物理数学3（上田正仁）期末試験（試験時間：105分）

2017/1/16

問題1から問題4全てに解答せよ。問題に不備、条件不十分な点等があると思われる場合は、どの点をどのように修正、解釈したかを明記した上で、その修正、解釈の下で解け。
解答用紙は2枚である。用紙の裏面も用いてよい。
遅刻は試験開始後30分までである。試験開始後30分以降であれば、答案を提出して退室してよい。

1 ベーカー・キャンベル・ハウスドルフの公式

群の元の結合は必ず群の元である。この性質をリー代数 W に対応するリー群 G に当てはめると、任意の $X, Y \in \mathrm{W}$ に対して $e^{iZ} = e^{iX}e^{iY}$ を満たす $Z \in \mathrm{W}$ が存在しなければならない。実際、W がリー代数であれば、Z はベーカー・キャンベル・ハウスドルフ (Baker-Campbell-Hausdorff) の公式

$$Z = X + \int_0^1 dt f(e^{i\mathrm{ad}(X)}e^{it\mathrm{ad}(Y)})Y \tag{1}$$

で求められる。ここで、$f(\zeta) = \frac{\ln\zeta}{1-\zeta^{-1}} (\zeta \in \mathbb{C})$ は $|\zeta - 1| < 1$ 内の正則関数であり、$\mathrm{ad}(X)$ は W 上の線形写像 $\mathrm{ad}(X)Y = [X, Y]$ である。
(1) 等式 $e^{i\mathrm{ad}(X)}Y = e^{iX}Ye^{-iX}$ を示せ。
(2) $e^{iZ} = e^{iX}e^{iY}$ を仮定する時、等式 $e^{i\mathrm{ad}(Z)} = e^{i\mathrm{ad}(X)}e^{i\mathrm{ad}(Y)}$ を示せ。
(3) 連続的なパラメーター $t \in \mathbb{R}$ に依存する $Z(t) \in \mathrm{W}$ に対して、$F(\lambda, t) = e^{-i\lambda Z(t)}\partial_t e^{i\lambda Z(t)}$ を定義する。$\partial_\lambda F(\lambda, t)$ を求め、その結果を偏微分方程式とみなして解くことで、等式

$$\frac{d}{dt}e^{iZ(t)} = e^{iZ(t)}\frac{1 - e^{-i\mathrm{ad}(Z(t))}}{\mathrm{ad}(Z(t))}\frac{d}{dt}Z(t) \tag{2}$$

を示せ。これはデュアメル (Duhamel) の公式と呼ばれている。
(4) $e^{iZ(t)} = e^{iX}e^{itY}$ をデュアメルの公式 (2) に当てはまることで、ベーカー・キャンベル・ハウスドルフの公式 (1) を導出せよ。

2 内部積とリー微分

n 次元多様体 M の点 p の接空間 $T_p(M)$ に属するベクトル $X = X^\mu\frac{\partial}{\partial x^\mu} (\mu = 1, 2, ..., n)$ に対して、r-形式 $\omega = \frac{1}{r!}\omega_{\mu_1\mu_2\ldots\mu_r}dx^{\mu_1} \wedge dx^{\mu_2} \wedge ... \wedge dx^{\mu_r}$ を $r-1$-形式に変換する内部積 i_X は

$$i_X\omega = \frac{1}{(r-1)!}X^\nu\omega_{\nu\mu_2\ldots\mu_r}dx^{\mu_2} \wedge ... \wedge dx^{\mu_r} \tag{3}$$

のように定義される。同じ X に対して、r-形式 ω を r-形式に変換するリー微分 $\mathcal{L}_X$ は

$$\mathcal{L}_X\omega = i_X d\omega + d(i_X\omega) \tag{4}$$

のように定義される。ここで、$d\omega$ は ω の外微分である。ξ, ω をそれぞれ r-形式、s-形式とし、次の式が成り立つことを示せ (外微分の性質は直接に使えば良い)。
(1) $\xi \wedge \omega = (-1)^{rs}\omega \wedge \xi$;
(2) $i_X^2 = 0$;
(3) $[d, \mathcal{L}_X] = 0$;
(4) $i_X(\xi \wedge \omega) = (i_X\xi) \wedge \omega + (-1)^r\xi \wedge (i_X\omega)$;
(5) $\mathcal{L}_X(\xi \wedge \omega) = (\mathcal{L}_X\xi) \wedge \omega + \xi \wedge (\mathcal{L}_X\omega)$。

3　定圧比熱と定積比熱の関係

任意の熱力学系に対して、定圧比熱 C_P と定積比熱 C_V の差は

$$C_P - C_V = VT\frac{\alpha^2}{\kappa_T} \tag{5}$$

のように表せる。ここで、比熱 $C_X = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_X (X = P, V)$、$\alpha = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P$ は定圧膨張係数であり、$\kappa_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T$ は等温圧縮率である。
(1) 自由エネルギー $F = E - TS$ に二回外微分をとることで Maxwell の関係式

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V \tag{6}$$

を示せ。
(2) 微分形式 $dP \wedge dV$ に対して変数変換を行うことで

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_P = -1 \tag{7}$$

を示せ。
(3) 微分形式 $dS \wedge dP$ に対して変数変換を行うことで

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_P = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V + \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P \tag{8}$$

を示せ。
(4) 小問 (1)(2)(3) の結果を使って式 (5) が成り立つことを示せ。

4　水素分子イオンの波動関数

水素分子イオン H_2^+ は数少ない解析的に扱える量子系の一つである。図 1 のように、ボルン-オッペンハイマー近似 (Born-Oppenheimer approximation) の下で二つの原子核の位置をそれぞれ z 軸上の $A = (0, 0, -D/2)$,$B = (0, 0, D/2)$ に固定すると、電子 e の固有波動関数はシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{m_e}\left[\frac{1}{2}\nabla^2 + \frac{1}{a_0}\left(\frac{1}{r_A} + \frac{1}{r_B}\right)\right]\psi = E\psi \tag{9}$$

で定めることが分かる。ここで、m_e は電子の質量であり、$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ はボーア半径である。

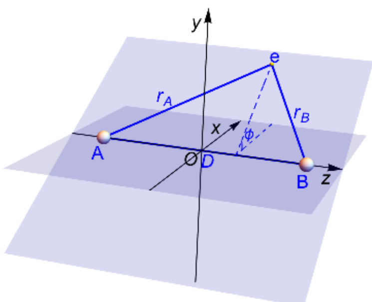

図 1 H_2^+ 分子イオンにおける各パラメーター。

(1) シュレーディンガー方程式 (9) を解くために図 1 で示したような楕円座標 ($\xi := \frac{r_A + r_B}{D}$,

$\eta := \frac{r_A - r_B}{D}, \phi)$ が便利である。デカルト座標 (x, y, z) と楕円座標 (ξ, η, ϕ) は

$$x = \frac{D}{2}\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\cos\phi, \quad y = \frac{D}{2}\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\sin\phi, \quad z = \frac{D}{2}\xi\eta \tag{10}$$

で結びついていることを示せ。
(2) 講義ノートでは任意の曲線座標 (u^1, u^2, u^3) に適用する一般的なラプラシアンの公式

$$\nabla^2 = \frac{1}{g_1 g_2 g_3}\left[\frac{\partial}{\partial u^1}\left(\frac{g_2 g_3}{g_1}\frac{\partial}{\partial u^1}\right) + \frac{\partial}{\partial u^2}\left(\frac{g_3 g_1}{g_2}\frac{\partial}{\partial u^2}\right) + \frac{\partial}{\partial u^3}\left(\frac{g_1 g_2}{g_3}\frac{\partial}{\partial u^3}\right)\right] \tag{11}$$

を示した。ここで、$g_i := \sqrt{\left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial u^i}\right)^2}$ である。小問 (1) の結果 (10) を式 (11) に当てはめることで楕円座標でのラプラシアン

$$\nabla^2 = \frac{4}{D^2(\xi^2-\eta^2)}\left\{\frac{\partial}{\partial\xi}\left[(\xi^2-1)\frac{\partial}{\partial\xi}\right] + \frac{\partial}{\partial\eta}\left[(1-\eta^2)\frac{\partial}{\partial\eta}\right] + \left(\frac{1}{\xi^2-1} + \frac{1}{1-\eta^2}\right)\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\} \tag{12}$$

を導出せよ。
(3) 楕円座標の下で $\psi(\xi, \eta, \phi) = R(\xi)S(\eta)e^{im\phi}(m \in \mathbb{Z})$ のような変数分離が可能となり、シュレーディンガー方程式 (9) は常微分方程式

$$\begin{aligned} &\frac{d}{d\xi}\left[(\xi^2-1)\frac{d}{d\xi}R\right] + \left(\frac{2D}{a_0}\xi + \frac{m_e E D^2}{2\hbar^2}\xi^2 - \frac{m^2}{\xi^2-1} - \Lambda\right)R = 0, \\ &\frac{d}{d\eta}\left[(\eta^2-1)\frac{d}{d\eta}S\right] + \left(\Lambda - \frac{m^2}{1-\eta^2} - \frac{m_e E D^2}{2\hbar^2}\eta^2\right)S = 0 \end{aligned} \tag{13}$$

に変形できることを示せ。ここで、Λ は未定定数である。

5　授業に関して

授業に関して率直かつ建設的な意見を述べてください (この部分は成績評価には影響しません)。