[化学物理 II (専門)]（全２題）

[問題１]

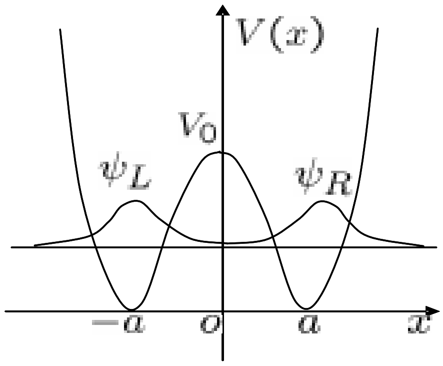
図のような二重井戸ポテンシャルにおける振動固有状態を求めることを考える。系のハミルトニアンを

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

とし、ポテンシャル関数$V(x)$を

$$V(x) = \frac{V_0}{a^4}(x^2 - a^2)^2$$

とおく。このとき以下の設問に文章で答え、また空欄（ア、イ、ウ、・・・）を適切な数式で埋めよ。



問 A　基底関数として左右の井戸を調和ポテンシャルで近似したものの振動基底状態ψ_L, ψ_Rを用いる。$V(x)$を$x = a$まわりで２次まで Taylor 展開し、その結果を$\frac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2$に等しいとおくと、調和振動数$\omega$は$m, V_0, a$を用いて$\boxed{ア}$と表せる。

問 B　$\hat{H}$の固有状態ψをψ_L, ψ_Rの線形結合として

$$\psi(x) = c_L\psi_L(x) + c_R\psi_R(x)$$

とおくと、係数　c_L, c_R　に対する行列表現のシュレーディンガー方程式は

$$\begin{bmatrix} \langle\psi_L|H|\psi_L\rangle & \langle\psi_L|H|\psi_R\rangle \\ \langle\psi_R|H|\psi_L\rangle & \langle\psi_R|H|\psi_R\rangle \end{bmatrix}\begin{bmatrix} c_L \\ c_R \end{bmatrix} = E\begin{bmatrix} c_L \\ c_R \end{bmatrix}$$

となる。（ここでψ_L, ψ_Rは規格化されているとし、重なり積分は０とする。）

$$\langle\psi_L|H|\psi_L\rangle = \langle\psi_R|H|\psi_R\rangle \approx \frac{1}{2}\hbar\omega、\quad \langle\psi_L|H|\psi_R\rangle = \beta\ (<0)$$

とおいて、上の行列方程式の固有値と固有ベクトルを求めよ。その結果から$\psi(x)$の対称性と固有エネルギーの大小について議論せよ。

問 C　ψ_L, ψ_R は次式で与えられる。

$$\psi_L(x) = \left[\frac{B}{\pi}\right]^{1/4} \exp\left[-\frac{1}{2}B(x+a)^2\right] \qquad \psi_R(x) = \left[\frac{B}{\pi}\right]^{1/4} \exp\left[-\frac{1}{2}B(x-a)^2\right]$$

ψ_R が調和振動子に対する次のシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2\right)\psi_R(x) = \frac{1}{2}\hbar\omega\psi_R(x)$$

を満たすことから、パラメータ B を $m, \omega, \hbar$ で表すと $\boxed{イ}$ となる。

問 D　次に行列要素

$$\beta = \left\langle \psi_L \middle| \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \middle| \psi_R \right\rangle$$

を計算する。右辺第一項で x について部分積分を行うと

$$\left\langle \psi_L \middle| -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \middle| \psi_R \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ T(x)\psi_L(x)\psi_R(x)$$

となる。ここで $T(x)$ を $m, \hbar, B, x, a$ を用いて表すと $\boxed{ウ}$ となる。次に $V(x)$ 中の x^4 の項を無視し、恒等式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \exp(-Bx^2) = \sqrt{\frac{\pi}{B}} \qquad \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x^2 \exp(-Bx^2) = \frac{1}{2B}\sqrt{\frac{\pi}{B}}$$

を用いて積分を実行すると、

$$\beta = \left\{-\boxed{エ}V_0 + \boxed{オ}\hbar\omega\right\} \times \exp\left\{-\boxed{カ}\frac{V_0}{\hbar\omega}\right\}$$

が得られる。この結果から、トンネル効果による固有エネルギーの分裂とポテンシャル関数の特徴がどのように関係しているか、簡潔に説明せよ。

[問題２]

　大きさμの磁気モーメントをもつN個の粒子が格子状に並んでいるとする。この系に磁場 H が作用したとき、個々の磁気モーメントは周りの磁気モーメントの向きにかかわりなく、磁場に平行か反平行の向きのどちらかをとるものとする。いま磁場と反平行にある粒子の数をnとすると系の相互作用エネルギーUは,

$$U = (2n - N)\mu H$$

とあらわされる。このとき以下の設問に答えよ。

問 **A**　この系のカノニカル分配関数Qは、

$$Q = q^N \sum_{n=0}^{N} \left[(1)\right]$$

とかける。ここで q は磁気に関係のない部分の寄与からくる一分子分配関数をあらわす。(1)にあてはまる式を記入せよ。

問 **B** この系の平均の磁化の大きさを$\langle M \rangle$とする。ただし$\langle M \rangle = \mu\left(N - 2\langle n \rangle\right)$とし、$\langle n \rangle$は n の期待値をあらわす。分配関数から期待値をもとめる表式から出発して、以下の関係式が成り立つことを示せ。ただし k、T はそれぞれボルツマン定数、温度を表す。

$$\langle M \rangle = kT\left(\frac{\partial \ln Q}{\partial H}\right)_T$$

問 **C**　問 **A** および問 **B** の結果を利用して,

$$\langle M \rangle = N\mu \tanh\frac{\mu H}{kT}$$

となることを示せ。

$$\tanh x = \frac{\exp(x) - \exp(-x)}{\exp(x) + \exp(-x)}$$

問 **D** $\Delta M = M - \langle M \rangle$としたとき、$\left\langle (\Delta M)^2 \right\rangle$ および$\langle M \rangle$の $T \to 0$ での振る舞いを記述せよ。