［専門科目（物理学）］

［問題 1］以下の文章を読み，問 A～D 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．

質量m，振動数ωをもつ一次元調和振動子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \tag{1}$$

により与えられる．ここで $\hat{p}$は運動量演算子，$\hat{x}$は位置演算子である．

これらの演算子の正準交換関係は

$$[\hat{x}, \hat{p}](\equiv \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) = i\hbar, \tag{2a}$$

$$[\hat{x}, \hat{x}] = [\hat{p}, \hat{p}] = 0 \tag{2b}$$

により与えられる．

問 A　運動量演算子の位置座標表示 $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ を用いて一般の波動関数$\phi(x)$に対し式(2a)の交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}]\phi(x) = i\hbar\phi(x)$ が成り立つことを示せ．

問 B　下式(3)により定義される生成・消滅演算子$\hat{a}^\dagger, \hat{a}$の交換関係$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$を導け．（下式では$\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$とおいた）

$$\hat{a} = \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) \tag{3a}$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right) \tag{3b}$$

また式(1)のハミルトニアンが個数演算子$\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$を用いて

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right) \tag{4}$$

と書かれることを示せ．但し，式(3)より得られる関係式

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \tag{5a}$$

$$\hat{p} = -\frac{i\hbar\alpha}{\sqrt{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \tag{5b}$$

を使ってよい．

問 C　$\psi_n(x)$が個数演算子 $\hat{N}$ に対する固有方程式 $\hat{N}\psi_n(x) = n\psi_n(x)$を満たす場合について，$\hat{a}\psi_n(x)$と$\hat{a}^\dagger\psi_n(x)$も$\hat{N}$の固有関数で，それぞれ固有値は$n-1$と$n+1$であることを示せ．

以降の問いでは， $\hat{a}^\dagger\psi_n(x), \hat{a}\psi_n(x)$が規格化因子も含め

$$\hat{a}^\dagger\psi_n(x) = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x),\ \hat{a}\psi_n(x) = \sqrt{n}\psi_{n-1}(x) \tag{6}$$

と書かれることを使ってよい．但し，$\hat{N}$の固有値nは0または正の整数 （$n = 0,1,2,\cdots$）であり， $\psi_0(x)$に対しては $\hat{a}\psi_0(x) = 0$である．

問 D　式(3a)の$\hat{a}$の固有関数$\varphi_\lambda(x)$について考える. 以下(i)~(iii)に答えよ．但し，φ_λは固有方程式 $\hat{a}\varphi_\lambda = \lambda\varphi_\lambda$を満たし，$\varphi_\lambda(x) = N_{|\lambda|}e^{\lambda\hat{a}^\dagger}\psi_0(x)$と書けることが知られている（$e^{\lambda\hat{a}^\dagger} \equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\lambda\hat{a}^\dagger)^n}{n!}$ とし， $N_{|\lambda|}$は規格化因子である）．$\hat{a}$は非エルミート演算子であるため固有値λは一般に複素数である．

(i)　式(3a)の$\hat{a}$について, 座標x を$\xi \equiv \alpha x$に変換しξのみの式に書き換えよ.

(ii)　(i)で得られた表式を用いると固有方程式 $\hat{a}\varphi_\lambda = \lambda\varphi_\lambda$は ξ についての微分方程式になり，その一般解は$\varphi_\lambda(\xi) = C_\lambda e^{g(\xi-\sqrt{2}\lambda)}$の形で表される（但し，$C_\lambda$は一般解の任意定数）．関数$g(\xi-\sqrt{2}\lambda)$の表式を求めよ．

(iii)　(ii)の解の形から，一次元調和振動子の基底状態 $\psi_0(x)$（$\hat{a}\psi_0(x) = 0$）を平行移動したものも，$\hat{a}$の固有関数になっていることがわかる．時刻$t = 0$における始状態を$\varphi_{\lambda_0}(x)$とすると，式(4)のハミルトニアンのもとでの時刻$t(> 0)$における波動関数$\Phi(x,t)$は，$\hat{a}$ の固有関数$\varphi_\lambda(x)$の λ が$\lambda(t) = \lambda_0 e^{-i\omega t}$のように時刻$t$に依存した関数$\varphi_{\lambda(t)}(x)$を用いて以下のように表されることを示せ.

$$\Phi(x,t) = e^{-\frac{i\omega t}{2}}\varphi_{\lambda(t)}(x) \quad \left(\text{但し，} i\hbar\frac{d}{dt}\Phi(x,t) = \hat{H}\Phi(x,t)\right)$$

［問題 2］ 以下の文章を読み，問 A〜D に答えよ．解答用紙には必要に応じて結果だけではなく，計算過程も記述すること．

半径 R，高さ L の円筒容器が，水平方向に挿入された無限に薄い板により 2 分割されている．仕切られた空間は，それぞれ単原子分子の理想気体 A（質量 m_{A}，個数 n_{A}）と B（質量 m_{B}，個数 n_{B}）で満たされている．この時の 2 つの気体の温度と圧力は等しく T，P とする．A と B の気体の占める体積を V_{A}，V_{B} とするとその割合は $V_{\mathrm{A}}:V_{\mathrm{B}} =$ $\boxed{\text{I}}$ である．

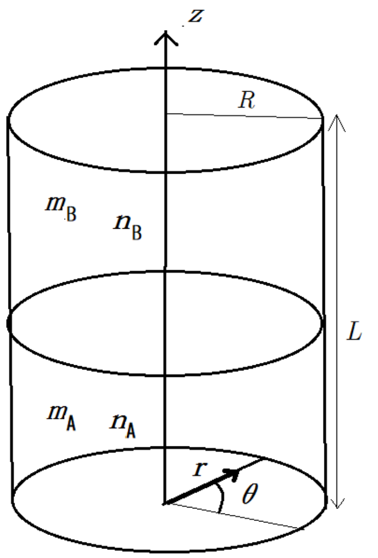

図１ 仕切られた円筒容器

気体 A の分配関数（Z_{sep}^{A}）は円柱座標系での原子 j の座標を r_{A}^j，θ_{A}^j，z_{A}^j，運動量を $p_{r_{\mathrm{A}}}^j$，$p_{\theta_{\mathrm{A}}}^j$，$p_{z_{\mathrm{A}}}^j$ とすると，位相空間の体積積分は正準変換で不変であるから，

$$Z_{sep}^{\mathrm{A}} = \frac{1}{n_{\mathrm{A}}!h^{3n_{\mathrm{A}}}} \prod_{j=1}^{n_{\mathrm{A}}} \int_0^R dr_{\mathrm{A}}^j \int_0^{2\pi} d\theta_{\mathrm{A}}^j \int_0^{\boxed{\text{II}}} dz_{\mathrm{A}}^j \int_{-\infty}^{\infty} dp_{r_{\mathrm{A}}}^j \int_{-\infty}^{\infty} dp_{\theta_{\mathrm{A}}}^j \int_{-\infty}^{\infty} dp_{z_{\mathrm{A}}}^j \, \mathrm{e}^{-\frac{1}{kT}H_{\mathrm{A}}(\mathbf{p}_{\mathrm{A}}^j,\mathbf{q}_{\mathrm{A}}^j)} \tag{1}$$

より計算される．ここで，h はプランク定数，k はボルツマン定数，気体 A の原子 j のハミルトニアン $H_{\mathrm{A}}(\mathbf{p}_{\mathrm{A}}^j,\mathbf{q}_{\mathrm{A}}^j) \equiv H_{\mathrm{A}}(p_{r_{\mathrm{A}}}^j, p_{\theta_{\mathrm{A}}}^j, p_{z_{\mathrm{A}}}^j, r_{\mathrm{A}}^j, \theta_{\mathrm{A}}^j, z_{\mathrm{A}}^j)$ は

$$H_{\mathrm{A}}(\mathbf{p}_{\mathrm{A}}^j,\mathbf{q}_{\mathrm{A}}^j) = \frac{1}{2m_{\mathrm{A}}}\left[\left(p_{r_{\mathrm{A}}}^j\right)^2 + \left(\frac{p_{\theta_{\mathrm{A}}}^j}{r_{\mathrm{A}}^j}\right)^2 + \left(p_{z_{\mathrm{A}}}^j\right)^2\right] \tag{2}$$

で与えられる．気体 A の分配関数は体積を V_{A} とおくと，公式 $\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(-\alpha x^2) = \sqrt{\pi/\alpha}$ を用いて $Z_{sep}^{\mathrm{A}} =$ $\boxed{\text{ア}}$ と計算される．分配関数 Z に対してヘルムホルツエネルギーは $F = -kT(\ln Z)$，圧力は $P = -\partial F/\partial V$，エントロピーは $S = -\partial F/\partial T$ と定義されている．公式 $\ln N! = N\ln N - N$（N は整数で

N　1）を用いると，気体Ａのヘルムホルツエネルギーは$F_{sep}^{\mathrm{A}}=$ $\boxed{\text{イ}}$，圧力は$P_{sep}^{\mathrm{A}}=$ $\boxed{\text{ウ}}$，エントロピーは$S_{sep}^{\mathrm{A}}=n_{\mathrm{A}}k\left(\dfrac{5}{2}-\ln n_{\mathrm{A}}+\ln\dfrac{V_{\mathrm{A}}(2\pi m_{\mathrm{A}}kT)^{3/2}}{h^{3}}\right)$と計算される．

次に仕切り板を取り除き，圧力や温度を保ったまま２つの気体を完全に混合させた．２つの気体原子の間に相互作用がないとすると，この時の混合気体の分配関数は $Z_{mix}=Z_{mix}^{\mathrm{A}}Z_{mix}^{\mathrm{B}}$ および

$$
\begin{aligned}
Z_{mix}^{\mathrm{A}}&=\frac{1}{n_{\mathrm{A}}!\,h^{3n_{\mathrm{A}}}}\prod_{j=1}^{n_{\mathrm{A}}}\int_{0}^{R}dr_{\mathrm{A}}^{j}\int_{0}^{2\pi}d\theta_{\mathrm{A}}^{j}\int_{0}^{\boxed{\mathrm{III}}}dz_{\mathrm{A}}^{j}\int_{-\infty}^{\infty}dp_{r_{\mathrm{A}}}^{j}\int_{-\infty}^{\infty}dp_{\theta_{\mathrm{A}}}^{j}\int_{-\infty}^{\infty}dp_{z_{\mathrm{A}}}^{j}\ \mathrm{e}^{-\frac{1}{kT}H_{\mathrm{A}}(\mathbf{p}_{\mathrm{A}}^{j},\mathbf{q}_{\mathrm{A}}^{j})}\\
Z_{mix}^{\mathrm{B}}&=\frac{1}{n_{\mathrm{B}}!\,h^{3n_{\mathrm{B}}}}\prod_{j=1}^{n_{\mathrm{B}}}\int_{0}^{R}dr_{\mathrm{B}}^{j}\int_{0}^{2\pi}d\theta_{\mathrm{B}}^{j}\int_{0}^{\boxed{\mathrm{IV}}}dz_{\mathrm{B}}^{j}\int_{-\infty}^{\infty}dp_{r_{\mathrm{B}}}^{j}\int_{-\infty}^{\infty}dp_{\theta_{\mathrm{B}}}^{j}\int_{-\infty}^{\infty}dp_{z_{\mathrm{B}}}^{j}\ \mathrm{e}^{-\frac{1}{kT}H_{\mathrm{B}}(\mathbf{p}_{\mathrm{B}}^{j},\mathbf{q}_{\mathrm{B}}^{j})}
\end{aligned}
\qquad (3)
$$

より計算される．円筒容器の全体積をVとすると，全体のヘルムホルツエネルギーは$F_{mix}=$ $\boxed{\text{エ}}$，エントロピーは$S_{mix}=$ $\boxed{\text{オ}}$ と計算される．

問 A　文中の空欄 $\boxed{\mathrm{I}}$～$\boxed{\mathrm{IV}}$ をn_{A}，n_{B}，Lを適宜用いて記せ．

問 B　文中の空欄 $\boxed{\text{ア}}$～$\boxed{\text{オ}}$ に当てはまる数字や数式を記せ．

問 C　A，B を混合する前後で変化したエントロピーは，分離状態でのエントロピーをS_{sep}とすると，$\Delta S=S_{mix}-S_{sep}$と表される．ΔSをn_{A}，n_{B}，V_{A}，V_{B}を用いて表し，その正負よりエントロピーの増減を調べよ．

ここで，温度を保ちながら，円筒容器と中の気体を一定の角速度 Ω で，一様に回転させた．この時気体Ａの原子jのハミルトニアンを，回転座標系上にとった円柱座標で表すと$H_{\mathrm{A}}'(\mathbf{p}_{\mathrm{A}}^{j},\mathbf{q}_{\mathrm{A}}^{j})=H_{\mathrm{A}}(\mathbf{p}_{\mathrm{A}}^{j},\mathbf{q}_{\mathrm{A}}^{j})-\Omega\, p_{\theta_{\mathrm{A}}}^{j}$であり，完全平方形に直すと

$$H'_{\mathrm{A}}(\mathbf{p}^j_{\mathrm{A}},\mathbf{q}^j_{\mathrm{A}})=\frac{1}{2m_{\mathrm{A}}}\left[\left(p^j_{r_{\mathrm{A}}}\right)^2+\left(\frac{p^j_{\theta_{\mathrm{A}}}}{r^j_{\mathrm{A}}}-m_{\mathrm{A}}r^j_{\mathrm{A}}\Omega\right)^2+\left(p^j_{z_{\mathrm{A}}}\right)^2\right]-\frac{1}{2}m_{\mathrm{A}}r^{j2}_{\mathrm{A}}\Omega^2 \tag{4}$$

である．$\xi=r^2$と変数変換し，$2rdr=d\xi$に注意し，分配関数を計算すると$Z'^{\mathrm{A}}_{mix}=$ $\boxed{\quad カ \quad}$，ヘルムホルツエネルギーは$F'^{\mathrm{A}}_{mix}=$ $\boxed{\quad キ \quad}$となる．$V=\pi LR^2$より$dV=$ $\boxed{\quad ク \quad}$ dRであるから，円筒の側面に及ぼす気体 A の分圧$P'^{\mathrm{A}}_{mix}=-\partial F'^{\mathrm{A}}_{mix}/\partial V$は，$P'^{\mathrm{A}}_{mix}=$ $\boxed{\quad ケ \quad}$である．

問 D　文中の空欄 $\boxed{\quad カ \quad}$ ～ $\boxed{\quad ケ \quad}$ に当てはまる式を記せ.