２０２２年４月入学
千葉大学大学院融合理工学府博士前期課程
一般選抜 学力検査問題
(先進理化学専攻・物理学コース)

専門科目（２）

検査時間　１２０分

注意事項

1. 監督者から解答を始めるように合図があるまでは冊子を開かないこと。
2. 問題は全部で３ページある。
3. 問題 I, II の両方に解答すること。
4. 問題 I, II でそれぞれ別の解答用紙を使用すること。１枚の解答用紙に複数の問題を解答してはいけない。また，問題 I, II のそれぞれについて１枚以上の解答用紙を提出すること。
5. 全ての解答用紙に，問題番号と受験番号を記入すること（氏名を記入してはいけない）。
6. 別途配布する草稿用紙は回収しない。

I

x 軸上を動く質量 m，エネルギー E の量子力学的粒子について考えよう。まず，図 1 に示すように，ポテンシャル $U(x)$ が次式の階段型の場合を考える。

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \text{ のとき} \\ V & x \geq 0 \text{ のとき} \quad (\text{ただし } V > 0) \end{cases}$$

エネルギーが $E > V$ の粒子が左から入射した場合の，定常状態の Schrödinger 方程式の解は，次式で与えられる。ただし，A，B，C，k，K は定数である。

$$\phi(x) = \begin{cases} Ae^{+ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \text{ のとき} \\ Ce^{+iKx} & x \geq 0 \text{ のとき} \end{cases}$$

1. k，K を，E を用いて表しなさい。

2. この粒子の透過率 T，反射率 R を求めなさい。必要ならば，確率の流れの密度は，$j = \dfrac{\hbar}{2im}[\phi^*(\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\phi) - (\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\phi^*)\phi]$ となることを用いてよい。

3. 透過率 T および反射率 R を，エネルギー E の関数として $E > V$ の範囲で図示しなさい。

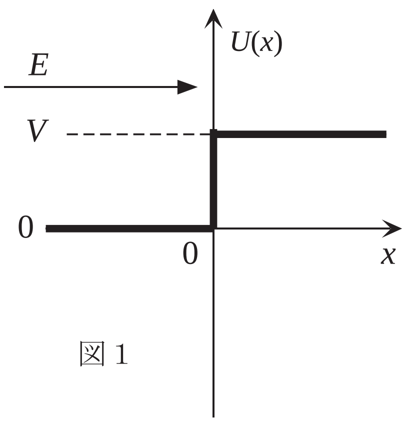

図 1

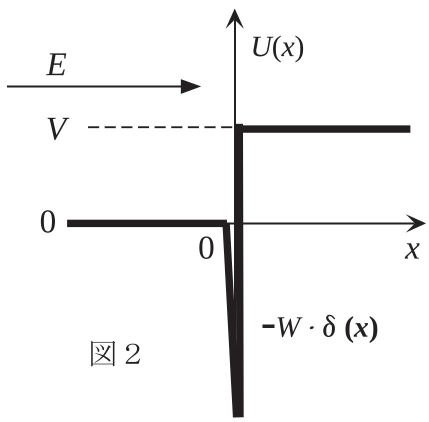

図 2

次に，図 2 のように，上記の $U(x)$ に，δ 関数型のポテンシャル $-W \cdot \delta(x)$（ただし $W > 0$）が加わった場合を考える。

4. 波動関数 $\phi(x)$ は $x = 0$ で連続である。$\phi(x)$ の微分は次式を満たすことを示しなさい。ただし，ε は正の微小量である。

$$\left.\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x}\right|_{x=\varepsilon} - \left.\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x}\right|_{x=-\varepsilon} = -\frac{2m}{\hbar^2} W \cdot \phi(x=0)$$

5. エネルギーが $E > V$ の粒子が左から入射した場合の透過率 T を求めなさい。また，透過率 T を，エネルギー E の関数として図示しなさい。特に，問 3 の透過率も破線で記入し，両者の違いが明らかになるように図示すること。

6. W がある値 W_0 より大きいときには，エネルギーが $E < 0$ の束縛状態が 1 つ存在する。W_0 の値と束縛状態のエネルギーを求めなさい。また，束縛状態のエネルギーを W^2 の関数として図示しなさい。

7. エネルギーが $E < 0$ の束縛状態に対し，位置の期待値 $\langle x \rangle$ を求めなさい。

8. 金属内の電子は表面近傍において，近似的に図 1 のようなポテンシャルを持つ（$x < 0$ が金属内，$x \geq 0$ が真空に相当する）。さらに表面に他の原子を吸着させて，図 2 のようなポテンシャルに変えた。$V = 5.0$ eV，$\dfrac{W}{a} = 9.0$ eV のとき，束縛状態の位置の期待値 $\langle x \rangle$ を，有効数字 1 桁で求めなさい。ただし $a = 0.053$ nm，$\dfrac{\hbar^2}{2ma^2} = 13.6$ eV とせよ。ここで a，$\dfrac{\hbar^2}{2ma^2}$ は，m を自由電子の質量としたときの Bohr 半径，Rydberg エネルギーである。

II

体積 V の容器に閉じ込められた質量 m の分子 N 個からなる気体が，温度 T の平衡状態にある。気体分子は内部自由度をもつが，並進運動に関しては古典的な自由粒子とみなせるとして，以下の問いに答えなさい。次の公式は証明せずに用いてよい。

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2\alpha}\right) dx = \sqrt{2\pi\alpha}$$

$$\log N! \approx N \log N - N \quad (N \gg 1)$$

1. この気体の並進運動に関する分配関数

$$Z(T, V, N) = \frac{1}{N!}\left[\frac{V}{h^3}\iiint \exp\left(-\frac{\boldsymbol{p}^2}{2mkT}\right) d\boldsymbol{p}\right]^N$$

を T，V，N の関数として求めなさい。ここで $\boldsymbol{p}$ は気体分子の運動量，h はプランク定数，k はボルツマン定数である。

2. 前問で求めた分配関数から Helmholtz 自由エネルギー F を T, V, N の関数として求め，N が十分に大きい場合に示量的であることが分かる形に整理しなさい。

3. 前問で求めた Helmholtz 自由エネルギー F から圧力 P と定積熱容量 C_V を求めなさい。

ここまでは気体分子の並進運動だけを考えてきたが，以下では分子の内部自由度も考える。熱容量を答える際には問 **3** で求めた並進運動による熱容量も合わせて答えなさい。問 **4** と問 **5** では異なる種類の分子を扱うので注意しなさい。

4. エネルギー $E = 0$ で縮退度 1 の基底状態と，エネルギー $E = \varepsilon$ で縮退度 3 の励起状態を持つ分子を考える。

(1) この内部自由度による気体の内部エネルギー U_{int} を N, T の関数として求めなさい。

(2) この気体の定積熱容量を求め，温度 T の関数としてその概形をグラフに表しなさい。

5. エネルギー準位 $E_j = Bj(j+1)$ が $(2j+1)$ 重に縮退している分子を考える。ただし B はエネルギーの単位を持つ正の定数で，j は 0 以上の全ての整数である。

(1) この内部自由度に関する気体の分配関数 Z_{int} を j についての和 $\sum_{j=0}^{\infty}$ を用いて表しなさい。

(2) 高温 $(T \gg B/k)$ の場合，前問で求めた Z_{int} を和を積分におきかえて温度 T の関数として表しなさい。

(3) この気体の高温での定積熱容量を求めなさい。

6. 問 **4** あるいは問 **5** のようなモデルで記述できる内部自由度を持つ分子の例をあげなさい。答える際にはどちらの場合であるかを述べること。