

平成26年度

大阪府立大学大学院
工学研究科電子・数物系専攻
博士前期課程入学試験

試験科目群4

数理工学専門
試験問題

(解答時間 180分)

注意

- (1) 受験番号、氏名を解答用紙の所定欄に記入せよ。
- (2) 数理工学専門(数学)問題群から4題選択、あるいは、非線形力学、量子物理学、物性物理学の3科目から1科目のみを選択し、解答せよ。
- (3) 選択した科目名を解答用紙の科目名欄に記入せよ。
- (4) 試験終了後、問題冊子は持ち帰ってよい。

数理工学専門（数学） 問題

数学グループを志望するものは、以下の問題群（全部で13題ある）から4題選択して、問題番号を解答用紙の所定の欄に記入して解答せよ。1題につき1枚の解答用紙を使用すること。問題文は、次ページにわたることもあるので、注意深く読むこと。なお、プログラミングの問題を解答するものは、試験監督に挙手で知らせ、プログラムの配付を受けること。

- [1] 関数 $\rho(x)$ は何回でも微分でき、かつ $\rho(x) = \rho(-x)$ 、さらに $\rho'(x) < 0$ ($0 < x < 1$)、 $\rho(x) = 0$ ($x \geq 1$) と

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1$$

を満たすとする。さらに、 n を自然数として、 $\rho_n(x) = n\rho(nx)$ とおく。また、関数 $f(x)$ は実数全体で連続であり、 $f(x) \equiv 0$ ($|x| \geq 2$) であるとする。ここで、

$$g_n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x-y)\rho_n(y) dy$$

とおく。このとき、以下の問いに答えよ。

- (1) 任意に固定された自然数 n に対して、 $\rho_n(x)$ は、一様連続であることを示せ。
- (2) 任意に固定された自然数 n に対して、関数 $g_n(x)$ の差分商

$$\frac{g_n(x+h) - g_n(x)}{h}$$

を考え、積分と微分の順序交換ができることを示し、関数 $g_n(x)$ は実数全体で微分可能であることを示せ。

- (3) 区間 $(-2, 2)$ で $f(x) > 0$ であるとする。このとき、 $g_n(2 + \frac{1}{2n}) = 0$ であるかどうか判定せよ。
- (4) $g_n(x)$ は $n \rightarrow \infty$ のとき、 $f(x)$ に収束することを示せ。なお、ルベグの収束定理を使用してはならない。使用せずに示すことができる。

問題は次ページに続く。

[2] 区間 $I = [a, b]$ で連続な関数列 $\{f_n(x)\}$ が I で連続関数 $f(x)$ に一様収束するとき、以下の問いに答えよ。ただし $f_n(x), f(x)$ は実数値関数である。

- (1) 実数値関数 $g(x)$ が \mathbb{R} で一様連続ならば、関数列 $\{g(f_n(x))\}$ は I で $g(f(x))$ に一様収束することを示せ。
- (2) 任意の $x \in I$ に対して

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\int_a^x f_n(t) dt \right) = \int_a^x \left(\lim_{n \rightarrow \infty} f_n(t) \right) dt$$

が成り立つことを示せ。なお、ルベーグの収束定理を使用してはならない。

- (3) $\varphi_n(x) = nxe^{-nx^2}$ とするとき、関数列 $\{\varphi_n(x)\}$ が区間 $[0, 1]$ で一様収束するか否か理由をつけて述べよ。

[3] 線形微分方程式

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \begin{pmatrix} -2 & a & -1 \\ -1 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -2 \end{pmatrix} \mathbf{x} \quad (*)$$

について、以下の問いに答えよ。ただし a は実数とする。

- (1) $a = 0$ のとき、方程式 (*) の一般解 $\mathbf{x}(t)$ を求めよ。
- (2) 方程式 (*) の右辺の係数行列を A とし、そのジョルダン標準形を J とするとき、線形微分方程式

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = J\mathbf{y}$$

の基本行列 $Y(t)$ を求めよ。ただし $J = P^{-1}AP$ となる正則行列 P は求めなくてよい。

- (3) 方程式 (*) のすべての解が $t \rightarrow \infty$ のとき $\mathbf{0}$ に収束するための a の値の範囲を求めよ。

問題は次ページに続く。

[4] 初期値問題

$$x' + x^2 + \alpha x + \beta = 0, \quad x(0) = x_0 \quad (**)$$

を考える。ただし、 $\alpha, \beta, x_0 \in \mathbb{R}$ である。このとき、以下の問いに答えよ。

- (1) $\alpha = -1, \beta = 0$ のとき、初期値問題 (**) の解 $x(t)$ を求め、 $x(t)$ が区間 $[0, \infty)$ 上で定義されるための必要十分条件を求めよ。
- (2) 関数 $x(t)$ を区間 $[0, \infty)$ 上で定義される初期値問題 (**) の解とし、

$$y(t) = \exp\left(\int_0^t x(s) ds\right)$$

とおく。このとき、 $y(t)$ が満たす微分方程式を求めよ。

- (3) (2) で得られた微分方程式の一般解を求めよ。
- (4) ある $x_0 \in \mathbb{R}$ に対して初期値問題 (**) の解が区間 $[0, \infty)$ 上で定義されるための必要十分条件を求めよ。

問題は次ページに続く。

[5] $\mathbf{x} = {}^t(x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ および $n \times n$ 行列

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

に対して、ベクトルノルムおよび行列ノルムを次のように定義する：

$$\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|, \quad \|\mathbf{x}\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{1/2}, \quad \|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|,$$

$$\|A\|_F = \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 \right)^{1/2}.$$

このとき、以下の問いに答えよ。

(1) 不等式

$$\left| \sum_{i=1}^n x_i y_i \right| \leq \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{1/2} \left(\sum_{i=1}^n y_i^2 \right)^{1/2}$$

が成立することを示せ。ただし、 $x_i, y_i \in \mathbb{R}$ ($i = 1, 2, \dots, n$) である。

(2) 任意の $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ に対して、 $\|A\mathbf{x}\|_2 \leq \|A\|_F \|\mathbf{x}\|_2$ が成立することを示せ。

(3) 点列 $\{\mathbf{x}^{(m)}\}_{m=0}^\infty \subset \mathbb{R}^n$ が $\mathbf{x}^{(m+1)} = A_m \mathbf{x}^{(m)}$ によって定義されると仮定する。ただし、 A_m は $n \times n$ 行列である。このとき、正定数 $K < 1$ と $m_0 \in \mathbb{N}$ が存在し、任意の自然数 $m \geq m_0$ に対して、 $\|A_m\|_F < K$ が成り立つならば、任意の初期点 $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ に対して、 $\lim_{m \rightarrow \infty} \|\mathbf{x}^{(m)}\|_2 = 0$ が成り立つことを示せ。

(4) $n = 2$ とし、 $\{A_m\}_{m=0}^\infty$ を

$$A_m = \begin{pmatrix} \alpha_m & 1/4 \\ 1/2 & 3/4 \end{pmatrix}$$

と定める。ただし、数列 $\{\alpha_m\}_{m=0}^\infty \subset \mathbb{R}$ は、 $\lim_{m \rightarrow \infty} \alpha_m = 0$ を満たすとする。ここで、 $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ を初期点とし、 $\mathbf{x}^{(m+1)} = A_m \mathbf{x}^{(m)}$ によって定義される点列 $\{\mathbf{x}^{(m)}\}_{m=0}^\infty \subset \mathbb{R}^n$ を考える。このとき、

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \|\mathbf{x}^{(m)}\|_1 = 0 \quad \text{および} \quad \lim_{m \rightarrow \infty} \|\mathbf{x}^{(m)}\|_\infty = 0$$

が成り立つことを示せ。

問題は次ページに続く。

[6] 以下の問いに答えよ.

(1) $\gamma > 0$ に対して

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\gamma x}}{1+x^2} dx$$

を求めよ.

(2) 従属操作原理

$$e^{-\gamma} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{e^{-u}}{\sqrt{u}} e^{-\frac{\gamma^2}{4u}} du, \quad \gamma > 0,$$

を示せ.

(3) $f \in L^1(\mathbb{R}^N)$ に対して, f の Fourier 変換を

$$\mathcal{F}[f](\xi) = \int_{\mathbb{R}^N} f(x) e^{-2\pi i x \cdot \xi} dx$$

で定義する. このとき熱核

$$G(x, t) = (4\pi t)^{-\frac{N}{2}} \exp\left(-\frac{|x|^2}{4t}\right), \quad x \in \mathbb{R}^N, \quad t > 0,$$

の Fourier 変換を求めよ.

(4) 上半空間 $\{(x, y) : x \in \mathbb{R}^N, y > 0\}$ における Laplace 方程式

$$\Delta u = 0$$

を, Dirichlet 境界条件 $u(x, 0) = f(x)$ の下で考える. この問題の解は N 次元 Poisson 核

$$P_y(x) = \int_{\mathbb{R}^N} e^{-2\pi|\xi|y} e^{2\pi i x \cdot \xi} d\xi$$

を用いて, 畳み込み $u(x, y) = (f * P_y)(x)$ で与えられる.

$$P_y(x) = \frac{\Gamma((N+1)/2)}{\pi^{(N+1)/2}} \frac{y}{(|x|^2 + y^2)^{(N+1)/2}}$$

を示せ. ここで $\Gamma(s)$ は Gamma 関数である.

問題は次ページに続く.

- [7] 2つの確率密度関数 $f_X(x), g_X(x)$ ($-\infty < x < \infty$) に対して, カルバック・ライブラーのダイバージェンスは以下で定義される.

$$D(g, f) = \int_{-\infty}^{\infty} g_X(x) \log \left\{ \frac{g_X(x)}{f_X(x)} \right\} dx$$

このとき, 以下の問いに答えよ.

- (1) すべての $y (> 0)$ に対して, 次の不等式

$$\log y \leq y - 1$$

が成り立つことを示せ.

- (2) $D(g, f) \geq 0$ となることを示せ. また, 等号成立条件を求めよ.

- [8] 確率変数 X の確率密度関数が

$$f_X(x) = \frac{1}{\sqrt{\alpha\pi x}} \exp \left[-\frac{\beta^2}{2x} - \frac{x}{\alpha} + \sqrt{\frac{2\beta^2}{\alpha}} \right] \quad (0 < x < \infty)$$

で与えられるとする. ただし, α, β は正の定数とする. このとき,

$$E(X) = \frac{1}{2} (\alpha + \sqrt{2\alpha\beta})$$

となることを示せ. ここで,

$$\int_0^{\infty} \sqrt{\frac{\lambda}{2\pi y^3}} \exp \left[-\frac{\lambda(y - \mu)^2}{2\mu^2 y} \right] dy = 1$$

を用いてよい. ただし, λ, μ は正の定数とする.

問題は次ページに続く.

- [9] 確率変数 X_1, X_2, \dots, X_n は互いに独立に、いずれもポアソン分布 $\mathcal{P}(\lambda)$ に従うとする。ここで、ポアソン分布 $\mathcal{P}(\lambda)$ の確率関数は次で与えられる。

$$p_X(x) = \frac{1}{x!} \lambda^x e^{-\lambda}, \quad (x = 0, 1, 2, \dots).$$

ただし、 λ は正の未知母数とする。このとき、以下の各問いに答えよ。

- (1) 確率変数 X_i ($i = 1, 2, \dots, n$) の積率母関数を求め、その平均 $E(X_i)$ ならびに分散 $\text{Var}(X_i)$ を求めよ。
- (2) X_1, X_2, \dots, X_n に基づく λ のモーメント法による推定量 $\hat{\lambda}$ を求めよ。
- (3) $\hat{\lambda}$ は λ の一致推定量であることを示せ。

- [10] a, b は $a < b$ なる実数とし、複素平面上のパラメータ曲線 $C: z = it$ ($a \leq t \leq b$) を考える。条件 $a < b$ のもと a, b を動かすとき、

$$V := \text{Im} \left(\int_C \frac{1-z}{3+2z-z^2} dz \right)$$

のとりうる値の範囲を求めよ。

問題は次ページに続く。

[11] 乗法群 G の部分群 H_1, H_2, \dots, H_n に対し, 次の (A) と (B) が同値であることを証明せよ.

(A) 次の2つが成り立つ.

(a-1) $i \neq j$ のとき, H_i の元と H_j の元は可換である.

(a-2) G の任意の元 a は $a = a_1 a_2 \cdots a_n$ ($a_i \in H_i$) と一意的に表される.

(B) 次の3つが成り立つ.

(b-1) すべての H_i は G の正規部分群である.

(b-2) $G = H_1 H_2 \cdots H_n$.

(b-3) $i = 2, 3, \dots, n$ に対して, $(H_1 \cdots H_{i-1}) \cap H_i = \{1_G\}$. ここで, 1_G は G の単位元である.

[12] 添付プログラム 1 はある数理モデルのプログラムである. 以下の問いに答えよ.

(1) この数理モデルはどのような現象を記述しているか説明せよ.

(2) このプログラムは改良を要する点がある. プログラムをどのように書き換えればよいか説明せよ (アルゴリズムを説明してもよいし, 実際に正しいプログラムを書いてもよい).

[13] 添付プログラム 2 はある数値計算のプログラムである. 以下の問いに答えよ.

(1) このプログラムでは正しい計算結果がでない. 理由を説明せよ.

(2) 正しい計算結果が得られるようにするには, プログラムをどのように書き換えればよいか説明せよ (アルゴリズムを説明してもよいし, 実際に正しいプログラムを書いてもよい).

非線形力学 問題

[1] 物理量 x が以下の方程式に従うものとする。

$$\dot{x} = -\frac{1}{3}x^3 + ax + \mu.$$

ここで、 a と μ はパラメーターである。以下の問いに答えよ。

- (1) $a < 0$ のとき、固定点はいくつあるか。また、そのうち、安定なものはいくつあるか。
- (2) a を正の値に固定し、 μ を $-\infty < \mu < \infty$ の範囲で変えるものとする。このとき、 μ の値に応じて、固定点の総数および安定な固定点の総数がどのように変わるかを調べよ。
- (3) (2) において、双安定性を生じる μ の区間を示せ。
- (4) (2) において、固定点の分岐ダイアグラムを描け。安定な分枝は実線で、不安定な分枝は破線で描くこと。

[2] 1次元写像系 $x_{n+1} = rf(x_n)$ ($n = 0, 1, \dots$) を考える。 $r (> 0)$ はパラメーターである。以下の問いに答えよ。

(1) 上の写像系がカオスを示し得るためには、 $f(x)$ のグラフがどのような形でなければならぬかを図で示せ。ただし、もっとも単純な場合のグラフを示すこと。

r を大きくしていくと周期倍分岐が無限回起こり、 2^k 周期解の分岐点 r_k ($k = 1, 2, \dots$) がある点 r_∞ に収束することがわかった。

(2) $r_3 = 0.831128$, $r_4 = 0.835747$, $r_5 = 0.836736$ であるとする。この結果から Feigenbaum の普遍定数 δ を見積もれ。小数第 4 位を四捨五入して答えよ。

(3) 十分大きな k に対し、 r_k, r_{k-1}, δ を用いて r_∞ を見積もる公式を導け。

[3] 物理量 x が以下の方程式に従う力学系を考える。

$$\ddot{x} + (x^2 - \mu)\dot{x} + \alpha x = 0.$$

ここで、 μ と α はパラメーターである。ただし、 α は正の値に固定し、 μ を $-\infty < \mu < \infty$ の範囲で変えるものとする。以下の問いに答えよ。

- (1) $y = \dot{x}$ において、上の方程式を 1 階連立微分方程式に変換せよ。
- (2) 固定点を求めよ。
- (3) 上で求めた固定点の安定性とタイプ (ノード、サドル、フォーカスの何れであるか) を調べよ。ただし、固定点異なるタイプの境界にある場合は無視してよい。
- (4) 固定点とは異なる解が分岐する μ の値 μ_c を求めよ。また、この分岐の名称を答えよ。
- (5) この解の周期は μ が上から μ_c に近づくとき、どんな値に収束するか。

[4] 以下の問いに答えよ。

(1) コッホ (Koch) 曲線の作り方を説明し、そのフラクタル次元を求めよ。

(2) 地図上で、ある海岸線の長さ L をいろいろなサイズ ϵ の線分を単位としてはかり、グラフに両対数プロット (横軸が $\ln \epsilon$ 、縦軸が $\ln L$) したところ、データは傾きが -0.12 の直線に乗った。この海岸線のフラクタル次元はいくらか。

量子物理学 問題

※ 3 ページにわたって問題は全部で 3 題ある。

問題 1.

次のハミルトニアンで記述される一次元調和振動子について考える。

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2.$$

m は粒子の質量, ω は古典的取扱いにおける単振動の角振動数である。

- (1) α, β を正の実数として, 消滅演算子 $b = \alpha x + i\beta p$ を導入する. 交換関係 $[b, b^+] = 1$ を満たし, $H_0 = \hbar\omega(b+b+1/2)$ となるよう α, β を定めよ.
- (2) 数演算子 b^+b の固有値 $n (= 0, 1, 2, \dots)$ に対応する固有状態 $|n\rangle$ は, H_0 の固有状態でもある. $n = 0$ に対する固有状態 $|0\rangle$ が規格化されているものとし, $|n\rangle$ を $|0\rangle$ および b^+ を用いて規格化した形で表せ. 計算の過程は示さなくてよい.
- (3) H_0 の基底状態 $|0\rangle$ は, $b|0\rangle = 0$ を満足する. これを微分方程式と見て解くことにより, $|0\rangle$ を表す規格化された波動関数 $\psi_0(x)$ を求めよ. 必要なら, 定数 $\gamma (> 0)$ に対して成り立つ積分公式: $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\gamma x^2} dx = \sqrt{\pi/\gamma}$ を用いよ.
- (4) $b|n\rangle$, および $b^+|n\rangle$ を b, b^+ を用いずに表せ. 計算の過程は示さなくてよい.
- (5) 粒子の位置, および運動量の測定誤差はそれぞれ $(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$, $(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$ で定義される. ただし, $\langle A \rangle$ は物理量 A に関する期待値を表す. 状態 $|n\rangle$ について, $(\Delta x)^2$, および $(\Delta p)^2$ を求め, 不確定性関係が成り立つことを示せ.

次に, λ, μ を定数として, 摂動ポテンシャル $V = \lambda x + \mu x^3$ が加えられた場合について考える.

- (6) H_0 の基底状態 $|0\rangle$ について, V による波動関数の変化を 1 次摂動の範囲で求めよ.
- (7) V による $|0\rangle$ のエネルギー変化を 2 次摂動の範囲で求めよ.

問題 2.

デルタ関数型ポテンシャルのもとでの粒子の運動について考える。粒子の質量は m とし、 x 軸上を運動するものとする。まず、 λ を正の定数として、引力ポテンシャル $V_1(x) = -\lambda\delta(x)$ の場合について考える。

- (1) 固有エネルギーを E として、定常状態に対するシュレディンガー方程式を示せ。
- (2) 波動関数 $\psi(x)$ の $x = 0$ における接続条件を見るため、 η を正の微小量として、(1) の方程式を微小領域 $-\eta < x < \eta$ で積分する。次の関係が成り立つことを示せ。

$$\psi'(+0) - \psi'(-0) = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0).$$

ただし、 $\psi'(\pm 0) = \lim_{x \rightarrow \pm 0} \frac{d\psi(x)}{dx}$ である。

- (3) x 軸負の側から正のエネルギーを持つ粒子を入射して、ポテンシャルによる粒子の散乱を考える。 $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ で与えられる波数 $k (> 0)$ 、および接続条件から決まる係数 α, β を用いて波動関数を次のように設定する。

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + \alpha e^{-ikx} & (x \leq 0) \\ \beta e^{ikx} & (0 < x) \end{cases}.$$

粒子の反射率 R 、および透過率 T を求めよ。

- (4) 引力ポテンシャルの場合、負の固有エネルギーを持つ束縛状態が存在する。それを求めるため、 $E = -\hbar^2 \kappa^2 / 2m$ で与えられるパラメータ $\kappa (> 0)$ 、および規格化定数 γ を用いて波動関数を次のように設定する。

$$\psi(x) = \begin{cases} \gamma e^{\kappa x} & (x \leq 0) \\ \gamma e^{-\kappa x} & (0 < x) \end{cases}.$$

束縛状態を表す規格化された波動関数と対応するエネルギー固有値を求めよ。

次に、 a および λ を正の定数として、 $x = \pm a$ にデルタ関数を持つポテンシャル、

$$V_2(x) = -\lambda\delta(x+a) - \lambda\delta(x-a)$$

のもとでの束縛状態について考える。ポテンシャルが $x = 0$ に関して対称であるため、波動関数は偶関数または奇関数となることに注意しよう。

- (5) $E = -\hbar^2 \kappa^2 / 2m$ で与えられるパラメータ $\kappa (> 0)$ 、および適当な係数を用いることにより、偶関数となる波動関数を設定せよ。
- (6) 接続条件を考えることにより、(5) の波動関数の κa をグラフの交点として図示せよ。
- (7) 奇関数の束縛状態についても同様に扱い、そのような束縛状態が存在するための条件を求めよ。

問題 3.

大規模なハミルトニアン行列 H を用いた行列形式のシュレディンガー方程式 $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ を数値的に扱う場合、ランチョス法と呼ばれる数値計算手法がしばしば有効である。ランチョス法に関する以下の設問に答えよ。

- (1) 「規格化されていない」ベクトル $|f_0\rangle$ を出発ベクトルとして、 $|f_1\rangle = H|f_0\rangle - a_0|f_0\rangle$ によりベクトル $|f_1\rangle$ を生成する。 $|f_0\rangle$ と $|f_1\rangle$ が直交するように係数 a_0 を定めよ。
- (2) 次に、 $|f_0\rangle, |f_1\rangle$ を用いて $|f_2\rangle = H|f_1\rangle - a_1|f_1\rangle - b_0|f_0\rangle$ によりベクトル $|f_2\rangle$ を生成する。 $|f_0\rangle$ および $|f_1\rangle$ が規格化されていないことに注意して、 $|f_2\rangle$ が $|f_0\rangle$ および $|f_1\rangle$ と直交するように係数 a_1 および b_0 を定めよ。
- (3) つづいて、 $|f_1\rangle, |f_2\rangle$ を用いて $|f_3\rangle = H|f_2\rangle - a_2|f_2\rangle - b_1|f_1\rangle$ によりベクトル $|f_3\rangle$ を生成する。 $|f_3\rangle$ と $|f_0\rangle$ が直交することを示せ。 また、 $|f_3\rangle$ が $|f_1\rangle$ および $|f_2\rangle$ と直交するように係数 a_2 および b_1 を定めよ。

上記のようにランチョス法は、 n を非負の整数として、直前の2つのベクトル $|f_n\rangle, |f_{n-1}\rangle$, およびそれらとの直交性を満足するように選ばれた係数 a_n, b_{n-1} を用いて

$$|f_{n+1}\rangle = H|f_n\rangle - a_n|f_n\rangle - b_{n-1}|f_{n-1}\rangle$$

により、新しいベクトル $|f_{n+1}\rangle$ を生成していく手法である。ただし、 $b_{-1} = 0$ である。

- (4) 以上の手続きで得られるベクトル列 $\{|f_n\rangle\}$ は、互いに直交することが示される。このことから、2つのベクトル $|f_i\rangle, |f_j\rangle$ について、 $|i-j| > 1$ のとき $\langle f_i | H | f_j \rangle = 0$ となることを示せ。
- (5) (4)により、ランチョス法で生成されるベクトル列は、ハミルトニアン演算子の3重対角表現を導く基底系を与えることが分かる。各 $|f_n\rangle$ を規格化したベクトルを $|\tilde{f}_n\rangle$ で表す。正規直交基底 $\{|\tilde{f}_n\rangle\}$ のもとでのハミルトニアン行列の副対角要素 $\langle \tilde{f}_{n-1} | H | \tilde{f}_n \rangle$ を重なり積分 $\langle f_{n-1} | f_{n-1} \rangle, \langle f_n | f_n \rangle$ を用いて表せ。

物性物理学 問題

問題は全部で4問ある。

1. 結晶の構造およびX線回折に関する以下の問いに答えよ。

- (1) 原子を剛体球とみなしたとき、面心立方格子における最大原子充填率を円周率 π を用いて求めよ。
- (2) 面心立方格子と同じ原子充填率が六方最密充填格子で実現するときの格子定数 a と c の比 c/a を求めよ。

結晶によるX線散乱は、散乱ベクトルが逆格子ベクトル \mathbf{G} に等しいときに起こる。いま、岩塩型の結晶構造をとる NaCl のX線回折を考える。結晶軸ベクトルは、単純立方格子と同じように立方体の各辺に沿ってとり、格子定数を a として $\mathbf{a}_1 = (a, 0, 0)$, $\mathbf{a}_2 = (0, a, 0)$, $\mathbf{a}_3 = (0, 0, a)$ と書ける。Na イオンあるいはCl イオンのみが形成する副格子はともに面心立方格子であり、格子内に各4個のイオンが含まれるものを単位格子とする。

- (3) NaCl 中の Na イオンと Cl イオンについて、単位格子内での原子位置の座標を全て答えよ。ただし、ひとつの Na イオンの位置は $(0, 0, 0)$ にあるとする。
- (4) Na および Cl イオンの原子形状因子をそれぞれ $f_{\text{Na}}, f_{\text{Cl}}$ とし、ミラー指数 (hkl) を用いて構造因子 $S_{\mathbf{G}}$ を書き下せ。
- (5) NaCl に対してX線回折を行った場合に観測される回折ピークのミラー指数 (hkl) に対する h, k, l の条件を述べよ。
- (6) 図1は Cu $K\alpha_1$ 線を用いて得られた NaCl の粉末X線回折プロファイルである。ピーク1, 4の強度は、2, 3, 5に比べて極端に小さい。各ピークのミラー指数を示し、このような強度分布が現れる理由を説明せよ。

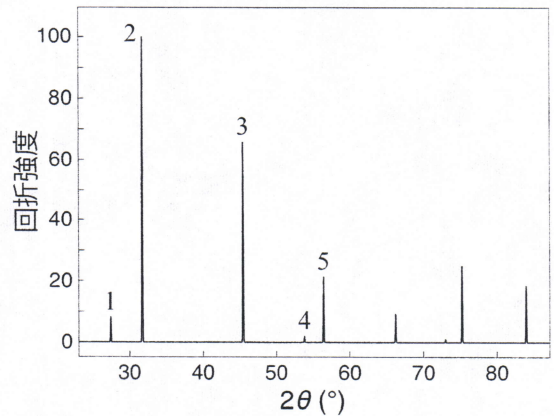


図1

2. 以下の3つの言葉について簡潔に説明せよ。必要ならば図を用いてもよい。

- (1) ファン・デル・ワールス (van der Waals) 相互作用
- (2) ホール (Hall) 効果
- (3) ブロッホ (Bloch) 関数

3. 図2のような2つの力定数 C_1 と C_2 が交互に無限につながる1次元の原子鎖がある。原子の質量を m 、隣り合う原子の間隔を a として、フォノンの分散関係を考える。偶数番目の原子の変位を x_{2n} 、奇数番目の原子の変位を x_{2n-1} (n は整数) とおいて、隣接する原子間だけに弾性力が働くものとする。

(1) 偶数番目および奇数番目の原子の平衡位置からの変位の運動方程式を示せ。

(2) 単位胞の一辺の長さに注意して弾性波の解を仮定し、その解が存在するための波数 k と角振動数 ω の関係 (分散関係) を導け。

(3) (2) で求めた分散関係を図示せよ。なお、波数 k が0と第1ブリルアンゾーン境界上における角振動数 ω も求めたうえで、図中に記入すること。

(4) 波数 k が0と第1ブリルアンゾーン境界上のとき、 $C_1 > C_2$ と仮定して単位胞での原子の動きを求め、矢印を用いて図示せよ。

(5) $C_1 = C_2$ の極限の場合の分散関係を、ブリルアンゾーンの変化にも注意して説明せよ。

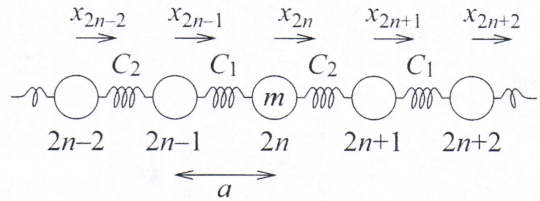


図2

4. 金属中の電子の性質を説明する自由電子モデルにおいて、シュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi(\mathbf{r}) \quad (\text{ただし } \psi(\mathbf{r}) = \psi(x, y, z))$$

と表される。ここでは m は電子の質量、 \hbar はプランク定数を h として $\hbar = h/2\pi$ である。1辺の長さ L の立方体で x, y, z の各方向に周期境界条件を課すものとする。

(1) 波動関数の解が平面波 $\frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ で与えられ、エネルギー固有値 $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m}$ をもつこ

とを、波数ベクトル $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ を用いて示せ。

(2) 絶対零度において、体積 $L^3 = V$ の立方体中に N 個の自由電子がある場合のフェルミエネルギーが $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3}$ で与えられることを示せ。

(3) エネルギーが ε と $\varepsilon + d\varepsilon$ の間にある単位体積あたりの状態の数は、電子の状態密度を $D(\varepsilon)$ として $D(\varepsilon)d\varepsilon$ と表される。 $D(\varepsilon)$ が $\sqrt{\varepsilon}$ に比例することを示せ。

(4) 温度 0 K で体積 V 内に N 個の電子が存在するとき、この電子気体の内部エネルギー U はフェルミエネルギー ε_F を用いて $U_0 = \frac{3}{5} N \varepsilon_F$ で表されることを示せ。

(5) 温度 0 K で体積 V 内に N 個の電子が存在するとき、電子気体の圧力 P に対して関係式 $PV = \frac{2}{3} U_0$ が成り立つことを示せ。