［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．$\hbar$は，Planck 定数hを用いて$\hbar = h/(2\pi)$と表される．

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の粒子の一次元運動は，以下の Schrödinger 方程式により記述される．

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

ここで$\psi(x)$は波動関数，Eは粒子のエネルギーである．まず図 1 のように，ポテンシャル$V(x)$が

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \le x \le a) \\ \infty & (x < 0, a < x) \end{cases} \tag{2}$$

で与えられる（$a > 0$）場合を考える． $k = \sqrt{2mE}/\hbar$とおくと（$E > 0$とする），$0 \le x \le a$の領域における式(1)の一般解は，二つの任意定数A，Bを用いて

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx \tag{3}$$

と表せる．$x = 0$，$x = a$における境界条件および規格化条件から，量子数nによりラベル付けされる波動関数$\psi_n^{(0)}(x)$および粒子のエネルギー$E_n^{(0)}$はそれぞれ

$$\psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\boxed{\quad ア \quad} \times x\right) \tag{4}$$

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2m} \times \boxed{\quad イ \quad} \tag{5}$$

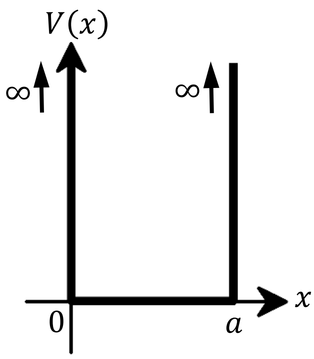


図 1　式(2)で与えられる$V(x)$の概形

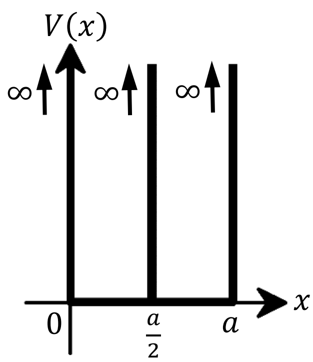


図 2　式(6)で与えられる$V(x)$の概形

と表される（$n = 1, 2, 3, \cdots$）.

次に図 2 のように，ポテンシャル$V(x)$が

$$V(x) = \begin{cases} \beta\delta\left(x - \dfrac{a}{2}\right) & (0 \le x \le a) \\ \infty & (x < 0, a < x) \end{cases} \tag{6}$$

で与えられる場合を考える（$a > 0$かつ$\beta \ge 0$）. ここで$\delta(x)$はデルタ関数であり，任意の実関数$f(x)$に対して

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - c)\mathrm{d}x = f(c) \tag{7}$$

を満たす．①<u>βが十分に小さく</u>

$$V'(x) = \beta\delta\left(x - \frac{a}{2}\right) \tag{8}$$

を摂動と見なせるとき，式(4)，式(5)で与えられている非摂動の波動関数$\psi_n^{(0)}(x)$およびエネルギー$E_n^{(0)}$を使うと，②<u>エネルギーに対する摂動の一次の補正</u>$E_n^{(1)}$は

$$E_n^{(1)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^{(0)}(x)V'(x)\psi_n^{(0)}(x)\mathrm{d}x \tag{9}$$

で与えられる．従って$E_n^{(1)}$は，nが $\boxed{\text{ウ}}$ のとき 0，$\boxed{\text{エ}}$ のとき $\boxed{\text{オ}}$ である．また，波動関数に対する摂動の一次の補正$\psi_n^{(1)}(x)$は

$$\psi_n^{(1)}(x) = \sum_{j \neq n} \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_j^{(0)}(x)V'(x)\psi_n^{(0)}(x)\mathrm{d}x}{E_n^{(0)} - E_j^{(0)}} \psi_j^{(0)}(x) \tag{10}$$

で与えられる．

問 A　空欄 $\boxed{\text{ア}}$，$\boxed{\text{イ}}$ に入る適切な数式をa，nを用いて答えよ．

問 B　下線部②に関して，以下の(a)および(b)に答えよ．

(a) 空欄 $\boxed{\text{ウ}}$，$\boxed{\text{エ}}$ に入るのは，「偶数」「奇数」どちらかの語句である. 空欄 $\boxed{\text{ウ}}$，$\boxed{\text{エ}}$ に入る適切な語句をそれぞれ答えよ．

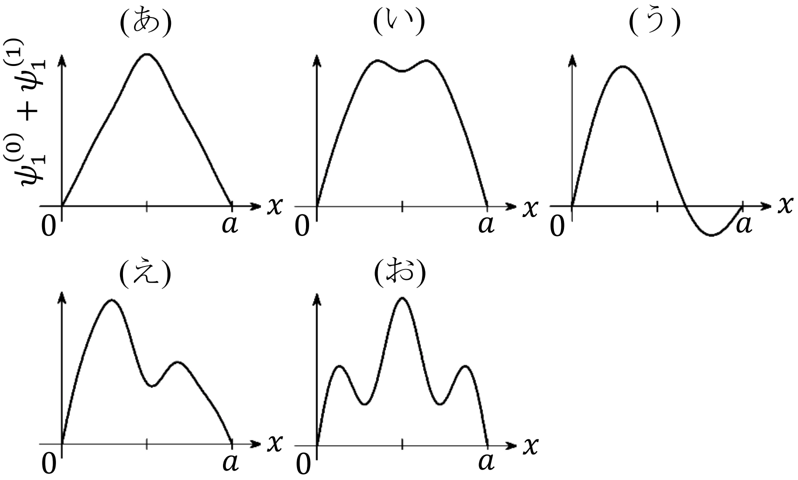
(b) 空欄 $\boxed{\text{オ}}$ に入る適切な数式をa，βを用いて答えよ．

問 C　基底状態（$n = 1$）の波動関数に対する摂動の一次の補正$\psi_1^{(1)}(x)$について，以下の(a)および(b)に答えよ．

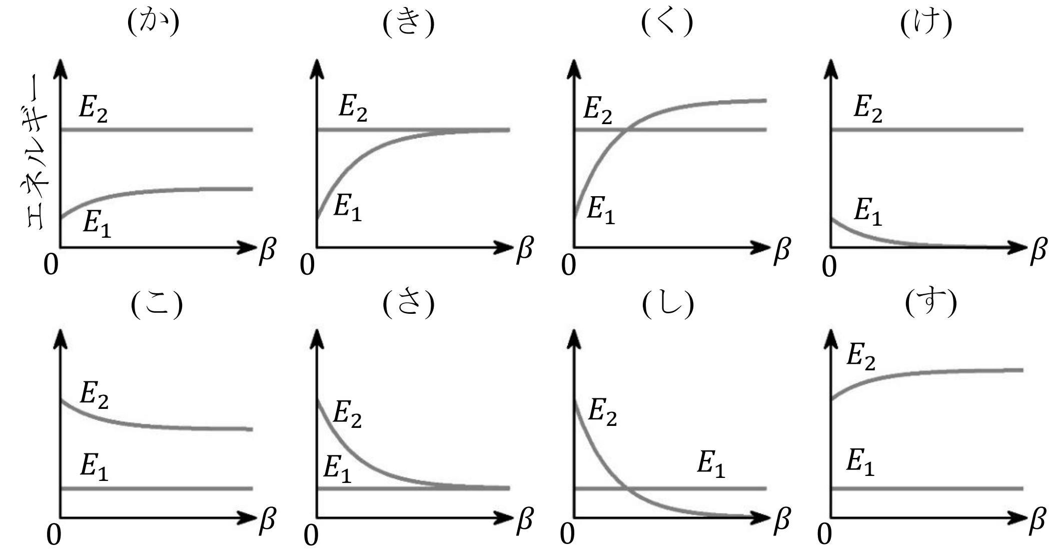
(a) jについての和のうち，始めのいくつかの項を以下のように整理した．空欄 $\boxed{\text{カ}}$，$\boxed{\text{キ}}$ に入る適切な数または数式を答えよ．

$$\psi_1^{(1)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \times \boxed{\text{カ}} \left[\sin\left(\frac{3\pi}{a}x\right) + \boxed{\text{キ}} \times \sin\left(\frac{5\pi}{a}x\right) + \cdots\right]$$

(b) (a)の結果に基づき，摂動の一次の補正を考慮した波動関数（$\psi_1^{(0)}(x) + \psi_1^{(1)}(x)$）の概形を最も適切に表している図を，以下の(あ)～(お)から選択して答えよ．



問 D　下線部①に関して，βが大きくなるにつれて$V'(x)$を摂動と見なせなくなる．基底状態のエネルギーE_1および第一励起状態のエネルギーE_2について，β依存性として最も適切なものを，以下の(か)～(す)から選択して答えよ．



［問題２］以下の文章を読み，問 A〜I に答えよ．ただし，解答用紙には導出過程も記述すること．

平衡状態において理想気体の 1 体速度分布関数となる Maxwell の速度分布関数を導出しよう．N個の粒子を速度空間中の微小領域 1 にN_1個，微小領域 2 にN_2個，…，微小領域iにN_i個，…と配分する組み合わせの数Wは

$$W = \frac{N!}{N_1!\,N_2!\cdots N_i!\cdots}$$

と表せる．組み合わせの数が最大になる場合が平衡状態に相当する．ここで全粒子数Nと全エネルギーEは常に一定であり，微小領域i中の粒子 1 個当たりの運動エネルギーをE_iとすると，微小変化δN_iに対するふたつの束縛条件

$$\delta N = \sum_i \boxed{\quad ア \quad} = 0 \qquad (1)$$

$$\delta E = \sum_i \boxed{\quad イ \quad} = 0 \qquad (2)$$

が存在する．NとN_iが十分に大きいとして，単調増加関数$\ln W$に対して Stirling の公式

$$\ln N! \cong N \ln N - N$$

を用いると，

$$\ln W \cong \boxed{\quad ウ \quad}$$

である．拘束条件(1)と(2)の下で組み合わせの数を最大にするため，Lagrange の未定乗数法を用いる．未定乗数αと$-\beta$を導入して，

$$\delta \ln W + \alpha\delta N - \beta\delta E$$

に変分原理を施すと，

$$N_i = \boxed{\quad エ \quad}$$

を得る．微小領域iの体積をV，理想気体の密度をn，気体粒子の質量をm，粒子

速度を$\boldsymbol{v}=(v_x, v_y, v_z)$として，平衡状態の 1 体速度分布関数$f_{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{v})=N_i/V$の規格化条件を

$$n=\int f_{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{v})\mathrm{d}\boldsymbol{v}$$

と課す．さらに温度を，Boltzmann 定数k_{B}を用いて

$$\frac{3nk_{\mathrm{B}}T}{2}=\int\frac{m\boldsymbol{v}^2}{2}f_{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{v})\mathrm{d}\boldsymbol{v}$$

で定義すると，未定乗数αとβが求まり，Maxwell の速度分布関数は$f_{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{v})=$ [オ] と導出できる．

問 A　空欄 [ア] および [イ] に入る適切な式を答えよ．

問 B　空欄 [ウ] に入る適切な式を，NおよびN_iを用いて答えよ．

問 C　空欄 [エ] に入る適切な式を，α，β，E_iを用いて答えよ．

問 D　空欄 [オ] に入る適切な式を，n，m，k_{B}，T，$\boldsymbol{v}$を用いて答えよ．

ここで，以下の Gauss 積分の公式を用いてよい．

$$\int\exp[-A\,\boldsymbol{v}^2]\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}=\left(\frac{\pi}{A}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$$\int\boldsymbol{v}^2\exp[-A\,\boldsymbol{v}^2]\,\mathrm{d}\boldsymbol{v}=\frac{3}{2A}\left(\frac{\pi}{A}\right)^{\frac{3}{2}}$$