

物 理 工 学 専 攻 入 学 試 験 問 題

物 理 学 I

(2 問出題, 2 問解答)

平成26年8月26日(火) 9:30~11:30

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った場合には申し出ること。
3. 出題された2問とも解答すること。
4. 答案用紙が2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

図1に示すように、質量 m 、半径 a の一様な剛体球が、水平な床に平行な軸を中心に角速度 $\omega(>0)$ で自転しながら床に垂直に衝突したところ、 x 方向の速度 $v'(<0)$ 、角速度 ω' で跳ね返った。ただし、 x 軸および回転の正方向を図1の矢印のようにとる。このとき、以下の問いに答えよ。

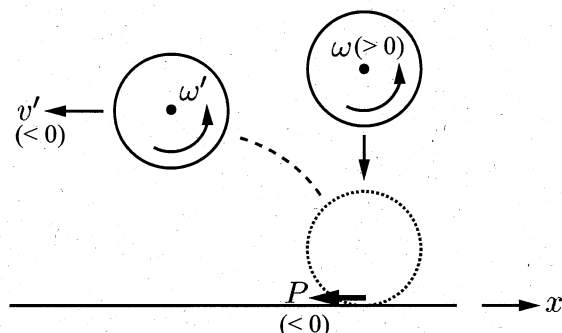


図1

- [1] この球の中心を通る軸の周りの慣性モーメント I が、 $I = \frac{2}{5}ma^2$ で与えられることを示せ。
- [2] 衝突時、球は床に対してすべらなかった。このとき v' と ω' の関係を示せ。ここで、球が床に対してすべらないとは、衝突直後の球の接触点の水平方向の速度が、床に対して0であることを意味する。
- [3] 図1のように、衝突時に球には床から摩擦による力積 $P(<0)$ が水平方向に働く。このとき、運動量と角運動量それぞれについて、衝突前後の関係を P を用いて表せ。さらに、[2] の条件の下で、衝突後の球の角速度 ω' を ω を用いて表せ。

次に、図2のように、同じ剛体球が摩擦のある床で繰り返し跳ね返る運動を考える。この球がある高さから x 方向に速度 $v_0(>0)$ 、角速度 $\omega_0(>0)$ で床に平行に打ち出されたとき、床との1回目の衝突で球には水平方向に力積 $P_1(<0)$ が働き、 x 方向の速度 v_1 、角速度 ω_1 で跳ね返った。その後、球は反跳を繰り返した。反発係数は1より小さく、球は一定時間の後、跳ね返らなくなり、一定の並進速度 v_f ですべらず転がった。ただし、 x 軸および回転の正方向を図2の矢印のようにとり、自転の軸は床に平行かつ x 軸に垂直である。

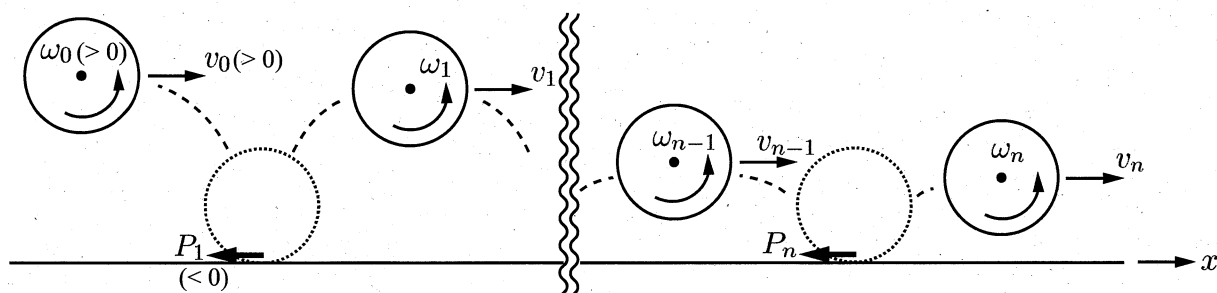


図2

- [4] n 回目の反跳で、球は x 方向の速度 v_{n-1} 、角速度 ω_{n-1} で床に衝突し、床から摩擦による力積 P_n を受け、 x 方向の速度 v_n 、角速度 ω_n となった。このとき、運動量と角運動量それぞれについて、跳ね返り前後の関係を P_n を用いて示せ。また、 n 回目に床で跳ね返った後の球の x 方向の速度 v_n と角速度 ω_n を用いた物理量

$$l = I\omega_n - amv_n$$

は n にらず常に一定であることを示せ。

- [5] 反跳が終わった直後の速度 v_f を m 、 a 、 l を用いて表せ。また、反跳が終わったとき転がらず $v_f = 0$ となるための、速度 v_0 と角速度 ω_0 の関係を求めよ。

第2問

真空中に置かれた無限に長い直線状の線電荷が作る静電ポテンシャルを考える。ただし、線電荷の密度は一様とし、真空中の誘電率を ε_0 とする。

- [1] 図1のように線電荷密度 λ の線電荷が z 軸上にあるとき、 $(x, y) = (r \cos \theta, r \sin \theta)$ での電場ベクトルの大きさ $E(r)$ を求め、静電ポテンシャル $\phi(r)$ が式 (1) のように表されることを示せ。ただし、静電ポテンシャルは $r = r_0$ でゼロになるように設定している。

$$\phi(r) = -\frac{\lambda}{2\pi\varepsilon_0} \ln \frac{r}{r_0} \quad (1)$$

- [2] 図2のように線電荷密度 λ の線電荷が $(x, y) = (a, 0)$ の位置に、さらに線電荷密度 $-\lambda$ の線電荷が $(b, 0)$ の位置に、それぞれ z 軸に平行に置かれている。このとき、 $(x, y) = (r \cos \theta, r \sin \theta)$ における全体の静電ポテンシャル $\phi(r, \theta)$ を求めよ。ただし、 $0 < a < b$ とする。

図1

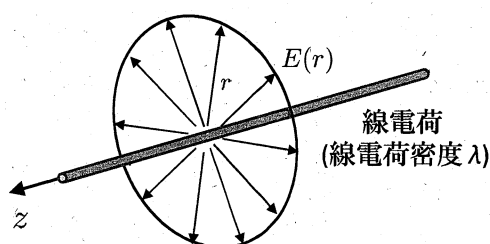


図2

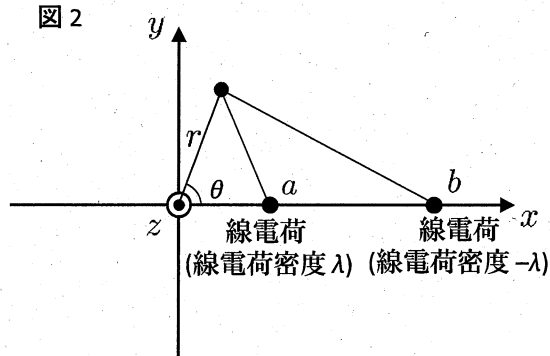


図3のように、 z 軸を中心軸とした半径 R の無限に長い円柱状の空洞がある導体と、その空洞内に z 軸と平行に置かれた無限に長い線電荷 (線電荷密度 λ) を考える。導体は接地されており、無限に大きいものとする。このとき、線電荷から生じる電場によって導体の内側表面には誘導電荷が生じる。この誘導電荷の分布を鏡像法を用いて導出することにする。

導体上では静電ポテンシャルが一定値となることから、線電荷と鏡像電荷の全体が作る静電ポテンシャルが導体の内側表面で一定値となるように鏡像電荷を配置する。図4のように円柱の中心軸を z 軸とし、 $(x, y) = (d, 0)$ の位置に線電荷密度 λ の線電荷が、 $(x, y) = (D, 0)$ の位置に線電荷密度 $-\lambda$ の鏡像電荷があるとして下記の問いに答えよ。ただし、 $0 < d < R < D$ とする。

- [3] 初めに導体が無いと仮定して、 $(x, y) = (r \cos \theta, r \sin \theta)$ における線電荷と鏡像電荷の全体が作る静電ポテンシャルを計算し、 $r = R$ で静電ポテンシャルが一定値となるための必要条件が $D = R^2/d$ であることを示せ。これより、空洞内 ($r < R$) における静電ポテンシャル $\phi(r, \theta)$ を D を使わずに表せ。
- [4] 導体の内側表面に誘起される電荷の面密度 σ は、静電ポテンシャルから式 (2) を使って求められる。

$$\sigma = -\varepsilon_0 \frac{\partial \phi}{\partial n} = \varepsilon_0 \left(\frac{\partial \phi}{\partial r} \right)_{r=R} \quad (2)$$

ここで $\partial \phi / \partial n$ は静電ポテンシャルの導体内側表面における法線方向の微分を表す。これより、導体内側表面上の位置 $(x, y) = (R \cos \theta, R \sin \theta)$ において誘起される電荷の面電荷密度 $\sigma(\theta)$ を求めよ。

図 3

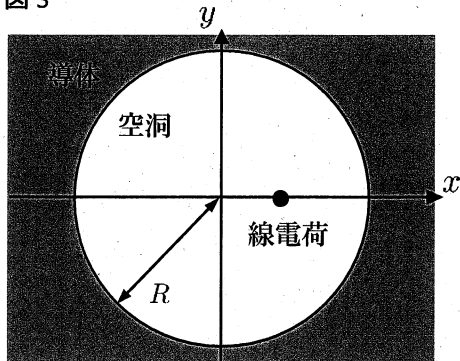
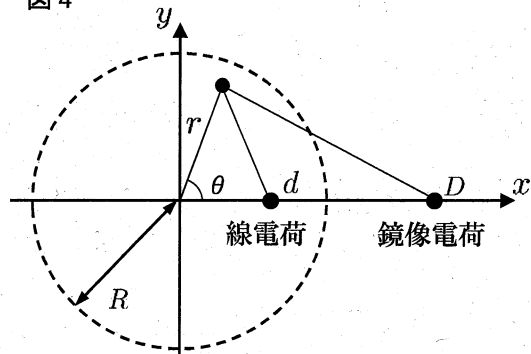


図 4



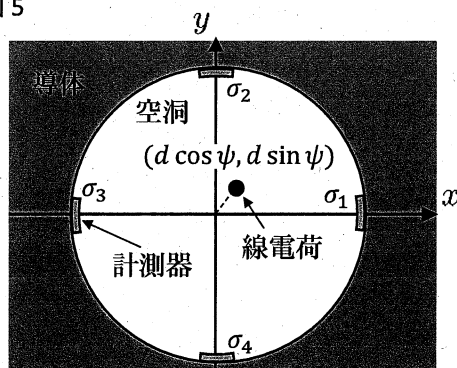
- [5] 設問 [4] で求めた面電荷密度を導体内側表面の円周に沿って周回積分することで、 z 軸方向の単位長さあたりに誘起される導体内側表面の電荷が、 $-\lambda$ になることを示せ。必要であれば式 (3) の公式を使って良い。

$$|a| < 1 \text{ のとき、 } \frac{1 - a^2}{1 - 2a \cos x + a^2} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} a^n \cos nx \quad (3)$$

導体の内側表面に誘起された面電荷密度を測定することで、線電荷の位置を決定することができる。図 5 に示すように、線電荷が空洞内の位置 $(x_0, y_0) = (d \cos \psi, d \sin \psi)$ ($d < R$) にあるときに、導体の内側表面上の $\theta = 0, \pi/2, \pi, 3\pi/2$ の位置において誘起された面電荷密度を測定したところ、それぞれ $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4$ となった。ただし、電荷密度を測定する計測器は大きさが無視でき、線電荷がつくる静電ポテンシャルに影響を与えないものとする。

- [6] 線電荷の位置 (x_0, y_0) を R と面電荷密度 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4$ を使って表せ。ただし、線電荷は z 軸に十分近いとし、式 (3) を使って d/R に関して 2 次以上の項は無視して良い。

図 5



物 理 工 学 専 攻 入 学 試 験 問 題

物 理 学 II

(4 問出題, 3 問解答)

平成26年8月26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っ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

図1のように2つの極小点を持つ1次元ポテンシャル $U(x)$ を考える。

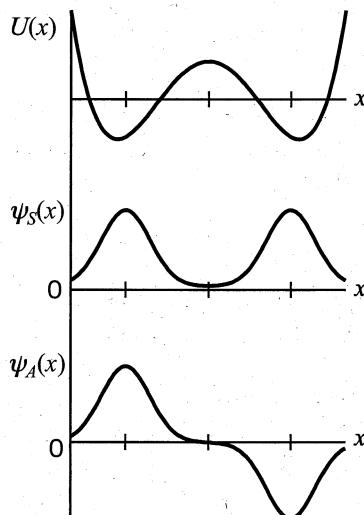


図1: ポテンシャル $U(x)$ とその固有状態 $\psi_S(x)$ および $\psi_A(x)$ 。

ポテンシャル $U(x)$ に1個の粒子を閉じ込めた系を考える。シュレーディンガー方程式の最もエネルギーの低い2つの解として、図1のような規格化された固有状態 $\psi_S(x)$ と $\psi_A(x)$ を得た。この2つの固有状態のエネルギーは $\pm J$ ($J > 0$) である。 $\psi_S(x)$ と $\psi_A(x)$ 以外の固有状態への遷移や散逸は全て無視できると仮定する。プランク定数を 2π で割った値を \hbar として、以下の設問に答えよ。

- [1] 図1に示した $\psi_S(x)$ と $\psi_A(x)$ のうち、固有エネルギーがより低いのは（すなわち、エネルギーが $-J$ となるのは）どちらか。理由とともに答えよ。

次に、 $\psi_L(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_S(x) + \psi_A(x))$ 、 $\psi_R(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_S(x) - \psi_A(x))$ と定義する。

- [2] 波動関数 $\psi_L(x)$ と $\psi_R(x)$ は直交することを示せ。さらに $\psi_L(x)$ と $\psi_R(x)$ を基底として、系のハミルトニアンを2行2列の行列で表せ。

以降、 $\psi_L(x)$ を「粒子が左の井戸にある状態」、 $\psi_R(x)$ を「粒子が右の井戸にある状態」と呼ぶことにする。

- [3] 時刻 $t=0$ において、粒子が左の井戸にあった。時刻 t に粒子が右の井戸にある確率を t の関数として表せ。

以下の設問ではポテンシャル $U(x)$ に同種粒子を2個閉じ込めた系を考える。粒子はボース統計に従い、内部自由度をもたないとする。系の時間発展を考えるために、

- 粒子が2個とも左の井戸にある状態を $|0\rangle$
- 粒子1個が左の井戸に、もう1個が右の井戸にある状態を $|1\rangle$

- 粒子が2個とも右の井戸にある状態を $|2\rangle$

と表し、全体の波動関数は $|\Psi(t)\rangle = c_0(t)|0\rangle + c_1(t)|1\rangle + c_2(t)|2\rangle$ で表せるとする。以下の設問に答えよ。

- [4] 粒子間に相互作用がない場合を考える。

[4.1] 系を表すハミルトニアン \mathcal{H} は

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{2}J & 0 \\ -\sqrt{2}J & 0 & -\sqrt{2}J \\ 0 & -\sqrt{2}J & 0 \end{pmatrix} \quad (1)$$

と表現できることを示せ。

- [4.2] 系の固有エネルギーをすべて求めよ。

- [4.3] 時刻 $t = 0$ に粒子が2個とも左の井戸にあった。時刻 t に右の井戸に粒子が n 個存在する確率 $P_n(t)$ ($n = 0, 1, 2$) を t と J の関数として表し、グラフに示せ。

- [5] 粒子の間に強い引力相互作用があり、2個の粒子が同じ井戸にある時にのみ全系のエネルギーが A ($A \gg J > 0$) だけ下がると仮定する。

[5.1] 設問 [4.1] で用いた \mathcal{H} の対角項に変更を加え、系を表すハミルトニアンを導け。

- [5.2] 系の固有エネルギーをすべて求めよ。さらに、 $A \gg J$ を利用して固有エネルギーを J^2/A のオーダーまで展開せよ。

- [5.3] 時刻 $t = 0$ に粒子が2個とも左の井戸にあった。時刻 t に右の井戸に粒子が n 個存在する確率 $P_n(t)$ ($n = 0, 1, 2$) をあらわすグラフを、次頁の図2の (a) から (e) の中から選べ。ただし、図中の実線、点線、一点鎖線がそれぞれ $P_n(t)$ ($n = 0, 1, 2$) のどれを指すかも答えること。さらに図中の周期 T を求めよ。

- [6] 粒子の間に強い斥力相互作用があり、2個の粒子が同じ井戸にある時にのみ全系のエネルギーが B ($B \gg J > 0$) だけ上がると仮定する。時刻 $t = 0$ に粒子が2個とも左の井戸にあった。時刻 t に右の井戸に粒子が n 個存在する確率 $P_n(t)$ ($n = 0, 1, 2$) をあらわすグラフを、図2の (a) から (e) の中から選べ。ただし、図中の実線、点線、一点鎖線がそれぞれ $P_n(t)$ ($n = 0, 1, 2$) のどれを指すかも答えること。さらに図中の周期 T を求めよ。

- [7] 粒子間の相互作用が引力の場合 (設問 [5.3]) と斥力の場合 (設問 [6]) を比べて、 $P_n(t)$ ($n = 0, 1, 2$) のふるまいの概略に差が見られるか否かを、理由とともに説明せよ。

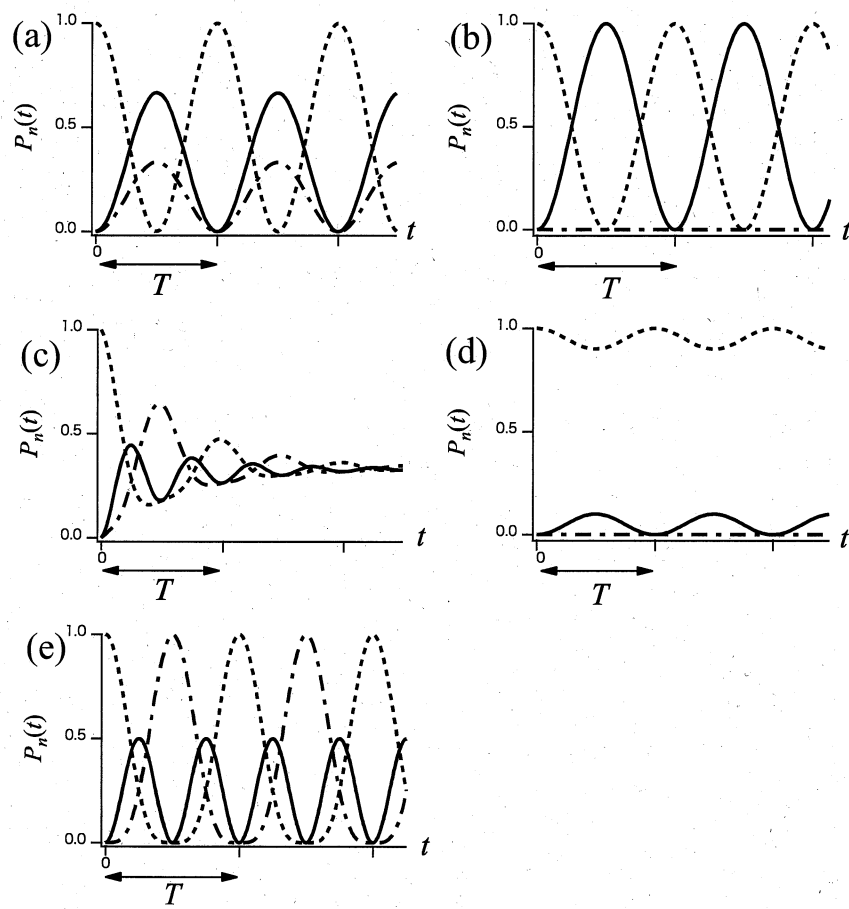


図 2: $P_n(t)$ の時間依存性のグラフ。実線、点線、一点鎖線がそれぞれ $P_n(t)$ ($n = 0, 1, 2$) のどれかを示している。

第2問

一辺の長さが L の箱に入った N 個の質量 m の同種粒子からなる系を、カノニカル分布で考える。プランク定数 h を 2π で割ったものを \hbar 、ボルツマン定数を k_B 、温度を T 、体積を $V = L^3$ として以下の設問に答えよ。なお、この系はボルツマン統計にしたがい、粒子がエネルギー E を持つ確率は $\exp(-\frac{E}{k_B T})$ に比例する。ここで、粒子の内部自由度、相対論的效果は考えないものとする。解答に際しては、必ず導出過程を記述すること。

まず粒子間の相互作用はなく、理想気体であるとする。

- [1] この系の分配関数 Z を求めよ。ここで必要ならば以下の積分を用いてよい。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi} \quad (1)$$

- [2] この系の内部エネルギー U と比熱 C を求めよ。

- [3] 次式 (2) を用いてこの系の圧力 P を計算し、状態方程式を求めよ。なお F はヘルムホルツの自由エネルギーである。

$$P = -\frac{\partial F}{\partial V} \quad (2)$$

次に粒子間に相互作用がある系を考える。粒子間の相互作用は長距離での引力部分と短距離での斥力部分を持つとする。引力的な相互作用は、密度に比例して働く一様な引力ポテンシャルで記述できるとしよう。この効果は1粒子のエネルギーを $E = \frac{p^2}{2m} - \alpha \frac{N}{V}$ と置くことで取り入れることができるとする。ここで α は正の定数、 p は粒子の運動量である。また、粒子間の短距離斥力のため、各々の粒子はそれぞれを中心とする体積 b の中に他の粒子の侵入を許さないとする。この効果は系の体積を $V - Nb$ に置き換えることで取り入れることができるとする。

- [4] この系の分配関数 Z を求めよ。また圧力 P を計算し、状態方程式を求めよ。

次に、ある温度 T 、圧力 P での V の関数 $A(V) = F(T, N, V) + PV$ を考える。この関数 $A(V)$ の極値を与える V においては、式 (2) より状態方程式が満たされている。ここで、ある温度 T 、圧力 P のもとでのギブスの自由エネルギー $G(T, N, P)$ を、その温度、圧力での V の関数 $F(T, N, V) + PV$ の最小値として、以下のように定義する。

$$G(T, N, P) = \min_V [F(T, N, V) + PV] \quad (3)$$

ある温度 T 、圧力 P のもとで $F(T, N, V) + PV$ が図1のように二つの等しい最小値を持った。

- [5] 図1で状態方程式を満たす点のうち、熱平衡状態として安定に存在する点と不安定な点はどれか。 $\frac{\partial P}{\partial V}$ の符号に注意してその理由を述べよ。
- [6] 温度 T を固定したまま、図1から圧力 P を大きくしたとき、また小さくしたときの $F(T, N, V) + PV$ の V 依存性の概形をグラフに描け。両者の場合について、圧力 P による変化の物理的理由を述べよ。
- [7] 以上の $F(T, N, V) + PV$ のふるまいをもとに、この温度での状態方程式から定まる等温曲線の概形を P - V 平面上に描け。また、式 (3) のギブスの自由エネルギーの定義をもとに、この温度での平衡状態の等温曲線を P - V 平面上に描け。

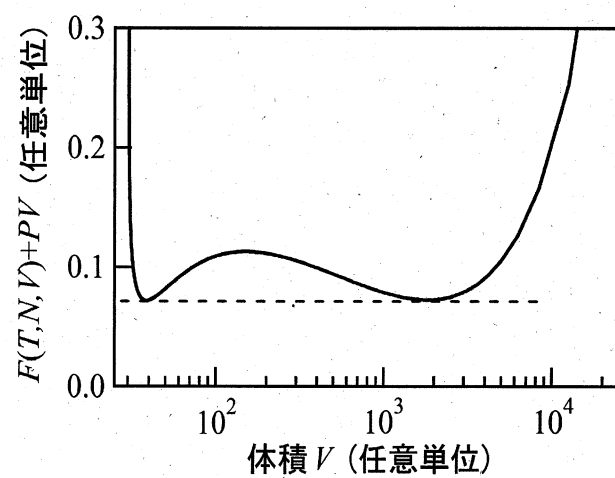


図 1: 体積 V の関数 $F(T, N, V) + PV$ (実線)。点線はガイド。

第3問

図1に示すように、真空中において x 軸方向にのみ振動する電場成分をもち $+z$ 方向に伝搬する単色平面電磁波(角周波数 ω) が、オームの法則に従う電気伝導性をもつ媒質との境界 ($z=0$) に入射する場合を考える。このとき、波の一部は反射され、残りは媒質中へ侵入して $+z$ 方向に伝搬する。以下では、この媒質中の電磁波の伝搬を考える。媒質中の電磁場は、位置 \mathbf{r} 、時刻 t における電場および磁束密度をそれぞれ $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ および $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ として、以下の方程式によって記述されるものとする。

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \quad \nabla \times \mathbf{B} = \varepsilon\mu \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mu\sigma \mathbf{E}, \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

ここで、 ε 、 μ 、 σ はそれぞれ媒質の誘電率、透磁率、電気伝導率であり、いずれも正の実定数であるものとする。このとき、媒質中を $+z$ 方向に伝搬する電磁波は次の波動方程式を満たす。

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial z^2} - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - \mu\sigma \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial z^2} - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} - \mu\sigma \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (2)$$

電磁波の電場は媒質中でも x 方向に振動するものとして、以下の設問に答えよ。

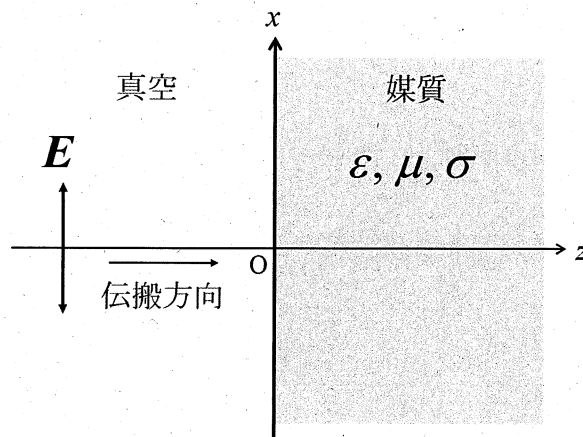


図1

- [1] 波動方程式(1)を満たす平面波解を、複素数表示を用いて以下のように表す。

$$\mathbf{E}(z, t) = \text{Re} \left[\tilde{\mathbf{E}}_0 \exp \left\{ i \left(\tilde{k}z - \omega t \right) \right\} \right] \quad (3)$$

ここで $\tilde{\mathbf{E}}_0$ は複素ベクトル、 $\tilde{k} = k_1 + ik_2$ は複素数 (k_1 、 k_2 はいずれも実数) である。式(3)で表される平面波の位相速度(等位相面が進む速度) v を、 k_1 、 k_2 、 ω の中から適切なものを用いて表せ。

- [2] 電場の振幅が入射直後 ($z=0$) の $1/e$ 倍 (e は自然対数の底) に減衰するまでに媒質中を伝搬する距離 d を、 k_1 、 k_2 、 ω の中から適切なものを用いて表せ。
- [3] k_1 、 k_2 をそれぞれ、 ε 、 μ 、 σ 、 ω を用いて表せ。
- [4] 設問[2]で定義した距離 d が電気伝導率 σ に対してどのように依存するか、 σ が極めて大きい場合 ($\sigma \gg \varepsilon\omega$) および極めて小さい場合 ($\sigma \ll \varepsilon\omega$) のそれぞれについて示せ。

[5] 電場の振動に対する磁束密度の振動の位相遅れ ϕ ($0 \leq \phi < 2\pi$) を、 k_1 、 k_2 、 ω の中から適切なものを用いて表せ。また、 σ が大きい極限 ($\frac{\sigma}{\epsilon\omega} \rightarrow \infty$) および小さい極限 ($\frac{\sigma}{\epsilon\omega} \rightarrow 0$) のそれぞれについて、 ϕ の値を求めよ。

[6] 入射直後 ($z = 0$) の電磁波のポインティングベクトル $\mathbf{S} = (1/\mu) \mathbf{E} \times \mathbf{B}$ の時間平均 $\langle \mathbf{S} \rangle$ の大きさ $|\langle \mathbf{S} \rangle|$ を、 ϵ 、 μ 、 σ 、 ω 、 ϕ 、 $|\tilde{\mathbf{E}}_0|$ の中から適切なものを用いて表せ。

この媒質中の電流密度 $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ がオームの法則 $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \sigma \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ に従うことに注意して、以下の設問に答えよ。

[7] 電場 $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ および磁束密度 $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ で表される電磁波が媒質に及ぼす、単位体積あたりの仕事率 $Q(\mathbf{r}, t)$ を、 $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ 、 $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ 、 $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ の中から適切なものを用いて表せ。

[8] 設問 [1]-[6] で考えた電磁波が媒質に及ぼす、単位体積あたりの仕事率 $Q(z, t)$ の時間平均を $\langle Q(z, t) \rangle$ とする。 $\int_0^{+\infty} \langle Q(z, t) \rangle dz$ を求め、その結果と [6] で求めた $|\langle \mathbf{S} \rangle|$ との関係を示せ。また、その関係が示す物理的意味を説明せよ。

第4問

図1に示す一辺の長さ a の単位胞からなる2次元結晶の電子状態について考える。基本単位格子ベクトルを $\mathbf{a}_1 = (\sqrt{3}a/2, a/2)$ 、 $\mathbf{a}_2 = (-\sqrt{3}a/2, a/2)$ として、以下の設問に答えよ。

- [1] 逆格子空間 (k_x, k_y) における基本並進ベクトル $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ を求め、それらとともに第1ブリュアン域を図示せよ。また、第1ブリュアン域境界と k_x 軸及び k_y 軸の交点 ($k_x, k_y > 0$) をそれぞれ P、Q とし、それらの座標を求めよ。
- [2] ここで、周期ポテンシャルの影響を受けない自由電子を考える。単位胞あたり電子が2個存在する場合のフェルミ面の半径 k_F をスピン自由度を考慮して求めよ。
- [3] 設問 [2] のフェルミ面の概形を、第1ブリュアン域との関係を明らかにしつつ図示せよ。

次に、図2に示した2次元結晶において、周期ポテンシャルのもとでの電子状態を考える。この2次元結晶は、図1と同じ単位胞内に A と B の2種類の原子を1個ずつ含み、各原子は等距離を隔てた位置に3個の最近接原子を持つ。結晶全体の電子の固有波動関数 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ は、シュレーディンガー方程式

$$\mathcal{H}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E(\mathbf{k})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1)$$

を満たす。ここで、 \mathcal{H} は系全体のハミルトニアン、 $E(\mathbf{k})$ は固有値、 \mathbf{k} は固有状態を指定する量子数である。 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ は、A 原子の軌道からなる関数 $\psi_{\mathbf{k}}^A(\mathbf{r})$ と B 原子の軌道からなる関数 $\psi_{\mathbf{k}}^B(\mathbf{r})$ を、係数 $\lambda_{\mathbf{k}}^A$ と $\lambda_{\mathbf{k}}^B$ で足し合わせた

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \lambda_{\mathbf{k}}^A \psi_{\mathbf{k}}^A(\mathbf{r}) + \lambda_{\mathbf{k}}^B \psi_{\mathbf{k}}^B(\mathbf{r}) \quad (2)$$

によって表せるとしよう。ただし、各 A 原子及び各 B 原子の最外殻の原子軌道 $\phi_A(\mathbf{r})$ 、 $\phi_B(\mathbf{r})$ (これらは実関数で与えられるものとする) を用いて、 $\psi_{\mathbf{k}}^A(\mathbf{r})$ と $\psi_{\mathbf{k}}^B(\mathbf{r})$ はそれぞれ、

$$\psi_{\mathbf{k}}^A(\mathbf{r}) = \sum_i \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i^A) \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i^A) \quad (3)$$

$$\psi_{\mathbf{k}}^B(\mathbf{r}) = \sum_j \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j^B) \phi_B(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j^B) \quad (4)$$

と書ける。ここで \mathbf{r}_i^A 及び \mathbf{r}_j^B は、それぞれ i 番目の A 原子、 j 番目の B 原子の位置である。以下、 $\phi_A(\mathbf{r})$ 、 $\phi_B(\mathbf{r})$ 以外の原子軌道は無視できるとし、電子間の相互作用は考えない。

- [4] $\int \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i^A) \mathcal{H} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ と $\int \phi_B(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j^B) \mathcal{H} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ などを計算し、 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ が式 (1) を満たすことを用いて、 $\lambda_{\mathbf{k}}^A$ と $\lambda_{\mathbf{k}}^B$ に関する連立方程式を導け。ただし、原子軌道間の重なり積分については、同一原子軌道間の

$$\int \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i^A) \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i^A) d\mathbf{r} = \int \phi_B(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j^B) \phi_B(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j^B) d\mathbf{r} = 1$$

のみが無視できないとする。また、同一原子軌道間のハミルトニアン \mathcal{H} の行列要素は、

$$\int \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i^A) \mathcal{H} \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i^A) d\mathbf{r} = \epsilon_A$$

$$\int \phi_B(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j^B) \mathcal{H} \phi_B(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j^B) d\mathbf{r} = \epsilon_B$$

で与えられ (ここで $\epsilon_A > \epsilon_B$ とする)、異なる位置にある原子軌道間の \mathcal{H} の行列要素は、最近接にある A 原子と B 原子の間 ($|\mathbf{r}_i^A - \mathbf{r}_j^B| = a/\sqrt{3}$) の

$$\int \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i^A) \mathcal{H} \phi_B(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j^B) d\mathbf{r} = \int \phi_B(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j^B) \mathcal{H} \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i^A) d\mathbf{r} = \tau$$

のみが無視できないとする。

- [5] 設問 [4] で得られた連立方程式を解き、すべてのエネルギー固有値 $E(\mathbf{k})$ を k_x と k_y の関数として求めよ。
- [6] 単位胞あたり最外殻電子が平均 2 個存在するとき、この系には有限のエネルギーギャップが存在する。このとき、 k_y 軸上のある点 X では、占有状態が最大エネルギー E_1 を、非占有状態が最小エネルギー E_2 を持つ。点 X の座標とエネルギーギャップ $E_g = E_2 - E_1$ の値を求めよ。

以下 $k_x = 0$ として考えよ。

- [7] 点 X 近傍での $E(\mathbf{k})$ の k_y 依存性を求めよ。さらに、 $E_g \gg |\tau|$ として、 k_y 方向の有効質量を求めよ。
- [8] B 原子のすべてを A 原子で置き換えるとする。点 X 近傍での $E(\mathbf{k})$ の k_y 依存性を求めよ。また、このときの E_g を求めよ。

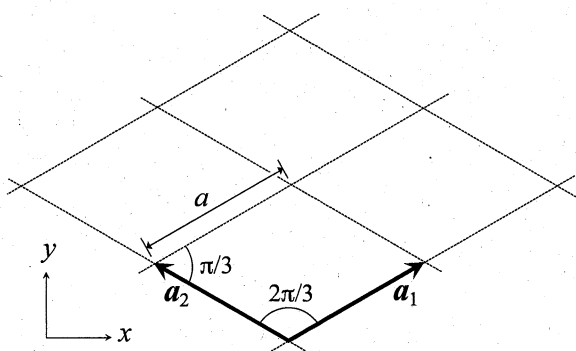


図 1: 2 次元格子。

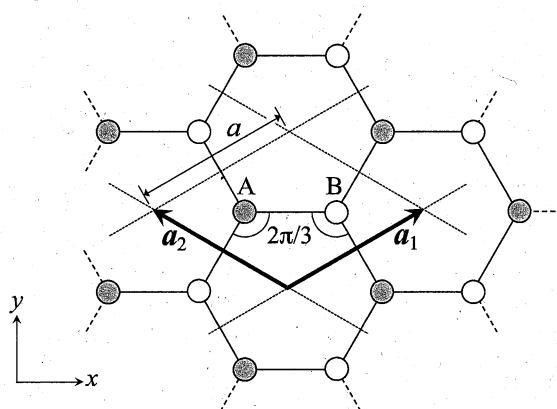


図 2: 2 種類の A、B 原子からなる 2 次元結晶。