［専門科目（物理学)］（全 2 題）

［問題 1］以下の文章を読み, 問 A～D に答えよ.

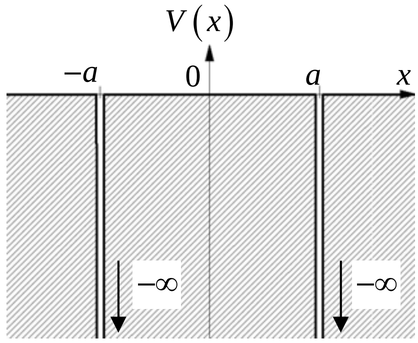

図 1　ポテンシャルの概形

時間に依存しないポテンシャル$V(x)$のもとで運動する質量 m の粒子の 1 次元運動は, 以下のシュレディンガー方程式により記述される.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x) \qquad (1)$$

ここで $\psi(x)$は波動関数, E は粒子のエネルギーであり, $\hbar$はプランク定数hを用いて$\hbar=h/(2\pi)$と表される. ポテンシャルが図 1 のように

$$V(x)=-V_0\left[\delta(x+a)+\delta(x-a)\right] \qquad (2)$$

で与えられるとする（$V_0>0$, $a>0$）. ただし$\delta(x)$はデルタ関数であり, 任意の実関数 $f(x)$に対して微小な正の実数εを用いて

$$\int_{c-\varepsilon}^{c+\varepsilon} f(x)\delta(x-c)dx = f(c) \qquad (3)$$

が成立している. ここでcは実定数である. 以下, 束縛状態（$E<0$）を考え, $\gamma\equiv\sqrt{-2mE}/\hbar$とする. ここでポテンシャル$V(x)$が偶関数であることから, 波動関数 $\psi(x)$は偶関数, もしくは奇関数であるとして一般性を失わない. 波動関数が偶関数の場合,

$$\psi(x)=\begin{cases} Ae^{-\gamma x} & (a<x) \\ B\left(e^{\gamma x}+e^{-\gamma x}\right) & (-a<x<a) \\ Ae^{\gamma x} & (x<-a) \end{cases} \qquad (4)$$

と表すことができる. ここで $x=a$ における接続条件

$$\begin{cases} \psi(a)=\lim\limits_{\varepsilon\to 0}\psi(a+\varepsilon)=\lim\limits_{\varepsilon\to 0}\psi(a-\varepsilon) & (5) \\ \lim\limits_{\varepsilon\to 0}\left(\left.\dfrac{d\psi(x)}{dx}\right|_{a+\varepsilon}-\left.\dfrac{d\psi(x)}{dx}\right|_{a-\varepsilon}\right)=-\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(a) & (6) \end{cases}$$

から，係数 A，B は

$$\begin{cases} Ae^{-\gamma a} - B\left(e^{\gamma a} + e^{-\gamma a}\right) = 0 & (7) \\ -\gamma Ae^{-\gamma a} - B\gamma\left(e^{\gamma a} - e^{-\gamma a}\right) = \boxed{\quad ア \quad} \times Ae^{-\gamma a} & (8) \end{cases}$$

を満たす．式(7)，(8)から A，B を消去することで

$$\frac{\hbar^2\gamma}{mV_0} - 1 = \boxed{\quad イ \quad} \tag{9}$$

が成り立つ.

波動関数が奇関数の場合には

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-\gamma x} & (a < x) \\ B\left(e^{\gamma x} - \boxed{\quad ウ \quad}\right) & (-a < x < a) \\ -Ae^{\gamma x} & (x < -a) \end{cases} \tag{10}$$

であり，

$$1 - \frac{\hbar^2\gamma}{mV_0} = \boxed{\quad イ \quad} \tag{11}$$

が成り立つ.

問 A　式(1)の両辺を領域$[a-\varepsilon, a+\varepsilon]$で積分した上で$\varepsilon \to 0$の極限をとる，すなわち

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}\right)dx\right] + \lim_{\varepsilon\to 0}\left[\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}V(x)\psi(x)\,dx\right] = \lim_{\varepsilon\to 0}\left[\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}E\,\psi(x)\,dx\right]$$

を計算することで，式(6)が成り立つことを示せ.

問 B　文中の空欄 $\boxed{\quad ア \quad}$ ～ $\boxed{\quad ウ \quad}$ に当てはまる数式を示せ.

問 C　式(9)の左辺，右辺それぞれを $y=$(左辺)，$y=$(右辺)とおいて，両者をγを横軸，y を縦軸にとって図示し，$\psi(x)$が偶関数のとき式(9)を満たすγが必ず存在することを示せ.

問 D　一方，$\psi(x)$が奇関数の解は必ず存在するわけではない．問 C と同様のやり方で式(11)を満たすγが存在するためのV_0の条件を示せ.

［問題 2］以下の文章を読み，問 A，B に答えよ．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．

電気双極子モーメント μ を持つ分子が z 軸方向を向く静電場 E 中にある(図 2)．分子は古典的に扱えるとし，その運動と熱力学的性質を調べる．双極子ベクトルを極座標 θ，ϕ で表し，それらに対応する運動量を p_θ，p_ϕ とする．分子の慣性モーメントを I とすると，ハミルトニアンは

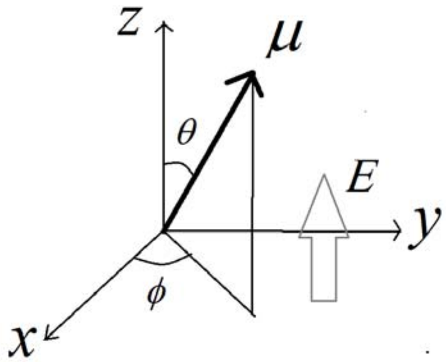

図 2 双極子ベクトルの極座標表示

$$H(p_\theta, \theta, p_\phi, \phi) = \frac{1}{2I}\left(p_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2\theta} p_\phi^2\right) - \mu E \cos\theta \tag{1}$$

で与えられる．

問 A (a) この運動はハミルトンの運動方程式

$$\dot{p}_\theta = -\frac{\partial H}{\partial \theta} \tag{2}$$

$$\dot{\theta} = \frac{\partial H}{\partial p_\theta} \tag{3}$$

$$\dot{p}_\phi = -\frac{\partial H}{\partial \phi} \tag{4}$$

$$\dot{\phi} = \frac{\partial H}{\partial p_\phi} \tag{5}$$

により調べられる．式(1)に対するハミルトンの運動方程式 (2)～(5)を求めよ．

(b) 式(4)，(5)より求めた表式を用い $\Omega = \dot{\phi}\sin^2\theta$ が時間に依存しない定数であることを示せ．

問 B　次にこの双極子の統計力学的性質を分配関数

$$Z = \frac{1}{h^2}\int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{\infty} dp_\theta \int_{-\infty}^{\infty} dp_\phi \exp\left[-\beta H(p_\theta, \theta, p_\phi, \phi)\right] \qquad (6)$$

より調べる．ここで h はプランク定数，β は温度 T とボルツマン定数 k_{B} より $\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$ と定義されている．

(a) 式(6)を p_ϕ と p_θ から順に積分することで，分配関数が

$$Z = \frac{A}{\beta\mu E}\left(\mathrm{e}^{\beta\mu E} - \mathrm{e}^{-\beta\mu E}\right) = \frac{2A}{\beta\mu E}\sinh(\beta\mu E) \qquad (7)$$

と計算されることを示せ．ここで $A = 4\pi^2 I/(\beta h^2)$ とおいた．ガウス積分の公式 $\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-\alpha x^2) = \sqrt{\pi/\alpha}$ を用いてよい．

(b) ヘルムホルツエネルギーは $F = -\beta^{-1}\ln(Z)$ で定義される．電気分極率

$$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial E}\right)_T \qquad (8)$$

が $P = \mu L(\beta\mu E)$ と計算されることを示せ．ここで

$$\begin{aligned} L(x) &= \coth(x) - \frac{1}{x} \\ &= \frac{\mathrm{e}^x + \mathrm{e}^{-x}}{\mathrm{e}^x - \mathrm{e}^{-x}} - \frac{1}{x} \end{aligned} \qquad (9)$$

はランジュバン関数である．

(c) 電気感受率は $\chi = P/E$ と定義される．x が小さい時に $L(x) \approx \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45} + \cdots$ と展開されることを用いて，P を E の最低次まで展開し χ を求めよ．結果はデバイの式と呼ばれる．