専門科目（午後）　　　　　　　　　　　２１　大修

材料物理科学（物理系）　　　　　　時間 13：30〜16：00

物質科学創造（物理系）

注意事項

１．　２つの問題全てに解答せよ。

２．　解答は１問題ごとに２枚の解答用紙を使って別々に記入せよ。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］ 以下の問に答えよ。

(a) 準静的過程のもとでの系の状態変化について、(1)〜(4)の熱力学的関係式を導け。また、(5)、(6)の問に答えよ。ただし、系の温度、圧力、体積をそれぞれT、P、V、定積熱容量をC_V、内部エネルギーをU、エントロピーをSと表すことにする。

(1) $\left(\dfrac{\partial U}{\partial S}\right)_V = T$

(2) $\left(\dfrac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\dfrac{\partial P}{\partial T}\right)_V$

(3) $C_V = T\left(\dfrac{\partial S}{\partial T}\right)_V$

(4) $dU = C_V dT + \left[T\left(\dfrac{\partial P}{\partial T}\right)_V - P\right]dV$

(5) (4)の関係式から、物質量一定の理想気体の内部エネルギーは体積に依存しないことを示せ。

(6) 熱力学の第2法則について説明せよ。また、準静的断熱過程ではエントロピーが変化しないことを示せ。

(b) 格子点に固定された電子N個からなる体積一定の系を考える。これらの電子には熱平衡状態が達成され、外部磁場H中での系の全内部エネルギーUが、

$$U = g\mu_{\mathrm{B}}H\sum_{i=1}^{N} s_{z,i} \quad \cdot\cdot\cdot\cdot\cdot \text{(i)}$$

で与えられるとする。ここで、外部磁場の向きをz軸の正の向きとする。また、g、μ_{B}、$s_{z,i}$は、それぞれランデのg因子、ボーア磁子、スピン角運動量の磁気量子数である。以下の問に答えよ。
ただし、ボルツマン定数をk_{B}とし、系のヘルムホルツの自由エネルギー、エントロピー、絶対温度をそれぞれF、S、Tと表すことにする。

(7) 電子の軌道角運動量が無視できるとき、自由電子のランデのg因子の値を有効数字1桁で答えよ。また、電子1個の持つ磁気モーメントの大きさμ_{S}を求めよ。

(8) この電子N個からなる系について、外部磁場H中での分配関数を電子の磁気モーメントの大きさμ_{S}を用いて表せ。

<次ページに続く>

(9) (8)で求めた式から、Fを計算せよ。

(10) Fを外部磁場Hと絶対温度Tの関数として考えると、$F(T,H)$の全微分は、係数A、Bを用いて、

$$dF = AdT + BdH \quad \cdot\cdot\cdot\cdot\cdot \text{(ii)}$$

と表すことができる。ここで、$A=-S$である。Sを計算せよ。また、Tが十分に大きいときのSの極限値を求め、このような極限値が得られる物理的理由を述べよ。

(11) (ii)式のBを具体的に計算することで、$-B$がこの系の全磁化Mであることを示せ。また、$k_B T >> \mu_S H$が成り立つ高温近似の範囲では、全磁化Mが$M \propto \dfrac{H}{T}$（キュリーの法則）を満たすことを示せ。

(12) (10)で求めたSは$\dfrac{T}{H}$のある関数$f\left(\dfrac{T}{H}\right)$を用いて$Nf\left(\dfrac{T}{H}\right)$と表すことができる。このことから、$S$が$\dfrac{T}{H}$の単調増加関数となる理由を述べよ。

(13) 外部磁場H_1のもとでこの系の温度はT_1であった。準静的断熱過程で外部磁場をH_1からH_2まで変化させると温度がT_2になった。T_2を求めよ。

[2] 以下の問に答えよ。ただし、粒子の質量を m、プランク定数を2πで割った値を$\hbar$、エネルギーをEとする。また、$a>0$、$V_0>0$である。

(a) まず、x軸上の$-a<x<a$で$V(x)=0$、$|x|\geq a$で$V(x)=V_0$である 1 次元の井戸型ポテンシャル$V(x)$中での定常状態の粒子の波動関数を考える。

(1) $V(x)$中の粒子の波動関数$u(x)$が満たすべき、時間に依存しないシュレディンガー方程式を書け。

(2) $V_0=\infty$のときの波動関数$u(x)$を求めよ。ただし、規格化は行わなくてよい。

(3) (2)の場合について、最も小さいエネルギー固有値および2番目に小さいエネルギー固有値に対応するそれぞれの波動関数$u(x)$を横軸xに対して図示せよ。

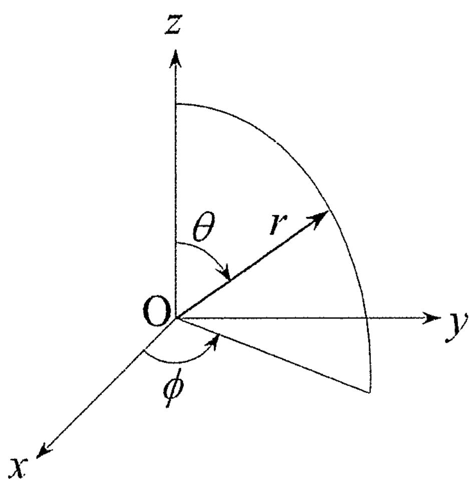
(4) V_0が有限値のとき、$|x|\geq a$での波動関数$u(x)$が$u(x)=Ce^{-\beta x}+De^{\beta x}$ (C、D は定数)の形で表わされることを利用し、$x=\pm a$において$-a<x<a$での波動関数と$|x|\geq a$での波動関数が接続することを考え、エネルギー固有値を持つ条件として$\alpha\cot(\alpha a)=-\beta$あるいは$\alpha\tan(\alpha a)=\beta$が満たされなければならないことを示せ。ここで$\alpha=\left(\dfrac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$、$\beta=\left[\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}}$である。

(5) $V_0=\dfrac{9\pi^2\hbar^2}{16ma^2}$のとき、$E=\dfrac{9\pi^2\hbar^2}{32ma^2}$がエネルギー固有値のひとつとなることを示せ。また、このときの波動関数$u(x)$を横軸xに対して図示せよ。ただし、規格化は考えなくてよい。

(6) $V_0=\dfrac{9\pi^2\hbar^2}{16ma^2}$のとき、$E=\dfrac{9\pi^2\hbar^2}{32ma^2}$よりも小さなエネルギー固有値を持つ状態が存在する理由を簡単に説明せよ。

(b) 次に、原点からの距離$r<a$で$V(r)=0$、$r\geq a$で$V(r)=V_0$である3次元の球対称の井戸型ポテンシャル$V(r)$中での定常状態の粒子の波動関数を考える。

(7) 右図に示すような球座標($0\leq r, 0\leq\theta\leq\pi, 0\leq\phi<2\pi$)を用いると、時間に依存しないシュレディンガー方程式は、



<次ページに続く>

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]u(r,\theta,\phi)+V(r)u(r,\theta,\phi)=Eu(r,\theta,\phi)$$

と書ける。このとき、球対称の井戸型ポテンシャル$V(r)$中での粒子の波動関数$u(r,\theta,\phi)$を$u(r,\theta,\phi)=R(r)\,\Omega(\theta,\phi)$で表わすと、変数分離を行うことによって、このシュレディンガー方程式を$R(r)$と$\Omega(\theta,\phi)$のそれぞれが独立に満たすべき微分方程式に分離できる。$R(r)$が満たすべき微分方程式は、$\Omega(\theta,\phi)$を具体的に求めることによって、

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left[r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right]+\left[V(r)-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]R(r)=ER(r)$$

で与えられる。ただし、lは0または正の整数で、軌道角運動量量子数である。このとき$\dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$の項の物理的意味を書け。また、$\Omega(\theta,\phi)$が満たすべき微分方程式を書け。

(8) $\chi(r)\equiv rR(r)$で定義される関数$\chi(r)$が満たすべき微分方程式を書け。

(9) $V_0=\infty$のとき、$l=0$の場合の$R(r)$を求めよ。ただし、規格化は行わなくてよい。

(10) (9)の場合について、最も小さいエネルギー固有値の状態に対応した$\chi(r)$と$R(r)$を横軸rに対して図示せよ。

(11) $V_0=\dfrac{9\pi^2\hbar^2}{16ma^2}$の場合には、$l=0$で$E=\dfrac{9\pi^2\hbar^2}{32ma^2}$がエネルギー固有値のひとつになることを示せ。

(12) $V_0=\dfrac{9\pi^2\hbar^2}{16ma^2}$の場合には、$l=0$で$E=\dfrac{9\pi^2\hbar^2}{32ma^2}$よりも小さなエネルギー固有値を持つ状態が存在するかどうか、理由とあわせて答えよ。

(13) $V_0<\dfrac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$の場合には$l=0$の束縛状態が存在しないことを示せ。

(14) (13)に示すように$V_0<\dfrac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$の場合には$l=0$の束縛状態が存在しない。このことをふまえて、$V_0=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$のときに$l=1$の束縛状態が存在するかどうか、理由とあわせて答えよ。