物理学 B Ⅰ

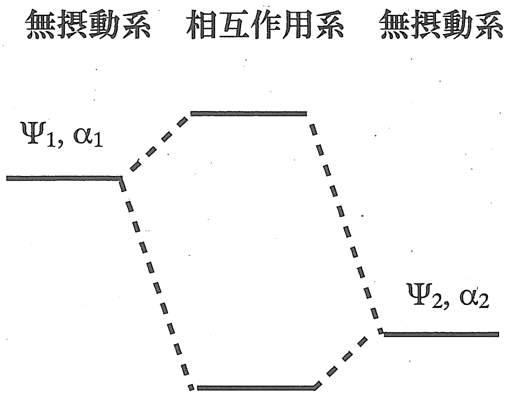
量子力学に関する以下の設問に答えなさい。

下図のような相互作用系を考える。この相互作用系のハミルトニアンを

$$H = H_0 + H'$$

とおく。H_0は無摂動系のハミルトニアンであり、H'は相互作用による摂動を表す。ここで、無摂動系の規格化された固有関数Ψ_1、Ψ_2とエネルギー固有値α_1、α_2とが与えられており、

$$H_0\Psi_1 = \alpha_1\Psi_1$$
$$H_0\Psi_2 = \alpha_2\Psi_2 \quad (\alpha_2 < \alpha_1 < 0)$$



とする。また、摂動による相互作用は、

$$\int \Psi_1^* H' \Psi_2 \, d\tau = \int \Psi_2^* H' \Psi_1 \, d\tau = \beta \quad (\beta < 0)$$

で与えられるものとし、

$$\int \Psi_1^* H_0 \Psi_2 \, d\tau = \int \Psi_2^* H_0 \Psi_1 \, d\tau = 0$$
$$\int \Psi_1^* H' \Psi_1 \, d\tau = \int \Psi_2^* H' \Psi_2 \, d\tau = 0$$
$$\int \Psi_1^* \Psi_2 \, d\tau = 0$$

とする。以下の問いに答えよ。

（1）相互作用系の固有関数を$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$とおき、エネルギーに関する変分原理から$c_1$、$c_2$の満たす方程式を導け。

（2）（1）の方程式を解き、相互作用系のエネルギー固有値を求めよ。

（3）xが十分に小さい時（$|x| << 1$）、

$$\sqrt{1+x} = 1 + \frac{1}{2}x$$

と近似することができる。$|\beta| << |\alpha_1 - \alpha_2|$であるとき、相互作用系のエネルギー固有値を求めよ。

（4）（3）の場合に、相互作用系の固有関数を求め、その性質を無摂動系の固有関数と比較せよ。なお、相互作用系の固有関数は規格化しなくてもよい。

物　理　学　BⅡ

統計力学に関する以下の設問に答えなさい。

大きさμの電気双極子モーメントをもつ分子がある。この分子N個からなる体積V、温度Tの系に関する以下の設問に答えなさい。ただし、これらの分子は互いに相互作用しないものとする。

（1）この系のz軸方向に大きさEの外部電場を印加したところ、図1で示されるように、ある分子の電気双極子モーメントが外部電場と傾き角θをなした。外部電場によるこの分子の電気双極子モーメントのポテンシャルエネルギー$V(\theta)$を、μ, E, θなどを用いて表しなさい。

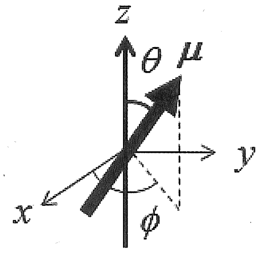


図1

（2）この系の状態の出現確率がカノニカル分布に従うものとする。この時、電気双極子モーメントが立体角要素$d\omega$に見出される確率$f(\theta)$は、

$$f(\theta)\,d\omega = C\exp\left(-\frac{V(\theta)}{kT}\right)d\omega \qquad (1)$$

と表すことができる。ここで、Cは規格化定数、kはボルツマン定数を表す。図1に示すθ, ϕ, $d\theta$, $d\phi$を用いて立体角要素$d\omega$を表しなさい。

（3）ポテンシャルエネルギー$V(\theta)$が熱エネルギーkTに比べて非常に小さい（$kT \gg V(\theta)$）場合、式(1)の$\exp\left(-\frac{V(\theta)}{kT}\right)$をテイラー展開で近似することができる。$\exp\left(-\frac{V(\theta)}{kT}\right)$の一次のテイラー展開を$\mu, E, \theta$などを用いて表しなさい。

（4）電気双極子モーメントの外部電場方向の成分$\mu\cos\theta$のカノニカル分布による平均は、$f(\theta)$を用いて

$$\mu\langle\cos\theta\rangle = \mu\frac{\displaystyle\int\cos\theta\exp\left(-\frac{V(\theta)}{kT}\right)d\omega}{\displaystyle\int\exp\left(-\frac{V(\theta)}{kT}\right)d\omega} \qquad (2)$$

と表すことができる。設問（3）の結果を利用し、ポテンシャルエネルギーが熱エネルギーに比べて非常に小さい場合の$\mu\langle\cos\theta\rangle$を求めなさい。

（5）マクロな測定で求められる電気分極は、単位体積当たりの電気双極子モーメントの外部電場方向の成分の平均値で表すことができる。設問（4）の結果を利用し、ポテンシャルエネルギーが熱エネルギーに比べて非常に小さい場合の電気分極の大きさPをμ, E, N, V, Tなどを用いて表しなさい。