専門科目（午後）　　　　　　　　　　　　１９　大修

材料物理科学Ａ　　　　　　　　時間　１３：３０～１６：００

物質科学創造Ｄ

注意事項

１．３つの問題全てに解答せよ。

２．解答は１問題ごとに別々の解答用紙に記入せよ。必要なら、その旨記して裏に書いてもよい。

３．各解答用紙には必ず問題の番号および受験番号を記入せよ。

４．各解答用紙は、解答を記入していないものも含めて全て提出せよ。

[1] 電荷eを持つ質量mの粒子が角振動数ωで振動する1次元調和振動子を考える。以下の問に答えよ。

(a) 外部電場がない場合の量子力学的なハミルトニアン演算子$\hat{H}_0$は,

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

と表される。ここで, xは粒子の座標, $\hbar$はプランク定数を2πで割ったものである。$\hat{H}_0\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$を満たす1次元調和振動子の波動関数$\psi_n(x)$ ($n = 0,1,2\cdots$)は,

$$\psi_n(x) = N_n \exp\left(-\alpha^2 x^2/2\right) G_n(\alpha x)$$

と求められる。ただし, $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$, $N_n = \left\{\alpha\Big/\left(\sqrt{\pi}\,2^n n!\right)\right\}^{1/2}$

$$\begin{cases} G_0(\alpha x) = 1 \\ G_1(\alpha x) = 2\alpha x \\ G_2(\alpha x) = 4(\alpha x)^2 - 2 \end{cases}$$

$G_n(\alpha x)$は, エルミート多項式と呼ばれる直交多項式である。

(1) $n = 0, 1$の場合の波動関数, $\psi_0(x)$と$\psi_1(x)$の概略をグラフで示せ。

(2) 基底状態のエネルギーE_0を$\hat{H}_0\psi_0(x) = E_0\psi_0(x)$から導け。

(3) $\langle\psi_0(x)|x|\psi_0(x)\rangle = 0$, $\langle\psi_0(x)|x^2|\psi_0(x)\rangle = \dfrac{1}{2\alpha^2}$, $\langle\psi_0(x)|x^3|\psi_0(x)\rangle = 0$であることを導け。

必要ならば, 以下の積分公式を用いよ。

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n+1}e^{-Rx^2}dx = 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n}e^{-Rx^2}dx = \frac{(2n-1)!!}{2^n}\sqrt{\frac{\pi}{R^{2n+1}}}$$

$$R > 0, \quad (2n-1)!! = (2n-1)(2n-3)\cdots 3\cdot 1, \quad 0! = 0!! = 1$$

(b) 次に, 時間に依存しない強さFの一様な外部電場のもとでのハミルトニアン演算子$\hat{H}$は,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \quad \hat{H}' = -eFx$$

と表されるものとする。電場Fが十分に弱いときのエネルギーEを変分法によって求める。試行関数として, $\phi(x) = N\psi_0(x)(1 + \beta x)$を考える。ここで$\beta$は変分パラメータ, Nは規格化定数である。

(4) 規格化定数Nを求めよ。

(5) $E(\beta) = \dfrac{\langle\phi(x)|\hat{H}|\phi(x)\rangle}{\langle\phi(x)|\phi(x)\rangle} = E_0 + \dfrac{\dfrac{\hbar^2\beta^2}{2m} - \dfrac{\beta eF}{\alpha^2}}{1 + \dfrac{\beta^2}{2\alpha^2}}$であることを示せ。

必要ならば, $\Phi_0(x) = \psi_0(x)x$として$\langle\Phi_0(x)|\hat{H}_0|\Phi_0(x)\rangle = E_0\langle\psi_0(x)|x^2|\psi_0(x)\rangle + \dfrac{\hbar^2}{2m}$の関係を用いよ。

(6) $E(\beta)$をβ^2の項まで残して変分することで, $E(\beta)$の最小値を求めよ。

[2] イギリスの物理学者 J.H. ポインティングは，電磁場のマクスウェル方程式を用いて以下の関係式を導出した。

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\{\frac{1}{2}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)\cdot\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},t)+\frac{1}{2}\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)\right\}+\nabla\cdot\{\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)\times\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)\}=-\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) \tag{i}$$

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},t)\times\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) \tag{ii}$$

ここで，式 (i) の $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$，$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)$，$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},t)$，$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)$，$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)$ はそれぞれ，位置 $\boldsymbol{r}=(x,y,z)$，時刻 t における電場，磁場，電束密度，磁束密度，電流密度を表している。また，式 (ii) の $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{r},t)$ は運動量密度と呼ばれ，ポインティング・ベクトル $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)\times\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r},t)$ と $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{S}(\boldsymbol{r},t)/c^2$ の関係にある。これらの関係式を参考に，SI 単位系を用いて以下の問に答えよ。ただし，真空の誘電率，透磁率はそれぞれ ϵ_0，μ_0 とし，$c=1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ である。

(1) 真空中に，角周波数 ω で y 方向に振動する電場 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)=(0,E_0\sin(kx-\omega t),0)$ を持つ電磁波がある。ここで，E_0 は電場の振幅，k は電磁波の波数を表す。このとき，マックスウェル方程式 $\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)=-\partial\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)/\partial t$ を解くことにより，磁束密度 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)$ を求めよ。また，電場の振幅と磁束密度の振幅との関係を示せ。

(2) 問 (1) のとき，電磁波のポインティング・ベクトルの大きさと方向を求めよ。また，磁場と電場のエネルギー密度を求め，式 (i) が成り立つことを示せ。

(3) 図1のように半径 r_1 の無限に長いソレノイドコイルを，その中心軸が z 軸と平行になるように真空中に置く。定常電流 I_0 がこのソレノイドコイルを図中の矢印の方向（ソレノイドコイルを z 軸の正の方向から見たときに反時計回りに回る方向）に流れているとき，コイルの内側の磁場の強さと，コイルの中心軸から距離 r $(r>r_1)$ の位置におけるベクトルポテンシャルの大きさを求めよ。そして，磁場の方向とベクトルポテンシャルの方向を図2（図1の簡略図）を答案用紙に書き写して図中に矢印で示せ。ただし，ソレノイドコイルの z 方向単位長さあたりの巻数を n とする。

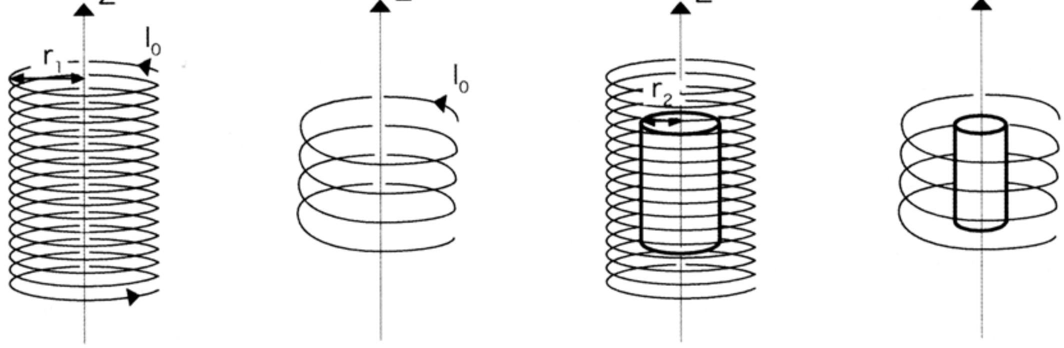

図１　　図２　　図３　　図４

＜次ページに続く＞

(4) このソレノイドコイルを貫く磁束 Φ が変化しないとき，ソレノイドコイルの z 方向単位長さあたりの磁場のエネルギーを Φ を用いて表せ。この場合，ソレノイドコイルにはマクスウェル応力と呼ばれる張力が働く。そのため，ソレノイドコイルの半径を一定に保つためには，コイルの側面に圧力を加える必要がある。この圧力の大きさを求めよ。

(5) 面密度 σ の一様な電荷を持つ，半径 r_2，長さ ℓ の厚さの無視できる絶縁性の円筒を，問 (3) のソレノイドコイルの中央に，円筒軸とソレノイドコイルの軸とが一致するように静止して置く（図３参照）。このとき，円筒の電荷によって生じる，円筒軸から距離 r $(r_2 \leq r \leq r_1)$ の位置での電場の強さ，ポインティング・ベクトルの大きさ，角運動量密度の大きさを求めよ。ここで，角運動量密度は運動量密度 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{r},t)$ の z 軸回りのモーメントである。また，図４（図３の簡略図）を答案用紙に書き写して，角運動量密度の方向を図中に矢印で示せ。ただし，円筒の長さ ℓ は端の効果が無視できる程度に長く，円筒の半径 r_2 はソレノイドコイルの半径 r_1 に比べて十分小さく，円筒の電荷によって生じる電場はソレノイドコイルに全く影響を与えないものとする。また，ソレノイドコイルの外側への漏れ磁場は無視する。

[3]　多数の微視的で同等な粒子によって構成される系を A とする。ただし，各粒子の位置は固定されているものとする。このような系 A の微視的な内部状態の数 Ω と巨視的なエントロピー S との間には，以下の関係が成立する。

$$S = k\ln\Omega \tag{i}$$

ここで，ln は自然対数を示し，k はボルツマン定数を表している。今，系 A を構成する全ての粒子は，縮退していない 3 種類の異なるエネルギー ε_1，ε_2 あるいは ε_3 のどれか一つの値をとるものとする。その際，エネルギーが ε_1，ε_2 および ε_3 となる粒子の個数をそれぞれ n_1，n_2 および n_3 とすると，微視的な内部状態の数 Ω は次式のように求められる。

$$\Omega = \sum \Omega_i = \sum \frac{N!}{n_1!n_2!n_3!} \tag{ii}$$

ここで，Ω_i は与えられた n_1，n_2 および n_3 の値に対する組み合わせの数を示し，下付添字 i は n_1，n_2 および n_3 の組み合わせの種類を示している。また，$\sum \Omega_i$ は全ての可能な n_1，n_2 および n_3 の組み合わせに対する Ω_i の総和を表している。一方，N は粒子の総数であり，次式のように定義される。

$$n_1 + n_2 + n_3 = N \tag{iii}$$

また，系 A の巨視的なエネルギーを E とすると，以下の関係が成り立つ。

$$\varepsilon_1 n_1 + \varepsilon_2 n_2 + \varepsilon_3 n_3 = E \tag{iv}$$

ここで，N および E は一定とする。このような条件をふまえ，以下の問に答えよ。

(1)　Ω_i の値が最大となる微視的な内部状態が，最も高い確率で実現される。また，粒子の総数 N が十分に大きな値であれば，Ω_i の最大値 $\Omega_{\max}$ のみがエントロピー S に寄与すると考えてもよい。その場合には，$\Omega = \Omega_{\max}$ とみなすことができる。そこで，$\Omega_{\max}$ に対する n_1，n_2 および n_3 の値をそれぞれ n_1^*，n_2^* および n_3^* とし，$\Omega = \Omega_{\max}$ の関係を式 (i) に代入した際のエントロピー S の表現式を求めよ。ただし，$\ln N! = N\ln N - N$ とみなして計算できるものとする。

(2)　上記 (1) のエントロピー S に対する全微分を求めよ。同様に，式 (iii) および式 (iv) に対する全微分を求めよ。

(3)　エントロピー S が最大値に達する微視的な内部状態を平衡状態と呼ぶ。平衡状態では S の全微分 $\mathrm{d}S$ が 0 となる。そこで，上記 (2) で求めた 3 種類の全微分式を用いて，平衡状態に対する n_1^*，n_2^* および n_3^* をラグランジュの未定係数法により求めよ。その際，式 (iii) および式 (iv) の全微分式に対する未定係数をそれぞれ α および β とせよ。

(4)　上記 (3) の結果に基づき，未定係数 α を求めよ。

(5)　上記 (3) で求めた n_1^*，n_2^* および n_3^* と上記 (4) で求めた α を上記 (1) のエントロピー S の表現式に代入し，未定係数 α を含まない S の表現式を求めよ。

〈次ページに続く〉

(6)　系 A の体積および温度をそれぞれ V および T とすると，平衡状態では式 (v) の関係が成立する。上記 (5) の結果や式 (v) の関係を用い，未定係数 β を求めよ。

$$\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{V,N} = \frac{1}{T} \tag{v}$$

(7)　上記 (5) および (6) の結果に基づき，未定係数 β を含まないエントロピー S の表現式を求めよ。