frac{\mathrm{e}^{\frac{m\omega^2\rho^2}{2kT}}}{\mathrm{e}^{\frac{m\omega^2R^2}{2kT}}-1}
\end{aligned}
$$