2026年度神戸大学大学院工学研究科博士課程前期課程入学試験

量子物性工学

下記の問題について解答しなさい．解答は，結果だけでなく導出の過程も記すこと．解答に必要な記号は各自で定義して用いてよい．

問題1　質量m の電子が原点からの距離xに比例する力$F=-kx$ （k はバネ定数）を受けて運動する一次元調和振動子を考える．下記の問いに答えよ．必要なら以下の積分公式を用いて良い．

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2}dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \quad (\text{ただし}\, a > 0)$$

1-1)　問題文中の力Fを受けて運動する電子のポテンシャルエネルギー$V(x)$を表す式をk を用いて答えなさい．

1-2)　振動の角振動数ωをm とk を用いて表しなさい（結果のみで良い）．

1-3)　問 1-1) で得られたポテンシャルエネルギー$V(x)$中の電子に対する時間に依存しないシュレディンガー方程式を，角振動数ω，ディラック定数$\hbar = h/(2\pi)$ （h はプランク定数)，波動関数$\varphi(x)$，電子のエネルギーεを含む式で書きなさい（結果のみで良い）．

1-4)　問 1-3) で得られたシュレディンガー方程式を踏まえて，基底状態のエネルギー準位ε_0，第一励起状態のエネルギー準位ε_1 を求め，ωを含む式で答えなさい．ただし基底状態，第一励起状態の規格化された波動関数がそれぞれ$\varphi_0(x) = A_0 e^{-\alpha x^2}$，$\varphi_1(x) = A_0 bxe^{-\alpha x^2} = bx\varphi_0(x)$という形に書ける事を用いてよい（$\alpha$，$A_0$，$b$は$x$に依存しない定数)．

1-5)　波動関数の規格化条件から，問 1-4) における定数A_0，bを表す式を求めなさい．

1-6)　問 1-1) で得られたポテンシャルエネルギー$V(x)$中の電子に対する時間に依存するシュレディンガー方程式を、時刻t，角振動数ω，ディラック定数$\hbar$，時間に依存する波動関数$\psi(x,t)$を含む式で書きなさい（結果のみで良い）．また，$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\varphi_n(x)e^{iE_n t/\hbar}$がその解となっている事を示しなさい．

1-7)　初期時刻$t=0$において$\psi(x,t=0) = \left[\varphi_0(x) + \varphi_1(x)\right]/\sqrt{2}$であったとする．この時，時刻$t \geq 0$における波動関数$\psi(x,t)$を表す式を求めなさい．ただし，問 1-6) 文中で与えられた$\psi(x,t)$の式を用いてよい．

1-8)　問 1-7) の結果を踏まえ，電子の位置の期待値$\langle x \rangle$の時間依存性を表す式を導出し，$\langle x \rangle$の時間発展の概略を横軸t，縦軸$\langle x \rangle$として図示しなさい．

（２枚目に続く）

問題２　図１に示す，$x-y$ 面内の２次元の結晶格子を考える．この結晶格子の基本並進ベクトルは $\boldsymbol{a}_1 = a\boldsymbol{i}$，$\boldsymbol{a}_2 = (a/2)\boldsymbol{i} + a'\boldsymbol{j}$ であり，ここで a' は a との間に $a' = (1+\varepsilon)a$ という関係があるとする（ε は歪み率であり $0 \le \varepsilon \ll 1$ とする）．図には示していないが，この２次元結晶格子は z 方向に周期 c で重なり合っているとし，$\boldsymbol{a}_3 = c\boldsymbol{k}$（ただし $c \gg a$）と併せて３次元の基本並進ベクトルを構成するとする．（上記で $\boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$ はそれぞれ x, y, z 方向の単位ベクトルである）

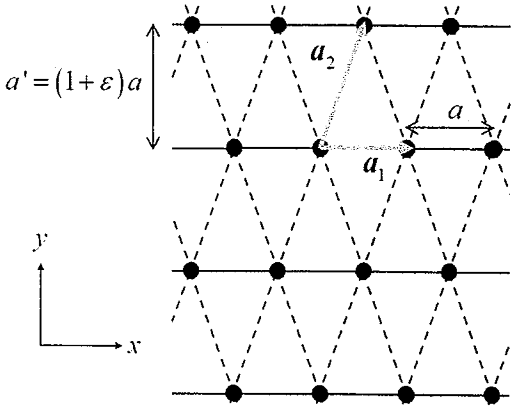

図１

2-1)　与えられた基本並進ベクトル $\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$ を用いて逆格子ベクトル $\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$ を求めなさい（$\boldsymbol{b}_3$ は不要）．

2-2)　問 2-1)で得られた逆格子ベクトル $\boldsymbol{b}_1$，$\boldsymbol{b}_2$ を用いて，歪み率 $\varepsilon = 0$，$\varepsilon > 0$ それぞれの場合についての２次元逆格子空間および第一ブリルアンゾーンを図示しなさい．

次に，a'，c が a に比べて十分大きい場合，y, z 方向での原子間の相互作用は無視でき，x 方向での原子間の相互作用は図２に示すような１次元結晶格子として考える事ができる．原子の質量はそれぞれ M とする．原子間に働く相互作用は最近接原子間のみであり，フックの法則に従うばね定数 k のばねによって表現できるとする．

2-3)　x 方向で n 番目の原子の平衡位置からの変位 u_n についての運動方程式を書きなさい．結果だけでなく、なぜそのような式になるかについても文章で説明しなさい．

2-4)　この方程式の解として、$u_n(t) = A\ \exp(iqna - i\omega t)$ が成り立つと仮定する．ここで t は時間，ω は角周波数，q は波数，A は振幅である．この式を問 2-3) で答えた運動方程式に代入し，分散関係（ω と q の関係）を表す式を導出しなさい．

2-5)　問 2-4) で得られた分散関係を第一ブリルアンゾーンの範囲で図示しなさい．また，ゾーン端における波数 q の値，ゾーン端及び $q=0$ における ω の値を図中に書き入れなさい．

2-6)　問 2-4) で得られた分散関係の式を q についてマクローリン展開して一次までで近似した式を導出しなさい．得られた結果から，音速を表す式を書き下し，その結果が速度の次元を持っていることを示しなさい．

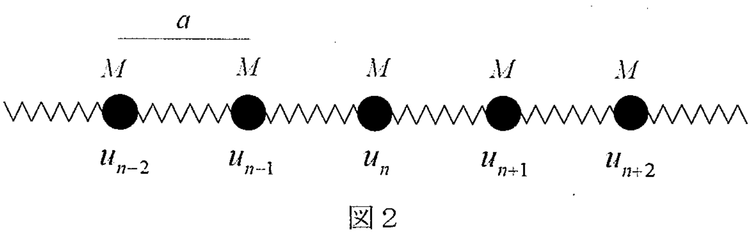

図２