物 理 学 B I

次の設問に答えなさい。

質量およびバネ定数がそれぞれ m、$m\omega^2$ で与えられる調和振動子がある。この調和振動子のハミルトニアンは、座標および運動量の演算子 $\hat{x}$ および $\hat{p}$ を用いて

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

と表される。ここで、$\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ であり（$\hbar$ はプランク定数 h を用い、$\hbar = h/(2\pi)$ で表される定数)、$\hat{x}$ と $\hat{p}$ により、以下の新しい演算子を定義する。

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

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

（1） $\hat{x}$ と $\hat{p}$ の交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ を用いて、$\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ の交換関係 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]$ を求めなさい。

（2） 式(I)のハミルトニアンが $\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$ と表されることを示しなさい。

（3） $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ を $\hat{N}$ と表し、$\hat{N}$ の規格化された固有関数と対応する固有値を ϕ_n、n とすると、

$$\hat{N}\phi_n = n\phi_n \tag{IV}$$

と表される。この時、

$$\hat{N}\hat{a}\phi_n = (n-1)\hat{a}\phi_n \tag{V}$$

と表されることを示しなさい。

（4） 式(V)は、 $\hat{a}\phi_n$ が $\hat{N}$ の固有関数であることを示している。調和振動子の解の存在条件から、n は 0 以上の整数であり、$n = 0$ に対しては、

$$\hat{a}\phi_0 = 0 \tag{VI}$$

となる。この時、式(VI)を満たす ϕ_0 は、x に関するガウス関数であることを示しなさい。

（5） ϕ_n に $\hat{a}$ および $\hat{a}^\dagger$ を作用させると、それぞれ、

$$\hat{a}\phi_n = \sqrt{n}\,\phi_{n-1}, \tag{VII}$$

$$\hat{a}^\dagger\phi_n = \sqrt{n+1}\,\phi_{n+1} \tag{VIII}$$

となることが知られている。この時、固有関数系 ϕ_n の規格直交性を用いて、

$$\langle x\rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty}\phi_n^*(x)\,\hat{x}\,\phi_n(x)dx, \tag{IX}$$

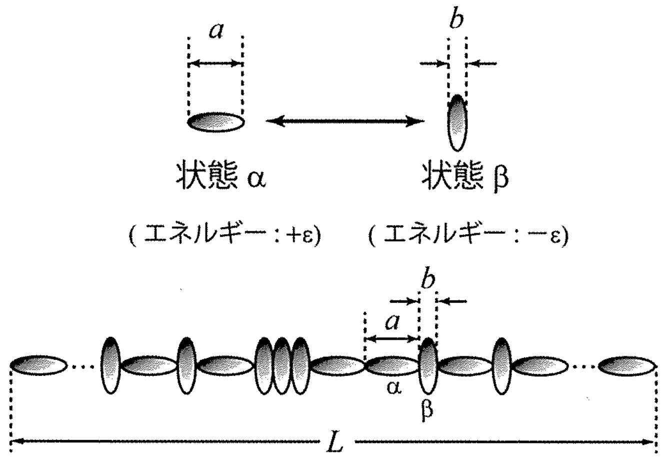
$$\langle x^2\rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty}\phi_n^*(x)\,\hat{x}^2\,\phi_n(x)dx \tag{X}$$

をそれぞれ求めなさい。

物理学 B Ⅱ

次の設問に答えなさい。

下図のようにN個の単量体が直線的に連結した鎖状分子を考える。各単量体は下図のように自由に変形し、長さaの状態 α（エネルギー： +ε）か長さbの状態 β（エネルギー：−ε）のいずれかを、隣り合う単量体とは独立にとることができるとする。鎖状分子が孤立した状態にあり、熱平衡状態（ミクロカノニカル分布）に達している場合を考える。ボルツマン定数はk_Bとする。



（1） N_α個がα、N_β個がβの状態にいる場合を考える（$N = N_\alpha + N_\beta$）。鎖状分子の長さLとエネルギーE_Lを求めなさい。

（2） この状態の熱力学的重率 $W(N_\alpha, N_\beta)$を求めなさい。

（3） 鎖状分子のエントロピーSが次のようになることを示しなさい。

$$S = -k_B\left\{N_\alpha \log\frac{N_\alpha}{N} + N_\beta \log\frac{N_\beta}{N}\right\}$$

Stirling の公式、$\log n! = n\log n - n \ (n \gg 1)$を用いてよい。

つぎに、鎖状分子が温度 T の熱浴に接していて、温度一定の状態におかれている場合（カノニカル分布）を考える。一般に状態 γ のエネルギーが E_γ とあらわされる場合、温度Tのカノニカルアンサンブルにおける分配関数Zは

$$Z = \sum_\gamma \exp\left(-\frac{E_\gamma}{k_B T}\right)$$

で与えられる。

次ページにつづく

（4）　一つの単量体の分配関数 Z_1 を示し、さらに、N 個の単量体からなる鎖状分子の分配関数 Z_N を求めなさい。

（5）　分配関数 Z_N より、Helmholtz の自由エネルギー $F = -k_B T \log Z_N$、エントロピー $S = -\partial F / \partial T$、系の内部エネルギー $U = F + ST$ を求めなさい。

（6）　比熱 $C = \partial U / \partial T$ を求め、温度の関数として図示しなさい。ただし、縦軸を C/Nk_B、横軸を $k_B T/\varepsilon$ とせよ。