（平成 28 年 8 月 18 日実施）

平成 29 年度

北海道大学大学院理学院　物性物理学専攻・宇宙理学専攻
修士（博士前期）課程入学試験　専門科目問題（午後）

受験に関する注意

- 試験時間：　13:00〜15:30 の 2 時間 30 分
- 解答紙、草案紙ともに受験番号を記入する。氏名は記入しない。
- 解答の際、途中の問が解けないときも問題文に記されている結果等を使ってそれ以降の問を解いてよい。
- 試験終了後、解答紙、草案紙ともすべて提出する。
- 物性物理学専攻志望者（宇宙理学専攻を併願する者を含む）: **問題 III, IV** を解答すること。
- 宇宙理学専攻志望者：
  - 宇宙物理学・素粒子論・原子核理論・情報メディア科学・原子核反応データ科学を志望するものは**問題 III, IV** を解答すること。
  - 惑星宇宙グループ・宇宙物質科学・相転移ダイナミクス・飛翔体観測を志望するものは**問題 III, IV, V, VI,VII** の中から 2 つの問題を選択して解答すること。
- 配布するものは

専門科目問題冊子	問題 III	3 枚 (A4)
	問題 IV	2 枚 (A4)
	問題 V	2 枚 (A4)
	問題 VI	3 枚 (A4)
	問題 VII	3 枚 (A4)
解答紙	2 問題分	6 枚 (B4)（各問題 3 枚）
草案紙	2 問題分	2 枚 (B4)（各問題 1 枚）

問題 III

以下の問 1 から問 2 までの全ての設問に答えよ。

問 1 静電ポテンシャル中での電子の運動を考える。原点に電荷 Ze（ただし $e > 0$）が固定されているとき、このポテンシャル中での電子のシュレディンガー方程式は、E をエネルギー固有値、m_e を電子の質量として

$$\left[-\frac{\hbar^2\Delta}{2m_\mathrm{e}} - \frac{Ze^2}{|\vec{r}|}\right]\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}),$$

と書くことが出来る。ここでは中心力ポテンシャル中の波動関数 $\Psi(\vec{r})$ を考えるために、極座標 (r,θ,ϕ) を用いる。$\vec{r} = (x, y, z) = (r\sin\theta\cos\phi, r\sin\theta\sin\phi, r\cos\theta)$ なる関係に注意せよ。

1-1. $\Psi(\vec{r}) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$ と変数分離することにより、$R(r)$, $\Theta(\theta)$, $\Phi(\phi)$ が満たす方程式をそれぞれ求めよ。ただし、以下に示す極座標でのラプラシアンを使ってもよい。

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

前問で得た方程式を物理的に適切な境界条件の下で解くと、量子化された状態を記述する波動関数として $\Psi(\vec{r}) = \Psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r)\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi)$（$n$: 主量子数、$l$: 軌道角運動量量子数、$m$: 磁気量子数）を得る。以下では、$n = 2$ の固有状態に注目する。$2s$ 軌道（$n = 2$, $l = 0$, $m = 0$）と $2p$ 軌道（$n = 2$, $l = 1$, $m = 0$, ±1）の規格化された波動関数 Ψ_{200}, Ψ_{21-1}, Ψ_{210}, Ψ_{211} は

$$\begin{aligned}
\Psi_{200}(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_{20}(r), \\
\Psi_{21-1}(\vec{r}) &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}}R_{21}(r)\sin\theta e^{-i\phi}, \\
\Psi_{210}(\vec{r}) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}R_{21}(r)\cos\theta, \\
\Psi_{211}(\vec{r}) &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}R_{21}(r)\sin\theta e^{i\phi},
\end{aligned}$$

で与えられる。

1-2. 3 つの $2p$ 軌道波動関数 Ψ_{21-1}, Ψ_{210}, Ψ_{211} の適当な線形結合により、3 つの規格直交な実波動関数 Ψ_x, Ψ_y, Ψ_z を作れ。ただし、$\Psi_x \propto R_{21}(r)x/r$, $\Psi_y \propto R_{21}(r)y/r$, $\Psi_z \propto R_{21}(r)z/r$ なる関数形とせよ。

次に、原点の電荷に加えて z 軸上の $(0,0,c)$ および $(0,0,-c)$ の位置に正の電荷 q がある場合を考える。これらの電荷と電子との間にも静電相互作用が働く。この静電相互作用の効果を 1 次の摂動計算により評価しよう。

1-3. 新たに加えた 2 つの電荷による静電ポテンシャル $V_0(\vec{r})$ は

$$V_0(\vec{r}) = -\left[\frac{qe}{\sqrt{x^2+y^2+(z+c)^2}} + \frac{qe}{\sqrt{x^2+y^2+(z-c)^2}}\right],$$

と表される。ここで、電荷は、波動関数の広がりに比べて十分遠い位置にあるとする。このとき、$r/c \ll 1$ として $V_0(\vec{r})$ を r/c について 2 次まで展開し、近似的な静電ポテンシャル $V(\vec{r})$ を求めよ。ルジャンドル多項式 $P_q(t)$ (定義域 : $|t| \leq 1$) を用いた以下の展開を使用してよい。

$$|s| \ll 1 \text{ に対して } \quad \frac{1}{\sqrt{1-2st+s^2}} = \sum_{q=0}^{\infty} P_q(t)s^q \simeq P_0(t) + P_1(t)s + P_2(t)s^2,$$

$$P_0(t) = 1,\ \ P_1(t) = t,\ \ P_2(t) = \frac{1}{2}(3t^2-1).$$

以下では $V(\vec{r})$ による摂動を考える。

1-4. $2s$ 軌道波動関数 Ψ_{200} と $2p$ 軌道波動関数 Ψ_x, Ψ_y, Ψ_z について $\langle\Psi_{200}|V(\vec{r})|\Psi_x\rangle = 0$, $\langle\Psi_{200}|V(\vec{r})|\Psi_y\rangle = 0$, $\langle\Psi_{200}|V(\vec{r})|\Psi_z\rangle = 0$ が成立する。これら 3 式のうち 1 つを選び証明せよ。残りは既知として使ってよい。

1-5. $2p$ 軌道波動関数 Ψ_x, Ψ_y, Ψ_z 同士についても、$\langle\Psi_x|V(\vec{r})|\Psi_y\rangle = 0$, $\langle\Psi_y|V(\vec{r})|\Psi_z\rangle = 0$, $\langle\Psi_z|V(\vec{r})|\Psi_x\rangle = 0$ が成立する。これら 3 式のうち 1 つを選び証明せよ。残りは既知として使ってよい。

1-6. 以上の結果を用いて、$n=2$ の固有状態エネルギーに対する $V(\vec{r})$ によるエネルギー補正を 1 次摂動の範囲で求めよ。ただし、動径方向の積分に関しては以下の記号を用いること。

$$\left\langle r^2 \right\rangle_l = \int_0^{\infty} r^2 dr \left[r^2 \left|R_{2l}(r)\right|^2\right]$$

また、得られた結果について、波動関数の形状に注目して定性的に議論せよ。

問 2 電子は軌道角運動量 $\vec{l} = (l_x, l_y, l_z)$ だけでなく、スピン角運動量 $\vec{s} = (s_x, s_y, s_z)$ を持つ。これらの角運動量を合成し、全角運動量 $\vec{J} = \vec{l} + \vec{s}$ の固有状態を調べよう。合成前の角運動量について $\vec{l}^{\,2}$, l_z, $\vec{s}^{\,2}$, s_z は互いに可換なため、それぞれの演算子に対して固有値が $\hbar^2 l(l+1)$, $\hbar m_l$, $\hbar^2 s(s+1)$, $\hbar m_s$ となる同時固有状態 $|l, m_l; s, m_s\rangle$ が存在する。一方で、全角運動量 $\vec{J}$ については $\vec{J}^{\,2}$ と J_z が互いに可換なため、それぞれの演算子に対して固有値が $\hbar^2 J(J+1)$, $\hbar m$ となる同時固有状態 $|J, m\rangle$ が存在する。ここで、$|l, m_l; s, m_s\rangle$, $|J, m\rangle$ はいずれも規格化されているとせよ。

2-1. $\vec{J}^{\,2}$ と l_z が非可換であることを示せ。証明には一般的な角運動量演算子 $\vec{L} = (L_x, L_y, L_z)$ に対して $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $[L_y, L_z] = i\hbar L_x$, $[L_z, L_x] = i\hbar L_y$ の関係があること、および昇降演算子 $L_\pm = L_x \pm iL_y$ (複合同順) を用いてもよい。同様の考察により、$\vec{J}^{\,2}$ と s_z も非可換であることが示される。

2-2. 以下では具体的に $l = 1$, $s = 1/2$ の場合を考える。$|l = 1, m_l; s = 1/2, m_s\rangle$ を基底にとったときの $\vec{J}^{\,2}$ の行列要素 $\langle 1, m_l'; 1/2, m_s'|\vec{J}^{\,2}|1, m_l; 1/2, m_s\rangle$ を全て求めよ。なお、以下に示す $l_\pm$ と $s_\pm$ の行列要素を用いてもよい。

$$\langle l, m_l'; s, m_s'|l_\pm|l, m_l; s, m_s\rangle = \hbar\sqrt{(l \mp m_l)(l \pm m_l + 1)}\,\delta_{m_s', m_s}\delta_{m_l', m_l \pm 1}, \qquad \text{(複合同順)}$$

$$\langle l, m_l'; s, m_s'|s_\pm|l, m_l; s, m_s\rangle = \hbar\sqrt{(s \mp m_s)(s \pm m_s + 1)}\,\delta_{m_s', m_s \pm 1}\delta_{m_l', m_l}. \qquad \text{(複合同順)}$$

2-3. **2-2** で求めた $\vec{J}^{\,2}$ の表現行列を対角化するユニタリー行列は、$|1, m_l; 1/2, m_s\rangle$ 基底を $|J, m\rangle$ 基底に変換する変換行列になっている。このユニタリー行列を求め、$\vec{J}^{\,2}$ と J_z に対する固有状態 $|J = 3/2, m = 1/2\rangle$ を $|1, m_l; 1/2, m_s\rangle$ 基底の線形結合で表せ。

問題 IV

以下の問 1 から問 3 までの全ての設問に答えよ。

問 1 以下の問いに答えよ。有効数字は 2 桁とする。ここでは、0 °C = 273 K とせよ。

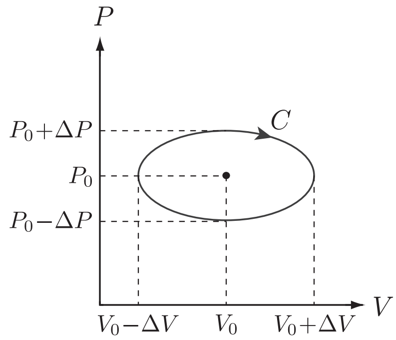
1-1. 100 °C の高温熱源と 20 °C の低温熱源との間で働く熱機関の最大効率を求めよ。

1-2. 1 気圧 100 °C で 100 g の水が沸騰して水蒸気になった。この時のエントロピー変化 ΔS [J/K] を求めよ。ただし、1 気圧 100 °C での水の蒸発熱は 540 cal/g, 熱の仕事当量は 4.2 J/cal である。

1-3. 気体を用いて、体積 V と圧力 P の平面における楕円

$$\left(\frac{P-P_0}{\Delta P}\right)^2+\left(\frac{V-V_0}{\Delta V}\right)^2=1$$

に沿って時計回りに 1 回の循環過程を行うとき（右図参照)、気体が外部にする仕事を求めよ。



1-4. 熱力学第一法則と第二法則は、数式で、それぞれ

$$\mathrm{d}U=\mathrm{d}'Q+\mathrm{d}'W, \qquad\qquad \mathrm{d}'Q\le T\mathrm{d}S.$$

と表せる。ここで、$\mathrm{d}U$ は注目する系の内部エネルギー変化、$\mathrm{d}'Q$ と $\mathrm{d}'W$ はそれぞれこの系に外部から加えた微小熱量と微小仕事、T は系を取り巻く外界の絶対温度、また、$\mathrm{d}S$ は系のエントロピー変化である。系が気体の場合の微小仕事は、気体の圧力 P と体積変化 $\mathrm{d}V$ を用いて、次のように書ける。

$$\mathrm{d}'W=-P\mathrm{d}V$$

以上を既知として、n モルの気体のエントロピー $S=S(T,V)$ と内部エネルギー $U=U(T,V)$ の微小変化が、定積モル比熱 $C_V=T(\partial S/\partial T)_V/n$ と状態方程式 $P=P(T,V)$ を用いて、次のように表せることを示せ。

$$\mathrm{d}S=n\frac{C_V}{T}\mathrm{d}T+\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V\mathrm{d}V, \qquad \mathrm{d}U=nC_V\mathrm{d}T+\left[T\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V-P\right]\mathrm{d}V. \tag{1}$$

1-5. 定積モル比熱 C_V が一定で、ファンデルワールスの状態方程式

$$\left[P+a\left(\frac{n}{V}\right)^2\right](V-nb)=nRT \qquad (a>0 \text{ と } b>0 \text{ は定数})$$

に従う n モルの気体がある。ただし R は気体定数である。**1-4** の (1) 式を用いて、この気体のエントロピー $S=S(T,V)$ と内部エネルギー $U=U(T,V)$ の表式を求めよ。

問 2 質量 m の単原子分子 N $(\gg 1)$ 個からなる古典理想気体が、体積 V の容器に入っており、絶対温度 T の外界と熱的に接触して熱平衡状態にある。この系の古典的ハミルトニアン H は、$\vec{p}_j$ を粒子 j $(=1, 2, \cdots, N)$ の運動量として、次式で与えられる。

$$H = \sum_{j=1}^{N} \frac{\vec{p}_j^{\,2}}{2m}$$

スターリングの公式 $\ln N! \approx N \ln N - N$ を用い、また、ボルツマン定数を k, プランク定数を $\hbar$ として、以下の問いに答えよ。

2-1. 分配関数 $Z = Z(T, V, N)$ の表式を求めよ。ただし、$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$ である。

2-2. 自由エネルギー $F = F(T, V, N)$ の表式を求めよ。

2-3. 内部エネルギー $U = U(T, V, N)$ の表式を求めよ。

2-4. エントロピー $S = S(T, V, N)$ と圧力 $P = P(T, V, N)$ の表式を求めよ。

2-5. 準静的断熱過程ではエントロピーが変化しない。**2-4** の結果を用いて、準静的断熱過程において「$PV^{\gamma} =$ 一定」 $(\gamma = 5/3)$ が成立することを示せ。

2-6. 化学ポテンシャル μ を、絶対温度 T と圧力 P の関数として表せ。

問 3 気体分子 1 個を吸着し得る吸着点 N $(\gg 1)$ 個をもつ吸着面がある。吸着された分子のエネルギーは、$-\varepsilon_0$ (< 0) と与えられる。今、この吸着面が、絶対温度 T と化学ポテンシャル μ を持つ気体と接触している。また、吸着された分子間の相互作用は無視できるものとする。ボルツマン定数を k として、以下の問いに答えよ。

3-1. 吸着分子に対する大分配関数 Z_G を求めよ。

3-2. 吸着された平均分子数 $\bar{n}$ を求めよ。