2011 年度東大理物答案

しゃんごん (@CEY3944)

2025 年 4 月 25 日

物理学

問題 1　量子力学: スピン系 Rabi 振動

1-1

Levi-Civita の記号と Einstein の縮約を使って角運動量は $L_i = \epsilon_{ijk}x_j p_k$ と書ける。これと交換子の線形性と $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$, Levi-Civita 記号の公式 $\epsilon_{ijk}\epsilon_{klm} = \delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl}$ を用いると

$$\begin{aligned}
[L_i,\, L_j] &= [\epsilon_{imn}x_m p_n\, \epsilon_{jrs}x_r p_s] &\text{(1-1.1)}\\
&= \epsilon_{imn}\epsilon_{jrs}(x_m[p_n, x_r]p_s + x_r[x_m, p_s]p_n) &\text{(1-1.2)}\\
&= i\hbar(\epsilon_{imn}\epsilon_{jrm}x_r p_n - \epsilon_{imn}\epsilon_{jns}x_m p_s) &\text{(1-1.3)}\\
&= i\hbar(\delta_{ir}\delta_{jn} - \delta_{jr}\delta_{in})x_r p_n &\text{(1-1.4)}\\
&= i\hbar\epsilon_{ijk}(\epsilon_{kmn}x_m p_n) &\text{(1-1.5)}\\
&= i\hbar\epsilon_{ijk}L_k &\text{(1-1.6)}
\end{aligned}$$

1-2

交換関係 $[S_z, S_x] = i\hbar S_y$ より

$$i\hbar S_y = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{1-2.1}$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} \tag{1-2.2}$$

1-3

ハミルトニアンを行列表示すると

$$H = -\mu H_x S_x = -\frac{\mu H_z}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} \tag{1-3.1}$$

これの固有値方程式を解くと

$$\lambda = \pm\frac{\mu H_x}{2} \tag{1-3.2}$$

となる。λ_1 を正の方の固有値、λ_2 を負の方の固有値とするとそれぞれの固有ベクトルは

$$|\lambda_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix} \tag{1-3.3}$$

$$|\lambda_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix} \tag{1-3.4}$$

である。

1-4

初期状態を

$$|\phi(0)\rangle = \begin{pmatrix}\cos\theta\\ e^{i\varphi}\sin\theta\end{pmatrix} \tag{1-4.1}$$

とおく。このもとで各スピンの調体の期待値を計算することで θ, φ をもとめると初期状態は

$$|\phi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{1-4.2}$$

とわかる。これの時間発展をもとめる。シュレーディンガー方程式より

$$\begin{aligned}
i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\phi(t)\rangle &= H|\phi(t)\rangle && (1\text{-}4.3)\\
|\phi(t)\rangle &= \exp(-iHt)|\phi(0)\rangle && (1\text{-}4.4)\\
&= \exp\left(\frac{i\mu H_x t}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\right)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} && (1\text{-}4.5)\\
&= \begin{pmatrix} \cos\frac{\mu H_x t}{2} & i\sin\frac{\mu H_x t}{2} \\ i\sin\frac{\mu H_x t}{2} & \cos\frac{\mu H_x t}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} && (1\text{-}4.6)\\
&= \begin{pmatrix} \cos\frac{\mu H_x t}{2} \\ i\sin\frac{\mu H_x t}{2} \end{pmatrix} && (1\text{-}4.7)
\end{aligned}$$

となる。途中パウリ行列 $\vec{\sigma}$ の性質

$$\exp(i\vec{a}\cdot\vec{\sigma}) = I\cos|\vec{a}| + i\left(\frac{\vec{a}}{|\vec{a}|}\cdot\vec{\sigma}\right)\sin|\vec{a}| \tag{1-4.8}$$

を使った。これより

$$\begin{aligned}
\langle\phi(t)|S_x|\phi(t)\rangle &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\frac{\mu H_x t}{2} & -i\sin\frac{\mu H_x t}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\frac{\mu H_x t}{2} \\ i\sin\frac{\mu H_x t}{2} \end{pmatrix} = 0 && (1\text{-}4.9)\\
\langle\phi(t)|S_y|\phi(t)\rangle &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\frac{\mu H_x t}{2} & -i\sin\frac{\mu H_x t}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\frac{\mu H_x t}{2} \\ i\sin\frac{\mu H_x t}{2} \end{pmatrix} = 0 && (1\text{-}4.10)\\
\langle\phi(t)|S_z|\phi(t)\rangle &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\frac{\mu H_x t}{2} & -i\sin\frac{\mu H_x t}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\frac{\mu H_x t}{2} \\ i\sin\frac{\mu H_x t}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\cos\mu H_x t && (1\text{-}4.11)
\end{aligned}$$

別解:Heisenberg 方程式

こっちでもできるはず

1-5

$$\begin{aligned}
i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle &= i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(e^{iH_1 t}|\varphi(t)\rangle\right) && (1\text{-}5.1)\\
&= -e^{iH_1 t}H_1|\varphi(t)\rangle + e^{iH_1 t}i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\varphi(t)\rangle && (1\text{-}5.2)\\
&= -e^{iH_1 t}H_1|\varphi(t)\rangle + e^{iH_1 t}(H_1 + H_2)|\varphi(t)\rangle && (1\text{-}5.3)\\
&= e^{iH_1 t}H_2 e^{-iH_1 t}e^{iH_1 t}|\varphi(t)\rangle && (1\text{-}5.4)\\
&= e^{iH_1 t}H_2 e^{-iH_1 t}|\psi(t)\rangle && (1\text{-}5.5)\\
&-\frac{a_0}{2}\begin{pmatrix} e^{-iat/2} & 0 \\ 0 & e^{iat/2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{iat/2} & 0 \\ 0 & e^{-iat/2} \end{pmatrix}|\psi(t)\rangle && (1\text{-}5.6)\\
&= -\frac{a_0}{2}\begin{pmatrix} 0 & e^{i(\omega-a)t} \\ e^{-i(\omega-a)t} & 0 \end{pmatrix}|\psi(t)\rangle && (1\text{-}5.7)
\end{aligned}$$

1-6

$$\langle\varphi(t)|S_z|\varphi(t)\rangle = \langle\varphi(t)|e^{iaS_z t}e^{-iaS_z t}S_z e^{iaS_z}e^{-iaS_z}|\varphi(t)\rangle = \langle\psi(t)|S_z|\psi(t)\rangle \tag{1-6.1}$$

である。このとき $|\psi(t)\rangle$ の時間発展の式は、$\omega = a$ とすると問題 4 で考えた $|\phi(t)\rangle$ の時間発展と同じであることがわかる。これらより求める値は $\langle\phi(t)|S_z|\phi(t)\rangle$ と同じで

$$\langle\varphi(t)|S_z|\varphi(t)\rangle = \frac{1}{2}\cos at \tag{1-6.2}$$

問題 2　統計力学: 分子の回転エネルギー

2-1

古典系での分配関数は位相空間での積分によって求められる。

$$
\begin{aligned}
Z &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2}\int_0^\pi d\theta\sin\theta\int_0^{2\pi}d\varphi\int_{-\infty}^{\infty}dp_\theta\int_{-\infty}^{\infty}dp_\varphi\exp\left[-\frac{\beta}{2I}\left(p_\theta^2+\frac{p_\varphi^2}{\sin^2\theta}\right)\right] && \text{(2-1.1)}\\
&= \frac{1}{2\pi\hbar^2}\int_0^\pi d\theta\sin\theta\sqrt{\frac{2\pi I}{\beta}}\sqrt{\frac{2\pi I\sin^2\theta}{\beta}} && \text{(2-1.2)}\\
&= \frac{I}{\hbar^2\beta}\int_0^\pi\sin^2\theta && \text{(2-1.3)}\\
&= \frac{\pi I}{2\hbar^2\beta} && \text{(2-1.4)}
\end{aligned}
$$

これより系の内部エネルギーは

$$
E = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z = k_BT \tag{2-1.5}
$$

比熱は

$$
C = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} = k_B \tag{2-1.6}
$$

2-2

縮重度も考慮して軌道量子数の和をとることで分配関数が求まる。

$$
Z = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\exp\left(-\frac{\beta\hbar^2}{2I}l(l+1)\right) \tag{2-2.1}
$$

高温のとき、つまり $\beta \gg 1$ のときでは l が大きいところでしか和が効かないので、

$$
Z \simeq \sum_{l=0}^{\infty}2l\exp\left(-\frac{\beta\hbar^2}{2I}l^2\right) \tag{2-2.2}
$$

$x = \sqrt{\beta\hbar^2/2I}\times l$ と文字を置き、β が小さいことから連続和とみなすと

$$
Z \simeq \frac{2I}{\beta\hbar^2}\int_0^x dx\,xe^{-x^2/2} = \frac{2I}{\beta\hbar^2} \tag{2-2.3}
$$

このときの内部エネルギーと比熱は

$$
\begin{aligned}
E &= -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z = k_BT && \text{(2-2.4)}\\
C &= \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} = k_B && \text{(2-2.5)}
\end{aligned}
$$

で古典的に 2 原子分子を扱ったときと同じ結果が現れる。

2-3

低温において、熱揺らぎによる基底状態からの励起はほとんど起きないと考えられることから、設問 2 の分配関数の和は $l = 0, 1$ まで取ればよい。よって分配関数は

$$
Z \simeq 1 + 3\exp\left(-\frac{\beta\hbar^2}{I}\right). \tag{2-3.1}
$$

これより内部エネルギーと比熱は

$$E = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z = \frac{\frac{3\hbar^2}{I}\exp\left(-\frac{\beta\hbar^2}{I}\right)}{1 + +3\exp\left(-\frac{\beta\hbar^2}{I}\right)} \simeq \frac{3\hbar^2}{I}\exp\left(-\frac{\beta\hbar^2}{I}\right) \tag{2-3.2}$$

$$C = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} = -k_B\beta^2\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}\beta} = 3k_B\left(\frac{\beta\hbar^2}{I}\right)^2\exp\left(-\frac{\beta\hbar^2}{I}\right) \tag{2-3.3}$$

2-4

水素原子核の合成スピンは摂動によって変わらないとすると、遷移できる準位は同じ合成スピンを持った準位の間のみである。原子核の入れかえのパリティについて考えたとき、水素分子自体はボゾンになるため、これを保つためにはオルソ水素では軌道の波動関数は対称、パラ水素では軌道の波動関数は反対称である必要がある。よってオルソ水素は l が偶数の準位、パラ水素は l が奇数の準位をとる。

2-5

オルソ水素の合成スピンはトリプレット状態であるので縮退度は 3, パラ水素の合成スピンはシングレット状態であるので縮退度は 1 である。十分高温では縮退度もこみで均等な数になるので

$$\frac{N_o}{N_p} = 3 \tag{2-5.1}$$

2-6

低温においてオルソ水素の分配関数の和は設問 2 の分配関数の和のうち $l = 0, 2$ だけをとってきて

$$Z = 1 + 5\exp\left(-\frac{3\beta\hbar^2}{I}\right) \tag{2-6.1}$$

これの内部エネルギーは

$$E = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z \simeq \frac{15\hbar^2}{I}\exp\left(-\frac{3\beta\hbar^2}{I}\right) \sim 0 \tag{2-6.2}$$

パラ水素の分配関数の和は $l = 1, 3$ だけをとってきて

$$Z = 3\exp\left(-\frac{\beta\hbar^2}{I}\right) + 7\exp\left(-\frac{6\beta\hbar^2}{I}\right) \tag{2-6.3}$$

これの内部エネルギーは

$$E = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z = \frac{3\hbar^2}{I}\frac{\exp\left(-\frac{\beta\hbar^2}{I}\right) + 14\exp\left(-\frac{6\beta\hbar^2}{I}\right)}{3\exp\left(-\frac{\beta\hbar^2}{I}\right) + 7\exp\left(-\frac{6\beta\hbar^2}{I}\right)} \simeq \frac{\hbar^2}{I} \tag{2-6.4}$$

よって内部エネルギーはパラ水素だけ考えればよく、求める値は

$$\frac{U}{k_B} = \frac{\hbar^2}{4k_BI} = 45\ \mathrm{K} \tag{2-6.5}$$