

2011 年度東大物工答案

しゃんごん (@CEY3944)

2025 年 6 月 10 日

物理

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]

波動関数の広がりには 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ときの状態を求めよ』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

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

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)

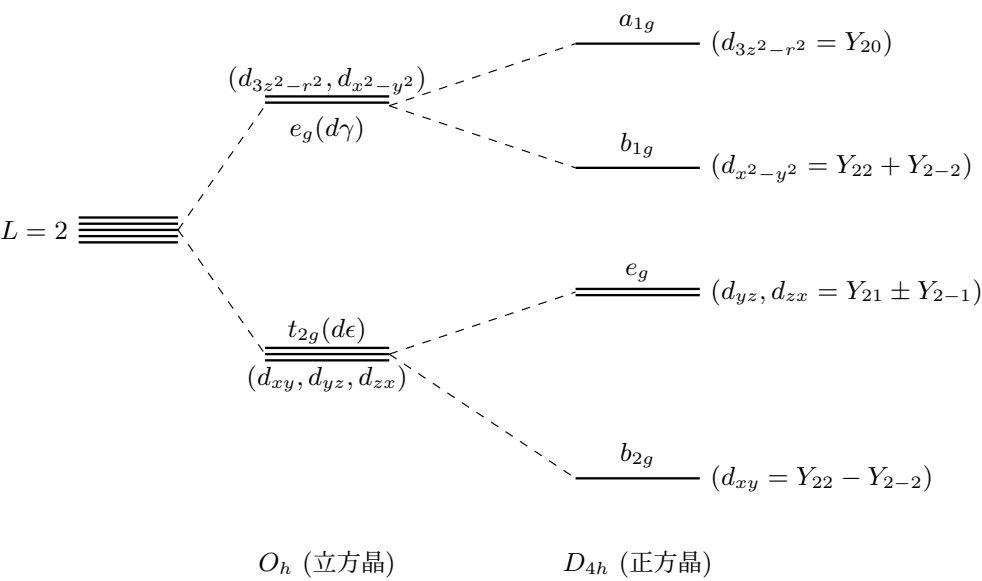


図: 結晶場分裂による軌道準位の変化

感想

私の専門なのでニコニコしながら解いてた。そのまま卒論に使いたいので、必要以上に記述している。

数学