物性物理科学 II

注意：問題 1 から 3 までの各問に解答し，各問題の答えを別々の解答用紙に記入すること．1 つの問題の解答が解答用紙 2 枚にわたるときは，2 枚目にも問題の番号を書き，2 枚目であることを明示すること．

問題 1

N 個の独立な質量 m の 1 次元振動子からなる古典系のハミルトニアン $\mathcal{H}$ は

$$\mathcal{H}(x_1,\cdots,x_N,p_1,\cdots,p_N)=\sum_{j=1}^{N}\left[\frac{p_j^2}{2m}+U(x_j)\right] \tag{1}$$

と与えられる．ここで，$U(x_j)$ は j 番目の振動子のポテンシャルエネルギーである．j 番目の振動子の絶対零度における平衡点を基準とし，そこからのずれを x_j とする．p_j は j 番目の振動子の運動量を表す．以下の問いに答えよ．なお，問 [1](a) 以外では導出過程も示すこと．

なお，必要であれば，以下の積分公式を用いて良い．

$$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\alpha x^2}dx=\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}},\ \int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-\alpha x^2}dx=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}},\ \int_{-\infty}^{+\infty}x^4e^{-\alpha x^2}dx=\frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}} \tag{2}$$

ただし，α は正の定数とする．以下の設問では，ボルツマン定数を k_{B} とする．以下の問題文において，$\langle\cdots\rangle$ は温度 T でのカノニカル分布 $P=e^{-\mathcal{H}/(k_{\mathrm{B}}T)}/\mathcal{Z}$ を用いた統計平均を表す．また，$\mathcal{Z}$ は分配関数である．解答に必要であれば，プランク定数 h あるいはディラック定数 $\hbar=h/(2\pi)$ を用いて良い．

[1] 式 (1) のポテンシャルエネルギー $U(x_j)$ が，次式の調和振動子型ポテンシャルで表される場合を考える．

$$U(x_j)=\frac{1}{2}m\omega^2x_j^2 \tag{3}$$

ただし，振動子の振動数を ω とした．

(a) ある温度 T に対して，古典系の分配関数 $\mathcal{Z}$ は以下のように与えられる．

$$\mathcal{Z}=A\int dx_1\cdots\int dx_N\int dp_1\cdots\int dp_N e^{-\mathcal{H}/(k_{\mathrm{B}}T)} \tag{4}$$

係数 A の表式を示し，係数 A の物理的な意味を説明せよ．

(b) 式 (4)の積分を計算し，$\mathcal{Z}$ を求めよ．

(c) 古典系のハミルトニアンはエネルギー E と等価である（$\mathcal{H}=E$）．この系のエネルギーの平均値 $\bar{E}=\langle\mathcal{H}\rangle$ を，$\hbar$, ω, m, k_{B}, N, T のうち必要なものを用いて表せ．

(d) エネルギーの揺らぎの二乗平均 $\sigma_E^2=\langle(\mathcal{H}-\langle\mathcal{H}\rangle)^2\rangle$ は $\sigma_E^2=k_{\mathrm{B}}T^2\frac{\partial\bar{E}}{\partial T}$ と表される．このとき，σ_E^2 を温度 T と N の関数として求めよ．さらに，平均値 $\bar{E}$ に比べて揺らぎ σ_E を無視できるのは N がどのような場合か説明せよ．

（次ページにつづく）

問題 1 のつづき

(e) k 番目の振動子の x_k の統計平均値 $\langle x_k \rangle$ を求めよ．

(f) x_k の揺らぎの二乗平均 $\langle (x_k - \langle x_k \rangle)^2 \rangle$ を計算し，T の関数として表せ．

(g) 熱力学第三法則によると，系のエントロピーは絶対零度で 0 となる．式 (1) で与えられる振動子系は熱力学第三法則を満たさないことを示せ．また，熱力学第三法則を満たさない理由を述べよ．

[2] 次に，式 (1) のポテンシャル $U(x_j)$ として，調和振動子ポテンシャルに非調和項が非常に小さい摂動として加わったことを考える．このとき，

$$U(x_j) = ax_j^2 - bx_j^3 \tag{5}$$

と書ける．ここで，a, b は正の定数であり，非調和項の係数は $b \ll a^{3/2}/\sqrt{k_{\mathrm{B}}T}$ を満たす十分小さい値であるとする．このとき，b について 1 次まで展開することで，温度 T における k 番目の振動子の x_k の統計平均値が $\langle x_k \rangle = DT$ となることを示し，定数 D を求めよ．

問題2

図1に示す2次元の蜂の巣格子結晶について考える．基本並進ベクトルを$\boldsymbol{a}_1 = \left(\sqrt{3}a/2,\ a/2\right)$，$\boldsymbol{a}_2 = \left(-\sqrt{3}a/2,\ a/2\right)$とし，単位格子の一辺の長さは$a$とする．以下の問いに答えよ．

[1] この系の逆格子空間$\left(k_x,\ k_y\right)$における基本並進ベクトル$\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$を，それぞれ a を用いて表せ．

[2] この系の第1 Brillouin 領域をk_x軸，k_y軸とともに図示し，その境界線がk_x軸，k_y軸の正の領域と交わる点Pと点Qの座標を求めよ．

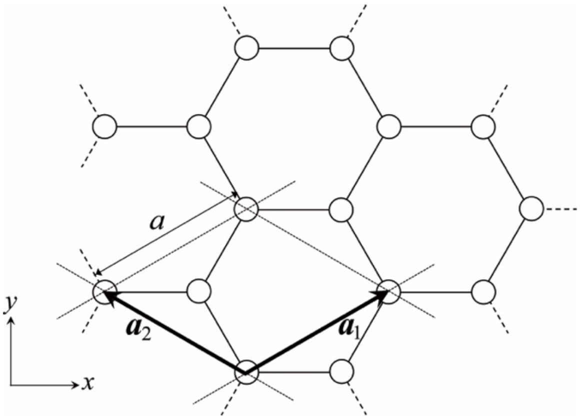

図1

図1の2次元結晶に対して，図2のようにx軸に平行なX線を入射してX線回折測定を行った．xy面内で稼働する検出器を用いており，入射X線と検出器に入射する散乱X線のなす角度を2θとする．

[3] 2θを$0°$から増加させたところ，$\theta = 30°$ で初めてブラッグ反射が観測された．このときの入射X線の波長λを，aを用いて表せ．ただし，λは$\frac{a}{2}$よりも大きいとする．また，2次元結晶の向きは図1と同じ向きに固定する．

[4] この2次元結晶をxy面内で30° 回転させ，波長がλより長いX線を用いて同様な測定を行ったところ，$\theta = 60°$ で初めてブラッグ反射が観測された．この際のX線の波長λ'を，aを用いて表せ．

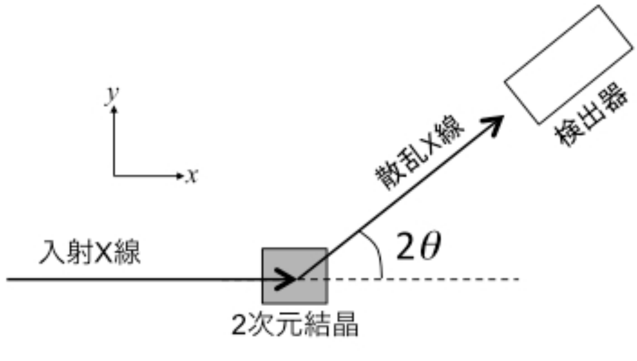

図2

（次ページにつづく）

問題 2 のつづき

[5] 次に 2 次元の蜂の巣格子のフェルミ面を考えることにする．第 1 Brillouin 領域は問[2]で与えられたものになっているが，波数kをもつ電子のエネルギーE は自由電子と同じ $E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ で与えられるとする．$\hbar$はプランク定数を2πで割ったものである．単位格子あたり 2 個の電子が存在する場合のフェルミ波数k_{F}を求めよ．ただし，スピン自由度を考慮すること．

[6] 問[5]で考えたフェルミ面が，周期ポテンシャルの影響を受けて第 1 Brillouin 領域境界付近でどのように修正されるかを考える．このフェルミ面の概形と第 1 Brillouin 領域境界を，k_x軸，k_y軸とともに図示せよ．ただし，必要に応じて $\sqrt[3]{3}\cong 1.44$, $\sqrt[4]{3}\cong 1.32$, $\sqrt{\pi}\cong 1.77$, $\sqrt{2\pi}\cong 2.51$であることを考慮し，第 1 Brillouin 領域境界に対するフェルミ面の配置が分かるように図示すること．

問題 3

真空と誘電体の境界における電磁波の振る舞いを考える．以下の問いに答えよ．なお，iは$i^2 = -1$を満たす虚数単位である．

[1] 境界における電磁場の満たすべき接続条件について，電場，磁場，電束密度，磁束密度の各ベクトル$\boldsymbol{E}$，$\boldsymbol{H}$，$\boldsymbol{D}$，$\boldsymbol{B}$に関して以下の選択肢から正しいものを全て選べ．

ア．電場$\boldsymbol{E}$と磁場$\boldsymbol{H}$は，境界面に対して垂直の成分が連続である．
イ．電場$\boldsymbol{E}$と磁束密度$\boldsymbol{B}$は，境界面に対して垂直の成分が連続である．
ウ．電束密度$\boldsymbol{D}$と磁場$\boldsymbol{H}$は，境界面に対して平行の成分が連続である．
エ．電束密度$\boldsymbol{D}$と磁束密度$\boldsymbol{B}$は，境界面に対して平行の成分が連続である．
オ．電束密度$\boldsymbol{D}$と磁場$\boldsymbol{H}$は，境界面に対して垂直の成分が連続である．
カ．電束密度$\boldsymbol{D}$と磁束密度$\boldsymbol{B}$は，境界面に対して垂直の成分が連続である．
キ．電場$\boldsymbol{E}$と磁束密度$\boldsymbol{B}$は，境界面に対して平行の成分が連続である．
ク．電場$\boldsymbol{E}$と磁場$\boldsymbol{H}$は，境界面に対して平行の成分が連続である．

[2] 図 3 のように真空中に置かれた，屈折率n（$n > 1$）のz軸の正方向に無限に長い直方体形状（各辺はx，y，z軸に平行）の誘電体の表面（$z = 0$の面）に平面電磁波を入射する．入射角θ $\left(0 \leq \theta < \frac{\pi}{2}\right)$にかかわらず，この誘電体内に入射された電磁波が外に漏れることなく伝播するためのnの条件を求めよ．ただし，電磁波はxz平面内を進行し，スネルの法則が成り立つものとする．

[3] 図 3 において，平面電磁波がz軸方向に進行し，誘電体表面（$z = 0$）に垂直に入射する場合（$\theta = 0$）を考える．誘電体の屈折率はn（$n > 1$）とする．入射波の電場を$E_I \exp[i(kz - \omega t)]$，反射波の電場を$E_R \exp[i(-kz - \omega t)]$，誘電体内を進行する透過波の電場を$E_T \exp[i(k'z - \omega t)]$と表す．真空と誘電体の界面（$z = 0$，$z$軸に垂直な面）における境界条件を電場，磁場のそれぞれについて考え，誘電体表面での入射波に対するエネルギー反射率$R = \frac{|E_R|^2}{|E_I|^2}$と屈折率$n$との関係式を求めよ．また，その導出過程も記せ．$\omega$は電磁波の角振動数，$k$，$k'$はそれぞれ真空中と誘電体中における電磁波の波数，　E_I，E_R，E_Tはそれぞれ入射波，反射波，透過波の電場の振幅である．

次に，真空と完全導体との境界における電磁波の振る舞いを考える．完全導体とは電気伝導度σが無限大，すなわち電気抵抗率ρが 0 となる導体である．以下の問いに答えよ．

[4] 完全導体内における電磁波の電場成分および磁場成分の大きさを答えよ．

[5] 完全導体表面には，表面電荷密度σ_s，表面電流密度j_sが存在する．完全導体表面近傍の真空側において表面に平行な磁場成分と表面に垂直な電場成分を真空の誘電率ε_0，真空の透磁率μ_0，σ_s，j_sのうち必要なものを用いて表せ．

（次ページにつづく）

<u>問題３のつづき</u>

次に，図４のように真空中に置かれた完全導体で作られたz軸方向に無限に長い矩形の導波管について考える．導波管の内辺二辺の長さはa，b（$a > b$）であり，それぞれ，x軸，y軸に平行である．この導波管の中を電磁波がz方向に伝播し，電磁波の電場が横波成分のみを持つ場合を考える．このとき，電場と磁束密度のx，y，z成分をそれぞれE_x，E_y，E_z（ただし，$E_z = 0$）および B_x，B_y，B_zとすると，E_x，E_y，B_x，B_yはz方向の波数k，角振動数ωを用いてそれぞれ

$$E_x = \frac{i\omega}{\gamma^2}\frac{\partial B_z}{\partial y}, \qquad E_y = -\frac{i\omega}{\gamma^2}\frac{\partial B_z}{\partial x}$$

$$B_x = \frac{ik}{\gamma^2}\frac{\partial B_z}{\partial x}, \qquad B_y = \frac{ik}{\gamma^2}\frac{\partial B_z}{\partial y}$$

と表される．一方，

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) B_z + \gamma^2 B_z = 0$$

が成立し，この方程式の解として，B_zが以下のように求まる．

$$B_z = B_0 f(x, y) e^{i(kz - \omega t)}$$

B_0は$x = y = z = 0$，$t = 0$におけるB_zの値である． $f(x,y)$は$f(0,0) = 1$を満たし，境界条件によって定まる関数である．なお，

$$\gamma^2 = \varepsilon_0 \mu_0 \omega^2 - k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} - k^2$$

である．cは真空中の光速度である．以下の問いに答えよ．

[6] $x = 0$および$x = a$の境界面においてE_yが満たすべき条件を示せ．また，$y = 0$および$y = b$の境界面においてE_xが満たすべき条件を示せ．

[7] 問[6]で示した境界条件を満たす$f(x,y)$の一般的な表式を，非負の整数m_1，m_2を用いて表せ．

[8] この導波管を減衰せず透過できる電磁波の最も長い波長（遮断波長）λ_cを求めよ．

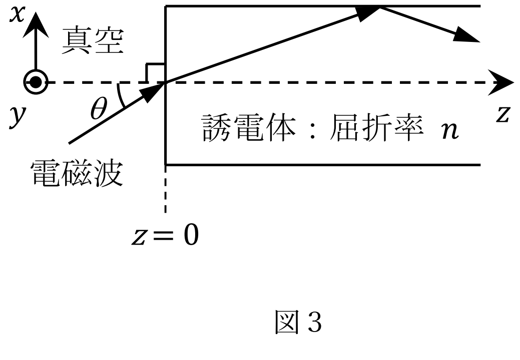

図３

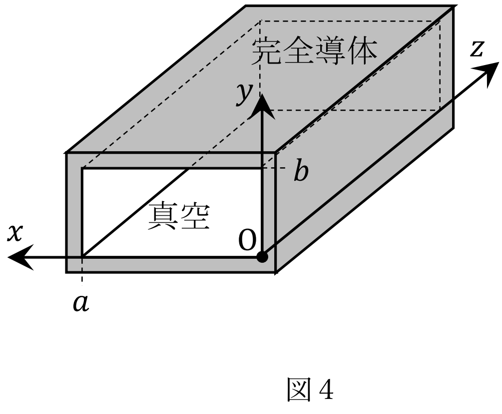

図４