物理工学専攻院試解答集
2023 年度物理学第 3 問

政岡凜太郎

[1.1] 静止円柱内の 1 粒子分配関数

確率密度の規格化は

$$1 = \frac{1}{h^3 L \widetilde{Z}_1} \int_{-L/2}^{L/2} dz \int_{x^2+y^2\le R^2} dx\, dy \int_{\mathbb{R}^3} d^3p\, e^{-p^2/(2mkT)}.$$

運動量積分は $(2\pi mkT)^{3/2}$、断面積は πR^2、高さ積分は L なので

$$\widetilde{Z}_1(T,R) = \frac{\pi R^2}{h^3}(2\pi mkT)^{3/2} = \boxed{\gamma R^2 (kT)^{3/2}}, \qquad \gamma = \frac{\pi^{5/2}(2m)^{3/2}}{h^3}.$$

[1.2] 自由エネルギー密度

古典的な同種粒子の分配関数は $Z_N = [L\widetilde{Z}_1]^N/N!$ である。Stirling 近似から

$$F = -kT \log Z_N \simeq -NkT \left[\log\left(\frac{L\widetilde{Z}_1}{N} \right) + 1 \right].$$

$\nu = N/L$ を固定して割り算すると

$$\boxed{\widetilde{F} = \frac{F}{L} = -\nu kT \left[\log\left(\frac{\widetilde{Z}_1}{\nu} \right) + 1 \right] = -\nu kT (\log \widetilde{Z}_1 - \log \nu + 1)}.$$

[1.3] 静止容器の側圧

半径を dR だけ準静的に増やすと体積変化は $dV = 2\pi RL\, dR$。したがって

$$P = -\frac{1}{2\pi R}\left(\frac{\partial \widetilde{F}}{\partial R} \right)_{T,\nu} = \boxed{\frac{\nu kT}{2\pi R \widetilde{Z}_1}\left(\frac{\partial \widetilde{Z}_1}{\partial R} \right)_T}.$$

ここで [1.1] の $\widetilde{Z}_1 \propto R^2$ を使うと

$$\boxed{P = \frac{\nu kT}{\pi R^2}}.$$

[2.1] 回転系ハミルトニアンの最小値

$r^2 = x^2 + y^2$ とし平方完成すると

$$H_1 - \omega M_1 = \frac{(p_x + m\omega y)^2 + (p_y - m\omega x)^2 + p_z^2}{2m} - \frac{m\omega^2 r^2}{2}.$$

$r \le R$ のもとでは二乗項をゼロにし、$r = R$ としたとき最小になる。よって

$$\boxed{\min(H_1 - \omega M_1) = -\frac{m\omega^2 R^2}{2} = -\epsilon}, \qquad \epsilon = \frac{mR^2\omega^2}{2}.$$

$\omega = 0$ では最小値は 0 である。

[2.2] 平衡流の速度場

位置 $\boldsymbol{r}$ を固定した運動量分布は

$$\exp\left[-\frac{(p_x + m\omega y)^2 + (p_y - m\omega x)^2 + p_z^2}{2mkT}\right]$$

に比例するガウス分布である。その中心運動量を m で割れば局所平均速度となる：

$$\boxed{v_x(\boldsymbol{r}) = -\omega y, \qquad v_y(\boldsymbol{r}) = \omega x, \qquad v_z(\boldsymbol{r}) = 0}.$$

これは z 軸周りの剛体回転 $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{r}$ である。

[2.3] 回転系の規格化定数

平方完成した運動量積分は通常の Gaussian と同じであり、位置に残る重みは $e^{m\omega^2 r^2/(2kT)}$ である。$\lambda = \epsilon/(kT)$ とすると

$$\begin{aligned}
\widetilde{Z}_1(T, R, \omega) &= \frac{(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3}\, 2\pi \int_0^R r\, e^{m\omega^2 r^2/(2kT)} dr \\
&= \frac{(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} \frac{2\pi kT}{m\omega^2} (e^{\lambda} - 1) \\
&= \boxed{\gamma R^2 (kT)^{3/2} \frac{e^{\lambda} - 1}{\lambda}} = \boxed{\frac{2\gamma (kT)^{5/2}}{m\omega^2} (e^{\epsilon/(kT)} - 1)}.
\end{aligned}$$

ここでは $\omega \neq 0$ とした。$\lambda \to 0$ で $(e^{\lambda} - 1)/\lambda \to 1$ となり、[1.1] の非回転極限に戻る。

[2.4] 回転容器の側圧

全粒子の角運動量を $M = \sum_j M_{1,j}$ とし、逆温度を $\beta = 1/(kT)$ と書く。角速度 ω の容器が粒子に及ぼすトルクの仕事率は $\omega\, d\langle M \rangle/dt$ なので、準静的な変化での第一法則は

$$d\langle H \rangle = T\, dS + \omega\, d\langle M \rangle - P\, dV \qquad (N \text{ 固定})$$

である。回転分布 $e^{-\beta(H-\omega M)}$ から得る熱力学ポテンシャルを F_ω と書くと、[1.2] と同じ粒子数の数え上げにより

$$\begin{aligned} F_\omega &= -kT\log\frac{[L\widetilde{Z}_1(T,R,\omega)]^N}{N!} = \langle H\rangle - TS - \omega\langle M\rangle \\ &\simeq -NkT\left[\log\left(\frac{L\widetilde{Z}_1(T,R,\omega)}{N}\right)+1\right], \\ dF_\omega &= -S\,dT - \langle M\rangle\,d\omega - P\,dV. \end{aligned}$$

従って側圧は T,ω,N,L 固定での半径微分から得られる。$dV = 2\pi RL\,dR$ と [2.3] を用いると

$$P = \frac{\nu kT}{2\pi R}\left(\frac{\partial\log\widetilde{Z}_1}{\partial R}\right)_{T,\omega} = \boxed{\frac{\nu m\omega^2}{2\pi(1-e^{-\lambda})}}, \qquad \lambda = \frac{mR^2\omega^2}{2kT}.$$

角速度固定で $T\to 0$、すなわち $\lambda\to\infty$ とすると

$$\boxed{P \longrightarrow \frac{\nu m\omega^2}{2\pi}}.$$

また $\lambda\to 0$ では $P\to \nu kT/(\pi R^2)$ となり、静止容器の式と一致する。

[2.5] 慣性モーメント

既に得た局所平均速度は $\langle \boldsymbol{v}\mid r\rangle = (-\omega y,\omega x,0)$ である。よって一粒子の軸まわり角運動量は $\langle M_1\mid r\rangle = x(m\omega x) - y(-m\omega y) = m\omega r^2$、全粒子について $\langle M\rangle = Nm\omega\langle r^2\rangle$ となる。ここで $I = Nm\langle r^2\rangle$ が質量分布の慣性モーメントである。回転分配関数は $e^{\beta\omega M_1}$ を含むため

$$I = \frac{\langle M\rangle}{\omega} = \frac{NkT}{\omega}\left(\frac{\partial\log\widetilde{Z}_1}{\partial\omega}\right)_{T,R}.$$

$$\log\widetilde{Z}_1 = (\text{terms independent of }\omega) - 2\log|\omega| + \log(e^\lambda - 1), \qquad \partial_\omega\lambda = \frac{2\lambda}{\omega}.$$

従って $\omega\neq 0$ で

$$\boxed{I = \frac{2N}{\omega^2}\left[\frac{\epsilon}{1-e^{-\epsilon/(kT)}} - kT\right]}.$$

極限 $\omega\to 0$ では $I\to NmR^2/2$、$T\to 0$ では $I\to NmR^2$ で、後者は粒子が側壁近くに集まることに対応する。

[2.6] 固定角速度の熱容量

固定した R,L,N,ω のもとで加熱すると、[2.4] の第一法則から、加えた熱は回転仕事を差し引いた

$$\delta Q = d\langle H\rangle - \omega\,d\langle M\rangle = d\langle H-\omega M\rangle$$

となる。従って固定角速度の熱容量では共回転系の平均 $U_\omega = \langle H-\omega M\rangle$ を温度微分する。回転分布の逆温度微分もこの同じ平均を与え、

$$U_\omega = \langle H-\omega M\rangle = -N\left(\frac{\partial\log\widetilde{Z}_1}{\partial\beta}\right)_{\omega,R}.$$

同じ式は $\langle H\rangle = \frac{3}{2}NkT + \frac{1}{2}I\omega^2$ と $\langle M\rangle = I\omega$ から $U_\omega = \frac{3}{2}NkT - \frac{1}{2}I\omega^2$ としても得られる。$\widetilde{Z}_1 \propto \beta^{-5/2}(e^{\beta\epsilon}-1)$ より

$$U_\omega = \frac{5}{2}NkT - \frac{N\epsilon}{1-e^{-\epsilon/(kT)}}.$$

よって ω 固定の熱容量は

$$\boxed{C_\omega = \left(\frac{\partial U_\omega}{\partial T}\right)_\omega = \frac{5}{2}Nk - \frac{N\epsilon^2}{kT^2}\frac{e^{-\epsilon/(kT)}}{\left(1-e^{-\epsilon/(kT)}\right)^2}}.$$

上式の減算項を $Nk\lambda^2 e^{-\lambda}/(1-e^{-\lambda})^2$ と書けば、高温の $\lambda \to 0$ では $1-e^{-\lambda} \sim \lambda$ から Nk に、低温の $\lambda \to \infty$ では 0 に近づく。従って非零の ω を固定した高温極限では $C_\omega \to \frac{3}{2}Nk$、低温極限では $C_\omega \to \frac{5}{2}Nk$ である。$\omega = 0$ では式の連続極限から $C_0 = \frac{3}{2}Nk$ がすべての T で得られる。