２０２６年４月入学
２０２５年１０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５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

体積 v の小さなセルを三次元の単純立方格子状に並べた系の熱平衡状態を考える。セルに $j = 1, 2, \cdots$ と番号をつけ，j 番目のセルは，0 または 1 の値を取る変数 n_j を用いてエネルギーが

$$\varepsilon_j = n_j \varepsilon, \qquad (\varepsilon > 0)$$

と表せる 2 つの状態をとるものとする。系の微視的状態は $n_1, n_2, \cdots$ の値の組で指定できる。系はマクロな大きさで，系の体積 V は $V \gg v$ を満たし，セルの数 V/v は系の体積変化に応じて変化するものとする。以下では逆温度を $\beta = 1/(kT)$ とする。T は温度，k はボルツマン定数である。

まず，セル間に相互作用がなく各セルは独立で，系のエネルギー E が各セルのエネルギーの和

$$E(n_1, n_2, \cdots, n_{V/v}) = \sum_{j=1}^{V/v} n_j \varepsilon$$

である場合を考える。

1. 分配関数 $Z(\beta, V)$ を求めなさい。

2. Helmholtz 自由エネルギー $F(\beta, V)$ と圧力 $P(\beta, V)$ を求めなさい。

3. カノニカル分布に対するエネルギーの期待値 $\langle E \rangle_T^{\mathrm{C}}$ を求めなさい。

4. 熱容量

$$C(T, V) = \frac{\partial \langle E \rangle_T^{\mathrm{C}}}{\partial T}$$

を求めなさい。また，低温の極限（$kT \ll \varepsilon$）での漸近的なふるまいを調べなさい。

次に，最近接のセル間だけに相互作用があり，系のエネルギーが

$$E(n_1, n_2, \cdots, n_{V/v}) = \sum_{j=1}^{V/v} n_j \varepsilon - J \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j, \qquad J > 0$$

である場合を考える。$\langle i, j \rangle$ は最近接のセルの組についての和を表す。

この系の熱平衡状態は，逆温度 β と二つの示量変数 V と $N \equiv \sum_{j=1}^{V/v} n_j$ を用いて一意に指定できる。以下では，N をある種の粒子数とみなし，これに共役な示強変数として化学ポテンシャル μ を導入してグランドカノニカル分布を適用しよう。一般に，大分配関数 $\Xi(\beta, V, \mu)$ は，粒子数 N のときのエネルギー固有状態に $k = 1, 2, \cdots$ と番号をつけ，その固有値を $E_{N,k}$ と表したとき，

$$\Xi(\beta, V, \mu) = \sum_{(N,k)} e^{-\beta(E_{N,k} - N\mu)}$$

と定義される。また，グランドポテンシャル $\mathcal{J}(\beta, V, \mu)$ とは

$$\mathcal{J}(\beta, V, \mu) = -\frac{1}{\beta} \ln \Xi(\beta, V, \mu)$$

という関係で結ばれる。

ここで，あるセルに着目したときにそれと相互作用するセルの n_i をある平均値 $\langle n \rangle$ でおきかえて，系のエネルギーを

$$\begin{aligned} E(n_1, n_2, \cdots, n_{V/v}) &\approx \sum_{j=1}^{V/v} n_j \varepsilon - J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\langle n \rangle^2 + \langle n \rangle (n_i - \langle n \rangle) + \langle n \rangle (n_j - \langle n \rangle) \right] \\ &= \frac{V}{v} \frac{zJ}{2} \langle n \rangle^2 + \sum_{j=1}^{V/v} n_j (\varepsilon - zJ \langle n \rangle) \end{aligned} \tag{1}$$

と平均場近似する。z は最近接のセルの数（$= 6$）である。

5. このエネルギー (1) を用い，$\langle n \rangle$ を β, V, μ とは独立なパラメータと形式的にみなして，大分配関数 $\Xi(\beta, V, \mu)$ を求めなさい。

6. グランドカノニカル分布に対する N の期待値 $\langle N \rangle^{\mathrm{GC}}_{\beta,\mu}$ と，系の圧力 $P(\beta, V, \mu)$ を求めなさい。

7. 平均値 $\langle n \rangle$ を熱平衡状態に対する期待値と等しいとして，$\langle n \rangle = \langle N \rangle^{\mathrm{GC}}_{\beta,\mu} v/V$ とおき，$\langle n \rangle$ に関する自己無撞着方程式を導きなさい。また，これを用いると系の圧力を $\langle n \rangle$ の関数として

$$P(\beta, V, \langle n \rangle) = \frac{zJ}{v} \left(-\frac{\langle n \rangle^2}{2} + \frac{1}{\beta z J} \ln \frac{1}{1 - \langle n \rangle} \right)$$

と表せることを示しなさい。

8. 前問 **7.** の圧力 $P(\beta, V, \langle n \rangle)$ では，臨界温度 T_{c} より低い温度では，$\langle n \rangle$ が大きくなると圧力 $P(\beta, V, \langle n \rangle)$ が減少する領域が現れる。この T_{c} を求めなさい。

II

A.

次のような質量 m の粒子に対するシュレーディンガー方程式を考える：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\Psi(x,t)$$

ただしポテンシャルの形は

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x \geq a,\ x \leq -a) \\ -V_0 & (-a < x < a) \end{cases}$$

で与えられ，V_0, a は正の定数である。

1. 定常状態の波動関数は，エネルギー E を用いて $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ と書ける。$\psi(x)$ の満たす方程式を求めよ。

2. 波動関数 $\psi(x)$ が $V(x)$ の不連続点で満たすべき境界条件を書け。また，束縛状態が存在するとき，無限遠方で満たすべき境界条件を書け。

エネルギー E をもつ束縛状態が存在すると仮定して以下の問いに答えよ。

3. 領域 $-a < x < a$ における束縛状態の解を $\psi(x) = C\sin kx + D\cos kx$ と仮定する (k, C, D は定数)。このときエネルギー E を決定する方程式は $\tan ka = X$ の形で書くことができる。$\psi(x)$ が偶関数および奇関数それぞれの場合について，X を V_0, E を用いて表せ。

4. 束縛状態が２つだけ存在するための条件を，$V_0, \hbar, a, m$ を用いて答えよ。

B.

続いて，３次元クーロンポテンシャル中の電子の定常状態シュレーディンガー方程式を考える：

$$H\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})$$
$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

ここで $\boldsymbol{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$ は運動量演算子，$r = \sqrt{\boldsymbol{r}^2} = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$，$e$ は素電荷，ϵ_0 は真空の誘電率である。

5. 角運動量演算子は $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ によって与えられる。その z 成分 L_z とハミルトニアン H との交換関係を答えよ。

簡単のため，以下では主量子数 $n = 2$ の状態空間だけを考えることにする。このとき状態は４重に縮退し，規格直交化された波動関数は

$$\psi_0(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{32\pi a_0^3}}\left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}, \quad \psi_1(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{32\pi a_0^5}}\, x\, e^{-r/2a_0},$$
$$\psi_2(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{32\pi a_0^5}}\, y\, e^{-r/2a_0}, \quad \psi_3(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{32\pi a_0^5}}\, z\, e^{-r/2a_0}$$

によって与えられる。$a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/me^2$ はボーア半径である。必要ならば次の積分公式

$$\int_0^\infty r^k\, e^{-r/a_0} dr = k!\, a_0^{k+1}$$

を用いてよい ($k = 0, 1, 2, \cdots$)。

6. エネルギー固有値を求めよ。必要ならば極座標表示におけるラプラシアンの公式 $\boldsymbol{\nabla}^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$ を用いてもよい。

7. ψ_0 と ψ_3 は L_z の固有状態になっている。それぞれの状態に対して L_z の固有値を求めよ。

8. ψ_1 と ψ_2 は L_z の固有状態になっていない。両者の重ね合わせによって L_z の規格直交化された固有関数と固有値をすべて求めよ。

9. 一定電場を z 方向にかけると，ハミルトニアン H に $H' = eE_0 z$ という項が加わる。E_0 は電場の強さを表す。縮退があるときの摂動論の考え方に従い，H' による１次のエネルギーシフトおよび規格直交化された固有関数をすべて求めよ。

上記４つの状態 ($\psi_{0,1,2,3}$) に対して，さらにスピン自由度も考える。スピンの波動関数は２つの状態 $\chi_\pm$（２成分スピノル）によって記述され，規格直交化されているとする。スピン角運動量演算子 $\boldsymbol{S}$ はこの状態に対して

$$S_x\chi_\pm = \frac{\hbar}{2}\chi_\mp$$
$$S_y\chi_\pm = \pm\frac{i\hbar}{2}\chi_\mp$$
$$S_z\chi_\pm = \pm\frac{\hbar}{2}\chi_\pm$$

のように作用する（複号同順)。

10. 上記の関係を用いて，S_x と S_y の交換関係を求めよ。

11. 一定磁場を z 方向にかけると，ハミルトニアンには $H'' = \mu_\mathrm{B}B_0(L_z + 2S_z)/\hbar$ という項が加わる。ここで B_0 は磁束密度の大きさ，μ_B はボーア磁子である。全ハミルトニアン $H + H''$ に対して，H'' による１次のエネルギーシフトおよび規格直交化された固有関数をすべて求めよ。