

2008 年度東大物工答案

しゃんごん (@CEY3944)

2025 年 5 月 16 日

第 1 問 量子力学: 変分法・共有結合

[1]

この系のシュレーディンガー方程式を書き直すと

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - V_0 \delta(x)\right) \phi_0(x) = E_0 \phi_0(x). \quad (1.1)$$

これらの両辺を微小区間 $(-\epsilon, \epsilon)$ で積分して、問題文で与えられた波動関数の表式を代入していくと、

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\phi_0(+0)}{dx} - \frac{d\phi_0(-0)}{dx} \right) - V_0 \phi_0(0) &= 0 \\ \frac{\hbar^2 C_0^{3/2}}{2m} - V_0 C_0^{1/2} &= 0 \\ C_0 &= \frac{2mV_0}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (1.2)$$

$x \neq 0$ ではシュレーディンガー方程式の中のデルタ関数は考えずに済み、単なる線形微分方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi_0(x) = E_0 \phi_0(x) \quad (1.3)$$

となる。これに波動関数の表式を代入して

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \sqrt{C_0} \exp(-C_0|x|) &= E_0 \sqrt{C_0} \exp(-C_0|x|) \\ \left(E + \frac{\hbar^2 C_0^2}{2m}\right) \sqrt{C_0} \exp(-C_0|x|) &= 0 \\ E &= -\frac{\hbar^2 C_0^2}{2m} = -\frac{2mV_0^2}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (1.4)$$

[2]

平衡状態を考えているので波動関数は実数とする。規格化条件より

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x)^2 \\ &= N^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \{ \phi_0^2(x-l) + \alpha^2 \phi_0^2(x+l) + 2\alpha \phi_0(x+l) \phi_0(x-l) \} \\ &= N^2 (1 + \alpha^2 + 2\alpha S) \\ N &= \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha^2 + 2\alpha S}} \end{aligned} \quad (2.1)$$

[3]

エネルギーは

$$\begin{aligned} E &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x) H \Psi(x) \\ &= N^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \{ \phi_0(x-l) H \phi_0(x-l) + \alpha^2 \phi_0(x+l) H \phi_0(x+l) + 2\alpha \phi_0(x+l) H \phi_0(x-l) \} \\ &= \frac{(1 + \alpha^2)J + 2\alpha K}{1 + \alpha^2 + 2\alpha S} \end{aligned} \quad (3.1)$$

[4]

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = \frac{2(\alpha J + K)(1 + \alpha^2 + 2S\alpha) - 2(\alpha + S)((1 + \alpha^2 + 2\alpha K))}{(1 + \alpha^2 + 2S\alpha)^2} = -\frac{2(SJ - K)(1 - \alpha^2)}{(1 + \alpha^2 + 2S\alpha)^2} \leq 0 \quad (4.1)$$

より $E(\alpha)$ の極値は

$$\alpha = \pm 1 \quad (4.2)$$

[5]

$E(\alpha)$ の最小値は $\alpha_1 = 1$ で、このときのエネルギー期待値は

$$E_1 = \frac{J + K}{1 + S} \quad (5.1)$$

波動関数は

$$\Psi(x)_1 = \frac{1}{\sqrt{2 + 2S}}(\phi_0(x - l) + \phi_0(x + l)) \quad (5.2)$$

[6]

重なり積分は

$$\begin{aligned} S &= \int_{-\infty}^{\infty} dx C_0 \exp[-C_0\{|x - l| + |x + l|\}] \\ &= 2 \int_0^l dx C_0 \exp(-2C_0l) + 2 \int_l^{\infty} dx C_0 \exp(-2C_0x) \\ &= 2(1 + C_0l)e^{-2C_0l} \end{aligned} \quad (6.1)$$

クーロン積分は

$$J = \quad (6.2)$$

交換積分は

$$K = \quad (6.3)$$

感想

波動関数が実関数というのは仮定してよかったのだろうか？ 設問 4 の計算をミスりまくって時間がかかった。設問 6 は覚えてたらやってもよいのだろうけど、覚えてなかったら捨てたくなる。

第一原理計算である指数関数基底は原子核にデルタ関数ポテンシャルがあると仮定したときの波動関数のことだったのかと気付いた。

第2問 統計力学：合金

[1]

1 格子につき、元素間の結合は 6 本ある。基底状態ではそれらすべてが X, Y 間の結合であるので、基底状態のエネルギー E_0 は

$$E_0 = 6q \quad (1.1)$$

[2]

格子点 i と j にある元素が同じときのエネルギーが p , 格子点 i と j にある元素が違うときのエネルギーが q となるようように S_i, S_j を使って書くと

$$\frac{1 + S_i S_j}{2} p + \frac{1 - S_i S_j}{2} q = \frac{p - q}{2} S_i S_j + \frac{p + q}{2} \quad (2.1)$$

これをすべての $\langle i, j \rangle$ で和を取ったのがハミルトニアンなので

$$H = \sum_{\langle i, j \rangle} \left(\frac{p - q}{2} S_i S_j + \frac{p + q}{2} \right) \equiv \sum_{\langle i, j \rangle} (J S_i S_j + K) \quad (2.2)$$

ここで

$$J := \frac{p - q}{2}, \quad K := \frac{p + q}{2} \quad (2.3)$$

[3]

ハミルトニアンに $S_i = \langle S_i \rangle + \delta S_i$ を代入して、和をとって整理していく。

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\langle i, j \rangle} \left[J(\langle S_i \rangle + \delta S_i)(\langle S_j \rangle + \delta S_j) + K \right] = \sum_{\langle i, j \rangle} \left[-n^2 J + nJ\delta S_i - nJ\delta S_j + J\delta S_i\delta S_j + K \right] \\ &\simeq 6nJ \left(\sum_i \delta S_i - \sum_j \delta S_j \right) - 3Nn^2 J + 3NK = 6nJ \left(\sum_i S_i - \sum_j S_j \right) + 3N(n^2 J + K) \end{aligned} \quad (3.1)$$

[4]

すべての S_i に ± 1 がどのように入っているかの配列を $\{S_i\}$ のように表すとする。分配関数は

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{S_i\}} \sum_{\{S_j\}} \exp \left[-6\beta nJ \left(\sum_i S_i - \sum_j S_j \right) - 3\beta N(n^2 J + K) \right] \\ &= \exp[-3\beta N(n^2 J + K)] \sum_{\{S_i\}} \sum_{\{S_j\}} \prod_{ij} \exp[-6\beta nJ(S_i - S_j)] \\ &= \exp[-3\beta N(n^2 J + K)] \prod_{ij} \sum_{S_i = \pm 1} \sum_{S_j = \pm 1} \exp[-6\beta nJ(S_i - S_j)] \\ &= \exp[-3\beta N(n^2 J + K)] \left[2(1 + \cosh(12\beta nJ)) \right]^{N/2} \\ &= \left[2 \exp[-3\beta(n^2 J + K)] \cosh(6\beta nJ) \right]^N = \left[2 \exp \left[-3 \frac{n^2 J + K}{k_B T} \right] \cosh \left(\frac{6nJ}{k_B T} \right) \right]^N \end{aligned} \quad (4.1)$$

[5]

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial J} \ln Z &= \frac{1}{Z} \sum_{\{S_i\}} \sum_{\{S_j\}} \frac{\partial}{\partial J} \exp \left[-6\beta n J \left(\sum_i S_i - \sum_j S_j \right) - 3\beta N (n^2 J + K) \right] \\
&= \frac{1}{Z} \sum_{\{S_i\}} \sum_{\{S_j\}} \left\{ -6\beta n \left(\sum_i S_i - \sum_j S_j \right) - 3\beta N n^2 \right\} \exp \left[-6\beta n J \left(\sum_i S_i - \sum_j S_j \right) - 3\beta N (n^2 J + K) \right] \\
&= \left\langle -6\beta n \left(\sum_i S_i - \sum_j S_j \right) - 3\beta N n^2 \right\rangle = -6\beta n \left(\sum_i \langle S_i \rangle - \sum_j \langle S_j \rangle \right) - 3\beta N n^2 \\
&= -3\beta n N (n_A - n_B + n)
\end{aligned} \tag{5.1}$$

これと $n_A + n_B = 0$ を使うと N_A は

$$\begin{aligned}
n_A &= -\frac{1}{6\beta n N} \frac{\partial}{\partial J} \ln Z - \frac{n}{2} \\
&= -\frac{1}{6\beta n N} \frac{\partial}{\partial J} \ln [2 \exp \left[-3 \frac{n^2 J + K}{k_B T} \right] \cosh \left(\frac{6nJ}{k_B T} \right)]^N - \frac{n}{2} \\
&= -\frac{1}{6\beta n} \left[-3\beta n^2 + 6n \tanh(6\beta n J) \right] - \frac{n}{2} \\
&= -\tanh(6\beta n J) = -\tanh \left(\frac{6nJ}{k_B T} \right)
\end{aligned} \tag{5.2}$$

そして n_B は

$$n_B = -n_A = \tanh \left(\frac{6nJ}{k_B T} \right) \tag{5.3}$$

[6]

$$n_A = -n_B = -n \text{ より}$$

$$n = \tanh(6\beta n J) \tag{6.1}$$

[7]

自己無同撞着方程式で $n \neq 0$ となる解がある条件は \tanh のグラフを考えると、 $6J/k_B T > 1$ のときであるので臨界温度 T_c は

$$T_c = \frac{6J}{k_B}. \tag{7.1}$$

また、 $T = T_c - \delta T$ の T_c 近傍の定温相では $n \ll 1$ であるので \tanh を展開して

$$\begin{aligned}
n &= \frac{6nJ}{k_B(T_c - \delta T)} - \frac{1}{3} \left(\frac{6\beta n J}{k_B(T_c - \delta T)} \right)^3 \\
&\simeq n \frac{6J}{k_B T_c} \left(1 + \frac{\delta T}{T_c} \right) - \frac{n^3}{3} \left(\frac{6J}{k_B T_c} \right)^3 \left(1 + 3 \frac{\delta T}{T_c} \right) \simeq n \left(1 + \frac{\delta T}{T_c} \right) - \frac{n^3}{3} \\
0 &= n \left(\frac{\delta T}{T_c} - \frac{n^2}{3} \right) \\
n &= 0, \pm \sqrt{\frac{3\delta T}{T_c}}
\end{aligned} \tag{7.2}$$

となる。

これらの式をまとめると、高温相では n は常に 0 で、臨界温度 T_c を超えると臨界温度を規準とした温度の $1/2$ 乗に比例して n が大きくなっていく。

[8]

高温相では各副サイトに X,Y の元素不規則に配置している。合金を冷やしていき、設問 [6] で求めた臨界温度 T_c より低くなると、徐々に秩序だった配置に元素が入っていく。そして十分低温になると、自己無撞着方程式より $n = \pm 1$ になることから基底状態である塩化ナトリウム型の結晶構造になることがわかる。

感想

『説明を理解しながら以下の設問 [1]-[8] に答えよ。』とあるので、その場で解いていくタイプの問題ではあるが驚いた。おそらくキッテルの下巻に乗っていたり、結晶成長の実験をやる人だったり、やったことある人はいるのかもしれない。

いわゆる最適化アルゴリズムの焼きなまし法の元ネタで、高温の無秩序相から定温の秩序相にすると基底状態が得られるというやつ。実際の試料・アルゴリズムともに 1 回の冷却だと局所安定状態が得られるので、何回か加熱して冷やすというのを繰り返すのも同じである。

合金系は適切に変数変換をすると反強磁性のイジング模型になるのは、相転移周りの具体例を増やす上でも良い問題だった。他にも気液相転移も分子の密度を秩序変数を変換すると強磁性のイジング模型になったはず。

第3問 光学：複屈折・マリュス則

[1]

結晶板を通った後の偏光の z 成分の位相変化は $\Delta\phi_z = n_e d/\lambda$, 結晶板を通った後の偏光の x 成分の位相変化は $\Delta\phi_x = n_o d/\lambda$ である。はじめは偏光面が z 軸から 45° であるので、偏光の z 成分と x 成分は同じ位相である。よって偏光板を通ったあとの z 成分の偏光の位相 x 成分のを規準として

$$\Delta\phi(d) = \Delta\phi_z - \Delta\phi_x = \frac{(n_e - n_o)d}{\lambda} < 0 \quad (1.1)$$

となる。これが求める位相差で、この結晶板を通ると c 軸方向の偏光の位相が遅れるとわかる。

[2]

偏光面が 90° 回転するのは、 n を整数として $\Delta\phi(d) = -(2n+1)\pi$ となるときである。なので

$$\begin{aligned} \frac{(n_e - n_o)d}{\lambda} &= (2n+1)\pi \\ d &= \frac{(2n+1)\pi\lambda}{n_o - n_e} \end{aligned} \quad (2.1)$$

[3]

入射光 \vec{E}_i はジョーンズベクトルを用いて

$$\vec{E}_i = \frac{\vec{e}_x + \vec{e}_z}{\sqrt{2}} \quad (3.1)$$

と表せる。結晶版を通ると z 成分の位相が $\Delta\phi(d)$ だけ変わるので、その光 $\vec{E}_o(d)$ は

$$\vec{E}_o(d) = \frac{\vec{e}_x + e^{i\Delta\phi(d)}\vec{e}_z}{\sqrt{2}} \quad (3.2)$$

となる。偏光子を通ると $\vec{E}_o(d)$ は $(\vec{e}_x + \vec{e}_z)/\sqrt{2}$ 方向に射影されるので、偏光子を通った後の光 $\vec{E}(d)$ は

$$\vec{E}(d) = \frac{\vec{e}_x + \vec{e}_z}{\sqrt{2}} \frac{1 + e^{i\Delta\phi(d)}}{2} \quad (3.3)$$

よって測定される強度は

$$I(d) = \vec{E}(d) \cdot \vec{E}^*(d) = \frac{1 + \cos \Delta\phi(d)}{2} = \cos^2 \frac{\Delta\phi(d)}{2} = \cos^2 \frac{(n_e - n_o)d}{2\lambda} \quad (3.4)$$

[4]

楔型素子を通ると c 軸方向である x 方向の位相が $\Delta\phi(d_2)$ だけ遅くなる。なので偏光子に入る直前の光 $\vec{E}_o(d_2)$ は

$$\vec{E}_o(d) = \frac{e^{i\Delta\phi(d_2)}\vec{e}_x + e^{i\Delta\phi(d_1)}\vec{e}_z}{\sqrt{2}} \quad (4.1)$$

と表せる。同様に偏光子を通した後の光 $\vec{E}(d_2)$ は

$$\vec{E}(d_2) = \frac{\vec{e}_x + \vec{e}_z}{\sqrt{2}} \frac{e^{i\Delta\phi(d_2)} + e^{i\Delta\phi(d_1)}}{2} \quad (4.2)$$

となって強度は

$$I(d_2) = \frac{1 + \cos(\Delta\phi(d_2) - \Delta\phi(d_1))}{2} = \cos^2 \frac{(n_e - n_o)}{2\lambda}(d_2 - d_1) \quad (4.3)$$

となる。これより d_2 を変化させていくと、強度は周期 $2\pi\lambda/(n_o - n_d)$ の三角関数になっていることがわかる。つまりこの周期を求めれば屈折率の差を求めることができる。その周期を測定した強度のデータから精度よく求めるには、 $I(d_2)$ がピークとなる 2 つの d_2 の幅を選ぶのではなく $I(d_2) = 0$ となる d_2 を 2 つ選ぶとよりよくなる。なぜなら、ピークの値は様々な要因による光の減衰によって $I(d_2) = 1$ にならず様々な値となるため、ピークとなる d_2 は求めることができないのに対し、 $I(d_2 = 0)$ となる d_2 は明確にわかるためである。

感想

実験やったことあったり、波動光学をやったことあるならめっちゃ簡単。最後の設問は生データを解析したことないと、どうやったら精密に測定できるかわからないと思う。ジョーンズベクトルは知ってたら記述が楽になる程度のもので、別に使わず電場の振動成分を書いてもいいと思う。

第4問 電磁気学・物性：光学用干渉フィルター

[1]

電荷分布がないときのマクスウェル方程式を考える。ファラデーの式より

$$\begin{aligned}\nabla \times E(x, t) &= -\frac{\partial B(x, t)}{\partial t} \\ \nabla \times (\nabla \times E(x, t)) &= -\frac{\partial}{\partial t} \nabla \times B(x, t) \\ \nabla^2 E(x, t) &= \frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 E(x, t)}{\partial t^2} \\ \frac{\partial^2 E(x, t)}{\partial t^2} &= \frac{c^2}{n^2} \frac{\partial^2 E(x, t)}{\partial x^2}\end{aligned}\tag{1.1}$$

問で与えられたように角周波数 ω の定常解 $E(x, t) = E(x)e^{-i\omega t}$ をこれに入れ少し整理すると、

$$\frac{d^2 E(x)}{dx^2} + \frac{\varepsilon \omega^2}{c^2} E(x) = 0\tag{1.2}$$

となる。これが求める微分方程式である。真空中では $\varepsilon = 1$ で、この微分方程式を解くと、

$$E(x) = Ae^{i\omega x/c} + Be^{-i\omega x/c} \equiv Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\tag{1.3}$$

となる。よって波数と角周波数の関係は

$$k = \frac{\omega}{c}.\tag{1.4}$$

[2]

ブロッホの定理

[3]

$$G_m = \frac{2\pi m}{a}\tag{3.1}$$

[4]

波数 k の光電場 $E_k(x) = e^{ikx}u_k(x)$ を設問 [1] で求めた微分方程式に入れて整理していくと、

$$\begin{aligned}0 &= \frac{d^2}{dx^2} e^{ikx}u_k(x) + \frac{\varepsilon \omega^2}{c^2} e^{ikx}u_k(x) \\ &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[(k^2 + 2kG_m + G_m^2)b_m - \frac{\varepsilon \omega^2}{c^2} b_m \right] e^{ikx} e^{iG_m x} \\ &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[\left((k + G_m)^2 - \frac{\varepsilon_0 \omega^2}{c^2} \right) b_m - \frac{\varepsilon_1 \omega^2}{c^2} (b_{m-1} + b_{m+1}) \right] e^{ikx} e^{iG_m x}\end{aligned}\tag{4.1}$$

となる。これより

$$\begin{aligned}\left(k^2 + 2kG_m + G_m^2 - \frac{\varepsilon_0 \omega^2}{c^2} \right) b_m - \frac{\varepsilon_1 \omega^2}{c^2} (b_{m-1} + b_{m+1}) &= 0 \\ b_m &= -\omega^2 \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} \frac{b_{m-1} + b_{m+1}}{\{\omega^2 - c^2(k + G_m)^2/\varepsilon_0\}}\end{aligned}\tag{4.2}$$

[5]

$m = 0$ の場合、与えられた条件を使って整理していくと

$$b_0 = -\omega^2 \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} \frac{b_{-1} + b_1}{\{\omega^2 - c^2 k^2 / \varepsilon_0\}} \simeq -\omega^2 \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} \frac{b_{-1} + b_1}{\{\omega^2 - \omega^2\}} \quad (5.1)$$

となり分母が 0 に近づくことがわかる。 $m = -1$ の場合、 $k + G_{-1} = \pi/a - 2\pi/a = -k$ より

$$b_{-1} = -\omega^2 \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} \frac{b_{-2} + b_0}{\{\omega^2 - c^2 k^2 / \varepsilon_0\}} \quad (5.2)$$

となり同様に分母が 0 に近づく。これら $m = 0, -1$ のときは $\varepsilon_0 \gg \varepsilon_1$ の条件と合わせると、0/0 の不定形になることから、 b_0, b_{-1} は考慮しなければならない。 $m \neq 0, -1$ の場合には $(k + G_m)^2 = k^2$ とならないため分母は 0 にならない。なので $\varepsilon_0 \gg \varepsilon_1$ の条件より $b_m \ll 1$ 、となるので、これらの b_m は無視できる。(直観的には光電場の直流成分と格子間隔に対応した吸収成分だけが生き残るというやつなのだろうか?)

[6]

(1) 式の漸化式の内 b_0, b_{-1} に関わるものを取り出すと

$$\begin{aligned} \begin{cases} b_0 &= -\omega^2 \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} \frac{b_{-1}}{\{\omega^2 - c^2 k^2 / \varepsilon_0\}} \\ b_{-1} &= -\omega^2 \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} \frac{b_0}{\{\omega^2 - c^2 (k - 2\pi/a)^2 / \varepsilon_0\}} \end{cases} \\ \begin{cases} b_0 &= -\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} \frac{b_{-1}}{\{1 - c^2 k^2 / \varepsilon_0 \omega^2\}} \\ b_{-1} &= -\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} \frac{b_0}{\{1 - c^2 (k - 2\pi/a)^2 / \varepsilon_0 \omega^2\}} \end{cases} \\ \begin{cases} \{1 - c^2 k^2 / \varepsilon_0 \omega^2\} b_0 + \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} b_{-1} &= 0 \\ \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} b_0 + \{1 - c^2 (k - 2\pi/a)^2 / \varepsilon_0 \omega^2\} b_{-1} &= 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (6.1)$$

連立方程式が非自明な解を持つ条件を考えると

$$\begin{vmatrix} \{1 - c^2 k^2 / \varepsilon_0 \omega^2\} & \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} \\ \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} & \{1 - c^2 (k - 2\pi/a)^2 / \varepsilon_0 \omega^2\} \end{vmatrix} = 0 \quad (6.2)$$

よって

$$\delta = \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon} \quad (6.3)$$

[7]

$k \sim \pi/a$ の近くの波数 $k = \pi/a + \Delta k$ で (6.1) の行列式を展開すると

$$\begin{aligned} 0 &= \left[1 - \frac{\pi^2 c^2}{\varepsilon_0 a^2 \omega^2} \left(1 + \frac{a \Delta k}{\pi c} \right)^2 \right] \left[1 - \frac{\pi^2 c^2}{\varepsilon_0 a^2 \omega^2} \left(1 - \frac{a \Delta k}{\pi c} \right)^2 \right] - \frac{\varepsilon_1^2}{\varepsilon_0^2} \\ &= \varepsilon_0^2 - \varepsilon_1^2 \end{aligned} \quad (7.1)$$

[8]

離散的な並進対称性によるブリュアンゾーン境界の縮退により、境界の分散関係が変わり特定の周波数 ~ エネルギーが取れなくなるというのがこの現象の本質である。物質波である電子ではこれはエネルギーバンドの形成に関わっている。

感想

電磁気の問題ではあるけど、使ってる道具はほとんど物性で習うような問題。位置のフーリエ変換で云々とあるけど、これを時間にするとフロケの話に見えなくはない。