令和 3 年度大学院入学試験問題　II（2 時間 30 分）

注意

(1) 問題 II–1，II–2，II–3，II–4 の解答はそれぞれ指定された解答用紙 1 枚に記入せよ．

(2) 問題 II–1，II–2，II–3 の解答は裏面を用いてもよい．

(3) 問題 II–4 は解答用紙の指定された場所 (裏面を含む) に記入せよ．

(4) 各解答用紙は横長に使用して，表側の左上部（線より上）に受験番号，氏名を記入せよ．解答用紙の他の部分に受験番号，氏名を書いてはいけない．解答用紙上部の線より上の欄には表，裏とも解答を書いてはいけない．

(5) 解答用紙は 4 問（計 4 枚）すべて提出すること．なお，問題冊子および下書き用紙は回収しない．

(6) 問題冊子は表紙を含めて 9 ページまである．

II-1 (量子力学) (100 点)

1 次元定常束縛状態を表すシュレディンガー方程式

$$H\varphi(x) = \left(\frac{1}{2m}p^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2 + \lambda x^4\right)\varphi(x) = E\,\varphi(x) \tag{A}$$

の最低エネルギー固有値 E_0 を摂動論と変分法の 2 通りで計算してみよう．ここで，m, ω, λ は正の定数である．また，$p = -i\hbar\,(d/dx)$ であり，$\hbar$ はプランク定数を 2π で割ったものである．

<u>摂動論</u>

無摂動ハミルトニアン $H^{(0)}$ と摂動項 $H^{(1)}$ をそれぞれ

$$H^{(0)} \equiv \frac{1}{2m}p^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2, \quad H^{(1)} \equiv \lambda x^4 \tag{B}$$

とする．

(1) 消滅・生成演算子

$$a = \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}p + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x, \quad a^\dagger = \frac{-i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}p + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x \tag{C}$$

を用いて $H^{(0)}$ を表せ．

(2) $H^{(0)}$ の基底状態を $|\Omega\rangle$ として，$\langle\Omega|\,x^4\,|\Omega\rangle$ を求めよ．ここで，$a\,|\Omega\rangle = 0$, $\langle\Omega|\,a^\dagger = 0$ であることと，$\langle\Omega|$ と $|\Omega\rangle$ の間の a と $a^\dagger$ の個数が同じでないと 0 になることに注意せよ．

(3) H の最低エネルギー固有値 E_0 を摂動論の公式を用いて λ の 1 次まで求めよ．

<u>変分法</u>

式 (A) で与えられるハミルトニアン H の最低エネルギー固有値を E_0 とする．このとき，波動関数 $\varphi(x) = \langle x|\varphi\rangle$ に対して次のレイリー商

$$R[\varphi] = \frac{\langle\varphi|\,H\,|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\varphi(x)^*\,H\varphi(x)}{\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\varphi(x)^*\,\varphi(x)} \quad \big(\varphi(x)^* \text{ は } \varphi(x) \text{ の複素共役}\big) \tag{D}$$

を定義すれば，$R[\varphi]$ はどんな $\varphi(x)$ に対しても常に E_0 以上である．また，最小値 E_0 を与える $\varphi(x)$ は基底状態に対応する．

（次ページに続く）

一般にはすべての波動関数を調べつくすことはできないため，レイリー商を最小にする波動関数を見つけることは容易ではない．そこで，ある連続変数 c をパラメーターとして持つ試行関数の集合 $\{\varphi_c(x)\}$ を用意し，レイリー商 $R[\varphi_c]$ をパラメーター c の関数とみなしてその最小値を与える c を見つける．すると，その c に対応する試行関数は，今用意した試行関数の集合の中では真の基底状態に最も近いものとみなせる．またそのときのレイリー商の値は，最低エネルギー固有値 E_0 の最もよい近似値を与える．

以下，変分法の試行関数として

$$\varphi_c(x) = \langle x|\varphi_c\rangle = e^{-(c/2)\,x^2} \quad (c>0) \tag{E}$$

を採用する．

(4) レイリー商 $f(c) \equiv R[\varphi_c]$ を c の関数として求めよ：

$$f(c) = R[\varphi_c] = \frac{\langle\varphi_c|\,H\,|\varphi_c\rangle}{\langle\varphi_c|\varphi_c\rangle}. \tag{F}$$

ただし，必要ならば次の積分公式を用いよ：

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^{2n}\, e^{-c\,x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{c}}\,\frac{(2n)!}{n!\,(4c)^n} \quad (c>0). \tag{G}$$

(5) パラメーター c が $f(c) = R[\varphi_c]$ を最小化するとき，その c が満たすべき方程式を

$$c^3 + \cdots = 0 \tag{H}$$

の形で表せ．

(6) λ が十分小さい ($\lambda \ll m^2\omega^3/\hbar$) とする．上で得られた式 (H) の解 $c = c(\lambda)$ を λ の 1 次まで求めよ．

(7) λ が十分小さいとき ($\lambda \ll m^2\omega^3/\hbar$) の最低エネルギー固有値の評価値 $f(c(\lambda))$ を λ の 1 次まで求めよ．

(8) 逆に，λ が十分大きい ($\lambda \gg m^2\omega^3/\hbar$) とする．上で得られた式 (H) の解 $c = c(\lambda)$ の $\lambda \to \infty$ での振る舞いを評価することにより，$\lambda \to \infty$ における $f(c(\lambda))$ の漸近形の最初の項を求めよ．

II-2 (力学) (50 点)

両端を固定して張り渡した針金の中点に質量 m の質点を取り付け，垂直な方向に振動させると,（針金のヤング率に比例し）変位の 3 乗に比例した復元力があらわれる．このような振動について，発見的に近似解を求めよう．

(1) まず，質量が m で角振動数が ω_0 の 1 次元調和振動子

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + m\omega_0^2 x = 0 \tag{A}$$

の一般解を $x = A\cos(\omega_0 t + \alpha)$ （A と α は定数）とする．これに対して，次のように $F\cos\omega t$ (F と $\omega(\neq \omega_0)$ は定数) で表される周期的な外力が作用する場合

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + m\omega_0^2 x = F\cos\omega t \tag{B}$$

を考える．ここで，$x = B_1\cos\omega t$ とおいて B_1 を決めることで式 (B) の特解を求め，一般解を求めよ．

(2) 外力の角振動数 ω が ω_0 に一致する場合，小問 (1) に示した方法では解くことができない．$x = B_2 t\sin\omega_0 t$ とおいて B_2 を決めることで式 (B) の特解を求めよ．これはどのような運動か．

(3) さて，変位の 3 乗に比例した復元力があらわれる振動を

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + m\omega_0^2 x + mCx^3 = 0 \tag{C}$$

とし，$|\omega_0^2 x| \gg |Cx^3|$ の場合を考える．

まず， ω_0 とわずかに異なる角振動数 p （ただし，$\omega_0^2 \gg |\omega_0^2 - p^2|$）の単振動から出発して，近似解を求める．$x = a\cos pt$ を式 (C) に代入し，それを，角振動数 p の単振動に対して周期的な外力が作用する，式 (B) のような形

$$\frac{d^2x}{dt^2} + p^2 x = D_1\cos pt + D_2\cos 3pt \tag{D}$$

に変形しよう．係数 D_1 と D_2 を求めよ．

3 倍角の公式は $\cos 3\theta = 4\cos^3\theta - 3\cos\theta$ である．

(4) この「外力」のもとでも小問 (2) のような運動にならないためには，D_1 が十分に小さいことが必要である．$D_1 = 0$ として p^2 を求め，式 (D) の特解を求めよ．

(5) 小問 (4) の場合，式 (D) の一般解を求めよ．

次いで，初期条件を $t = 0$ で $x = a, \dfrac{dx}{dt} = 0$ として，式 (C) の近似解を求めよ（ω_0 を使わず，p をそのまま使って良い）．

（このページは白紙である）

II-3 (統計熱力学) (50 点)

箱に閉じ込められた，質量 m の同種の単原子分子からなる古典的な理想気体が熱平衡にあるとして，この理想気体の状態方程式を求めてみよう．以下，箱の中の温度を T，全粒子数を N，箱の体積を V とする．また，ボルツマン定数を k と書き，$\hbar$ はプランク定数を 2π で割ったものとする．

a 番目の粒子 $(a = 1, \ldots, N)$ の位置と運動量をそれぞれ $\vec{x}_a$, $\vec{p}_a$ とすれば，ハミルトニアンは次で与えられる：

$$H = \sum_{a=1}^{N} \frac{\vec{p}_a^{\,2}}{2m}. \tag{A}$$

また，古典極限における分配関数 $Z = e^{-F/(kT)}$ は，次の積分で表される：

$$Z = \frac{1}{N!} \int \prod_{a=1}^{N} \frac{d^3\vec{x}_a\, d^3\vec{p}_a}{(2\pi\hbar)^3}\, e^{-H/(kT)}. \tag{B}$$

(1) ヘルムホルツの自由エネルギー $F(T,N,V)$ が，$N \to \infty$ の極限で

$$F(T,N,V) = -kNT \ln\frac{V}{N} - kNg(T) \tag{C}$$

の形となることを示せ．なお，必要であれば，積分公式 $\int_{-\infty}^{\infty} dz\, e^{-c\,z^2} = \sqrt{\pi/c}$ $(c>0)$ と，$N \to \infty$ における $N!$ の漸近形 $N! \sim N^N e^{-N}$ を用いよ．

単原子分子理想気体に限らず，一般に理想気体の自由エネルギーは常に式 (C) の関数形となる．

(2) 式 (C) を用いて理想気体の状態方程式を導け．なお，必要であれば，関係式 $dF = -S\,dT + \mu\,dN - p\,dV$ (S：エントロピー，μ：化学ポテンシャル，p：圧力) を用いよ．

(3) 理想気体の定積熱容量 C_{v} と定圧熱容量 C_{p} を，N, T と $g(T)$ のみ ($g(T)$ の微分も含む) を用いて表せ．

（このページは白紙である）