専門科目（午後）　　　　　　　　　　　　　２２　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。

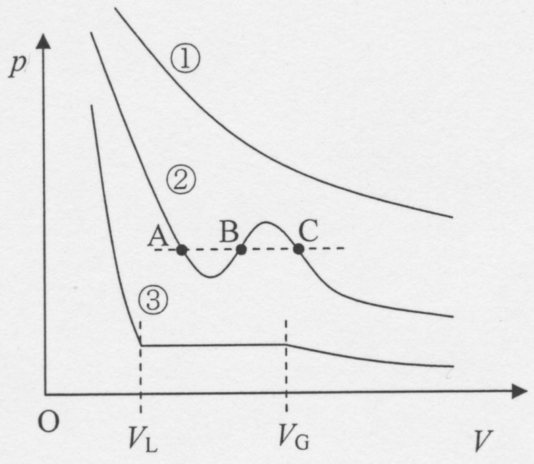
２．解答は１問題ごとに１枚の解答用紙を使って別々に記入せよ。必要ならば、その旨記して裏に書いてもよい。

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) 1モルの1成分系の、ある温度 T における圧力 p と体積 V の関係（等温線）について以下の問 (1)-(4) に答えよ。



(1) この系が van der Waals の状態方程式

$$\left(p+\frac{a}{V^2}\right)(V-b)=RT$$

で表される場合について考える。ただし、R は気体定数であり、a、b はそれぞれ正の定数である。等温線は T の関数として変化してゆく。$T > T\mathrm{c}$ の時は図の ① のように単調関数となるが、$T < T\mathrm{c}$ では ② のように極値を持つようになる。$T = T\mathrm{c}$ の時の p、V を R、a、b を用いて表せ。さらに、$T\mathrm{c}$ を R、a、b を用いて表せ。また、この $T\mathrm{c}$ を何と言うか。

(2) 等温線 ② 上の $dp/dV > 0$ を満たす領域の一点を B とし、B を含みかつ p が一定の直線と等温線 ② との交点を図のように A、C とする。点 A、B、C におけるギブスの自由エネルギーを G(A)、G(B)、G(C) とする。G(B) と G(A) の大小関係および G(B) と G(C) の大小関係を、それぞれ理由とともに示せ。

(3) $T < T\mathrm{c}$ において、現実には $dp/dV > 0$ となる領域は現れず、③ のような等温線が実現する。等温線 ③ では、p が一定の値を保つのは $V_L \leqq V \leqq V_G$ の領域である。この領域では、液相・気相が共存した状態となっている。この時の p の値を何と呼ぶか。さらに、等温線 ③ 上の状態についてヘルムホルツの自由エネルギー F が V の関数としてどのようにふるまうか、$\dfrac{\partial^2 F}{\partial V^2}$ の値に注意して図示せよ。

(4) 等温線 ③ において x モルの液体と $(1\text{-}x)$ モルの気体の混合状態が実現している時、$x/(1\text{-}x)$ を V_L、V、V_G で表せ。

<次ページに続く>

(b) 以下の問 (5)-(8) に答えよ。

調和振動子１個のエネルギー固有値は、固有角振動数ωを用い

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

$(n = 0, 1, 2, \ldots)$

と表される。ただし、$\hbar$ はプランク定数を 2π で割ったものである。

(5) 調和振動子１個に対する分配関数

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta E_n)$$

を求めよ。ただし、$\beta = \dfrac{1}{kT}$ であり、k はボルツマン定数、T は温度である。

(6) 調和振動子１個のエネルギーの期待値を求めよ。

この期待値から、温度に依存しない項を差し引いたものを$\varepsilon(\omega,T)$とする。このような調和振動子 N_i 個から成る系を考え、その系のエネルギーは

$$U = \int_0^{\infty} \varepsilon(\omega,T) g(\omega) d\omega$$

で与えられるものとする。ただし、ω_D を定数として

$$g(\omega) = \frac{9N_i\omega^2}{\omega_D{}^3} \quad (0 < \omega \leqq \omega_D)$$

$$g(\omega) = 0 \quad (\omega_D < \omega)$$

である。

(7) $kT << \hbar\omega_D$ となるような低温において、比熱 $C \propto \dfrac{\partial U}{\partial T}$ が T^3 に比例することを示せ。

(8) $kT >> \hbar\omega_D$ となるような高温において、$\dfrac{\partial U}{\partial T}$ を $\dfrac{1}{T}$ の２次の項まで計算せよ。

[2]　以下の問に答えよ。ただし、プランク定数を2πで割ったものを$\hbar$とせよ。

i)　x方向に進行する質量mの粒子が図１の１次元ポテンシャル$V(x)$にエネルギーEで入射することを考える。
ここで

$$V(x) = 0 \qquad (x < 0)$$
$$V(x) = V_1 \qquad (x \geq 0)$$

V_1は０より大きい有限の値とする。以下の問に答えよ。

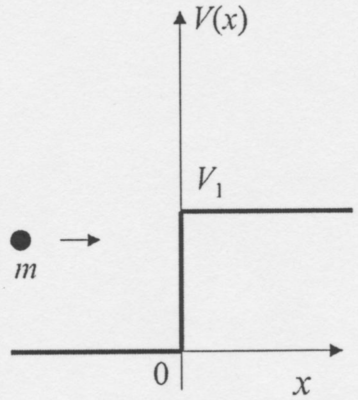


図１

(a)　$E > V_1$のときを考える。

(1)　$x < 0$および$x \geq 0$の領域における時間に依存しないシュレディンガー方程式を記せ。ただし$x < 0$および$x \geq 0$の領域における波動関数をそれぞれ$\phi_0(x)$および$\phi_1(x)$とせよ。

(2)　$x = 0$において波動関数$\phi_0(x)$と$\phi_1(x)$が満たすべき連続条件の式を求めよ。

(3)　透過確率を求めよ。

(4)　$x < 0$における粒子のド・ブロイ波長を求めよ。

(b)　$E < V_1$のときを考える。

(5)　$x < 0$および$x \geq 0$の領域における波動関数の概略を図示せよ。

(6)　反射確率を求めよ。

ii)　ハミルトニアン$\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + \dfrac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$で表される、質量$m$の粒子の１次元調和振動子について考える。ここで$\omega$は固有角振動数、$\hat{p}$と$\hat{x}$はそれぞれ運動量演算子と位置演算子である。
以下の問に答えよ。

(7)　以下に示す波動関数$\varphi_0(x,t)$と$\varphi_1(x,t)$が時間tに依存するシュレディンガー方程式の解であり、エネルギー固有値が$E_0 = \dfrac{\hbar\omega}{2}$と$E_1 = \dfrac{3\hbar\omega}{2}$となることを示せ。ただし、$i$は虚数単位$\sqrt{-1}$とする。

$$\varphi_0(x,t) = \exp(-iE_0 t/\hbar)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2)$$

$$\varphi_1(x,t) = \exp(-iE_1 t/\hbar)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} x\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2)$$

(8)　$t = 0$において$|\varphi_0(x,t)|^2$をグラフに書け。

(9)　プランク定数を有効数字２桁で書け。また単位も書け。

<次ページに続く>

(10)　$E_0 = \dfrac{\hbar\omega}{2}$ をエネルギーの固有値とする状態における粒子の位置の期待値を求めよ。

(11)　波動関数 $\varphi_0(x,t)$ と $\varphi_1(x,t)$ の線形結合で表される状態の波動関数 $\Psi(x,t)$ を考える。
ここで

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_0(x,t) + \varphi_1(x,t)\right)$$

とする。この状態でのエネルギー期待値を求めよ。

(12)　上に示した波動関数 $\Psi(x,t)$ で表される状態での粒子の位置の期待値を求めよ。

ここで $\displaystyle\int_0^\infty x^2 \exp(-ax^2)dx = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$ 　（ただし $a > 0$）であることを用いても良い。