［専門科目（物理学）］（全２題）

［問題 1］以下の文章を読み，問 A～F に答えよ．ただし，解答用紙には導出過程も記述すること．また，ディラック定数 $\hbar$ は 1 とする．

3 次元直交座標系の軌道角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{l}}$ の各成分 $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$ は，位置演算子 $\hat{\boldsymbol{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ と運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ の外積 $\hat{\boldsymbol{l}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}$ として与えられる．このとき $\hat{\boldsymbol{r}}$，$\hat{\boldsymbol{p}}$ の各成分間の交換関係から，以下の交換関係が導かれる．

$$[\hat{l}_x, \hat{l}_y] = i\hat{l}_z, \qquad [\hat{l}_y, \hat{l}_z] = i\hat{l}_x, \qquad [\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hat{l}_y$$

また，$\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$を用いて定義される次の演算子

$$\hat{\boldsymbol{l}}^2 = \hat{l}_x\hat{l}_x + \hat{l}_y\hat{l}_y + \hat{l}_z\hat{l}_z, \qquad \hat{l}_+ = \hat{l}_x + i\hat{l}_y, \qquad \hat{l}_- = \hat{l}_x - i\hat{l}_y (= \hat{l}_+^\dagger)$$

を考える．$\hat{\boldsymbol{l}}^2$ と $\hat{l}_z$ は交換可能であり，その同時固有関数を $\psi_{j,m}^z(x, y, z)$と記す．以降では座標(x, y, z)を省略し，固有方程式は $\hat{\boldsymbol{l}}^2\psi_{j,m}^z = j(j+1)\psi_{j,m}^z$，$\hat{l}_z\psi_{j,m}^z = m\psi_{j,m}^z$と実数 j, m を用いて表され，$\psi_{j,m}^z$ は規格化されているものとする．

問 A　演算子 $\hat{\boldsymbol{l}}^2$ は $\hat{\boldsymbol{l}}^2 = \hat{l}_+\hat{l}_- + \boxed{\quad ア \quad}$ の形で表わされる．空欄 $\boxed{\quad ア \quad}$ に入る適切な式を $\hat{l}_z$ を用いて答えよ．

問 B　$\hat{l}_z$ の固有関数 $\psi_{j,m}^z$に $\hat{l}_+$を作用させた関数 $\hat{l}_+\psi_{j,m}^z$ も $\hat{l}_z$ の固有関数となることを $[\hat{l}_z, \hat{l}_+] = \hat{l}_+$ を用いて示せ．また，そのときの固有値を求めよ．

問 C　$\hat{l}_-^\dagger = \hat{l}_+$ より，$\hat{l}_+\psi_{j,m}^z$のノルムの 2 乗は$\left(j + \boxed{\ イ\ }\right)\left(j - \boxed{\ ウ\ }\right)$の形で表わされる．空欄 $\boxed{\ イ\ }$，$\boxed{\ ウ\ }$ に入る適切な式を答えよ．

電子スピン演算子 $\hat{\boldsymbol{s}}$ の各成分 $\hat{s}_x, \hat{s}_y, \hat{s}_z$ も上記の $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$と同じ交換関係を満たす．電子は $j = 1/2$ の角運動量を持つことから，そのスピン波動関数は

$$\hat{\boldsymbol{s}}^2\theta_{1/2,m}^z(\sigma) = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\theta_{1/2,m}^z(\sigma), \qquad \hat{s}_z\theta_{1/2,m}^z(\sigma) = m\theta_{1/2,m}^z(\sigma)$$

を満たす 2 つの固有関数 $\alpha(\sigma) \equiv \theta_{1/2,+1/2}^z(\sigma)$ と $\beta(\sigma) \equiv \theta_{1/2,-1/2}^z(\sigma)$ を用いて一

般に $\varphi(\sigma) = c_1\,\alpha(\sigma) + c_2\,\beta(\sigma)$ と表される. ただし, σ はスピン座標を表し, $\alpha(\sigma)$, $\beta(\sigma)$ は規格化された関数とする．演算子 $\hat{O}$ を $\varphi(\sigma)$ に作用させて生成する関数 $\varphi'(\sigma) = \hat{O}\varphi(\sigma)$ を， $\varphi'(\sigma) = c_1'\alpha(\sigma) + c_2'\beta(\sigma)$ と表し，これをスピン波動関数の係数を成分とするベクトル $\boldsymbol{c}$ から $\boldsymbol{c}'$ への変換と考えれば，演算子の作用は

$$\begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{21} & O_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

のように2×2の行列との積として表わされる．この行列 $\boldsymbol{O}$ を $\hat{O}$ の行列表示と呼ぶ．例えば，演算子 $\hat{s}_x, \hat{s}_z$ の行列表示はそれぞれ以下の通りである．

$$\mathbf{s}_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{s}_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

問D　演算子 $\hat{s}_y$ の行列表示 $\mathbf{s}_y$を記せ. ただし, 交換関係 $[\hat{s}_z, \hat{s}_x] = i\hat{s}_y$ を用いよ.

問E　静磁場 $\boldsymbol{B}(\phi) = B_0(\sin\phi, 0, \cos\phi), 0 \le \phi < 2\pi$ の中での電子スピンの運動を考える. ハミルトニアンは$\hat{H}_{B_0} = 2\mu_{\mathrm{B}}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{s} = 2\mu_{\mathrm{B}}B_0(\sin\phi\cdot\hat{s}_x + \cos\phi\cdot\hat{s}_z)$ で与えられるものとする．ハミルトニアン $\hat{H}_{B_0}$ の行列表示を求め，その固有値を全て求めよ.

問Ｆ　前問Ｅの $\boldsymbol{B}(\phi)$ にて $\phi = \pi/2$とおいた静磁場のもと，時刻 $t = 0$ において $\hat{s}_z$ の固有状態 $\alpha(\sigma)$ にある系が，ハミルトニアン $\hat{H}_{B_0}$ のもとシュレディンガー方程式に従い時間発展するとき，時刻 $t = \tau\,(> 0)$ での波動関数 $\varphi(\sigma,\tau) = c_1(\tau)\alpha(\sigma) + c_2(\tau)\beta(\sigma)$ の係数 c_1, c_2を τ の関数として表せ．ただし，形式解が $\varphi(\sigma,\tau) = \exp\left[-i\hat{H}_{B_0}\tau\right]\varphi(\sigma,0)$ として与えられ，さらにエルミート行列 $\mathbf{H}$ の指数関数の計算では, 対角化 $\mathbf{H} = \mathbf{U}\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}\mathbf{U}^\dagger$ による $e^{\mathbf{H}} = \sum_{n=0}^{\infty}\mathbf{H}^n/n! = \mathbf{U}\begin{pmatrix} e^{\lambda_1} & 0 \\ 0 & e^{\lambda_2} \end{pmatrix}\mathbf{U}^\dagger$ という関係式を用いてよい.

［問題２］以下の文章を読み，問 A～D に答えよ．

系の熱力学的状態は，系に含まれる微視的状態のエネルギーにより定義される分配関数を用いて調べることができる．微視的状態 i のエネルギーを E_i とすると，系の分配関数 Z は次式で与えられる．

$$Z = \sum_i \exp\left(-\frac{E_i}{k_B T}\right) \tag{1}$$

ここで，k_B はボルツマン定数，T は温度である．また，和は系に含まれるすべての可能な微視的状態に対して取られる．この分配関数により，系のヘルムホルツ自由エネルギー F が与えられる．ヘルムホルツ自由エネルギー F は温度 T と体積 V の関数であり，その微小変化 dF は次式で表される．

$$dF = -SdT - pdV \tag{2}$$

ここで S はエントロピー，p は圧力である．系の内部エネルギー U は，F から次の関係式により得られる．

$$U = F + TS \tag{3}$$

さて，以下の原子の結晶の熱力学的状態を考える．結晶は N 個の原子からなり，温度 T の熱浴に接している．原子数 N は変化しないとする．それぞれの原子は 1 個の基底状態と 1 個の励起状態の合計 2 状態のみを取り，基底状態のエネルギーは 0，励起状態のエネルギーは ε である．ここで，励起状態のエネルギー ε は結晶内の相互作用により次式のように体積 V に依存するとする．

$$\varepsilon = \frac{a}{v} \tag{4}$$

$$v = \frac{V}{N} \tag{5}$$

ここで，a は正の定数である．すなわち，結晶の体積が大きくなると，励起状態のエネルギーが下がる．それぞれの原子 1 個の分配関数は $\boxed{\text{ア}}$ であり，結晶内のそれぞれの原子の状態分布は独立とすると，結晶の分配関数は $\boxed{\text{イ}}$ となる．この分配関数より，結晶のヘルムホルツ自由エネルギーが次式で与えられる．

$$F = -Nk_{\mathrm{B}}T\ln\left[1+\exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_{\mathrm{B}}T}\right)\right] \tag{6}$$

問 A 文中の空欄 $\boxed{\text{ア}}$ に当てはまる原子 1 個の分配関数の式を，ε，k_{B}，及び T を用いて記せ.

問 B 文中の空欄 $\boxed{\text{イ}}$ に当てはまる結晶の分配関数の式を，ε，k_{B}，T，及び N を用いて記せ.

問 C 結晶の F が式 (6) で与えられるとき, 内部エネルギー U を表す式を, k_{B}，T，N，a，及び V を用いて記せ．導出過程も記述すること．

問 D 結晶の F が式 (6) で与えられるとき，圧力 p 及び体積熱膨張率 γ に関して，以下の (a)～(c) に答えよ．導出過程も記述すること．

(a) 圧力 p を表す式を，k_{B}，T，N，a，及び V を用いて記せ.

(b) 高温のとき（$\varepsilon << k_{\mathrm{B}}T$）

$$e^{\frac{\varepsilon}{k_B T}} \cong 1+\frac{\varepsilon}{k_B T} \tag{7}$$

と近似できる．近似式 (7) を用いると，$1/p$ が次式で表せる.

$$\frac{1}{p} = \boxed{\text{ウ}} + \boxed{\text{エ}} \times \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T} \tag{8}$$

空欄 $\boxed{\text{ウ}}$ 及び $\boxed{\text{エ}}$ に当てはまる式を N, a, 及び V を用いて記せ.

(c) 体積熱膨張率 γ は次式で定義される.

$$\gamma = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \tag{9}$$

式 (8) の両辺を p を固定して T で偏微分することにより，次の γ の表式が得られる.

$$\gamma = \frac{1}{1+\boxed{\text{オ}}} \times \frac{1}{T} \tag{10}$$

空欄 $\boxed{\text{オ}}$ に当てはまる式を k_{B}，T，N，a，及び V を用いて記せ.