

## [専門科目 (物理学)]

[問題 1] 以下の文章を読み, 問 A~D に答えよ.

質量 $m$ の自由粒子の一次元運動を考える. 時間 $t = 0$ における実空間での粒子の波動関数 $\psi(x, t = 0)$ は以下のような関数で表されるとする.

$$\psi(x, 0) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \exp(ik_0x - \alpha x^2/2) \quad (1)$$

ここで,  $k_0$ および $\alpha$ は実数である.

さらに, 時間 $t = 0$ における運動量空間での粒子の波動関数 $\Phi(k, 0)$ は, 運動量を $p$ とした場合 $k = p/\hbar$ で与えられる波数 $k$ に関する $\psi(x, 0)$ のフーリエ変換により,

$$\Phi(k, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, 0) \exp(-ikx) dx \quad (2)$$

と表される. ここで,  $\hbar = h/(2\pi)$ であり,  $h$ はプランク定数である.

問題を解くうえで, 適宜以下の公式を利用してもよい.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (3)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \exp(-ax^2) dx = 0 \quad (4)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-ax^2) dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \quad (5)$$

問 A 式(2)を用いると,  $t = 0$ での運動量空間での粒子の波動関数は,

$$\Phi(k, 0) = \left(\frac{1}{\pi\alpha}\right)^{1/4} \exp\left\{-\frac{(k-k_0)^2}{2\alpha}\right\} \quad (6)$$

となることを示せ. なお, 導出過程を明記せよ.

問 B 運動量空間における時間 $t > 0$ の波動関数は $\Phi(k, t) = \Phi(k, 0)e^{-i\hbar k^2 t/2m}$ と表せる.  $\Phi(k, t)$ の確率密度関数を求めよ.

問 C 運動量空間における波動関数を用いて,  $t > 0$ における運動量に関する期待値,  $\langle p \rangle_t$ および $\langle p^2 \rangle_t$ を求めよ. ここで,  $\langle \dots \rangle_t$ は時間 $t$ における期待値を表す記号である.

問D  $t > 0$  における位置に関する期待値,  $\langle x \rangle_t$  および  $\langle x^2 \rangle_t$  はそれぞれ,

$$\langle x \rangle_t = \frac{\hbar k_0}{m} t \quad (7)$$

$$\langle x^2 \rangle_t = \left( \frac{\hbar k_0}{m} t \right)^2 + \frac{1}{2\alpha} \left\{ 1 + \left( \frac{\hbar t \alpha}{m} \right)^2 \right\} \quad (8)$$

である. 時間  $t > 0$  における  $p$  および  $x$  の分散  $(\Delta p)_t^2$ ,  $(\Delta x)_t^2$  が

$$(\Delta p)_t^2 (\Delta x)_t^2 > \frac{\hbar^2}{4} \quad (9)$$

を満たすことを示せ. これは, 不確定性原理を表している.

[問題2] 以下の文章を読み、問A~Dに答えよ。

ゴムひもの弾性を簡単な高分子鎖モデルで考察する。図1に概略を示す。高分子は長さ $a$ の $N$ 個のモノマーからなり、それぞれのモノマーはひもの伸張方向の $x$ 軸、およびそれに垂直な $y$ 軸の方向に向くことが出来る。モノマー同士の排除効果は無視し、重なることが出来るとする。  $x$ 軸方向に向いたモノマーのエネルギーは0、 $y$ 軸方向に向いたモノマーのエネルギーは $\varepsilon$  ( $\varepsilon > 0$ )とし、高分子鎖の内部エネルギーを $U$ とする。ひもの一端の座標は原点、もう一方の端の座標は $L_x$ および $L_y$ とし、 $L_y = 0$ であるとする。

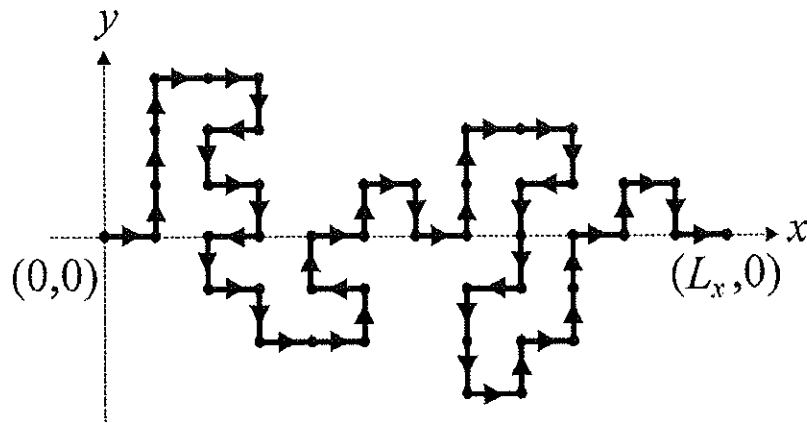


図1 ゴムひもの高分子鎖の概略図

高分子中で、 $x$ 軸の正方向および負方向に向いているモノマーの数をそれぞれ $N_x^+$ および $N_x^-$ 、 $y$ 軸のそれらを $N_y^+$ および $N_y^-$ とすると、以下の関係式が成り立つ。

$$\begin{aligned}
 N &= N_x^+ + N_x^- + N_y^+ + N_y^- \\
 l_x \equiv L_x / a &= N_x^+ - N_x^- \\
 l_y \equiv L_y / a &= N_y^+ - N_y^- = 0 \\
 u \equiv U / \varepsilon &= N_y^+ + N_y^-
 \end{aligned} \tag{1}$$

この高分子鎖の微視的状态数 $\Omega$ は、 $N$ 個のモノマーをそれら4方向の向きに分配する組み合わせの数なので、 $N$ 、 $N_x^+$ 、 $N_x^-$ 、 $N_y^+$ 、および $N_y^-$ の階乗を用いて

$$\Omega = \boxed{\text{ア}} \tag{2}$$

と表される。エントロピー $S$ は $\Omega$ を用いて

$$S = k_B \ln \Omega \quad (3)$$

と定義される。ここで  $k_B$  はボルツマン定数である。式(1)～(3)より、 $S$  は  $N$ 、 $L_x (= al_x)$ 、および  $U (= \varepsilon u)$  の関数として表される。モノマーの数  $N$  が大きい熱力学的極限で Stirling の近似式を適用すると、 $S$  に対して次式を得る。

$$S = k_B N \ln N - k_B u \ln \frac{1}{2} u - \frac{k_B}{2} (N + l_x - u) \ln \frac{1}{2} (N + l_x - u) - \frac{k_B}{2} (N - l_x - u) \ln \frac{1}{2} (N - l_x - u) \quad (4)$$

更に、①温度  $T$  の定義式を用いると、以下の状態方程式を得る。

$$e^{\frac{2\varepsilon}{k_B T}} = \frac{(N - u)^2 - l_x^2}{u^2} \quad (5)$$

問 A 文中の空欄  に当てはまる式を記せ。

問 B 下線部①に関して、温度  $T$  は  $S$  の偏微分を用いて定義される。温度  $T$  の定義式を  $S$ 、 $N$ 、 $L_x$ 、 $U$ 、および偏微分記号を用いて記せ。

問 C  $L_x = 0$  のとき、熱力学的極限における  $N_x^+$ 、 $N_x^-$ 、 $N_y^+$ 、および  $N_y^-$  の平均値 (それぞれ  $\bar{N}_x^+$ 、 $\bar{N}_x^-$ 、 $\bar{N}_y^+$ 、および  $\bar{N}_y^-$  とする) の大小関係を、以下の場合について等号・不等号 ( $=, >, <$ ) を用いて表せ。

(a)  $T$  が有限。

(b) 高温極限  $\varepsilon / (k_B T) \rightarrow 0$ 。

問 D ゴムひもを  $L_x = 0$  から最大値である  $L_x = aN$  まで温度  $T$  で準静的に等温伸張する。

(a) 内部エネルギー  $U$  の変化を  $N$ 、 $\varepsilon$ 、 $T$ 、および  $k_B$  を用いて表せ。

(b) 高温極限  $\varepsilon / (k_B T) \rightarrow 0$  のとき、系になされた仕事を、 $N$ 、 $T$ 、および  $k_B$  を用いて表せ。