

関西学院大学大学院理工学研究科

2026 年度入学試験

(一次：2025 年 8 月 1 日実施)

専門科目

先進エネルギーナノ工学専攻

(11:10-13:10 120 分)

【試験にあたっての注意】

1. 筆記用具以外はカバンに入れ、カバンは床の上に置くこと。
2. 携帯電話、スマートフォン、ウェアラブル端末、音楽プレーヤー等の音の出る機器の電源を切ること。
なお、アラームを設定している人は解除してから電源を切り、カバンにしまうこと。
3. 時計のアラームは解除すること。携帯電話を時計として使用することは認めない。
4. 試験の途中退場は認めない。ただし、やむを得ない場合は挙手し監督者に知らせること。
5. 不審な言動は慎むこと。不正行為が発覚した場合、全科目を0点とする。
6. 試験用紙は以下の構成となっている。
 - ① 問題冊子1冊
 - ② 選択問題調査書、解答用紙
7. 指示があるまで問題冊子および解答用紙を開かないこと。
8. 解答用紙のホチキスは、はずさないこと（提出時もホチキス留めのまま提出すること）。
9. 各問題は、所定の解答用紙に解答すること。
10. 解答にあたっては、問題冊子および解答用紙に書かれた注意に従うこと。
11. 解答用紙には、氏名は記入せず、受験番号のみを記入すること。
12. 原則、解答用紙の裏面使用は不可。やむを得ず解答欄が不足する場合は<裏面に続く>と記載することで、裏面への記載を認める。
13. 試験終了後、問題冊子は各自持ち帰ること。

以上

[I] 数学

以下の問1から問3に答えよ.

問1. 図1に示す3次元空間に関する以下の(1)から(4)に答えよ.

- (1) 直交座標系 (デカルト座標系) の座標 x, y, z ($-\infty < x, y, z < \infty$) を球面座標系 (極座標系) の座標 r, θ, ϕ で表せ. (球面座標系から直交座標系への変数変換式を示せ.) この際, r, θ, ϕ の範囲も示すこと.
- (2) 球面座標系 (r, θ, ϕ) から直交座標系 (x, y, z) への変数変換の際のヤコビ行列式 (ヤコビアン) を求めよ.
- (3) 直交座標系の体積要素 dV が $dx dy dz$ であるとき, 球面座標系の体積要素を表せ.
- (4) (3) の結果を用いて半径 R の球の体積を求めよ.

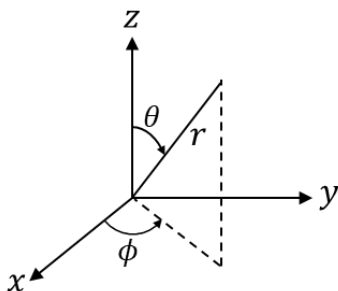


図1

問2. 行列 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & 3 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ について, 以下の(1)から(3)に答えよ.

- (1) 行列 \mathbf{A} の固有値を求めよ.
- (2) (1) で求めた行列 \mathbf{A} の固有値に対する固有ベクトルを求めよ.
- (3) 行列 \mathbf{A} を対角化できるか. 対角化できる場合は行列 \mathbf{A} を対角化せよ.

問3. 行列 $\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 2 & 5 \end{pmatrix}$ について, 以下の(1)から(3)に答えよ.

- (1) 行列 \mathbf{B} の固有値を求めよ.
- (2) (1) で求めた行列 \mathbf{B} の固有値に対する固有ベクトルを求めよ.
- (3) 行列 \mathbf{B} を対角化できるか. 対角化できる場合は行列 \mathbf{B} を対角化せよ.

[I] 数学 解答

出題意図

大学で学ぶ微積分学や線形代数学に関して基本的な問題が解けるかを問う。

解答例

問 1 .

$$(1) \quad x = r \sin \theta \cos \phi, y = r \sin \theta \sin \phi, z = r \cos \theta \quad (0 \leq r < \infty, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \phi \leq 2\pi)$$

$$(2) \quad \begin{vmatrix} \sin \theta \cos \phi & r \cos \theta \cos \phi & -r \sin \theta \sin \phi \\ \sin \theta \sin \phi & r \cos \theta \sin \phi & r \sin \theta \cos \phi \\ \cos \theta & -r \sin \theta & 0 \end{vmatrix} \\ = r^2 \cos^2 \theta \sin \theta \cos^2 \phi + r^2 \sin^3 \theta \sin^2 \phi + r^2 \cos^2 \theta \sin \theta \sin^2 \phi + r^2 \sin^3 \theta \cos^2 \phi \\ = r^2 \sin \theta \cos^2 \phi + r^2 \sin \theta \sin^2 \phi = r^2 \sin \theta$$

$$(3) \quad r^2 \sin \theta \, dr d\theta d\phi$$

$$(4) \quad \int_0^R r^2 \, dr \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi = \left[\frac{r^3}{3} \right]_0^R [-\cos \theta]_0^\pi [\phi]_0^{2\pi} = \frac{R^3}{3} \times 2 \times 2\pi = \frac{4\pi R^3}{3}$$

問 2 .

$$(1) \quad (4 - \lambda)(2 - \lambda) - 3 \times 1 = \lambda^2 - 6\lambda + 5 = (\lambda - 1)(\lambda - 5) = 0 \text{ より固有値は, } 1, 5.$$

$$(2) \quad \text{固有値 } 1 \text{ に対して, } \begin{pmatrix} 3 & 3 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \mathbf{0} \text{ より, 固有ベクトルは } s \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

$$\text{固有値 } 5 \text{ に対して, } \begin{pmatrix} -1 & 3 \\ 1 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \mathbf{0} \text{ より, 固有ベクトルは } t \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

ここで s, t は任意定数である.

$$(3) \quad \mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \text{ とすると, } \mathbf{P}^{-1} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -3 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \text{ より,}$$

$$\mathbf{P}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{P} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -3 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 3 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 5 \end{pmatrix}$$

問 3 .

$$(1) \quad (1 - \lambda)(5 - \lambda) - (-2) \times 2 = \lambda^2 - 6\lambda + 9 = (\lambda - 3)^2 = 0 \text{ より固有値は, 重複度 } 2 \text{ の固有値 } 3.$$

$$(2) \quad \text{固有値 } 2 \text{ に対して, } \begin{pmatrix} -2 & -2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \mathbf{0} \text{ より, 固有ベクトルは } s \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix},$$

ここで s は任意定数である.

$$(3) \quad 2 \text{ 次正方行列で重複度 } 2 \text{ なので対角化できない.}$$

[Ⅱ] 化学

以下の問1から問3に答えよ。

問1. 以下の設問に答えよ。

- (1) ${}_{11}\text{Na}$ および ${}_{17}\text{Cl}$ の基底状態の電子配置を例に従って答えよ。(例: 水素 (${}_{1}\text{H}$): $1s^1$)
- (2) Na 単体は何結合で形成されているか。また、 Cl_2 の Cl 間は何結合か。それぞれ下記の選択肢より選んで答えよ。
イオン結合 金属結合 共有結合
- (3) Na は Na^+ に、 Cl は Cl^- にそれぞれイオン化される。 Na の原子半径と Na^+ のイオン半径はどちらが大きいかに答えよ。また、 Cl の原子半径と Cl^- のイオン半径はどちらが大きいかについても答えよ。それぞれその理由についても述べよ。
- (4) NaCl は Na^+ と Cl^- から形成され、その結晶構造は、 Cl^- を面心立方格子の形に並べたとき、 Na^+ を立方体の各辺の midpoint と立方体の中心に置いた形になっている。単位格子に含まれる Na^+ と Cl^- の個数をそれぞれ答えよ。また、 Na^+ と隣接する Cl^- の個数および Cl^- と隣接する Na^+ の個数についても答えよ。
- (5) NaCl 結晶内の最近接の Na^+ と Cl^- 間の距離を $2.82 \times 10^{-8} \text{ cm}$ とするとき、 NaCl 結晶の密度を g/cm^3 の単位で求めよ。 NaCl の分子量を 58.5 とする。
- (6) 58.5 g の NaCl を 300 g の水に溶かして NaCl 水溶液を調製した。この水溶液中では NaCl が完全に電離しているものとして、この溶液の凝固点は何 $^{\circ}\text{C}$ になるか。ただし、水のモル凝固点降下は $1.85 \text{ K} \cdot \text{kg/mol}$ 、 NaCl の分子量は 58.5 とする。

問2. Zn 板を ZnSO_4 水溶液に浸したものと、 Cu 板を CuSO_4 水溶液に浸したものを組み合わせた電池をダニエル電池とよぶ。このダニエル電池に関する以下の問いに答えよ。ただし、この電池の 25°C における標準起電力を 1.100 V、気体定数 R を $8.31 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$ とする。

- (1) カソードおよびアノードの反応式を書け。
- (2) ダニエル電池 $\text{Zn}|\text{Zn}^{2+}(a_{\pm}=0.6)|\text{Cu}^{2+}(a_{\pm}=0.2)|\text{Cu}$ の 25°C における起電力を求めよ。ただし、 a_{\pm} はイオンの平均活量、ファラデー定数を 96500 C/mol とする。また、次の自然対数の値 $\ln 2 = 0.69$, $\ln 3 = 1.10$, $\ln 5 = 1.61$ を用いてよい。
- (3) ダニエル電池の標準ギブスエネルギー変化量を求めよ。

問3. $A_2(\text{gas}) + 2S(\text{surf}) \rightleftharpoons 2A(\text{ads})$ で表される気体分子 A_2 の表面への解離吸着平衡を考える。ここで、 $S(\text{surf})$ は表面の空いている吸着サイト、 $A(\text{ads})$ は原子 A が吸着したサイトを表しており、1つの吸着サイトには1つの原子だけが吸着する（単原子層吸着）と仮定する。

(1) 表面における被覆率の定義について述べよ。

(2) 気体 A_2 の分圧を P_{A_2} 、原子 A の被覆率を θ としたとき、吸着速度定数 k_a を用いて吸着速度を表せ。ただし、反応速度は通常は反応速度定数と反応物の濃度の積で表されるが、本問において気体の濃度は分圧で、吸着原子もしくは空きサイトの濃度は被覆率を用いて表すものとする。

(3) 同様に、脱離速度定数 k_d を用いて脱離速度を表せ。

(4) 平衡状態では吸着速度と脱離速度が等しいことから、吸着平衡定数 $K_{\text{ads}} = k_a/k_d$ を用いて、原子 A の平衡被覆率を導出せよ。

[II] 化学 解答

出題意図

基礎化学，電気化学，反応速度論の基礎的な内容を問う。

解答

問 1.

- (1) Na: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ Cl: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$
- (2) Na: 金属結合、Cl₂: 共有結合
- (3) Na > Na⁺, Cl < Cl⁻
- (4) Na⁺も Cl⁻も 4 個。隣接数はどちらも 6 個
- (5) $(58.5 / (6.023 \times 10^{23})) \times 4 / (5.64 \times 10^{-8})^3 = 2.17 \text{ g/cm}^3$
- (6) $\Delta T = K_f \cdot m$ m は質量モル濃度
完全に電離しているため、2 倍の濃度となる。
よって、 $\Delta T = (1.85 \times (58.5/58.5) \times 2) / 0.3 = 12.33 \text{ K}$
凝固点は $-12.33 \text{ }^\circ\text{C}$ 。

問 2.

- (1) カソード: $\text{Cu}^{2+} + 2e^- \rightarrow \text{Cu}$
アノード: $\text{Zn} \rightarrow \text{Zn}^{2+} + 2e^-$
- (2) $E = E^0 - (RT/nF) \ln(a_{\text{Zn}}/a_{\text{Cu}})$
 $= 1.100 - ((8.31 \times 298) / (2 \times 96500)) \ln(0.6/0.2) = 1.086 \text{ V}$
- (3) $E^0 = -(\Delta G^0/nF)$ より、 $\Delta G^0 = -E^0 \times nF = -1.100 \times 2 \times 96500$
 $= -212.3 \text{ kJ}$

問 3.

- (1) 被覆率 = 吸着原子 (分子も可) で占有された吸着サイト数 / 表面の全吸着サイト数
- (2) 吸着速度: $k_a P_{A_2} (1-\theta)^2$
- (3) 脱離速度: $k_d \theta^2$
- (4) 平衡状態では、 $k_a P_{A_2} (1-\theta)^2 = k_d \theta^2$
 $K_{\text{ads}} = k_a / k_d$ を用いて、 $K_{\text{ads}} P_{A_2} (1-\theta)^2 - \theta^2 = 0$
 $(\sqrt{K_{\text{ads}} P_{A_2}} ((1-\theta) + \theta) (\sqrt{K_{\text{ads}} P_{A_2}} ((1-\theta) - \theta)) = 0$
 $0 \leq \theta \leq 1$ であり、前部は明らかに正なので、 $\sqrt{K_{\text{ads}} P_{A_2}} (1-\theta) - \theta = 0$
 $\therefore \theta = \frac{\sqrt{K_{\text{ads}} P_{A_2}}}{1 + \sqrt{K_{\text{ads}} P_{A_2}}}$

[Ⅲ] 電磁気

以下の問1から問3に答えよ.

問1. 図1に示すように, 内半径 a , 外半径 c の同軸円筒コンデンサーにおいて, 内円筒(半径 a)に単位長さあたり λ の電荷を与え, 外円筒(半径 c)を接地した. 内円筒から半径 b ($a \leq b \leq c$)の同軸円筒のところまで誘電率 ϵ_1 , そこから外円筒まで誘電率 ϵ_2 の誘電体で満たしている. 以下の問いに答えよ. ただし, 同軸円筒コンデンサーは軸方向に無限に長いものとし, 内円筒と外円筒は, それぞれ厚さが無視できる導体であるものとする.

- (1) 誘電率 ϵ_1, ϵ_2 の各誘電体中の電場の大きさ $E_1(r), E_2(r)$ をそれぞれ求めよ. ただし, r は中心軸からの距離とする.
- (2) $\epsilon_1 > \epsilon_2$ のとき, 図2に示すように r を横軸, 電場 $E(r)$ を縦軸として $E(r)$ を図示せよ.
- (3) 内円筒と外円筒の間の電位差 V を求めよ.
- (4) 単位長さあたりの電気容量 C を求めよ.

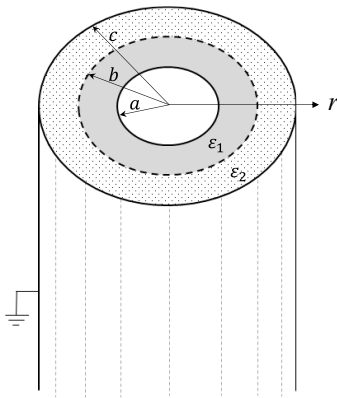


図1

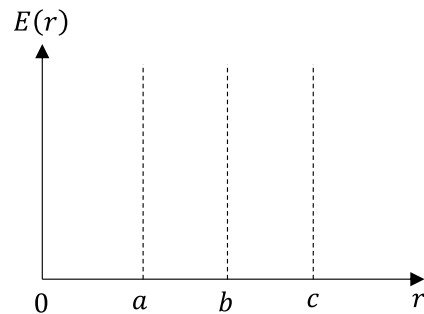


図2

問2. 図3(a)と(b)に示すように、 x 方向に一様な磁束密度 B の磁場中において、面積 S の長方形の閉回路 $abcd$ を磁場(x 方向)に垂直な軸(z 方向)のまわりに回転させた。閉回路の抵抗値を R とし、閉回路の面の法線が磁場の方向となす角を θ とする。以下の問いに答えよ。

(1) 閉回路に鎖交する磁束を、 θ を用いて表せ。

(2) 閉回路に生じる起電力の大きさを、 $\frac{d\theta}{dt}$ を用いた式で表せ。

(3) 閉回路の面が磁場に垂直な位置($\theta = 0$)から、半回転する($\theta = \pi$ となる)間に点 a を通過する電気量を求めよ。また、その電気量は回転する速さに依存するか否かを答えよ。

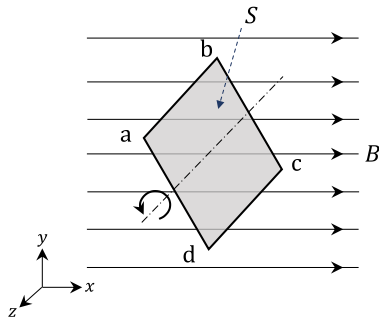


図3(a)

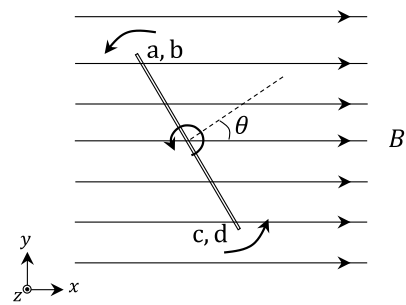


図3(b)

問3. 電極面積 S 、電極間距離 d の平行平板電極に誘電率 ϵ の誘電体が隙間なく挿入されている。正弦波(振幅 V_1 、周波数 f)に直流電圧 V_0 を加えた電圧 $V(t) = V_0 + V_1 \sin 2\pi f t$ を電極間に印加するとき、以下の問いに答えよ。ただし、電極間に生じる電場は空間的に一様であるものとする。

(1) 平行平板間の電場 $E(t)$ を求めよ。

(2) 平行平板間の変位電流密度 $J_d(t)$ を求めよ。

(3) 誘電体内部の電場に蓄えられるエネルギーの1周期($= 1/f$)での平均値 W を求めよ。

[Ⅲ] 電磁気 解答

出題意図

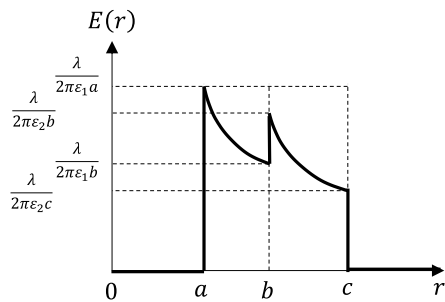
大学で学ぶ電磁気学に関して、基本的な問題が解けるかを問う。

解答例

問 1.

$$(1) \quad E_1(r) = \frac{\lambda}{2\pi\epsilon_1 r}, \quad E_2(r) = \frac{\lambda}{2\pi\epsilon_2 r}$$

(2)



$$(3) \quad V = \frac{\lambda}{2\pi\epsilon_2} \log \frac{c}{b} + \frac{\lambda}{2\pi\epsilon_1} \log \frac{b}{a}$$

$$(4) \quad C = \frac{2\pi}{\frac{1}{\epsilon_2} \log \frac{c}{b} + \frac{1}{\epsilon_1} \log \frac{b}{a}}$$

問 2.

$$(1) \quad \text{磁束 } \Phi = BS \cos\theta$$

$$(2) \quad \text{起電力の大きさ } e = BS \sin\theta \frac{d\theta}{dt}$$

$$(3) \quad \text{電気量 } Q = \frac{2BS}{R}, \quad \text{回転する速さに依存しない}$$

問 3.

$$(1) \quad E(t) = \frac{V_0 + V_1 \sin 2\pi f t}{d}$$

$$(2) \quad J_d(t) = \epsilon \cdot 2\pi f \cdot \frac{V_1}{d} \cos 2\pi f t$$

$$(3) \quad W = \frac{\epsilon S}{2d} \left(V_0^2 + \frac{V_1^2}{2} \right)$$

[IV] 電気回路

以下の問1から問3に答えよ.

問1. 図1に示す直流回路について以下の問(1)から(2)に答えよ.

- (1) 電圧 E , 抵抗 r , 電流 I , 電圧 V の間に成り立つ関係式を示せ.
- (2) 抵抗 R を R_1 に変更したときの電流と電圧がそれぞれ I_1 と V_1 , 抵抗 R を R_2 に変更したときの電流と電圧がそれぞれ I_2 と V_2 であった. 抵抗 r を I_1, V_1, I_2, V_2 を用いて表せ.

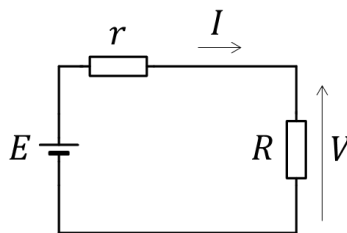


図1

問2. 図2に示す交流回路について以下の問(1)から(3)に答えよ. なお電流 I と電圧 E は実効値である.

- (1) 電流 I を電圧 E , 抵抗 r , 抵抗 R , インダクタンス L , キャパシタンス C , 角周波数 ω , 虚数単位 j を用いて表せ.
- (2) 抵抗 R の平均電力 P を電圧 E , 抵抗 r , 抵抗 R , インダクタンス L , キャパシタンス C , 角周波数 ω を用いて表せ.
- (3) 平均電力 P が最大となるための角周波数 ω の条件と抵抗 R の条件を求めよ.

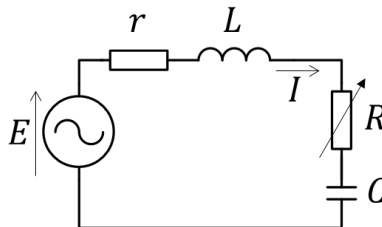


図2

問3. 図3に示す回路について以下の問(1)から(4)に答えよ. なおコンデンサ C の初期電荷はゼロとし, 時刻 $t < 0$ ではスイッチ S_1 と S_2 はともに開いた状態であるとする. また抵抗を R , 電池の起電力を E とする.

- (1) $t = 0$ でスイッチ S_1 を閉じた. $t \geq 0$ におけるコンデンサの電圧 $v(t)$ を求めよ.
- (2) その後, $t = T$ でスイッチ S_1 を開くと同時にスイッチ S_2 を閉じた. $t \geq T$ におけるコンデンサの電圧 $v(t)$ を求めよ.
- (3) $t \geq 0$ でコンデンサに流れる電流 $i(t)$ を求めよ. ただし2つの時間帯 $0 \leq t < T$ と $t \geq T$ においてそれぞれ求めよ.
- (4) 電流波形 $i(t)$ の概形を図示せよ. 縦軸と横軸の値も図中に記すこと.

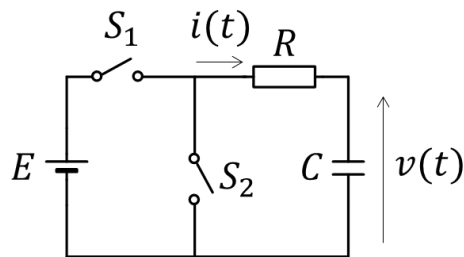


図3

[IV] 電気回路 解答

出題意図

直流回路，交流回路，過渡解析に関する基本事項の理解を問う。

解答例

問1.

$$(1) E = rI + V$$

$$(2) r = \frac{V_2 - V_1}{I_1 - I_2}$$

問2.

$$(1) I = \frac{E}{r + R + j(\omega L - 1/\omega C)}$$

$$(2) P = R |I|^2 = \frac{RE^2}{(r + R)^2 + (\omega L - \frac{1}{\omega C})^2}$$

$$(3) \omega = \frac{1}{\sqrt{LC}}, R = r \quad \left(\frac{dP}{dR} = 0 \text{ より} \right)$$

問3.

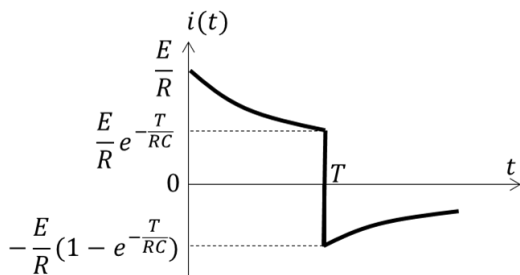
$$(1) v(t) = E(1 - e^{-\frac{t}{RC}})$$

$$(2) v(t) = E \left(1 - e^{-\frac{T}{RC}} \right) e^{-\frac{t-T}{RC}}$$

$$(3) i(t) = \frac{E}{R} e^{-\frac{t}{RC}} \quad (0 \leq t < T)$$

$$i(t) = -\frac{E}{R} (1 - e^{-\frac{T}{RC}}) e^{-\frac{t-T}{RC}} \quad (T \leq t)$$

(4)



[V] 熱力学

以下の問1および問2に答えよ.

問1. 熱力学第二法則に関連する以下の問(1)~(5)に答えよ. なお導出の際には, 本問で与えていない熱力学用語を自由に用いても構わないものとする.

- (1) 系が温度 T の熱浴と熱量を授受する過程を考える. 系のエントロピーを S とし, 系が熱浴から微小熱量 dq を受け取る時に, エントロピーの変化 dS , dq , T の間に成り立つ関係を不等式を用いて答えよ.
- (2) (1)で示した不等式において, 等号が成り立つのはどのような場合か答えよ.
- (3) 温度 T_h の系から温度 T_c のもう一つの系へ微小熱量 dq としてエネルギーが輸送される場合を考える. ただし, $T_h > T_c$, $dq > 0$ とする. (1)で示した不等式を用いて, 高温から低温への熱の移動は自発的であることを示せ.
- (4) エントロピーが状態関数であることを用いて, 適当なサイクルにおいて(1)で示した不等式を足し合わせるにより, 1サイクルに対する積分 $\oint \frac{dq}{T}$ が満たす条件を不等式で答えよ.
- (5) (1)で示した不等式を用いて, ギブスの自由エネルギー変化 dG が, 定温定圧条件下における系の変化が自発的であるかの判断基準となることを導け.

問2. マクスウェルの速度分布を以下の問(1)~(4)に従って導出せよ. ただし, 本問において以下の積分公式は導出なしで用いてよいものとする.

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad \int_0^{\infty} x^4 e^{-ax^2} dx = \frac{3}{8} \sqrt{\frac{\pi}{a^5}}$$

(1) 1つの気体分子の速度成分を (v_x, v_y, v_z) , 分子の総数を N , 速度の x 成分が v_x から $v_x + dv_x$ の間に入る分子の数を dN_1 とすると, 適当な分布関数 f_1 を用いて,

$$\frac{dN_1}{N} = f_1(v_x) dv_x$$

と表すことができる. 「気体分子の速度の x , y , z 成分は互いに独立であり, どの方向にも同じように運動している」という仮定を用いて,

$$\frac{dN}{N} = A^3 e^{-\beta v^2} dv_x dv_y dv_z$$

と表されることを導け. ただし, v は気体分子の速さで $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$ であり, A , β は導出の過程でおいた適当な定数とする.

(2) (1)で導いた式の両辺を積分することで, A を求めよ. ただし, β を用いてよいものとする.

(3) 全気体分子の運動エネルギーの和 E は, 速度空間において全積分することにより,

$$E = \int_0^{\infty} \frac{1}{2} m v^2 \cdot N \cdot A^3 e^{-\beta v^2} \cdot 4\pi v^2 dv$$

で表すことができる. これが気体分子運動論より $\frac{3}{2} N k_B T$ となることを用いて, β を求めよ. ただし, k_B はボルツマン定数, T は気体の温度とする.

(4) ある気体分子の速度が v となる確率 $F(v)$, すなわちマクスウェルの速度分布を表せ.

[V] 熱力学 解答

出題意図

クラウジウスの不等式（問 1）、マクスウェルの速度分布（問 2）を題材に、熱力学・統計熱力学に関する基礎に関して理解しているかどうかを問う。

解答例

問 1.

$$(1) dS \geq \frac{dq}{T}$$

(2) 可逆過程

$$(3) (1)式より高温および低温熱源におけるエントロピー変化はそれぞれ, $dS_h \geq -\frac{dq}{T_h}$, $dS_c \geq \frac{dq}{T_c}$,$$

$$\text{よって, 全体のエントロピー変化は, } dS = dS_h - dS_c \geq dq \left(\frac{1}{T_c} - \frac{1}{T_h} \right) \geq 0 \quad (\because T_h > T_c, dq > 0)$$

ゆえに, 高温から低温への熱の移動は自発的である.

$$(4) \text{ 適当なサイクルについて(1)式を足し合わせると, } \sum dS \approx \oint dS \geq \sum \frac{dq}{T} \approx \oint \frac{d'q}{T}$$

$$\text{エントロピーは状態関数なので, } \oint dS = 0$$

$$\text{よって, } \oint \frac{d'q}{T} \leq 0$$

$$(5) (1)式より, $dS - \frac{dq}{T} \geq 0$$$

$$\text{定圧条件下では } dH = dU + pdV = dq \text{ より, } dS - \frac{dH}{T} \geq 0$$

$$\text{さらに定温条件下では, } dG = dH - TdS \text{ より, } dG \leq 0$$

よって, dG が負となることが, 定温定圧条件下における系の変化が自発的であるかの判断基準となる.

問 2.

(1) 仮定より, x 方向にも $-x$ 方向にも同じように運動しているため, $f_1(-v_x) = f_1(v_x)$

上記の関係が成り立つということは, f_1 が偶関数であり v_x^2 の関数となるため, $\frac{dN_1}{N} = f(v_x^2)dv_x$

(偶関数は v_x^2 の関数とは限らないのではというご指摘を頂きましたが, v_x^{2n} の関数ならば全て v_x^2 の関数として表すことができます. あとは \cos や \cosh 関数も偶関数ですが, この場合は後の関数の積が変数の和となる束縛条件により除外できることとなります.)

仮定より各成分は互いに独立なので, y, z 方向についても同じ関数 f を用いることができる. 速度の各成分が, それぞれ $v_x \sim v_x + dv_x$, $v_y \sim v_y + dv_y$, $v_z \sim v_z + dv_z$ の間に入る分子の数を dN とする

$$\frac{dN}{N} = f(v_x^2)f(v_y^2)f(v_z^2)dv_xdv_ydv_z$$

さらに, 速度に方向性がないため, 下線部は $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$ の関数になるはずである.

関数同士の積を変数の和で表すことができる関数の形は指数関数形であることから, $f(v_x^2) = Ae^{-\beta v_x^2}$ とおくと,

$$\frac{dN}{N} = A^3 e^{-\beta(v_x^2+v_y^2+v_z^2)}dv_xdv_ydv_z = A^3 e^{-\beta v^2} dv_xdv_ydv_z$$

となり, 確かに v^2 の関数として表せた.

(2) ガウス積分の公式 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$ を用いて, 両辺を積分すると,

$$\int \frac{dN}{N} = A^3 \iiint e^{-\beta(v_x^2+v_y^2+v_z^2)} dv_xdv_ydv_z = A^3 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta v_x^2} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta v_y^2} dv_y \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta v_z^2} dv_z$$

$$1 = A^3 \left(\frac{\pi}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}} \quad \therefore A = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}}$$

(3) $E = \iiint \frac{1}{2}mv^2 \cdot NA^3 e^{-\beta v^2} dv_xdv_ydv_z = \int_0^{\infty} \frac{1}{2}mv^2 \cdot N \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\beta v^2} \cdot 4\pi v^2 dv$

$$= \frac{2mN\beta^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} v^4 e^{-\beta v^2} dv$$

積分公式 $\int_0^{\infty} x^4 e^{-ax^2} dx = \frac{3}{8} \sqrt{\frac{\pi}{a^5}}$ を用いて,

$$E = \frac{2mN\beta^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} v^4 e^{-\beta v^2} dv = \frac{2mN\beta^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{3}{2^3} \sqrt{\frac{\pi}{\beta^5}} = \frac{3mN}{4\beta}$$

気体分子運動論から, $E = \frac{3}{2}Nk_B T$ より, $\beta = \frac{m}{2k_B T}$

(4) (2), (3)より速度が v になる確率 $F(v)$ は,

$$F(v) = \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\beta v^2} \cdot 4\pi v^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{m}{k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} v^2 \cdot \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right)$$

[VI] 量子力学

質量 m の粒子が x 軸上をポテンシャル $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ (ω : 正の定数) の下で運動する1次元調和振動子を考える. 位置演算子 \hat{x} , 運動量演算子 \hat{p} を用い, ハミルトン演算子 \hat{H} は

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

と書ける. 次に, \hat{x} と \hat{p} から演算子

$$\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right), \quad \hat{a}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right)$$

を定義する. ここで, \hbar はプランク定数 h を 2π で割ったもの, \hat{a}^\dagger は \hat{a} のエルミート共役である. また, $\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$ も定義する. 以下の問(1)から(10)に答えよ. 解答にあたっては, 必要に応じて, ブラ・ケットに関する次の性質(a), (b)を用いてよい.

- (a) 双対関係にあるブラベクトル $\langle\alpha|$ とケットベクトル $|\alpha\rangle$ の内積 $\langle\alpha|\alpha\rangle$ は, 非負の実数である.
- (b) c を複素数, \hat{A} を演算子として, ケットベクトル $c\hat{A}|\alpha\rangle$ と双対関係にあるブラベクトルは $c^*\langle\alpha|\hat{A}^\dagger$ である. ここで, c^* は c の複素共役である.

- (1) 交換関係 $[\hat{x}, \hat{x}] = [\hat{p}, \hat{p}] = 0$, および $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ を用いて, $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ を示せ. ただし, 2つの演算子 \hat{A} , \hat{B} に対して, 交換子は $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ と定義される.
- (2) ハミルトン演算子 \hat{H} が, \hat{N} を用いて $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + 1/2)$ と表されることを示せ.
- (3) \hat{H} のエネルギー固有値が $\hbar\omega/2$ 以上となることを示せ.
- (4) ケットベクトル $|0\rangle$ が $\hat{a}|0\rangle = 0$ を満たすとき, $|0\rangle$ は \hat{H} の固有ベクトルであることを示し, そのエネルギー固有値 E_0 を求めよ.
- (5) $|0\rangle$ は \hat{H} の基底状態の状態ベクトルである. その理由を説明せよ.
- (6) $|0\rangle$ の位置表示の波動関数は, 位置演算子の固有ベクトル $|x\rangle$ を用いて $\langle x|0\rangle$ と書ける. $\langle x|0\rangle$ は, $\hat{a}|0\rangle = 0$ の関係から, 微分方程式

$$\left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx}\right)\langle x|0\rangle = 0$$

に従う. 規格化された波動関数 $\langle x|0\rangle$ を求めよ. ここで, 必要に応じて, 正の実数 γ に対して成り立つ以下の積分公式を用いてよい.

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}}$$

- (7) \hat{H} と \hat{a} の交換関係 $[\hat{H}, \hat{a}] = C\hat{a}$ において, 定数 C を求めよ.
- (8) \hat{H} の第一励起状態の状態ベクトルを $|1\rangle$, エネルギー固有値を E_1 とおく. このとき $\hat{a}|1\rangle$ が \hat{H} の固有ベクトルでそのエネルギー固有値が $E_1 - \hbar\omega$ となることを示せ.

$\hat{a}|1\rangle$ のエネルギー固有値が第一励起状態のエネルギー固有値より小さいことから, $\hat{a}|1\rangle$ は基底状態の状態ベクトルである. 加えて, 1次元の束縛状態に縮退がないため, $\hat{a}|1\rangle$ は $|0\rangle$ に比例する.

- (9) $\hat{N}|1\rangle = |1\rangle$ を示せ.
- (10) $\hat{a}|1\rangle = \lambda|0\rangle$ と書いたとき, その比例係数 λ を求めよ. ただし, λ は正の実数とし, $|1\rangle$ と $|0\rangle$ は規格化されているとする.

[VI] 量子力学 解答

出題意図

量子力学の基礎である状態ベクトルと演算子に関する理解を確認するために、調和振動子を題材とした問題を出題した。

解答例

(1)

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right), \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) \right] = \frac{m\omega}{2\hbar} \left([\hat{x}, \hat{x}] - \frac{i}{m\omega} [\hat{x}, \hat{p}] + \frac{i}{m\omega} [\hat{p}, \hat{x}] + \frac{1}{m^2\omega^2} [\hat{p}, \hat{p}] \right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left(-\frac{i}{m\omega} [\hat{x}, \hat{p}] + \frac{i}{m\omega} [\hat{p}, \hat{x}] \right) = \frac{m\omega}{2\hbar} \left(-\frac{i}{m\omega} i\hbar + \frac{i}{m\omega} (-i\hbar) \right) = 1 \end{aligned}$$

(2) \hat{x} と \hat{p} を \hat{a} と \hat{a}^\dagger で表すと、

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{p} = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$$

また、問(1)より $\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1$ であるから、

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 = -\frac{1}{2m} \frac{\hbar m\omega}{2} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ &= -\frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger) + \frac{\hbar\omega}{4} (\hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger) = \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} (2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1) = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

(3) エネルギー固有値を E 、規格化された固有ベクトルを $|\varphi\rangle$ とおくと、 $\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$ から、

$$E = \langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle = \langle \varphi | \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) | \varphi \rangle = \hbar\omega \langle \varphi | \hat{a}^\dagger\hat{a} | \varphi \rangle + \frac{\hbar\omega}{2} \langle \varphi | \varphi \rangle = \hbar\omega \langle \varphi | \hat{a}^\dagger\hat{a} | \varphi \rangle + \frac{\hbar\omega}{2}$$

$\langle \varphi | \hat{a}^\dagger\hat{a} | \varphi \rangle$ は双対関係にあるブラとケットの内積で $\langle \varphi | \hat{a}^\dagger\hat{a} | \varphi \rangle \geq 0$ であるため、 $E \geq \hbar\omega/2$ が示される。

(4)

$$\hat{H}|0\rangle = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right) |0\rangle = \hbar\omega \hat{a}^\dagger\hat{a} |0\rangle + \frac{\hbar\omega}{2} |0\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} |0\rangle$$

より、 $|0\rangle$ は \hat{H} の固有ケットで、エネルギー固有値は $\hbar\omega/2$ 。

(5) $|0\rangle$ のエネルギー固有値 $\hbar\omega/2$ が、 \hat{H} のエネルギー固有値の最低値 $\hbar\omega/2$ に等しいため。

(6) 微分方程式

$$x\langle x|0\rangle + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \langle x|0\rangle = 0$$

から、その解が、 C を積分定数として

$$\langle x|0\rangle = C \cdot \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)$$

と求まる. ここで問題文中の $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\gamma x^2) dx = \sqrt{\pi/\gamma}$ を用い, 規格化定数を求めると,

$$|C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} x^2\right) dx = |C|^2 \left(\frac{\pi\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} = 1$$

から, $C = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$ となり, 規格化された波動関数は

$$\langle x|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)$$

(7)

$$[\hat{H}, \hat{a}] = \hbar\omega \left[\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}, \hat{a} \right] = \hbar\omega [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] = \hbar\omega \hat{a}^\dagger [\hat{a}, \hat{a}] + \hbar\omega [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] \hat{a} = \hbar\omega [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] \hat{a} = -\hbar\omega [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \hat{a} = -\hbar\omega \hat{a}$$

より, $C = -\hbar\omega$ である.

(8) 問(7)より, $\hat{H}\hat{a} = \hat{a}\hat{H} - \hbar\omega\hat{a}$ である. したがって,

$$\hat{H}\hat{a}|1\rangle = \hat{a}\hat{H}|1\rangle - \hbar\omega\hat{a}|1\rangle = \hat{a}E_1|1\rangle - \hbar\omega\hat{a}|1\rangle = (E_1 - \hbar\omega)\hat{a}|1\rangle$$

より, $\hat{a}|1\rangle$ は \hat{H} の固有ベクトルで, エネルギー固有値は $(E_1 - \hbar\omega)$ である.

(9) $E_1 - \hbar\omega = E_0$ より $E_1 = E_0 + \hbar\omega = 3\hbar\omega/2$ であるから,

$$\hat{H}|1\rangle = E_1|1\rangle = \frac{3\hbar\omega}{2}|1\rangle$$

これと

$$\hat{H}|1\rangle = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) |1\rangle = \hbar\omega \hat{N}|1\rangle + \frac{\hbar\omega}{2}|1\rangle$$

より, $\hat{N}|1\rangle = |1\rangle$ が示される.

(10) $\hat{a}|1\rangle$ の自分自身との内積は,

$$\langle 1|\hat{a}^\dagger\hat{a}|1\rangle = \langle 1|\hat{N}|1\rangle = \langle 1|1\rangle = 1$$

$\lambda|0\rangle$ の自分自身との内積は,

$$|\lambda|^2 \langle 0|0\rangle = |\lambda|^2$$

したがって, $|\lambda|^2 = 1$ より $\lambda = 1$ となる.

[VII] 固体物性

二次元正方格子結晶 (x 軸, y 軸方向共に, 格子定数: a) 中に, 二次元電子ガスが存在する. このような電子ガスの分散関係 (電子のエネルギー E と波数ベクトル \mathbf{k} の関係) が,

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

で与えられるとして, 以下の問いに答えよ. ここで, k は電子の波数ベクトル \mathbf{k} の絶対値, m は電子の有効質量, \hbar はプランク定数 h を 2π で割ったものである. また, 電子間の相互作用は無視できるものとする.

- (1) 上記した二次元電子ガス中電子の波動関数が, x 軸方向に a の N 倍進んだところで周期的境界条件を満たすとする. 周期的境界条件の下では, 電子の取り得る波数, 即ち状態は離散的になる. 電子の波動関数が x 軸方向に取り得る最も小さな波数と 2 番目に小さな波数を示せ.
- (2) 上記電子の波動関数が, y 軸方向にも同様に, a の N 倍進んだところで周期的境界条件を満たすとした場合, 電子が取り得る状態 (波数ベクトル) は二次元波数空間に離散的且つ等間隔に分布する. これら状態一つあたりの波数空間の面積を求めよ.
- (3) この二次元電子系の状態密度 $D(E)$ を求めよ. ここで状態密度とは, エネルギー E と $E + dE$ との間に存在する単位面積当たりの状態数 $D(E)dE$, 即ち取り得る波数の数をエネルギー幅 dE で割ったものである. また, 状態密度を求める際には, 電子のスピン自由度も考慮すること.
- (4) この二次元電子系のフェルミエネルギー E_F (絶対零度におけるフェルミ準位) を, 電子密度 n を用いて表せ.
- (5) 温度が絶対零度から温度 T (ただし, k_B をボルツマン定数として $T \ll E_F/k_B$ とする) に僅かに上昇した場合, フェルミ準位は高くなるか, 低くなるか, あるいは変わらないかを答えよ. またその理由について簡単に説明せよ.

[VII] 固体物性 解答

出題意図

固体（結晶）中の電子のブロッホ状態とその状態密度について正しく理解できているかを問う。

解答例

問1. 最も小さな波数： $\frac{2\pi}{Na}$, 2番目に小さな波数： $\frac{2\pi}{Na/2} = 2 \times \frac{2\pi}{Na}$.

問2. $\frac{2\pi}{Na} \times \frac{2\pi}{Na}$

問3. エネルギー E から $E + dE$ に対応する波数空間の面積は、 $\frac{\hbar^2}{m} kdk = dE$ を用いて、

$$2\pi kdk = \frac{2\pi m}{\hbar^2} dE$$

これを状態一つが占める波数空間の面積 $\frac{2\pi}{Na} \times \frac{2\pi}{Na}$ で割って、さらに実空間の面積 $Na \times Na$ で割って、最後に、スピン自由度を考慮して2倍した結果、

$$D(E)dE = 2 \times \frac{1}{Na \times Na} \times \frac{1}{\frac{2\pi}{Na} \times \frac{2\pi}{Na}} \times \frac{2\pi m}{\hbar^2} dE = \frac{m}{\pi \hbar^2} dE$$

となり、

$$D(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2}$$

が求められる。

問4.

$$D(E) \times E_F = n$$

より、

$$E_F = \frac{\pi \hbar^2 n}{m}$$

問5. 変わらない。状態密度がエネルギーに依存しないから。