2009年度統計力学II 宿題12 (7月8日出題、7月15日提出) 解答

担当 吉森 明

[問題1.] (1) (予習) $f(M) = A_0 + A_2M^2 + A_4M^4$ で $A_2 > 0$ と $A_2 < 0$ の2つの場合に $f(M)$ を最小とする M_0 と $f(M_0)$ を全て求めよ。ただし、$A_4 > 0$ とする。[*1]

(2) 締め切り延長

[解答](実際の解答にはここまで計算を丁寧に書かなくて良い。)

(1) $f(M)$ の増減を調べるために、微分をとると

$$f'(M) = 2A_2M + 4A_4M^3 = M(2A_2 + 4A_4M^2) \tag{1}$$

①$A_2 > 0$ の時:

常に $2A_2 + 4A_4M^2 > 0$ だから

M		0	
$f'(M)$	$-$	0	$+$
$f(M)$	減少	A_0	増加

したがって、$M = 0$ が唯一の極小で、最小。その値は、$f(0) = A_0$ となる。

②$A_2 < 0$ の時:

$$M_0 = \sqrt{\frac{-A_2}{2A_4}} \tag{2}$$

とすると $|M| > M_0$ のとき、$2A_2 + 4A_4M^2 > 0$ となり、$|M| < M_0$ のとき、$2A_2 + 4A_4M^2 < 0$ だから、

M		$-M_0$		0		M_0	
$f'(M)$	$-$	0	$+$	0	$-$	0	$+$
$f(M)$	減少		増加		減少		増加

[*1] 板書ではこの条件が抜けていました。申し訳ありません。訂正して下さい。

したがって、$M=0$ は極小で、最小は $M=\pm M_0$ になる。関数の値は、M_0 を代入して

$$f(M_0) = A_0 + A_2\left(\frac{-A_2}{2A_4}\right) + A_4\left(\frac{-A_2}{2A_4}\right)^2 \tag{3}$$

$$= A_0 - \frac{A_2^2}{2A_4} + \frac{A_2^2}{4A_4} \tag{4}$$

$$= A_0 - \frac{A_2^2}{4A_4} \tag{5}$$

[問題 2.]p131 演習問題 [1]

[解答] 分子 1 個の回転を表す分配関数は、古典系の場合、

$$Z_T = \frac{1}{2}\int \frac{d\mathbf{r}d\mathbf{p}}{h^3}\exp[-\beta H(\mathbf{r},\mathbf{p})] \tag{6}$$

ここで、2 個の核の位置を $\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2$ とすると、$\mathbf{r}$ は、$\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2$ で定義される相対座標と、$\mathbf{p}$ はそれと共役な運動量を表す。また、積分の前についている 1/2 は、2 個の原子核が同種のため区別できないところから来る。

普通の xyz 座標 $(\mathbf{r},\mathbf{p})$ から一般化座標 $\{q_l,p_l;l=1,2,3\}$ の変数変換を考える。

$$q_l = q_l(\mathbf{r},\mathbf{p}) \tag{7}$$

$$p_l = p_l(\mathbf{r},\mathbf{p}) \tag{8}$$

解析力学から $\{q_l,p_l\}$ が正準変数であれば、

$$d\mathbf{r}d\mathbf{p} = \prod_l^3 dq_l dp_l \tag{9}$$

だから、(6) 式は、

$$Z_T = \frac{1}{2}\int \frac{\prod_l^3 dq_l dp_l}{h^3}\exp[-\beta H(\{q_l,p_l\})] \tag{10}$$

と書き換えられる。

今の場合、$\{q_l, p_l\} = \{r, \theta, \phi, p_r, p_\theta, p_\phi\}$ だが、r, p_r は回転には寄与しないので、除くと、r, p_r を除いた回転だけの分配関数 Z を考える。問題のハミルトニアンを代入すると、

$$Z = \frac{1}{2}\int \frac{d\theta d\phi dp_\theta dp_\phi}{h^2}\exp[-\frac{\beta}{2I}\left(p_\theta^2 + \frac{p_\phi^2}{\sin^2\theta}\right)] \tag{11}$$

p_θ と p_ϕ は、ガウス関数なので、積分できて

$$= \frac{1}{2}\int \frac{d\theta d\phi}{h^2}\sqrt{2\pi I k_{\mathrm{B}} T}\sqrt{2\pi I k_{\mathrm{B}} T}\sin\theta \tag{12}$$

被積分関数は、ϕ によらないので、

$$= \frac{1}{2}\int \frac{2\pi d\theta}{h^2}\sqrt{2\pi I k_{\mathrm{B}} T}\sqrt{2\pi I k_{\mathrm{B}} T}\sin\theta \tag{13}$$

θ の積分範囲は 0 から π なので、

$$= \frac{2\pi}{2h^2}\sqrt{2\pi I k_{\mathrm{B}} T}\sqrt{2\pi I k_{\mathrm{B}} T} \times 2 \tag{14}$$

$$= \frac{4\pi^2 I k_{\mathrm{B}} T}{h^2} \tag{15}$$

後の計算は、教科書 P217 と同じ。