

令和2年度  
大学院融合理工学府博士前期課程 学力検査問題  
(先進理化学専攻・物理学コース)

専門科目(2)(物理学)

試験時間 120分

注意事項

1. 監督者から解答を始めるように合図があるまでは冊子を開かないこと。
2. 問題は全部で4ページある。
3. 問題 I, II の両方に解答すること。
4. 問題 I, II でそれぞれ別の解答用紙を使用すること。1枚の解答用紙に複数の問題を解答してはいけない。また、問題 I, II のそれぞれについて1枚以上の解答用紙を提出すること。
5. 全ての解答用紙の所定欄に、問題番号と受験番号を記入すること(氏名を記入してはいけない)。
6. 別途配布する草稿用紙は回収しない。

# I

## 1次元の Schrödinger 方程式

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x)$$

に従う、 $x$  軸上の有限区間に閉じ込められた（つまり、その区間以外では波動関数  $\psi(x)$  がゼロになる）質量  $m$  の粒子について考える。1次元の場合、束縛状態は離散的なエネルギー固有値を持ち、その固有状態には縮退がないこと、また、その波動関数は実数にとれることが知られている。以下の設問では、これらの結果を証明なしに用いてよい。

1. 有限区間  $[0, a]$  に閉じ込められ、ポテンシャル  $U(x)$  が  $U(x) = 0$  で与えられる場合を考える。

- (1) エネルギー固有値  $E$  と規格化された固有関数  $\psi(x)$  とを求めなさい。
- (2) 基底状態と第1励起状態の固有関数  $\psi(x)$  ( $0 \leq x \leq a$ ) の概略を  $x$  の関数として、それぞれ図示しなさい。

2. 有限区間  $[-L, L]$  に閉じ込められ、ポテンシャル  $U(x)$  が、

$$U(x) = v\delta(x)$$

で与えられる場合を考える。ここで、 $\delta(x)$  は Dirac のデルタ関数であり、 $v$  は実数で  $v \geq 0$  とする。一般に、空間反転  $x \rightarrow -x$  に対して、ポテンシャル  $U(x)$  が  $U(x) = U(-x)$  を満たすとき、縮退がない場合には、固有関数  $\psi(x)$  は定まった偶奇性を持つ、つまり、偶パリティの状態

$$\psi(-x) = \psi(x)$$

あるいは、奇パリティの状態

$$\psi(-x) = -\psi(x)$$

のどちらかに限られることを、以下の設問で証明なしに用いてよい。

- (1) エネルギー固有値  $E$  を  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0$  とおいて ( $k > 0$  とする)、エネルギー固有関数  $\psi(x)$  を

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) & (0 < x \leq L) \\ \psi_0(x) & (x = 0) \\ \psi_2(x) & (-L \leq x < 0) \end{cases}$$

のように領域に分けて  $x$  の関数として表したい。適切な定数  $A$  を用いて、 $\psi_1(x) = A \sin k(L - x)$  とすれば、この  $\psi_1(x)$  は Schrödinger 方程式の解となることを示しなさい。

以下の問題で、 $A$  を求める必要はない。

- (2)  $\psi_1(x) = A \sin k(L - x)$  に対して、偶パリティの状態を記述する波動関数  $\psi_2(x)$  を書き表しなさい。

- (3) 偶パリティの場合に、 $k$ の値を決定するための関係式を求めなさい。それを用いて、 $v$ をゼロから無限大まで連続的に変えるとき、 $k$ の値 ( $k > 0$ ) はどのように変化するか答えなさい。必要なら以下の事実を証明なしに用いてよい。Schrödinger 方程式の両辺を微小区間  $[-\epsilon, +\epsilon]$  で積分することで、波動関数  $\psi(x)$  とその微分  $\psi'(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}$  の間に関係式

$$\lim_{\epsilon \rightarrow +0} [\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)] = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx [U(x) - E]\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2} v\psi(0)$$

が成り立つ、つまり、波動関数は  $x = 0$  で連続であるが、その導関数は不連続になり得る。

- (4)  $\psi_1(x) = A \sin k(L - x)$  に対して、奇パリティの状態を記述する波動関数  $\psi_2(x)$  を求め、 $k$ の値 ( $k > 0$ ) を求めなさい。
- (5) 波動関数  $\psi(x)$  ( $-L \leq x \leq L$ ) の概略を  $x$  の関数として、3つの場合、(a)  $v = 0$ , (b)  $0 < v < \infty$ , (c)  $v = \infty$  に図示しなさい。ただし、偶パリティ、奇パリティそれぞれの場合について、最も低いエネルギー固有値となる場合のみ描けばよい。
- (6) この系の基底状態と第1励起状態のエネルギーは、 $v$ をゼロから無限大まで連続的に変えるときどう変化するか、その概略を、縦軸にエネルギー  $E$  を横軸に  $v$  をとって、一つのグラフに示しなさい。そのようなグラフになる理由も答えなさい。

## II

質量  $m$  , 固有角振動数  $\omega$  を有する  $N$  個の独立な調和振動子が温度  $T$  の熱平衡状態にある。以下の問いに答えなさい。ボルツマン定数  $k_B = 1.381 \times 10^{-23} [\text{J}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}]$  , 換算プランク定数  $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.055 \times 10^{-34} [\text{J} \cdot \text{s}]$  ( $h$  はプランク定数) とする。

1. 振動子が古典力学に従う場合, この系のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q_i^2 \right)$$

で与えられる。このとき, 分配関数  $Z$  , 内部エネルギー  $U = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z$  , エントロピー  $S = -\frac{\partial}{\partial T} (-k_B T \ln Z)$  , 比熱  $C_V$  を求めなさい。

2. 振動子が量子論に従う場合, そのエネルギー準位は  $n=0, 1, 2, \dots$  として

$$\varepsilon_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

と与えられる。このとき, 分配関数  $Z = \left( \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\varepsilon_n/k_B T} \right)^N$  , 内部エネルギー  $U$  , エントロピー  $S$  , 比熱  $C_V$  を求めなさい。

3. 前問2で求めた内部エネルギー  $U$  と比熱  $C_V$  について, 低温および高温での漸近形を求めなさい。
4. 振動子を古典力学的に取り扱った場合, 量子論的に取り扱った場合の両方について, 比熱  $C_V$  を温度  $T$  の関数として図示しなさい。特に, 2つの違いが分かるように描くこと。

結晶の比熱の振る舞いは, 格子振動を量子論的調和振動子の集まりと考えることでほぼ説明できる。Debye モデルでは結晶を弾性体とみなして, その中の弾性波を考え, さらにそれを量子論的調和振動子の集まりと考える。いま, 波数ベクトル  $\mathbf{k}$  と振動数  $\omega$  の間に

$$\omega^2 = c^2 |\mathbf{k}|^2$$

で表されるような分散関係が成り立っているとする。ただし,  $c$  は縦波または横波の速さ,  $|\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$  であり, 周期境界条件を適用すると固有振動の波数ベクトル  $\mathbf{k}$  は

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} (n_x, n_y, n_z), \quad n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

である。ここで,  $L$  は体積  $V (= L^3)$  を有する弾性体の一辺である。

5. 上記の固有振動について振動数が  $\omega$  と  $\omega + d\omega$  の間にある振動モードの数  $D(\omega)d\omega$  が

$$D(\omega) = \frac{\omega^2 V}{2\pi^2 c^3}$$

で表せることを示しなさい。

6. 3次元の弾性体では、1つの縦波と2つの横波が存在する。それぞれの速さを  $c_l, c_t$  とすると  $D(\omega)$  は

$$D(\omega) = \frac{\omega^2 V}{2\pi^2} \left( \frac{1}{c_l^3} + \frac{2}{c_t^3} \right) \equiv \frac{9N}{\omega_D^3} \omega^2$$

で与えられる。ここで、Debye 振動数  $\omega_D$  は、 $\omega_D$  以下の振動数を持つ固有振動の総数が結晶の原子の振動の自由度  $3N$  に等しくなるように定める。つまり、 $\int_0^{\omega_D} D(\omega) d\omega = 3N$ 。

このとき、比熱が Debye 温度  $\Theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{k_B}$  を用いて

$$C_V = 9Nk_B \left( \frac{T}{\Theta_D} \right)^3 \int_0^{\Theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$

で表せることを示しなさい。ただし、 $x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$  である。

7. 前問で示した比熱  $C_V$  について、低温および高温での漸近形をそれぞれ求めなさい。必要であれば  $\int_0^{\infty} \frac{y^4 e^y}{(e^y - 1)^2} dy = 4! \frac{\pi^4}{90}$  を用いなさい。