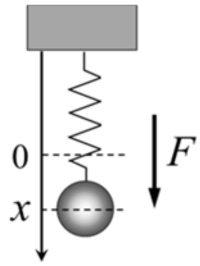
［専門科目 (物理学)］(全 2 題)

［問題 1］以下の文章を読み，問 A～C に答えよ．

電荷 e，質量 m，角振動数 ω を持つ 1 次元調和振動子に，時刻 t=0 に強度一定の電場 F を加えはじめる．この場合，系のハミルトニアン $\hat{H}$ は



$$\hat{H}=\begin{cases}-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}+\dfrac{m\omega^2x^2}{2} & (t<0)\\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}+\dfrac{m\omega^2x^2}{2}-eFx & (t\geq 0)\end{cases}$$

で与えられる．ここで $\hbar=h/2\pi$ であり，h は Planck 定数である．$t<0$ における調和振動子の定常状態について考える．ν 番目 $(\nu=0,1,2\cdots)$ のエネルギー固有値は $\varepsilon_\nu=\boxed{\text{ア}}$，固有関数は $\alpha=\sqrt{m\omega/\hbar}$，$A_\nu=\sqrt{\alpha/\sqrt{\pi}2^\nu\nu!}$ を用いて

$$\psi_\nu(x)=A_\nu\exp(-\alpha^2x^2/2)H_\nu(\alpha x)$$

で与えられる．$H_\nu(z)$ は $\boxed{\quad\text{I}\quad}$ 多項式と呼ばれ($z=\alpha x$ とおいた),

$$H_\nu(z)=(-1)^\nu\exp(z^2)\frac{d^\nu}{dz^\nu}\exp(-z^2)$$

で与えられる．したがって，例えば $\nu=0,1,2$ について $H_0(z)=\boxed{\text{イ}}$，$H_1(z)=\boxed{\text{ウ}}$，$H_2(z)=\boxed{\text{エ}}$ となる．これらより，反転操作について一般的に成立する $\boxed{\quad\text{I}\quad}$ 多項式の性質 $H_\nu(-z)=\boxed{\text{オ}}\times H_\nu(z)$ を確認することができる．

$t\geq 0$ における調和振動子の定常状態について考える．ハミルトニアンは

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{m\omega^2}{2}(x-x_0)^2+y_0$$

と式変形される．ここで，$x_0=\boxed{\text{カ}}$，$y_0=\boxed{\text{キ}}$ である．したがって n 番目(n=0, 1, 2⋯)の固有値は $E_n=\boxed{\text{ク}}$ で，固有関数は

$$\phi_n(x)=A_n\exp\left[-\alpha^2(x-x_0)^2/2\right]H_n(\alpha(x-x_0))$$

で与えられる．

問 A　上記の文中にある空欄 ア ～ ク に適切な数，及び数式を答えよ．

また，空欄 I について適切な用語を答えよ．

問 B　多項式 $H_n(z)$ は，母関数の展開

$$\exp\left(-k^2+2kz\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{k^n}{n!}\right)H_n(z)$$

によっても定義することができる．両辺の係数比較を行うことで $H_0(z)$，$H_1(z)$，$H_2(z)$ を求め，問 A で得た結果と一致することを示せ．

問 C　$t<0$ において基底状態 $\psi_0(x)$ にあった調和振動子の，$t \geq 0$ における波束の時間発展を考える．$t \geq 0$ において，時間依存の波動関数 $\Phi(x,t)$ は次のように表せる．

$$\Phi(x,t)=\sum_{n=0}^{\infty}c_n\,\phi_n(x)\exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)$$

(1) $c_n=\int_{-\infty}^{+\infty}\phi_n^*(x)\,\psi_0(x)\,dx$ であることを示せ．

(2) (1)を計算し，

$$c_n=\frac{A_0A_n}{\alpha}\exp\left(-\frac{z_0^2}{4}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-z^2\right)\exp\left[-\left(\frac{z_0}{2}\right)^2-2z\left(\frac{z_0}{2}\right)\right]H_n(z)\,dz$$

と書けることを示せ．ここで，$z=\alpha x$，$z_0=\alpha x_0$ である．

(3) (2)の c_n に，$k=z_0/2$ として問 B の母関数展開の関係式を適用すると

$$c_n=\left[\left(-z_0\right)^n\Big/\sqrt{2^n n!}\right]\exp\left[-\left(z_0\right)^2\Big/4\right]$$

と書けることを示せ．必要であれば，以下の積分公式を用いて良い．

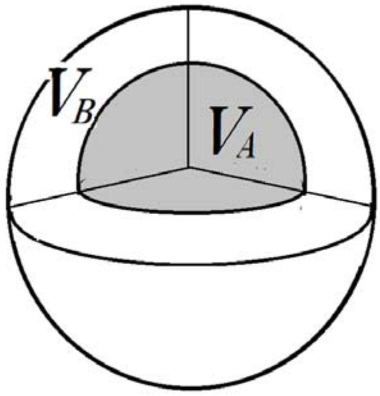
$$\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-z^2\right)H_n(z)\,H_m(z)dz=\sqrt{\pi}\,2^n n!\ \delta_{nm}$$

(4) (3)の結果を用いると，波束は次式で与えられる．

$$\left|\Phi(x,t)\right|^2=(\alpha/\sqrt{\pi})\exp[-\alpha^2(x_0\cos\omega t+x-x_0)^2]$$

この波束の中心位置の時間発展について，古典的な一次元調和振動子の運動と比較しながら論ぜよ．

［問題 2］以下の文章を読み，問 A～F に答えよ．なお，答案用紙には結果だけではなく，計算過程も記述すること．



球殻の中に閉じ込められた 2 種類の原子 A，B からなる液体の相分離と混合について考えよう．初めにそれぞれの原子は右図のように球体の内殻，外殻に体積 V_A， V_B で相分離していると仮定する. 原子 A, B の原子数を N_A , N_B , 質量を m_A , m_B とし，A，B 系は完全に独立に扱え，温度 T の熱平衡にあるとする．球殻は外から圧力 P がかけられており，簡単化のため原子 AA 間，BB 間それぞれの相互作用エネルギーは $N_A\mu_A$， $N_B\mu_B$ で記述されるとする.

問 A　相分離状態での A 系のみの状態について考えよう．Boltzmann 定数を k , Planck 定数を h とする．A 原子の運動量成分を p_j $(j = x, y, z)$ で表すと A 系の分配関数は

$$Z_A = \frac{1}{N_A! h^{3N_A}} \left[V_A \iiint dp_x dp_y dp_z \exp\left(-\frac{1}{kT} \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m_A} \right) \right]^{N_A} \exp\left[-\frac{N_A \mu_A}{kT} \right]$$

で与えられる.

(1) 分配関数の定義において $N_A!$ と h^{3N_A} で除する意味を記せ.

(2) Gauss 積分の公式 $\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$ を用いて,

$$Z_A = \frac{V_A^{N_A}}{N_A!} \left(C_A T \right)^{\frac{3N_A}{2}} \mathrm{e}^{-\frac{N_A \mu_A}{kT}}$$

となることを示せ. ここで, 簡略化のため $C_A = 2\pi m_A k / h^2$ と記した.

問 B　Stirling の公式は$\ln n! = n\ln n - n$　(n は$n \gg 1$の整数)で与えられる．

Helmholtz 自由エネルギー$F_A = -kT\ln Z_A$を計算せよ．

問 C　B 系の分配関数も A 系と同様に計算されるとしよう．A，B 系の圧力は$P_i = -(\partial F_i / \partial V_i)$（$i = A$または$B$）で与えられる．二つの系の圧力が等しくなるための条件を記せ．

問 D　原子 A，B が混合されている場合を考えよう．全原子数は$N = N_A + N_B$であり，混合により全体積$V = V_A + V_B$は変化しないとする．B 原子の運動量をp'_j　($j = x, y, z$)で表し，混合溶液に対する原子 AA 間，BB 間，AB 間の相互作用のエネルギーをそれぞれ$N_A(\mu_A - \Delta\mu_A)$，$N_B(\mu_B - \Delta\mu_B)$，$N_A N_B \mu_{AB} / N$とするなら，分配関数は

$$Z_{A+B} = \frac{1}{N_A! N_B! h^{3N}}\left[V\iiint dp_x dp_y dp_z \exp\left(-\frac{1}{kT}\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m_A}\right)\right]^{N_A}$$
$$\times\left[V\iiint dp'_x dp'_y dp'_z \exp\left(-\frac{1}{kT}\frac{p'^2_x + p'^2_y + p'^2_z}{2m_B}\right)\right]^{N_B}$$
$$\times\exp\left[-\frac{N_A N_B \mu_{AB}}{NkT} - \frac{N_A(\mu_A - \Delta\mu_A)}{kT} - \frac{N_B(\mu_B - \Delta\mu_B)}{kT}\right]$$

で与えられる．混合後の全 Helmholtz 自由エネルギーF_{A+B}を計算せよ．

問 E　混合前後における全系の自由エネルギーの変化を$\Delta F = F_{A+B} - F_A - F_B$としよう．混合前は問 C の条件が成り立っているとする．原子 A の濃度を$\phi = N_A / N$とすると，$1-\phi = N_B / N$である．1 原子あたりの自由エネルギー変化$\Delta\bar{F} = \Delta F / N$を，$\phi$の関数として表せ．

問 F　二つの原子が混ざるためには, 自由エネルギーが濃度の変化に対して安定, すなわち$\partial^2 \Delta\bar{F} / \partial\phi^2 > 0$となる必要がある．($0 < \phi < 1$とする)．

(1) 混合の条件式を求めよ．

(2) AB 間の相互作用μ_{AB}　の大小と，混合の難易についての関係を述べ，その理由を考察し記せ．