［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．

図 1 に表される直交座標の xy 平面に束縛されたスピンを持たない質量 M の荷電粒子の 2 次元調和振動子の量子状態を考える．系のハミルトニアンは

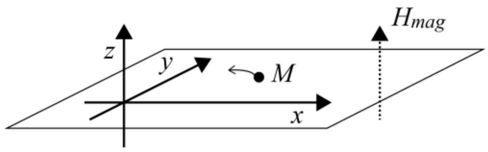

図 1　xy 平面に束縛された荷電粒子

$$\hat{H}(x,y) = -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)+\frac{1}{2}M\omega^2\left(x^2+y^2\right) \tag{1}$$

となる．ここで $\hbar = h/(2\pi)$ で h はプランク定数，ω は調和振動子の振動数である．

x 座標に関する 1 次元の調和振動子の波動関数 $\psi_{n_x}(x)$ は次式のシュレディンガー方程式により与えられる．

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}M\omega^2 x^2\right)\psi_{n_x}(x) = \hbar\omega\left(n_x+\frac{1}{2}\right)\psi_{n_x}(x) \tag{2}$$

ここで $n_x\left(n_x = 0,1,2,\cdots\right)$ は振動量子数である． $n_x = 0$ および $n_x = 1$ の波動関数は，

$$\psi_0(x) = C_0 \exp\left(-\frac{M\omega}{2\hbar}x^2\right) \tag{3}$$

$$\psi_1(x) = C_1 x \exp\left(-\frac{M\omega}{2\hbar}x^2\right) \tag{4}$$

である． ここで C_0 及び C_1 は規格化定数である． y 座標に関する 1 次元の調和振動子の波動関数 $\psi_{n_y}(y)$ も振動量子数 $n_y\left(n_y = 0,1,2,\cdots\right)$ を用いて同様の表式となる．

2 次元の調和振動子の量子状態は，量子数 $N\left(N = 0,1,2,\cdots\right)$ を用いて表される．波動関数 $\Psi_N(x,y)$ は，1 次元の調和振動子の波動関数 $\psi_{n_x}(x)$ と $\psi_{n_y}(y)$ から構成することが可能であり，例えば，基底状態 $N = 0$ の波動関数は $\Psi_0(x,y) = \boxed{\quad ア \quad}$ と表せる．また，量子数 N の状態のエネルギーは $E_N = \boxed{\quad イ \quad}$ となる． $N \geq 1$ では量子状態は縮重し，縮重している状態の数は $\boxed{\quad ウ \quad}$ である．

さて，この 2 次元の調和振動子を 2 次元極座標 r, ϕ で取り扱う．

$$x = r\cos\phi \tag{5}$$

$$y = r\sin\phi \tag{6}$$

ここで，$0 \le r \le \infty$ 及び $0 \le \phi \le 2\pi$ である．角運動量演算子 $\hat{L}$ を直交座標から極座標に変換すると，ϕ の関数として角運動量演算子の固有方程式が得られる．

$$\hat{L}(\phi)\Phi_m(\phi) = \hbar m \Phi_m(\phi) \tag{7}$$

$$\hat{L}(\phi) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{8}$$

ここで m は整数で，角運動量の量子数である．$\Phi_m(\phi)$ はその固有関数である．

極座標で表示されたシュレディンガー方程式は

$$\hat{H}(r,\phi)\Psi_{Nm}(r,\phi) = E_N \Psi_{Nm}(r,\phi) \tag{9}$$

と表され，極座標に変換された式(1)のハミルトニアンは

$$\hat{H}(r,\phi) = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{L}^2(\phi)}{2Mr^2} + \frac{1}{2}M\omega^2 r^2 \tag{10}$$

となる．波動関数は，r の関数 $R_{Nm}(r)$ と式(7)で与えられる角運動量演算子の固有関数 $\Phi_m(\phi)$ の積で次式のように表される．

$$\Psi_{Nm}(r,\phi) = R_{Nm}(r)\Phi_m(\phi) \tag{11}$$

この xy 平面の 2 次元上の量子状態に，図 1 のように z 軸に沿って弱い磁場 H_{mag} を印加すると，荷電粒子と磁場との相互作用

$$\hat{H}' = -\frac{\mu}{\hbar}\hat{L}(\phi)H_{mag} \tag{12}$$

（ここで μ は定数）により，$N \ge 1$ での縮重が解ける．

問 A　2 次元直交座標 x, y を用いた 2 次元調和振動子の量子状態について以下の (a)～(d) に答えよ．

(a) 量子数 N を，n_x および n_y を用いて表せ．

(b) 空欄 $\boxed{\quad ア \quad}$ に入る適切な数式を，$\psi_{n_x}(x)$ および $\psi_{n_y}(y)$ を用いて表せ．

このとき，n_x および n_y には適切な量子数を用いよ．

(c) 空欄 $\boxed{\text{イ}}$ に入る適切な数式を答えよ．

(d) 空欄 $\boxed{\text{ウ}}$ に入る適切な数式または数を答えよ．

問 B　2 次元極座標を用いた角運動量演算子 $\hat{L}(\phi)$ の固有状態について以下の(a)～(c)に答えよ．

(a) 固有関数 $\Phi_m(\phi)$ の表式を規格化定数も含めて答えよ．

(b) $\Phi_m(\phi)$ は式(10)に含まれる演算子 $\hat{L}^2(\phi)$ の固有関数でもある．$\Phi_m(\phi)$ の $\hat{L}^2(\phi)$ の固有値を表す数式を答えよ．

(c) $m \neq 0$ のとき，演算子 $\hat{L}^2(\phi)$ の固有値の縮重度を答えよ．

問 C　$N=1$ の縮重した状態が，式(12)で与えられる荷電粒子と磁場との相互作用によって分裂した．以下の(a)～(c)に答えよ．

(a) 磁場印加前の縮重したすべての状態の波動関数を，$\psi_{n_x}(x)$ および $\psi_{n_y}(y)$ を用いて表せ．このとき，n_x および n_y には適切な量子数を用いよ．

(b) 上問(a)の x, y 座標で表された波動関数を極座標 r, ϕ で表すと，変数 ϕ に依存する関数部分は異なる量子数 m を持つ $\Phi_m(\phi)$ の線形結合で表せる．このとき，取り得る m の値をすべて答えよ．

(c) 磁場印加後に分裂したすべての状態について，磁場印加前と後のエネルギー差を表す数式を答えよ．

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

２個のスピン A，B がある．それぞれのスピンの上向き，下向きの状態を↑，↓ で区別し，規格化された関数 $\phi_{\uparrow}^{i}$，$\phi_{\downarrow}^{i}$（$i=A,B$）で表されるとする．
このスピン系の温度 T での平衡状態を調べよう．

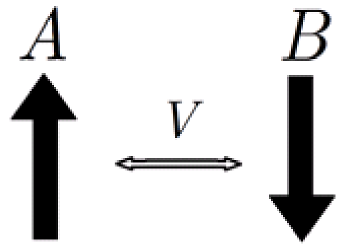

図１　相互作用する２スピン系

はじめにスピン A だけを考え，その状態を列ベクトル $\phi_{\uparrow}^{A}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$，$\phi_{\downarrow}^{A}=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$ で記述する．対応するハミルトニアンは行列形式で

$$\mathbf{H}_A=\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & -\varepsilon_A\end{bmatrix} \tag{1}$$

と表される．ここで，↑状態でのエネルギーは 0，↓状態でのエネルギーは $-\varepsilon_A$ である．A の分配関数を計算するために行列

$$\mathbf{Z}_A=\exp[-\beta\mathbf{H}_A]\equiv\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\beta)^n}{n!}\mathbf{H}_A^n \tag{2}$$

を考える．$\beta=1/k_{\mathrm{B}}T$ はボルツマン定数 k_{B} で除した逆温度，$\mathbf{H}_A^n$ は $\mathbf{H}_A$ の n 次の積で, 0 次は $\mathbf{H}_A^0=\mathbf{I}$ で定義されている（$\mathbf{I}$ は単位行列）. 対角行列 $\mathbf{H}_A$ に対し $\mathbf{Z}_A$ は

$$\mathbf{Z}_A=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \exp(\beta\varepsilon_A)\end{bmatrix} \tag{3}$$

と計算される．A の分配関数 Z_A はこの行列のトレース（$n\times n$ 正方行列 $\mathbf{X}$ のトレースは対角成分の和 $\mathrm{tr}\{\mathbf{X}\}=\sum_{j=1}^{n}\mathrm{X}_{jj}$）であり，$Z_A=\mathrm{tr}\{\mathbf{Z}_A\}=1+\exp(\beta\varepsilon_A)$ となる．

B の↑，↓状態のエネルギーを 0，$-\varepsilon_B$ とするなら，相互作用のない場合の B の分配関数 Z_B は，Z_A と同様にして求められ，$Z_B=1+\exp(\beta\varepsilon_B)$ である．

つぎに両方のスピンを考え（$\varepsilon_A > \varepsilon_B > 0$），全状態を A, B の状態関数の積 $\Phi_{\uparrow\uparrow} = \phi_\uparrow^A \phi_\uparrow^B$，$\Phi_{\downarrow\uparrow} = \phi_\downarrow^A \phi_\uparrow^B$，$\Phi_{\uparrow\downarrow} = \phi_\uparrow^A \phi_\downarrow^B$，$\Phi_{\downarrow\downarrow} = \phi_\downarrow^A \phi_\downarrow^B$ とし，その基底を

$$\Phi_{\uparrow\uparrow} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},\quad \Phi_{\downarrow\uparrow} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},\quad \Phi_{\uparrow\downarrow} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix},\quad \Phi_{\downarrow\downarrow} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{4}$$

で表す．大きさ V の相互作用を含む全ハミルトニアン $\mathbf{H}_{tot}$ が

$$\mathbf{H}_{tot} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\varepsilon_A & -V & 0 \\ 0 & -V & -\varepsilon_B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\varepsilon_A - \varepsilon_B \end{bmatrix} \tag{5}$$

で与えられるとすると，系の分配関数は $Z_{tot} = \mathrm{tr}\{\exp[-\beta \mathbf{H}_{tot}]\}$ より計算される．

問 A　相互作用がない場合（$V = 0$）を考える．以下の(a)〜(c)に答えよ．

(a) 式(3)が成り立つことを示せ．

(b) 式(5)のハミルトニアンの分配関数が $Z_{tot} = Z_A \times Z_B$ であることを示せ．

(c) ヘルムホルツエネルギー $F_{A+B} = -k_{\mathrm{B}} T \ln(Z_A \times Z_B)$ を求めよ．

問 B　相互作用がある場合（$V > 0$）を考える．以下の(a)〜(d)に答えよ．

(a) 式(5)の固有値を計算せよ．

(b) 以下では $(\varepsilon_A - \varepsilon_B) \gg V$ の場合を考え，小さな数 $|\delta| \ll 1$ に対する展開 $\sqrt{1 \pm \delta} \approx 1 \pm \delta / 2$ を用い，(a)で求めた固有値を $V / (\varepsilon_A - \varepsilon_B)$ の 2 次までで近似して議論する．トレースの値は $\mathbf{H}_{tot}$ が対角化されても不変であることを用い，$V' \equiv V^2 / (\varepsilon_A - \varepsilon_B)$ として分配関数 Z_{tot} を求めよ．

(c) この時のヘルムホルツエネルギー F_{tot} を求めよ．

(d) V' の増加に対するヘルムホツルエネルギー F_{tot} の増減を調べよ．