Ⅰ 次の問題１，２に答えよ．解答はそれぞれ所定の用紙に書け．

問題１　次の問１～問４に答えよ．

問１　系のエントロピー変化 dS と吸収した熱量 dq には，温度 T を用いて $dS \geq dq/T$ の関係がある．等号が成立するのはどのような場合であるかを記せ．

問２　G が $G = H - TS$ により定義されるとき，一定圧力，一定温度の下で自発的変化に対する dG の符号について理由を付して述べよ．ここで，H はエンタルピーである．

問３　G の全微分を書き下し（ただし，分子数一定），それを参考に $\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p = -\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T$ であることを示せ．

問４　一成分系の固体と液体が相平衡状態にある．固体と液体で等しい示強性の量（変数）を３つ挙げよ．

問題２　一次元の箱の中の自由粒子のシュレーディンガー方程式は

$$d^2\,\psi(x)/\,dx^2 + 2mE/\hbar^2\,\psi(x) = 0 \qquad -a/2 \leq x \leq a/2$$

と与えられる．ここで, E はエネルギー，m は粒子の質量，$\psi(x)$ は粒子の運動を表す波動関数である．箱の大きさを a として，箱の左端を $x = -a/2$，右端を $x = a/2$ とする．位置エネルギーは箱の中では 0, 箱の外では ∞ とする．次の問に答えよ．

問１　境界条件を代入してエネルギーが $E_n = h^2n^2/8ma^2$ （n=1, 2,・・）と与えられることを示せ．

問２　波動関数を求め，規格化せよ．

問３　粒子を $x = 0$ と $x = a/2$ の間に見出す確率を計算せよ．

問４　ブタジエン(C_4H_6)，ヘキサトリエン(C_6H_8) ,・・というように二重結合を交互に持つ分子を伸ばしていくとき，その分子に属するπ電子が，一次元の箱の中の粒子のように振る舞うとする．そのような分子に光を照射するとき吸収される波長が500 nmより長くなるのは炭素数がいくつの分子か答えよ．ここで，C=C二重結合距離を 0.135 nm, C–C一重結合距離を 0.154 nmとして，端の炭素原子核からH_2までの距離は無視する．また, $h = 6.63 \times 10^{-34}$ Js，$m = 9.11 \times 10^{-31}$ kg, 1 cm^{-1} は 1.986×10^{-23} J　に相当する．