

物理工学専攻 入学試験問題

専門科目

(4問出題, 3問解答)

平成22年8月31日(火) 13:00~16:00

注意事項

1. 試験開始の合図まで、この問題冊子を開かないこと。
2. 本冊子に落丁, 乱丁, 印刷不鮮明の箇所などがあつた場合には申し出ること。
3. 出題された4問のうちから3問を選び解答すること。
4. 答案用紙が3枚渡されるから、1題ごとに必ず1枚の答案用紙を使用すること。止むを得ぬときは答案用紙の裏面を使用してもよい。
5. 答案用紙上方の指定された箇所に、その用紙で解答する問題番号を忘れずに記入すること。
6. 草稿用紙は本冊子から切り離さないこと。
7. 解答に関係のない記号, 符号などを記入した答案は無効とする。
8. 答案用紙および問題冊子は持ち帰らないこと。

受験番号	No.
------	-----

上欄に受験番号を記入すること。

第1問

2次元または3次元空間中、原点に固定された電荷 $e (> 0)$ の点電荷に束縛されている電荷 $-e$ を持つ電子の基底状態を変分法で調べよう。点電荷から電子までの距離を r とし、ハミルトニアンを

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

とする。ここで \hbar はプランクの定数を 2π で割ったもの、 m は電子の質量、 ϵ_0 は真空の誘電率を表す。このハミルトニアンに対し、電子の変分波動関数として r だけの関数 $\psi(r) = N \exp(-\alpha r)$ を採用する。ただし、 α が変分パラメータであり、 N は規格化定数である。

- [1] 3次元空間中の場合、 ∇^2 を r だけの関数 $f(r)$ に作用させると、

$$\nabla^2 f(r) = \frac{d^2}{dr^2} f(r) + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} f(r)$$

となることを使って、最適変分波動関数およびそのエネルギー期待値を求めよ。

- [2] 2次元空間中の場合は、

$$\nabla^2 f(r) = \frac{d^2}{dr^2} f(r) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(r)$$

となる。このときの最適変分波動関数およびそのエネルギー期待値を求めよ。

- [3] [1]、[2] で求めた電子の波動関数の広がりおよび、そのエネルギー期待値の違いが示す物理的意味を議論せよ。

第2問

3次元空間中のフェルミ粒子を考える。このフェルミ粒子はスピン1/2を持ち、一辺 L の周期的境界条件の箱の中で温度 T の熱源および化学ポテンシャル μ の粒子源に接しているものとする。この系の1粒子シュレーディンガー方程式は粒子のスピンによらずに

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \mu\right)\phi = E\phi \quad (1)$$

と書かれる。ただし \hbar はプランク定数を 2π で割ったもの、 m は粒子の質量、 $r = (x, y, z)$ は空間座標である。

この系の1粒子固有関数は $\phi = \exp[i(k_x x + k_y y + k_z z)]/\sqrt{L^3}$ 、対応する固有値は

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu, \quad \varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m} \quad (2)$$

で与えられる。ただし波数ベクトル $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ はそれぞれ $k_x = 2\pi l_x/L$, $k_y = 2\pi l_y/L$, $k_z = 2\pi l_z/L$ (l_x, l_y, l_z は整数)で与えられる離散点である。

ここで多数のフェルミ粒子からなる相互作用のない理想フェルミ粒子系が温度 T 、化学ポテンシャル μ で熱平衡状態にあるとしよう。この系の大分配関数 Ξ は各波数を与える離散点 (l_x, l_y, l_z) の1粒子状態からの寄与 $\Xi_1(l_x, l_y, l_z)$ の関数として書ける。ボルツマン定数を k_B とし以下の問に答えよ。

- [1] スピン1/2の自由度に注意して $\Xi_1(l_x, l_y, l_z)$ を求め、フェルミ統計の性質からなぜそうなるか説明せよ。さらに Ξ の表式を $\Xi_1(l_x, l_y, l_z)$ を用いて書き表せ。
- [2] 波数ベクトル \mathbf{k} の状態を占める粒子数(スピンについて和を取ったもの)の平均値 $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle$ を Ξ_1 から求める表式を与え、さらに μ , \hbar , m , k , T , k_B を用いて書き表せ。 L は十分大きいとして、 $|\mathbf{k}|$ の関数として $\langle n_{\mathbf{k}} \rangle$ の概形を描き、その温度依存性の特徴を絶対零度でのふるまいを含めて述べよ。

十分大きな L (熱力学極限)を取ると波数に関する整数の組 (l_x, l_y, l_z) の和は積分に置き換えられ、

$$\sum_{l_x, l_y, l_z} \rightarrow \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int dk 4\pi k^2 = L^3 \int d\varepsilon D(\varepsilon) \quad (3)$$

となる。ただし $D(\varepsilon)$ はスピンあたりかつ単位体積当たりの状態密度である。必要ならこの関係を使い、以下熱力学極限で考えよ。

- [3] 大分配関数から導かれる熱力学関数 $J = -k_B T \ln \Xi$ の表式を、 $D(\varepsilon)$ を用いて書き表せ。なお、次問以降もスピンの2自由度からの寄与を忘れず考慮せよ。
- [4] $\beta = 1/(k_B T)$ で定義される β を用いて、温度 T における単位体積当たりのエネルギーの平均値 $\langle E \rangle$ を Ξ から求める表式を書け。また、これをもとに $\langle E \rangle$ を、 β と $D(\varepsilon)$ を用いた表式で与えよ。
- [5] $D(\varepsilon)$ の具体形を ε の関数として書け。
- [6] [4]、[5]の結果を用い、絶対零度での単位体積当たりのエネルギー E_g を μ の関数として求めよ。

- [7] 粒子密度の期待値 $\langle \rho \rangle = \langle N \rangle / L^3$ を用いて、密度感受率 κ は $\kappa = d\langle \rho \rangle / d\mu$ で定義される。ただし N は全粒子数である。任意の温度での $\langle \rho \rangle$ を求める表式を、 $D(\epsilon)$ を用いて書け。さらに絶対零度で化学ポテンシャル μ を動かすとき、 $\mu > 0$ と $\mu < 0$ の場合に分け、 $\langle \rho \rangle$ と κ を μ の関数として求めよ。また化学ポテンシャル μ における状態密度 $D(\mu)$ と κ はどのような関係にあるか述べ、理由を説明せよ。
- [8] 絶対零度で粒子数のゆらぎ $\langle \rho^2 \rangle - \langle \rho \rangle^2$ は ϵ あるいは J から求められる。この表式を書き下し、密度感受率 κ との関係を議論せよ。

第3問

$+z$ 方向に一様な磁束密度 B の静磁場が加わっている 3 次元空間における質量 m 、電荷 q の荷電粒子の運動を考える。この粒子の時間 t に依存する位置座標を $\mathbf{r} = (x(t), y(t), z(t))$ とする。この粒子には、原点からの距離に比例する大きさの、原点に向けた向心力 $\mathbf{F} = -k\mathbf{r}$ が働いている。粒子の運動速度は、光の速度に比べて十分に小さいものとし、以下の問いに答えよ。

- [1] 荷電粒子の運動を記述する運動方程式を記し、 z 軸に沿った運動に対する固有角周波数 ω_0 を求めよ。
- [2] xy 面に射影した荷電粒子の運動は、2つの単振動の合成となる。 $x(t) = a \cos \Omega t$ 、 $y(t) = b \sin \Omega t$ の形を仮定し、この2つの固有角周波数 Ω の値を求めよ。
- [3] 設問 [1] で求めた固有角周波数 ω_0 が、 $\omega_0 \gg qB/m$ を満たすとき、固有角周波数 Ω の磁束密度 B に対する依存性を図示せよ。
- [4] 設問 [3] で求めた2つの角周波数の差の原因を説明せよ。

さらに上記の条件に加えて、この粒子に $\mathbf{f} = -m\gamma d\mathbf{r}/dt$ (γ は正の定数でかつ $\gamma \ll \omega_0$) で表される減衰力が働いているものとする。以下の問いに答えよ。

- [5] 一様な交流電場 $\mathbf{E} = (E_0 \cos \omega t, 0, 0)$ を作用させ、定常状態に達したときの $x(t)^2 + y(t)^2$ の一周期 $2\pi/\omega$ での平均値 $\overline{x(t)^2 + y(t)^2}$ を求めよ。
- [6] 設問 [5] で求めた $\overline{x(t)^2 + y(t)^2}$ の ω に対する依存性の概略を図示せよ。ただし、 B を変化させ、 $\gamma \ll qB/m \ll \omega_0$ 及び $qB/m \ll \gamma \ll \omega_0$ を満たす2つの場合を考察せよ。

第 4 問

遷移金属化合物結晶中の 3d 遷移金属陽イオンには、周囲の陰イオンからの電場が働く。この電場を結晶場という。球対称ポテンシャル中で 5 重縮退していた 3d 電子軌道（主量子数 $n = 3$ 、方位量子数 $l = 2$ 、および磁気量子数 $m = -2, \dots, 2$ ）は、結晶場中で縮退が解けてエネルギー分裂する。この分裂を結晶場分裂という。3d 軌道に電子が 1 つ存在する遷移金属陽イオン ($3d^1$) は、図 1 のように陰イオンに囲まれているとする。この遷移金属陽イオンの 3d 電子軌道の結晶場分裂に関する以下の問に答えよ。なお、結晶場分裂の原因としては図 1 に示されている最近接陰イオンのみの影響を考えれば良い。更に、スピン分裂は無視できるものとし、スピン軌道相互作用は考えない。また、結晶場分裂は小さく 3d 軌道以外の軌道からの混成は無視してよい。

解答にあたっては、球対称ポテンシャル中の 3d 軌道の 1 電子波動関数の方位部分が、球面調和関数 $Y_{2m}(\theta, \phi) = \Theta_{2m}(\theta)\Phi_m(\phi)$ で与えられることを用いて良い。ここで θ と ϕ は、図 1 に定義されている極座標変数である。 $\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}$ であり、 $\Theta_{2m}(\theta)$ は次のように与えられる（複合同順）：

$$\begin{aligned}\Theta_{20} &= \frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{2}}(3\cos^2\theta - 1), \\ \Theta_{2\pm 1} &= \mp \frac{\sqrt{15}}{2}\sin\theta\cos\theta, \\ \Theta_{2\pm 2} &= \frac{\sqrt{15}}{4}\sin^2\theta.\end{aligned}$$

- [1] 図 1 において $a = c$ の場合、陰イオンの配置は正 8 面体となり、3d 遷移金属陽イオンの周囲の対称性は立方対称となる。球対称ポテンシャル中で 5 重に縮退していた 3d 電子の軌道は、立方対称結晶場中では 2 つの $d\gamma$ 軌道および 3 つの $d\epsilon$ 軌道に縮退が解けてエネルギー分裂することが知られており、その波動関数の方位部分は以下の形に書くことができる。

$$\overbrace{\text{(a)}Y_{20} \quad \text{(b)}Y_{22} + Y_{2-2}}^{d\gamma} \quad \overbrace{\text{(c)}Y_{21} + Y_{2-1} \quad \text{(d)}Y_{21} - Y_{2-1} \quad \text{(e)}Y_{22} - Y_{2-2}}^{d\epsilon}$$

上の (a-e) を図 2(i-v) に示された波動関数の実空間表示と対応づけよ。さらに、 $d\gamma$ および $d\epsilon$ 軌道のどちらのエネルギーが高いかを答えよ。

- [2] 次に z 方向に僅かに縮んだ ($0 < 1 - \frac{c}{a} \ll 1$) 8 面体中の 3d 電子軌道のエネルギー分裂を考えよう。 z 方向への縮みにより対称性は立方対称から正方対称へと低下し、 $d\gamma$ および $d\epsilon$ 軌道の縮退は更に解ける。この際、波動関数の形には変化がないとして良い。上の 5 つの波動関数の形状からエネルギー準位を考察し、それぞれの軌道をエネルギーの高さの順に並べよ。（縮退が残る場合は明示せよ。）

次に [2] で求めた正方対称結晶場中の 3d 電子軌道のエネルギー準位を、光吸収スペクトル測定で決定することを考える。光の波長は 3d 電子波動関数の広がりに対して十分長く、光と 3d 電子の相互作用ハミルトニアンは以下の式で近似的に与えられるとする：

$$\mathcal{H}' = -\mathbf{P} \cdot \mathbf{E} - \mathbf{M} \cdot \mathbf{H}, \quad (1)$$

ここで $\mathbf{P} = -e\mathbf{r}$ および $\mathbf{M} \simeq -\mu_B \mathbf{l}$ であり、 e 、 r 、 l および μ_B はそれぞれ素電荷、3d 電子の位置演算子、3d 電子の軌道角運動量演算子、およびボーア磁子である。 \mathbf{E} および \mathbf{H} は光の電場および磁場ベクトルである。 \mathcal{H}' の第一項は電気双極子、第二項は磁気双極子相互作用による遷移を与える。

[3] [2] で求めたエネルギー準位間の電気双極子遷移の可能性を議論せよ。

[4] ここからは磁気双極子遷移についてのみ考える。光吸収スペクトルを測定したところ、絶対零度極限で図 3(A) および (B) に示す結果を得た。この実験では、電場ベクトルは y 軸もしくは z 軸に平行であり、 x 軸方向に進む直線偏光の光 (電場ベクトル $E = E_0 \cos(k_x x - \omega t)$) が用いられたことがわかっている。(A) および (B) それぞれの測定に用いられた入射光の偏光方向を根拠とともに答えよ。ここで、角運動量の昇降演算子が $l_{\pm} = l_x \pm il_y$ で与えられることを用いて良い。

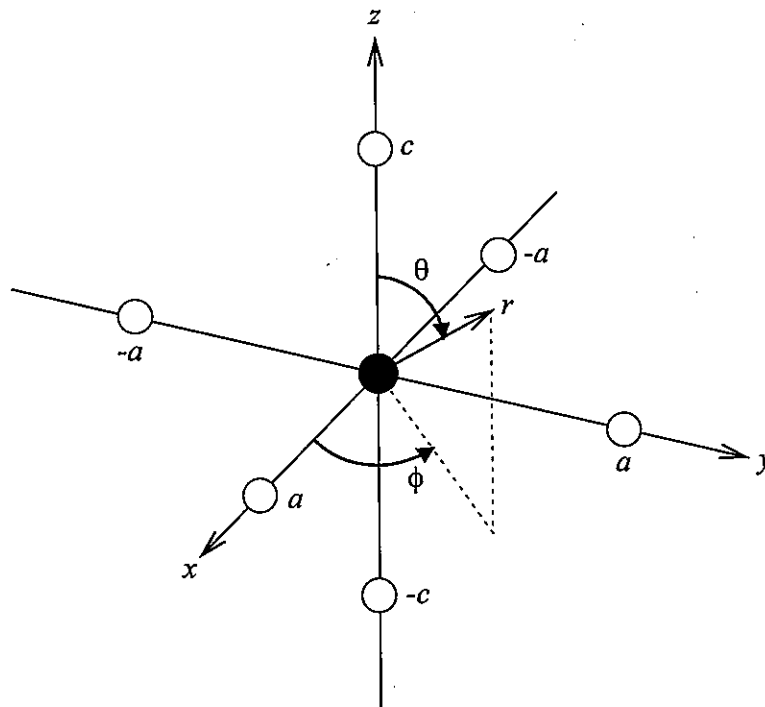


図 1: 陰イオン 8 面体配位中の 3d 遷移金属陽イオン。陽イオン (黒丸) は原点に、陰イオン (白丸) は x 、 y および z 軸上に配置されている。原点から陰イオンまでの距離は x 、 y 方向が a 、 z 方向が c である。

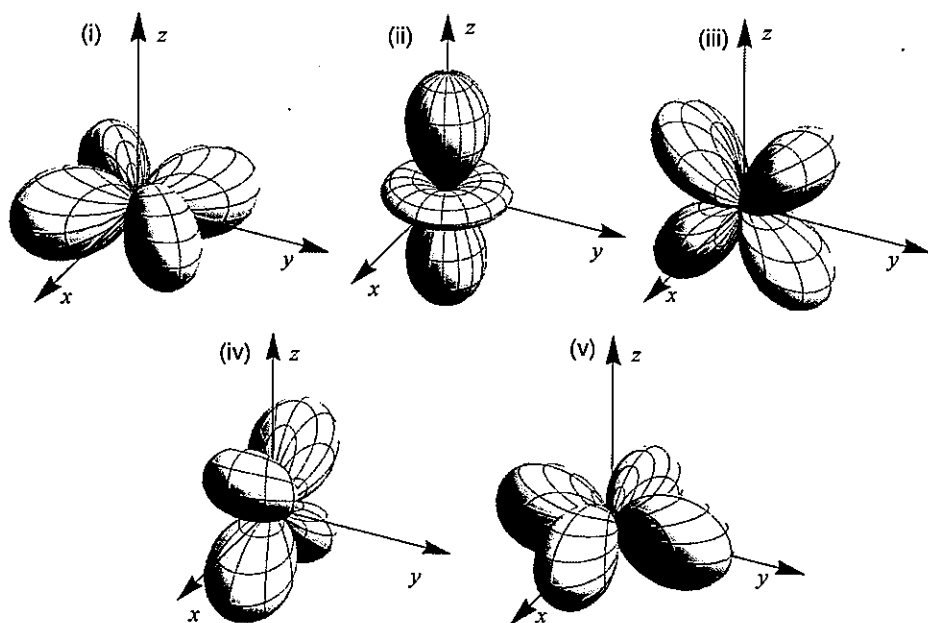


図 2: d_x および d_y 波動関数の方位部分の実空間表示。波動関数の方位部分の振幅を原点からの距離として示している。

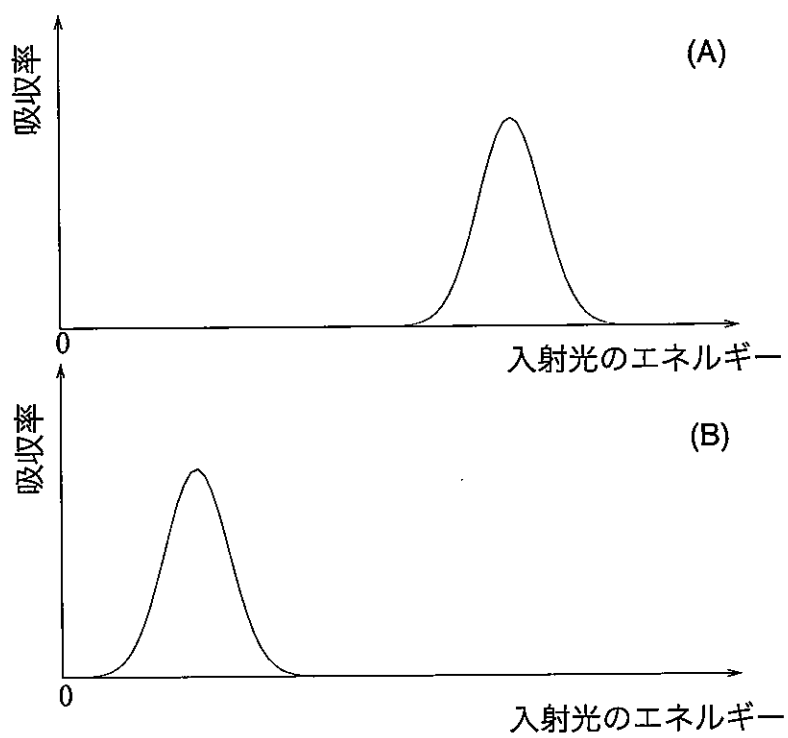


図 3: (A, B) 絶対零度極限での光吸収スペクトル。(A) および (B) は同じエネルギー範囲の測定結果であるが、縦軸は同じスケールではない。