

2011 年度東大物工答案

しゃんごん (@CEY3944)

2025 年 6 月 11 日

第 1 問 量子力学: 変分法

計算ミスを防ぐため、 $\hbar = m = e = /4\pi\epsilon_0 = 1$ の単位系で計算を行い、最後に単位を復活させる。このとき、距離の単位はボーア半径

$$a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2m} \quad (0.1)$$

で、エネルギーの単位は水素原子の基底状態のエネルギーの 2 倍である

$$E_0 = \frac{e^4m}{(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2} \quad (0.2)$$

である。

[1]

波動関数の規格化条件より N は α を使って

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\infty dr 4\pi r^2 \psi^*(r) \psi(r) = 4\pi |N|^2 \int_0^\infty dr r^2 e^{-2\alpha r} = 4\pi |N|^2 \times \frac{2!}{(2\alpha)^3} \\ N &= \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} \end{aligned} \quad (1.1)$$

と書ける。

これよりエネルギーは

$$\begin{aligned} H\psi(r) &= \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) - \frac{1}{r} \right] N e^{-\alpha r} = \left[-\frac{\alpha^2}{2} + \frac{\alpha-1}{r} \right] N e^{-\alpha r} \\ E &= \int_0^\infty dr 4\pi r^2 \psi^*(r) H\psi(r) = 4\alpha^3 \int_0^\infty dr \left[-\frac{\alpha^2}{2} r^2 + (\alpha-1)r \right] e^{-2\alpha r} \\ &= -4\alpha^3 \frac{\alpha^2}{2} \frac{2}{(2\alpha)^3} + 4\alpha^3 (\alpha-1) \frac{1}{(2\alpha)^2} = \frac{\alpha^2}{2} - \alpha \\ &= \frac{(\alpha-1)^2}{2} - \frac{1}{2} \geq -\frac{1}{2} \end{aligned} \quad (1.2)$$

とわかる。なので基底状態のエネルギーは

$$E = -\frac{E_0}{2} = -\frac{e^4m}{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2} \quad (1.3)$$

とわかる。

また、 α は距離の逆数の次元の量なので $\alpha = 1/a_B$ である。これより波動関数は

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-r/a_B} = \sqrt{\frac{e^6 m^3}{\pi (4\pi\epsilon_0)^3 \hbar^3}} \exp \left[-\frac{e^2 m}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} r \right] \quad (1.4)$$

[2]

波動関数の規格化条件より N は α を使って

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\infty dr 2\pi r \psi^*(r) \psi(r) = 2\pi |N|^2 \int_0^\infty dr r e^{-2\alpha r} = \frac{2\pi |N|^2}{4\alpha^2} \\ N &= \sqrt{\frac{2\alpha^2}{\pi}} \end{aligned} \quad (2.1)$$

これよりエネルギーは

$$\begin{aligned}
H\psi(r) &= \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right) - \frac{1}{r} \right] N e^{-\alpha r} = \left[-\frac{\alpha^2}{2} + \frac{\alpha/2 - 1}{r} \right] N e^{-\alpha r} \\
E &= \int_0^\infty dr 2\pi r \psi^*(r) H\psi(r) = 4\alpha^2 \int_0^\infty dr \left[-\frac{\alpha^2}{2} r + (\alpha/2 - 1) \right] e^{-2\alpha r} \\
&= -4\alpha^2 \frac{\alpha^2}{2} \frac{1}{(2\alpha)^2} + 4\alpha^2 (\alpha/2 - 1) \frac{1}{2\alpha} = \frac{\alpha^2}{2} - 2\alpha \\
&= \frac{(\alpha - 2)^2}{2} - 2 \geq -2
\end{aligned} \tag{2.2}$$

とわかる。なので基底状態のエネルギーは

$$E = -2E_0 = -\frac{2e^4 m}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \tag{2.3}$$

とわかる。

また、 α は距離の逆数の次元の量なので $\alpha = 2/a_B$ である。これより波動関数は

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{8}{\pi a_B^2}} e^{-r/2a_B} = \sqrt{\frac{8e^4 m^2}{\pi (4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2}} \exp\left[-\frac{2e^2 m}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} r\right] \tag{2.4}$$

[3]

波動関数の広がりとは 2 次元だと $1/\alpha = a_B/2$ なのに対し、3 次元だと $1/\alpha = a_B$ となっていて、2 次元の方ときのほうが電子は正電荷により近づいているのがわかる。電子が電荷に近づいたことによってクーロンポテンシャルの利得が大きくなるため、変分によって得られたエネルギーは 2 次元ときの方が 3 次元のときのエネルギーよりも低くなると理解できる。

感想

問題文に『2 次元または、3 次元空間中、』にとあるが、この書き方はよくないと思われる。というのも、2 次元空間中といったときに、物質場と電場が両方ともは 2 次元中にあると読めてしまうためである。そうすると、クーロンポテンシャルの形がおかしくなる。2 次元のポアソン方程式を解いてもよいし、ガウスの法則で電気力線の本数を数えてもよい。楽なので後者で計算を進める。半径 r の 2 次元の円周が囲む電荷の量が $+e$ であるので電場は

$$2\pi r E = +e/\epsilon_0 \quad \rightarrow \quad E = \frac{+e}{2\pi\epsilon_0 r}$$

となる。ここで、次元が変わったことにより、誘電率の次元が変わっていることに注意。これ自体はローレンツモデル等を計算すると誘電率は $\epsilon \propto Ne^2/m \propto L^d$ となるのとコンシステントである。この電場による電位 ϕ は

$$\phi = \int dr E = \frac{e}{2\pi\epsilon_0} \ln r + \text{const.}$$

これより $-e$ のポテンシャル $V = -q\phi$ は

$$V = -\frac{e}{2\pi\epsilon_0} \ln r$$

となり、 $\ln r$ の依存性になり、問題で与えられたハミルトニアンとは異なる。この結果自体は 2 次元のスケール不変性のある場の理論からも支持される。

なので、この問題では物質場は 2 次元、光子場は 3 次元的に扱っているとわかる。そのような問題分をそのような意図にするには、『3 次元空間に固定された電荷と電子の状態を求めよ』を [1] にして、『電子が空間を自由に動くことができず、2 次元平面上のみを動くことができる状態を求めよ』を [2] にすればよかったと思われる。

この勘違いの理由としては、物性では 2 次元系と言ったときに物質は 2 次元だが、光子は 3 次元的に扱うのが基本だからである。ゲージ理論的にも 3+1 次元中に U(1) ゲージ場はあるともいえる。

相互作用場が物質よりも高次元の場であってもよいという例にも見える。そうすると重力理論とかであるグラビトンは高次元を伝播するというのもそんなに変なアイデアではないとわかるし、次元によってポテンシャルの冪が変わることから万有引力の冪を実験的に求めようとするというのも納得である。

第2問 統計力学: グランドカノニカル分布

$\beta = 1/k_B T$ とする。

[1]

スピンの状態を σ で指定する。 l_x, l_y, l_z, σ で指定される状態の分配関数は

$$\Xi_1(l_x, l_y, l_z, \sigma) = 1 + \exp \left[-\beta \left(\frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} (l_x^2 + l_y^2 + l_z^2) - \mu \right) \right] \quad (1.1)$$

今、 σ の状態には注目しないので、 σ をトレースアウトすると

$$\begin{aligned} \Xi_1(l_x, l_y, l_z) &= \sum_{\sigma=\pm 1/2} \Xi_1(l_x, l_y, l_z, \sigma) \\ &= 1 + 2 \exp \left[-\beta \left(\frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} (l_x^2 + l_y^2 + l_z^2) - \mu \right) \right] + \exp \left[-2\beta \left(\frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} (l_x^2 + l_y^2 + l_z^2) - \mu \right) \right] \end{aligned} \quad (1.2)$$

となる (これ自体は σ の自由度を考えずにはじめから、電子がないとき、スピン up/down が1つあるとき、電子が2つあるときの和をとっても得られる)。また、 Ξ の表式については Ξ_1 をすべての状態についてそれぞれ考え、それらの積を取ればよいので

$$\Xi = \prod_{l_x, l_y, l_z} \Xi_1(l_x, l_y, l_z) \quad (1.3)$$

のように書ける。

[2]

$$\begin{aligned} \langle n_k \rangle &= \frac{1}{\Xi_1(k)} \sum_{n_k=0,1,2} n_k e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)n_k} = \frac{1}{\beta \Xi_1(k)} \frac{\partial}{\partial \mu} \sum_{n_k=0,1,2} e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)n_k} \\ &= \frac{\partial}{\beta \partial \mu} \ln \Xi_1(k) = \frac{\partial}{\beta \partial \mu} \ln \left(1 + 2e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} + e^{-2\beta(\varepsilon_k - \mu)} \right) \\ &= \frac{2e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} + 2e^{-2\beta(\varepsilon_k - \mu)}}{1 + 2e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} + e^{-2\beta(\varepsilon_k - \mu)}} = \frac{2e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}(1 + e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)})}{(1 + e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)})^2} \\ &= \frac{2}{1 + e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)}} \end{aligned} \quad (2.1)$$

のようにフェルミ分布関数がスピン自由度も込みで得られる。

[3]

$$\begin{aligned} J &= -k_B T \ln \Xi = -k_B T \sum_{l_x, l_y, l_z} \ln \left(1 + 2e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} + e^{-2\beta(\varepsilon_k - \mu)} \right) \\ &= -k_B T L^3 \int d\varepsilon D(\varepsilon) \ln \left(1 + 2e^{-\beta(\varepsilon - \mu)} + e^{-2\beta(\varepsilon - \mu)} \right) = -2k_B T L^3 \int d\varepsilon D(\varepsilon) \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)} \right) \end{aligned} \quad (3.1)$$

[4]

$E(k)$ の期待値は β と $D(\varepsilon)$ を用いて表すと

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= \frac{1}{L^3 \Xi} \sum_k \sum_{n_k} n_k E(k) e^{-\beta E(k) n_k} = \frac{1}{L^3 \Xi} \sum_k \sum_{n_k} \left(-\frac{\partial}{\partial \beta} E(k) e^{-\beta E(k) n_k} \right) \\ &= -\frac{1}{L^3} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Xi = -\frac{\partial}{\partial \beta} \int d\varepsilon D(\varepsilon) \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)} \right) = 2 \int d\varepsilon D(\varepsilon) \frac{E}{1 + e^{\beta E}}\end{aligned}\quad (4.1)$$

と書ける。

[5]

状態密度 $D(\varepsilon)$ の表式は

$$\int d\varepsilon D(\varepsilon) := \frac{1}{(2\pi)^3} \int dk 4\pi k^2 = \int d\varepsilon \frac{dk}{d\varepsilon} \frac{k^2}{2\pi^2} = \int d\varepsilon \frac{1}{2\pi^2} \frac{mk}{\hbar^2} = \int d\varepsilon \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} \quad (5.1)$$

より

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} \quad (5.2)$$

である。

[6]

$E(k)$ の絶対零度での期待値である E_g は

$$E_g = 2 \int_0^\mu d\varepsilon \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} (\varepsilon - \mu) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left[\frac{2}{5} \mu^{5/2} - \frac{2}{3} \mu^{5/2} \right] = -\frac{2}{15\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \mu^{5/2} \quad (6.1)$$

である。^{*1}

[7]

粒子数密度は

$$\begin{aligned}\langle \rho \rangle &= \frac{1}{L^3 \Xi} \sum_k \sum_{n_k} n_k e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu) n_k} = \frac{1}{L^3 \Xi} \sum_k \sum_{n_k} \frac{\partial}{\partial \beta \mu} e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu) n_k} = \frac{1}{L^3} \frac{\partial}{\partial \beta \mu} \ln \Xi \\ &= 2 \int d\varepsilon D(\varepsilon) \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)} \right) = 2 \int d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)}}\end{aligned}\quad (7.1)$$

と表せる。 $\rho = \partial_\mu J / L^3$ でもよい。

これより密度感受率は

$$\kappa = \frac{\partial}{\partial \mu} 2 \int d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)}} = 2 \int d\varepsilon \frac{\beta e^{\beta(\varepsilon - \mu)}}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)}} D(\varepsilon) = \beta \int d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{1 + \cosh(\beta(\varepsilon - \mu))} \quad (7.2)$$

と表せる。

絶対零度においては $\mu < 0$ のとき $\langle \rho \rangle = 0$ より $\kappa = 0$ である。 $\mu > 0$ のとき、

$$\langle \rho \rangle = 2 \int_0^\mu d\varepsilon \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon} = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m\mu}{\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (7.3)$$

^{*1} 見慣れない表式なのでこの式を観察してみる。エネルギーが負なのは、この問題でのエネルギーの基準が化学ポテンシャルであり、電子はそれより低いエネルギーに詰まっているからとわかる。また、これを物性の本で見えるような表式にする。粒子数は状態密度にスピンの自由度を入れない notation であるので $N = \frac{2}{3} 2D(\varepsilon_F) \varepsilon_F$ となる。これより

$$E_g = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \left[\frac{2}{5} \varepsilon_F^{5/2} - \frac{2}{3} \varepsilon_F^{5/2} \right] = \frac{2}{3} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon_F} \times \left(\frac{3}{5} - 1 \right) \varepsilon_F = \frac{3}{5} N \varepsilon_F - N \varepsilon_F = -\frac{2}{5} N \varepsilon_F$$

$= 2D(\varepsilon_F)$

となる。フェルミ準位まで詰まった電子のエネルギーが $\frac{3}{5} N \varepsilon_F$ でそこから、エネルギーの基準点であるフェルミエネルギーの分を除いた量とわかる。

より

$$\kappa = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} = 2D(\mu) \quad (7.4)$$

となり、スピンも考慮した状態密度と同じものになっている。

この結果はとなる理由は、化学ポテンシャルを単位エネルギーずらしたときに増える電子の数を言い換えると状態密度に単位エネルギーを掛けて得られる状態数そのものであるから。

つまり、化学ポテンシャルを変化させたとき、フェルミ面付近にどれほど電子が増えるかというのが密度感受率と読むことができる。

[8]

密度のゆらぎは

$$\begin{aligned} \langle \rho^2 \rangle - \langle \rho \rangle^2 &= \frac{1}{L^6 \Xi} \sum_k \sum_{n_k} n_k^2 e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)n_k} - \left(\frac{1}{L^3 \Xi} \sum_k \sum_{n_k} n_k e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)n_k} \right)^2 = \frac{1}{L^6 \Xi} \frac{\partial^2 \Xi}{\partial \beta \partial \mu^2} - \left(\frac{1}{L^3 \Xi} \frac{\partial \Xi}{\partial \beta \partial \mu} \right)^2 \\ &= \frac{\partial}{\partial \beta \partial \mu} \left(\frac{1}{\Xi} \frac{\partial \Xi}{\partial \beta \partial \mu} \right) = \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial \beta \partial \mu} = k_B T \frac{\kappa}{L^3} (= k_B T \frac{2D(\mu)}{L^3}) \end{aligned} \quad (8.1)$$

となる。

前問より密度感受率はフェルミ面付近の電子数の変化を表す量であるので、フェルミ面付近の粒子数のゆらぎは $k_B T$ に比例するという結果になる。これはフェルミ分布関数の値の変化する領域が $k_B T$ 程度であるという [2] の結果とも一致する。

感想

グランドカノニカル分布からフェルミ分布を導出する際に、はじめからスピンの自由度を考慮してやるのは初めてやった。これがよくやってる計算と同じ結果になったのは感動した。よくあるスピン自由度を後から考えて状態密度を2倍するという処方だと、エニオンのような分数統計のときには不安になるが、この問題の手順だと安心して考えれる。

第 4 問 固体物理：結晶場分裂・禁制遷移

[1]

(a)

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{5}{4}}(3\cos^2 - 1) = \sqrt{\frac{5}{4}} \frac{3r^2 \cos^2 - r^2}{r^2} \propto 3z^2 - r^2 \quad (1.1)$$

より (ii)

(b)

$$Y_{22} + Y_{2-2} = \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{2\pi}} \sin\theta(e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}) = \frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}} \frac{r^2 \sin^2\theta \cos^2\varphi - r^2 \sin^2\theta \sin^2\varphi}{r^2} \propto x^2 - y^2 \quad (1.2)$$

より (v)

(c)

$$Y_{21} + Y_{2-1} = -\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}} \cos\theta \sin\theta(e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}) = -i\sqrt{\frac{15}{2\pi}} \frac{r \cos\theta r \sin\theta \sin\varphi}{r^2} \propto yz \quad (1.3)$$

より (iii)

(d)

$$Y_{21} - Y_{2-1} = -\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}} \cos\theta \sin\theta(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}) = -\sqrt{\frac{15}{2\pi}} \frac{r \cos\theta r \sin\theta \cos\varphi}{r^2} \propto zx \quad (1.4)$$

より (iv)

(b)

$$Y_{22} - Y_{2-2} = \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{2\pi}} \sin\theta(e^{2i\varphi} - e^{-2i\varphi}) = i\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}} \frac{r \sin\theta \cos\varphi \times r \sin\theta \cos\varphi}{r^2} \propto xy \quad (1.5)$$

より (i)

[2]

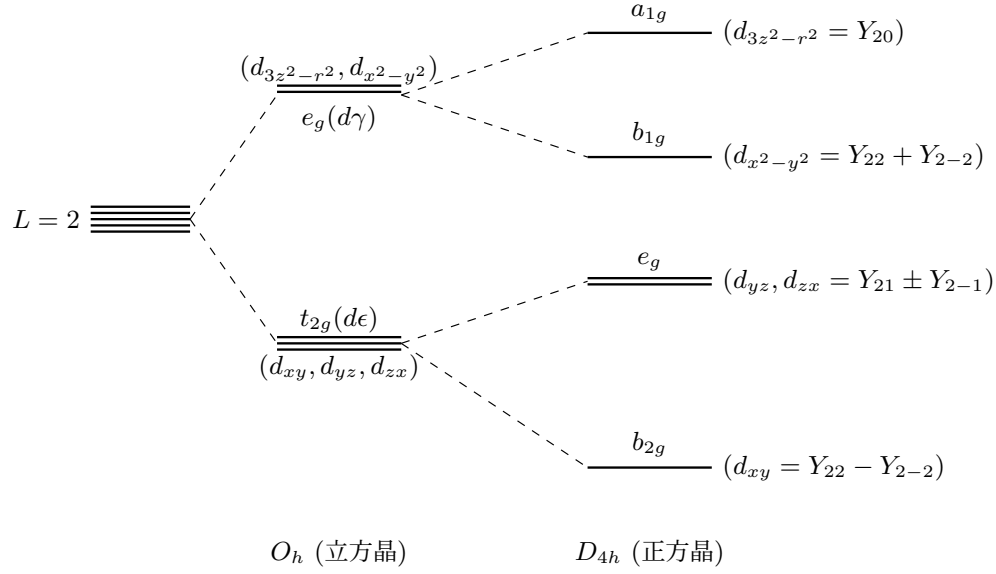


図: 結晶場分裂による軌道準位の変化

[3]

電気双極子相互作用のハミルトニアンを以下のように 1 階の球テンソルに分けて考える

$$\begin{aligned}
 H_p &= exE_x + eyE_y + ezE_z = e \left(-\frac{x+iy}{\sqrt{2}} \right) \frac{\left(-\frac{E_x+iE_y}{\sqrt{2}} \right)^*}{E_+^*} + ezE_z + e \left(\frac{x-iy}{\sqrt{2}} \right) \frac{\left(\frac{E_x-iE_y}{\sqrt{2}} \right)^*}{E_-^*} \\
 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} er (Y_{1,1}E_+^* + Y_{1,0}E_z + Y_{1,-1}E_-^*)
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

そうするとこの相互作用による遷移積分は rY_{1m} の部分だけを調べて、その重ね合わせてやればよいのがわかる。3d 電子自身も球面調和関数 Y_{2m} の重ね合わせであるので次の遷移要素を $\langle 2, m_f | Y_{1m} | 2, m_i \rangle$ を調べればよい。角度方向の積分だけ注目すると Gaunt 積分と呼ばれる積分になる。

$$\int d\Omega Y_{2m_f}^* Y_{1m} Y_{2m_i} = \sqrt{\frac{5 \times 3 \times 5}{4\pi}} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 2 \\ m_f & m & m_i \end{pmatrix} \tag{3.2}$$

1 つ目の 3j 記号の列の反対称性によりこの積分は 0 になるので、3d 電子内での双極子相互作用による遷移はどの準位間での生じない。こんな大道具使わずとも d 電子が偶関数、双極子が奇関数であり、全体のパリティが奇になるので、全領域で積分すると 0 となるで十分。

3j 記号について

3j 記号は角運動量の合成にあらわれる Clebsh-Gordan 係数を拡張したようなものになっている。

$$\langle l_1 m_1; l_2 m_2 | L, M \rangle = (-1)^{l_1-l_2+M} \sqrt{2L+1} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} \tag{3.3}$$

角運動量の合成の合成であるので 3j 記号内の数字の組で、角運動量の合成則を守らないようなときには値が 0 になる。具体的には、

$$m_1 + m_2 - M = 0, \quad l_1 + l_2 + L \in \mathbb{Z}, \quad |l_1 - l_2| \leq L \leq l_1 + l_2 \tag{3.4}$$

である。

3j は列の奇置換に関して位相因子が表れる。これは角運動量の空間反転の対称性のようなものである。

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ m_1 & m_3 & m_2 \end{pmatrix} \tag{3.5}$$

また磁気量子数の反転に関しても位相因子が表れる。これは角運動量の時間反転の対称性のようなものである。

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} \tag{3.6}$$

[4]

磁気双極子相互作用は

$$\begin{aligned} H_M &= \mu_B H_x l_x + \mu_B H_y l_y + \mu_B H_z l_z \\ &= \mu_B \left(-\frac{H_x + iH_y}{\sqrt{2}} \right)^* \left(-\frac{l_x + il_y}{\sqrt{2}} \right) + \mu_B H_z^* l_z + \mu_B \left(\frac{H_x - iH_y}{\sqrt{2}} \right)^* \left(\frac{l_x - il_y}{\sqrt{2}} \right) \end{aligned} \quad (4.1)$$

と書ける。

ファラデーの式をフーリエ変換したものより、

$$\begin{aligned} -\frac{\partial B}{\partial t} &= \nabla \times E \\ i\omega \mu H &= k \times E \\ H &\propto k \times E \end{aligned} \quad (4.2)$$

x 方向に進む光電場が y 方向の直線偏光を持っているとすると、磁場は z 方向に振動する。なので、このときの磁気双極子相互作用は

$$H_M = \mu_B H_z^* l_z \quad (4.3)$$

である。これより

$$\begin{aligned} l_z |d_{3z^2-r^2}\rangle &\propto l_z Y_{20} = 0 \\ l_z |d_{x^2-y^2}\rangle &\propto l_z (Y_{22} + Y_{2-2}) \propto Y_{22} - Y_{2-2} \propto |d_{xy}\rangle \\ l_z |d_{yz}\rangle &\propto l_z (Y_{21} + Y_{2-1}) \propto Y_{21} - Y_{2-1} \propto |d_{zx}\rangle \\ l_z |d_{zx}\rangle &\propto l_z (Y_{21} - Y_{2-1}) \propto Y_{21} + Y_{2-1} \propto |d_{yz}\rangle \\ l_z |d_{xy}\rangle &\propto l_z l_z (Y_{22} + Y_{2-2}) \propto Y_{22} + Y_{2-2} \propto |d_{x^2-y^2}\rangle \end{aligned} \quad (4.4)$$

とわかる。つまり、 y 方向の偏光直線偏光によって、

$$|d_{xy}\rangle \leftrightarrow |d_{x^2-y^2}\rangle, \quad |d_{yz}\rangle \leftrightarrow |d_{zx}\rangle \quad (4.5)$$

間の遷移が可能であるとわかる。

z 方向の直線偏光の光電場の磁場は y 方向に振動する。なので磁気双極子相互作用は

$$H_M = -i\mu_B H_y l_+ + i\mu_B H_y l_- \quad (4.6)$$

と書ける。これより、

$$\begin{aligned} (-l_+ + l_-) |d_{3z^2-r^2}\rangle &\propto (-l_+ + l_-) Y_{20} = -Y_{21} + Y_{2-1} \propto |d_{zx}\rangle \\ (-l_+ + l_-) |d_{x^2-y^2}\rangle &\propto (-l_+ + l_-) (Y_{22} + Y_{2-2}) \propto Y_{21} - Y_{2-1} \propto |d_{yz}\rangle \\ (-l_+ + l_-) |d_{yz}\rangle &\propto (-l_+ + l_-) (Y_{21} + Y_{2-1}) \propto -Y_{22} + Y_{2-2} \propto |d_{x^2-y^2}\rangle \\ (-l_+ + l_-) |d_{zx}\rangle &\propto (-l_+ + l_-) (Y_{21} - Y_{2-1}) \propto -Y_{22} - Y_{2-2} + 2Y_{20} \propto |d_{xy}\rangle + |d_{3z^2-r^2}\rangle \\ (-l_+ + l_-) |d_{xy}\rangle &\propto (-l_+ + l_-) (Y_{22} + Y_{2-2}) \propto Y_{21} - Y_{2-1} \propto |d_{zx}\rangle \end{aligned} \quad (4.7)$$

とわかる。つまり、 y 方向の偏光直線偏光によって、

$$|d_{3z^2-r^2}\rangle, |d_{xy}\rangle \leftrightarrow |d_{zx}\rangle, \quad |d_{x^2-y^2}\rangle \leftrightarrow |d_{yz}\rangle \quad (4.8)$$

間の遷移が可能であるとわかる。

いま、光の吸収が両者であったことから電子は $|d_{xy}\rangle$ まで詰まっているとわかるため、吸収される入射光のエネルギーが大きい (A) は y 偏光の光電場、吸収される入射光のエネルギーが小さい (B) は z 偏光の光電場とわかる。

感想

私の専門なのでニコニコしながら解いてた。そのまま卒論の素材に使いたいの、必要以上に記述している。J.J. Sakurai の 3 章にある回転の表現や球テンソル演算子については追ったことある人もいるだろうけど、具体例がないのでなかなか馴染めてない人多そう。

ここら辺の光学遷移則は黙って計算するか、結果だけ認めて使うのでも十分ではあるが、球テンソル演算子表記にすると光の角運動量が1であるというような表現の由来がわかるのも良い。ベクトルは1階のテンソルであり、Wigner-Eckartの定理により回転に対して共変な1階の球テンソルは $L=1$ の角運動量に比例定数をつけた恰好になるというのが、抽象的な表現論での言い方である。それはこの問題で追ってみたように、1階の球テンソルは光を独立な円偏光と z 偏光の重ね合わせとみなして、それに対応する演算子は電気双極子だったら Y_{1m} 、磁気双極子だったら l_z, l_{\pm} が出てくるのでそれらは角運動量とよく結びついているとわかる。

最後の[4]はこれで合ってるのだろうけど、 z 軸のひずみが小さいとしているので、(B)の遷移は大分小さくて見えないんじゃないかなと思う。もしかして $0 < 1 - \frac{c}{a} \ll 1$ という式は正方晶での結晶場分裂がよく見える程度にはゆがんでいるが、もともとの結晶の形を大きく変化はしていないというのを表しているのだろうか？

第 1 問 積分・偏微分方程式

[1]

[1-1]

$x = a \tan \theta$ と置換すると

$$I_{n+1} = \int \frac{dx}{(x^2 + a^2)^{n+1}} = \int \frac{1}{a^{2n+2}(1 + \tan^2 \theta)^{n+1}} \frac{a d\theta}{\cos^2 \theta} = \frac{1}{a^{2n+1}} \int \cos^{2n} \theta d\theta \quad (1.1)$$

ここで、

$$\begin{aligned} \int \cos^{2n} \theta d\theta &= \int \cos^{2n-2} \theta (1 - \sin^2 \theta) d\theta \\ &= \int \cos^{2n-2} \theta d\theta - \int \left(-\frac{1}{2n-1} \cos^{2n-1} \theta \right)' \sin \theta d\theta \\ &= \int \cos^{2n-2} \theta d\theta + \frac{1}{2n-1} \cos^{2n-1} \theta \sin \theta + C - \frac{1}{2n-1} \int \cos^{2n} \theta d\theta \\ \frac{2n}{2n-1} \int \cos^{2n} \theta d\theta &= \int \cos^{2n-2} \theta d\theta + \frac{1}{2n-1} \cos^{2n} \theta \tan \theta + C \\ \int \cos^{2n} \theta d\theta &= \frac{2n-1}{2n} \int \cos^{2n-2} \theta d\theta + \frac{\tan \theta}{2n(1 + \tan^2 \theta)^n} + C \end{aligned} \quad (1.2)$$

より、

$$\begin{aligned} I_{n+1} &= \frac{2n-1}{2na^2} I_n + \frac{1}{2na^2} \frac{a \tan \theta}{a^{2n}(1 + \tan^2 \theta)^n} + C \\ &= \frac{1}{2na^2} \left[(2n-1) I_n + \frac{x}{(x^2 + a^2)^n} \right] + C \end{aligned} \quad (1.3)$$

[1-2]

$$\begin{aligned} I_1 &= \int \frac{dx}{x^2 + a^2} = \frac{1}{a} \tan^{-1} \frac{x}{a} \\ I_2 &= \frac{1}{2a^2} \left[I_1 + \frac{x}{x^2 + a^2} \right] = \frac{1}{2a^3} \tan^{-1} \frac{x}{a} + \frac{x}{2a^2(x^2 + a^2)} \end{aligned} \quad (1.4)$$

[1-3]

被積分関数を以下のように部分分数分解をする。

$$\frac{4x^2 + 2x^3 + 10x^2 + 3x + 9}{(x+1)(x^2+2)^2} = \frac{a}{x+1} + \frac{bx+c}{x^2+2} + \frac{dx+e}{(x^2+2)^2} = \frac{2}{x+1} + \frac{2x}{x^2+2} + \frac{-2x+1}{(x^2+2)^2} \quad (1.5)$$

これより

$$\begin{aligned} \int \frac{4x^2 + 2x^3 + 10x^2 + 3x + 9}{(x+1)(x^2+2)^2} dx &= \int \left(\frac{2}{x+1} + \frac{2x}{x^2+2} + \frac{-2x}{(x^2+2)^2} + \frac{1}{(x^2+2)^2} \right) dx \\ &= 2 \ln |x+1| + \ln |x^2+2| + \ln |(x^2+2)^2| + \frac{1}{4\sqrt{2}} \tan^{-1} \frac{x}{\sqrt{2}} + \frac{x}{4(x^2+2)} \\ &= \ln [(x+1)^2(x^2+2)^3] + \frac{1}{4\sqrt{2}} \tan^{-1} \frac{x}{\sqrt{2}} + \frac{x}{4(x^2+2)} \end{aligned} \quad (1.6)$$

[2]

[2-1]

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} &= \frac{\partial \xi}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \eta} = c \left(\frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \\ \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta}\end{aligned}\quad (2.1)$$

より、

$$\begin{aligned}0 &= \left(\frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) u \\ &= \left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} - 2 \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \eta} - \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} - 2 \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \eta} \right) u \\ &= \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta}\end{aligned}\quad (2.2)$$

となり、問の前半が示せた。

後半については、前半で得られた関係式の両辺を η で積分すると

$$0 = \int \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \eta} d\eta = \frac{\partial u}{\partial \xi} + f(\xi) \quad (2.3)$$

さらに ξ で微分して

$$\begin{aligned}0 &= \int \left(\frac{\partial u}{\partial \xi} + f(\xi) \right) d\xi = u + \int f(\xi) d\xi + g(\eta) \\ u &= - \int f(\xi) d\xi - g(\eta)\end{aligned}\quad (2.4)$$

そして改めて ξ の関数である $\int f(\xi) d\xi$ を $\phi(\xi)$, η の関数である $-g(\eta)$ を $\varphi(\eta)$ とおきなおすと

$$u = \phi(\xi) + \varphi(\eta) = \phi(x + ct) + \varphi(x - ct) \quad (2.5)$$

となり、一般解の形が得られた。

[2-2]

$g(x)$ の原始関数を $G(x)$ とおくと式 (5) は

$$u(x, t) = \frac{1}{2}(f(x + ct) + f(x - ct)) + \frac{1}{2c}(G(x + ct) - G(x - ct)) \quad (2.6)$$

となり、一般解の形を満たすため、偏微分方程式の解の候補であるのがわかる。境界条件を満たすかを確かめていく。1 目の境界条件は

$$u(x, 0) = \frac{1}{2}(f(x + 0) + f(x - 0)) + \frac{1}{2c} \int_{x-0}^{x+0} g(s) ds = f(x) \quad (2.7)$$

より満たしているのがわかる。2 目の境界条件は

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) &= \frac{1}{2c}(f'(x + ct) - f'(x - ct)) + \frac{1}{2}(g(x + ct) + g(x - ct)) \\ \frac{\partial}{\partial t} u(x, t) \Big|_{t=0} &= g(x)\end{aligned}\quad (2.8)$$

より満たしているのがわかる。以上より式 (5) は求める解であるのがわかる。

[2-3]

この境界条件は全問で調べた形であるので、解はヘヴィサイドの階段関数 $\theta(x)$ を用いて

$$u(x, t) = \frac{1}{2c} \int_{x-ct}^{x+ct} c_0 \delta(s) ds = \frac{c_0}{2c} [\theta(x + ct) - \theta(x - ct)] \quad (2.9)$$

となる。この解は単一矩形波が伝播しているような解である。

第 2 問 線形代数: 対称行列と 2 次形式

[1]

アインシュタインの縮約を使い、ベクトル表示と成分表示を行き来することにする。 $x^T Ax/2 - x^T b$ の停留値となる x の条件は

$$\begin{aligned} 0 &= \nabla \left(\frac{1}{2} x^T Ax - x^T b \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{1}{2} A_{jk} x_j x_k - x_j b_j \right) \\ &= \frac{1}{2} \delta_{ij} A_{jk} x_k + \frac{1}{2} \delta_{ik} A_{jk} x_j - \delta_{ij} b_j = \frac{A_{ij} + A_{ji}}{2} x_j - b_i \end{aligned} \quad (1.1)$$

いま、 A は対称行列で $A_{ij} = A_{ji}$ より

$$\begin{aligned} 0 &= A_{ij} x_j - b_i = Ax - b \\ Ax &= b \end{aligned} \quad (1.2)$$

これを逆にたどれば、 $Ax = b$ を x について解いたものは $x^T Ax/2 - x^T b$ の停留値となるのもわかるので示せた。

[2]

B の固有値方程式を考える。固有値を λ とすると、

$$\begin{aligned} 0 &= |B - cI| = \begin{vmatrix} 6-\lambda & 2 & 2 \\ 2 & 7-\lambda & 0 \\ 2 & 0 & 5-\lambda \end{vmatrix} = (5-\lambda) \begin{vmatrix} 6-\lambda & 2 \\ 2 & 7-\lambda \end{vmatrix} + 2 \begin{vmatrix} 2 & 2 \\ 7-\lambda & 0 \end{vmatrix} \\ &= (5-\lambda)(6-\lambda)(7-\lambda) - 4(5-\lambda) - 4(7-\lambda) = (5-\lambda)(6-\lambda)(7-\lambda) - 8(6-\lambda) \\ &= (6-\lambda)(\lambda^2 - 12\lambda + 27) = (6-\lambda)(3-\lambda)(9-\lambda) \end{aligned} \quad (2.1)$$

これより $c_1 = 9, c_2 = 6, c_3 = 3$ となる。また、 A は対称行列であるため、固有値に対応する大きさ 1 の固有ベクトルを並べることで A を対角化する D を作ることができる。よって D は

$$D = \begin{pmatrix} 2/3 & 1/3 & 2/3 \\ 2/3 & -2/3 & -1/3 \\ 1/3 & 2/3 & -2/3 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

[3]

$$B^k \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = B^k \left(2 \begin{pmatrix} 2/3 \\ 2/3 \\ 1/3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2/3 \\ -1/3 \\ -2/3 \end{pmatrix} \right) = \left(2 \times 9^k \begin{pmatrix} 2/3 \\ 2/3 \\ 1/3 \end{pmatrix} + 3^k \begin{pmatrix} 2/3 \\ -1/3 \\ -2/3 \end{pmatrix} \right) \quad (3.1)$$

これより

$$\frac{a_k}{b_k} = \frac{4 \times 9^k + 2 \times 3^k}{4 \times 9^k - 3^k} \rightarrow 1 \quad (k \rightarrow \infty) \quad (3.2)$$

となる。

[4]

$y = (y_1 \ y_2 \ y_3)^T, z = (z_1 \ z_2 \ z_3)^T$ とする。このとき、 D は直交行列であるので $z^T z = y^T y$ が成り立つことに注意して f を変形していく。

$$f = \frac{1}{4} + \frac{y^T B y^T}{4 y^T y} = \frac{1}{4} + \frac{z^T C z^T}{4 z^T z} = \frac{1}{4} + \frac{9z_1^2 + 6z_2^2 + 3z_3^2}{4 z^T z} = 1 + \frac{3}{4} \frac{3z_1^2 + 2z_2^2}{z^T z} \quad (4.1)$$

ここで、 $z_1 = r \sin \theta \cos \varphi, z_2 = r \sin \theta \sin \varphi, z_3 = r \cos \theta$ として極座標で表示すると

$$f = 1 + \frac{3}{4} \sin^2 \theta (3 \cos^2 \varphi + 2 \sin^2 \varphi) = 1 + \frac{3}{4} \sin^2 \theta (\cos^2 \varphi + 2) \geq 1 \quad (4.2)$$

となるので最小値は 1