1996年度 入学試験 物理専門科目

専攻問題1

水素原子の中の陽子と電子の相対運動のシュレディンガー方程式は、相対座標を \vec{r} 、換算質量をmとすると、cgsガウス系を単位系に用いた場合、通常次の形に書かれる。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \qquad \cdots (1)$$

この固有エネルギー E_n と固有関数 $\psi_{n\ell m}(\vec{r})$ は次のように求まる:

$$E_n = -\frac{R_y}{n^2}$$
 $(n = 1, 2, ...)$... (3)

$$\psi_{n\ell m}(\vec{r}) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi) \qquad (\ell = 0, 1, ..., n-1; \quad m = 0, \pm 1, ..., \pm \ell) \qquad \cdots (4)$$

ただし $R_y\equiv me^4/2\hbar^2$ は Rydberg 定数である。ここで、 (r,θ,ϕ) は極座標、 $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ は規格化された球面調和関数であり、たとえば、 $Y_{00}=1/\sqrt{4\pi}$ である。波動関数の動径部分 $R_{n\ell}(r)$ は、1s 状態 $(n=1,\ell=0)$ 、2s 状態 $(n=2,\ell=0)$ および、2p 状態 $(n=2,\ell=1)$ についてはそれぞれ、

$$R_{10}(r) = \frac{2}{\sqrt{a^3}} \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \tag{5}$$

$$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{8a^3}} \left(2 - \frac{r}{a}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \qquad \cdots (6)$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{24a^5}} r \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \qquad \cdots (7)$$

で与えられる。ただし、 $a \equiv \hbar^2/me^2$ は Bohr 半径である。

以上の知識を手がかりにして、以下の問いに答えよ。

1. 絶縁体に弱い光を当てると、電子と正孔のペアができる。絶縁体の中では、電子は電荷 -e で質量が m_e の粒子のように、正孔は電荷 +e で質量が m_h の粒子のようにふるまい、両者の間にはたらくポテンシャルは、絶縁体の(比)誘電率を ε (定数とする) として、

$$V = -\frac{e^2}{\varepsilon r} \tag{8}$$

で与えられると仮定する。電子と正孔の束縛状態について、以下の問いに答えよ。

- (i) 最も低いエネルギーを持つ束縛状態の束縛エネルギーを求めよ。
- (ii) この束縛状態の空間的広がりの目安として、r の期待値 $\langle r \rangle$ を求めよ。
- 2. 電子が実際に感じるポテンシャルは、式 (2) や式 (8) から少しずれていることが分かっている。たとえば水素原子の場合、陽子のごく近くでは、電子・陽子対が仮想的に生成・消滅している「雲」の内側にはいるためにポテンシャルが修正される。それが何をもたらすかを大ざっぱにみるために、式 (2) のポテンシャルを次のように修正してみよう。

$$V(\vec{r}) = -\frac{e^2}{r} - \lambda \delta^3(\vec{r}) \qquad \cdots (9)$$

ただし、 λ はある正の定数であり、 $\delta^3(\vec{r})$ は 3 次元のデルタ関数である。

- (i) V の右辺第 2 項を摂動とみなし、摂動を受けた 1s 状態、2s 状態、2p 状態のエネルギーを、それぞれ λ の一乗の精度で求めよ。
- (ii) 摂動を受けた 1s 状態の電子について、電子を見いだす確率密度の r=0 における値が、 $\lambda=0$ の場合の何倍になっているかを求めよ。ただし、摂動計算に用いる非摂動状態としては、1s,2s,2p 状態だけを考慮すればよく、また、 λ の一乗の精度まででよい。
- (iii) この確率密度が $\lambda = 0$ の場合に比べて増加しているか減少しているかを述べ、式 (9) の形のポテンシャルがそのような確率密度の増加 (あるいは減少) をもたらした理由を直感的に説明せよ。
- 3. 通常のクーロンポテンシャルで記述される系、式 (1)-(7) に戻って、量子力学における確率の意味を考えよう。 時刻 $t=t_0$ に、電子を、1s 状態と 2s 状態の次のような重ね合わせ状態に置く:

$$\psi(\vec{r}, t = t_0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{100}(\vec{r}) + \psi_{200}(\vec{r})] \qquad \cdots (10)$$

- (i) この状態では、確率密度 $|\psi(\vec{r},t)|^2$ が t の周期関数になることを示し、その周期を求めよ。
- (ii) 電子のエネルギーの期待値 $\langle E \rangle$ はいくらか? また、実際に電子のエネルギー E を一度だけ測定した場合に測定値として得られる可能性がある E の値をすべて挙げ、その値が得られる確率を書け。
- (iii) 一度目の測定を終了してから、もういちど式 (10) の状態の電子を用意し、その E を測定する。さらにもう一度式 (10) の状態の電子を用意し、その E を測定する、…、ということを繰り返し、全部で N 回の測定を行うとする。i 番目 (i=1,2,...,N) の測定で得た E の測定値を ε_i と記すと、通常、その平均値

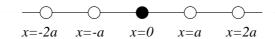
$$\bar{\varepsilon}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varepsilon_i \qquad \cdots \tag{11}$$

を「E の実験値」として、理論値と比較することになる。しかしながら、測定の回数 N が有限である以上、 $\bar{\epsilon}_N$ は一般には上で計算した $\langle E \rangle$ とは異なる。この、実験値 $\bar{\epsilon}_N$ と理論値 $\langle E \rangle$ のずれを δ と記すことにする。その自乗期待値

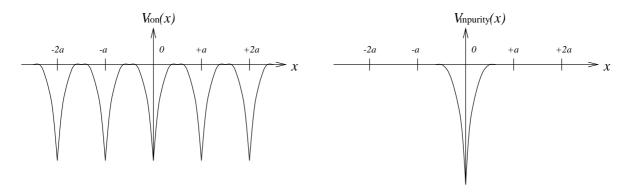
$$\langle \delta^2 \rangle \equiv \langle (\bar{\varepsilon}_N - \langle E \rangle)^2 \rangle \qquad \cdots (12)$$

を求めよ。そして、無限回の測定を繰り返せば $\bar{\epsilon}_N$ が $\langle E \rangle$ に一致すると期待できること、即ち、 $N \to \infty$ で $\langle \delta^2 \rangle \to 0$ となることを確かめよ。

不純物による固体中の電子の束縛問題を考える。簡単のために、格子定数がaの一次元結晶とし、格子点はx = na; $n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$ で、不純物は x = 0 にあるとする。



完全結晶の場合に、格子点にあるイオンからのポテンシャルを $V_{\text{ion}}(x)$ とし、 x=0 にある不純物によるポテンシャ ル $V_{\text{impurity}}(x)$ は、 $V_{\text{ion}}(x)$ に $\Delta V(x)$ が加わったものとする。 $V_{\text{ion}}(x)$ や $V_{\text{impurity}}(x)$ の概略は下図のようであるが、本 問では共にデルタ関数型に簡略化する。



- 1. まず、 $V_{\rm ion}(x)\equiv 0$ 、すなわち、1 次元の自由運動をする質量 m の電子が $\Delta V(x)=-rac{\hbar^2}{m\,lo}\delta(x)$ によって束縛される 問題を考える。ここで、 $\lambda_0 > 0$ とする。
 - (i) 束縛エネルギー E_0 の電子の波動関数 $\phi_0(x)$ に対するシュレーディンガー方程式を書き下せ。
 - (ii) この方程式にフーリエ変換

$$\phi_0(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \, e^{-ikx} \phi_0(k) \tag{1}$$

を施し、k 空間でのシュレーディンガー方程式が次のように書けることを示せ。

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \phi_0(k) - \frac{\hbar^2}{m \lambda_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk'}{2\pi} \phi_0(k') = E_0 \phi_0(k) \qquad \cdots (2)$$

(iii) E_0 を $-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}$ と書くと、 $\phi_0(k)$ は

$$\phi_0(k) = \frac{C_0}{k^2 + \kappa^2} \tag{3}$$

と書ける。ここで、定数 C_0 は

$$C_0 = \frac{2}{\lambda_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \,\phi_0(k) \tag{4}$$

である。 式 (3) と 式 (4) とを組み合わせて κ を求めよ。また、 E_0 を λ_0 の関数として求めよ。

(iv) $\phi_0(k)$ のフーリエ逆変換 $\phi_0(x)$ を λ_0 をパラメータとして求めよ。 そして、 $\phi_0(x)$ の概要を図示し、 λ_0 の物 理的な意味を述べよ。なお、波動関数を規格化する必要はない。

2. 次に、 $\Delta V(x) \equiv 0$ の完全一次元結晶を考える。すなわち、 $\lambda > 0$ として、

$$V_{\text{ion}}(x) = -\frac{\hbar^2}{m\lambda} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na) \qquad \cdots (5)$$

の場合に、1. に従い、k 空間での電子の波動関数 $\phi(k)$ を使って固有値問題を解こう。

(i) エネルギー ε の電子の $\phi(x)$ を決めるシュレーディンガー方程式は次のようになることを示せ。

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \phi(k) - \frac{\hbar^2}{m\lambda a} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi(k - \frac{2\pi}{a}n) = \varepsilon \,\phi(k) \qquad \cdots (6)$$

なお、次のポアソンの和公式に注意せよ。

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{inx} = 2\pi \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - 2\pi n) \qquad \cdots (7)$$

(ii) $\varepsilon = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$ と書くと、 $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$ を満たす任意の k や整数 n に対して、

$$\phi(k - \frac{2\pi}{a}n) = \frac{C_k}{(k - \frac{2\pi}{a}n)^2 + \kappa^2}$$
 (8)

と書ける。 ここで、k にはよるが、n にはよらない数 C_k は

$$C_k = \frac{2}{\lambda a} \sum_{n=1}^{\infty} \phi(k - \frac{2\pi}{a}n) \tag{9}$$

である。 これから、 κ と k とは次の関係で結びつくことを示せ。

$$\cos(ak) = \cosh(a\kappa) - \frac{1}{\kappa\lambda} \sinh(a\kappa) \qquad \cdots (10)$$

なお、u,v>0 として、次の公式を使ってもよい。

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{v}{(n-u)^2 + v^2} = \pi \frac{\sinh(2\pi v)}{\cosh(2\pi v) - \cos(2\pi u)}$$
 ... (11)

(iii) 式 (10) から、 $\lambda < a$ の場合、 $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$ の範囲の任意の k に対して、 κ は近似的に

$$\kappa = \frac{1}{\lambda} [1 + 2e^{-a/\lambda} \cos(ak)] \qquad \cdots (12)$$

のように与えられることを示せ。

(iv) 式 (12) から、k の関数としてのエネルギーの固有値 ε_k (分散関係) が決められる。 $|k| \ll \frac{\pi}{a}$ の場合には、それは次の式に示すような自由電子の分散関係に類似した形を持つことを示せ。

$$\varepsilon_k = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \tag{13}$$

このとき、 ε_0 や電子の有効質量 m^* はどのように与えられるか。

- 3. 最後に、 $\Delta V(x) \neq 0$ で $V_{\rm ion}(x) \neq 0$ の場合を考える。これまでのように、k 空間でのシュレディンガー方程式から出発すると、x=0 にある不純物に捕らえられた電子の束縛エネルギー \bar{E}_0 が一般的に求められる。しかし、これまでの結果をよく考察すれば、次の 2 つの極限的な場合には \bar{E}_0 の値は予測できる。その予測値を記し、そのように予測した理由を書け。
 - (i) $\lambda \ll a$ 、且つ、 $\lambda_0 \ll a$ の場合。
 - (ii) $\lambda \ll a \ll \lambda_0$ の場合。

1. S 座標系と、それに対して x-軸方向に速度 v で運動している S' 座標系との間のローレンツ変換は

$$ct' = +\frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}ct - \frac{v/c}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}x$$

$$x' = -\frac{v/c}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}ct + \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}x$$

$$y' = y$$

$$z' = z$$

である。ただし、二つの座標系は t=t'=0 で完全に重なっていたとする。c は光の速度である。数学的には ローレンツ変換は世界間隔の2乗

$$s_{12}^2 = -(ct_2 - ct_1)^2 + (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2$$

を不変にする座標変換である。次の3つの条件からローレンツ変換を導け。

- ●世界間隔の2乗が不変である。
- ●座標系の相対性原理(等速運動している座標系は互いに同等である。)
- $\bullet v/c \ll 1$ の極限で座標変換はガリレオの座標変換

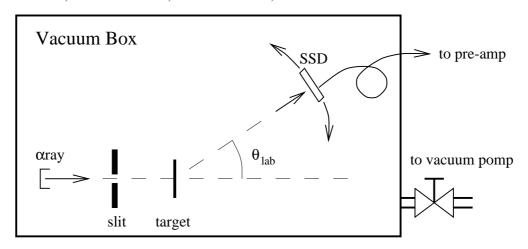
$$t' = t$$
 $x' = x - vt$ $y' = y$ $z' = z$

に一致する。

- 2. 光の速さに近い速度 v で走っている電車から振動数 vo の光がすべての方向に放射されている。電車の進行方 向側の線路上に立っている観測者が観測する光の振動数 ν₁ を求めよ。 また線路と直交している道路の無限遠方で観測したとき光の振動数 ν2 はいくらか?
- 3. 静止状態での長さが 500 m の電車が光の速さに近い速度で走っている。電車の進行方向に小さな山があり、そ のトンネルの長さは 400 m である。電車が光の速度の 4/5 の速さで等速運動しながらこのトンネルを通過す ることについて以下の問いに答えよ。
 - (i) 特殊相対論では自分の座標系に対して相対的に速度を持った物体の長さは短く観測される。これはローレ ンツ短縮と呼ばれている。静止時の物体の長さ(固有長さ)が ℓ_0 である物体が観測者の座標系で x・軸方向 に速度νで等速運動している。観測者が測定する長さℓを求めよ。
 - (ii) 電車がトンネルに入り、また出て行くのを近くの丘の上で A 君が観測することにした。A 君は、「ローレ ンツ短縮の効果で、先頭から後尾まで電車のすべてが完全にトンネル内に入ってしまい、電車が見えなく なるようなことが起こるはずだ。」と考えた。地面に静止した座標系では電車の長さは何 m と推定され るか?
 - (iii) 逆に電車に乗っている B 君は、「トンネルこそローレンツ短縮を受けて短くなるはずである。したがって どんな時刻においても、電車の先頭、後尾の少なくともどちらかはトンネル外にあるはずで、電車の全体 がトンネル内にあるようなことは起こり得ない。」と考えた。 B 君から見たトンネルの長さはいくらか?
 - (iv) 電車の後尾がトンネルに入る時刻を、A 君の時計で、 t_1 、B 君の時計で、 t_1' 、また先頭がトンネルから出 てくる時刻を A 君の時計で t_2 、B 君の時計で t_3 として、A 君と B 君の考え方の違いを比較検討し解説 せよ。

真空箱の中に, α 線源のポロニウム ($^{212}_{84}$ Po)、金 ($^{197}_{79}$ Au) の薄膜標的、スリット、シリコン半導体検出器 (SSD) を模 式図のように配置してラザフォード散乱実験を行なった。 α 粒子の運動エネルギーは、 T_{α} = 9 [MeV] であった。簡 単のために、標的の質量は α 粒子の質量にくらべて十分に大きく標的の反跳効果は無視できるものとする。なお、 α 粒子はヘリウムの原子核であり $^4 ext{He}^{2+}$ である。また、質量数 A の原子核の半径は、 $r=1.2\cdot A^{1/3} imes 10^{-15}$ [m] で 与えられる。必要に応じて次の数値を参照せよ。

$$N_A($$
アポガドロ数 $)=6\times10^{23}$ [個/mol], $\hbar c=200\times10^{-15}$ [MeV·m], $\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}=\frac{1}{137}$ $4^{\frac{1}{3}}=1.6$, $197^{\frac{1}{3}}=5.8$, $212^{\frac{1}{3}}=6.0$, $208^{\frac{1}{3}}=5.9$



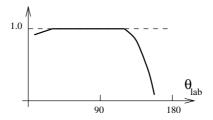
- 1. 実験を真空中で行なう理由を1行以内で述べよ。
- 212 Po は、 lpha 崩壊を起こし 鉛 208 Pb に変換する。鉛の核表面における lpha 粒子に対するクーロン障壁の大きさ を [MeV] 単位で求め、 α 崩壊のメカニズムを定性的に述べよ。
- 3. α 粒子が、前方 (例えば 30°) と後方 (例えば 150°) に散乱されたときのそれぞれの軌道を、衝突径数 b や最近 接距離 b_0 などの大小関係が判るように、一つの図の中に描け。ただし、散乱過程は古典力学的に取り扱うこ とができ、古典的軌道を描くことができるとする。また、軌道と b や b_0 の関係式や具体的な値を求める必要 はなく、定性的なことが判るように図示されていれば十分である。
- 4. 標的にスリットを通って入射する α 粒子数を I [個/秒]、金の原子数を N [個/ \mathbf{m}^2]、検出器の立体角を $\Delta\Omega$ [sr]、 微分散乱断面積を $(d\sigma/d\Omega)_R$ [m²/sr] とする。
 - (i) 計数率 Y [個/秒] を求める式を書き下せ。
 - (ii) 金薄膜の厚さは $1 [g/m^2]$ である。金の原子数を $[m^{-2}]$ の単位で求めよ。
 - (iii) 標的から検出器までの距離は $0.2\,[\mathrm{m}]$ 、また検出器の有感面積は $4\times10^{-4}\,[\mathrm{m}^2]$ であった。立体角を求めよ。
 - (iv) I が 10^8 [個/秒] のときに、散乱角度 60° に散乱した lpha 粒子を検出し、1% の統計精度の個数になるまで計 数したい。これに必要な測定時間をもとめよ。ただしlpha 粒子の検出効率は100% とする。ここで、点電 荷 Z_A によるラザフォード散乱は式

$$\Big(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\Big)_R = \Big(\frac{2Z_A e^2}{4\pi\varepsilon_0}\Big)^2 \frac{1}{T_\alpha^2 \cdot \sin^4\theta/2}$$

で与えられる。

5. 金の原子は79個の電子を持っているが、この電子がラザフォード散乱の角度分布に与える影響を議論せよ。

- 6. 標的をアルミニウム ($^{27}_{13}$ A ℓ) の薄膜に変えて測定を行ったところ下図の結果を得た。ここで、横軸は散乱角度 $(heta_{
 m lab})$ 、縦軸はラザフォード比と呼ばれる量であり、測定で得た微分散乱断面積 $({
 m d}\sigma/{
 m d}\Omega)_{exp}$ をラザフォード散 乱で予想される微分散乱断面積 $(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)_R$ で規格化したものである。
 - (i) 大きな散乱角度から小さな散乱角度に向かって測定を行ったところ、ラザフォード比の値がだんだんと1 からずれて小さくなった。
 - この原因として考えられることを、検出器の計数効率を考慮して簡潔に推論せよ。また、その様なことが 起こらないようにする実験的工夫を述べよ。
 - (ii) 最近接距離 b_0 が原子核の半径程度になると、原子核反応を引き起こす。図のなかのどこにその様なこと が現れているか。簡潔に説明せよ。



結晶中の各原子 (単位体積あたりの個数を n とする) に 1 個ずつ電子が存在し、隣り合った原子の間で電子が弱く相互作用している系がある。ある温度 $T=T_t$ で、この系は 1 次相転移を示し、 $T\geq T_t$ の相 (高温相) では、各原子に 1 個ずつ捕らえられた相互作用のない電子からなる系と同じ比熱と帯磁率を示した。 $T\leq T_t$ の相 (低温相) では、弱い原子間の相互作用が摂動となり電子がある小さな確率で原子間をとび移るために、比熱、帯磁率は縮退した自由電子ガスと同じ温度依存性を示した。しかし、その比熱の絶対値は、自由電子ガスの比熱の表式において、自由電子の質量 m_e をより大きな値 m^* (有効質量と呼ぶ) に置き換えたもので表された。十分低温のため、格子比熱、各相での熱膨張は無視できるものとして、次の間に答えよ。

1. 高温相の単位体積あたりの帯磁率、磁場中での比熱を求めよ。磁場 \vec{H} と電子との相互作用ハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = \sum_{i} 2\mu_{\rm B} \vec{H} \cdot \vec{S}_{i} \qquad \cdots (1)$$

で与えられるとする。ここで、 $\mu_{\rm B} \equiv e\hbar/2m_ec$ は電子のボーア磁子、 $\vec{S_i}$ は電子 i のスピン演算子を表す。

2. 低温相の単位体積あたりの比熱は、温度 T の最低次までで、

$$c_{\rm P} = \frac{k_{\rm B}^2 m^*}{3\hbar^2} \left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{\frac{1}{3}} T \qquad \cdots (2)$$

と与えられた $(k_B: \pi)$ ボルツマン定数)。式 (2) が温度に比例する理由を、有限温度のフェルミ分布関数を用いて定性的に説明せよ。

以下の設問では、磁場はかかっていないとし、前問で求めた両相の諸量の表式は転移点 T, まで使えるものとする。

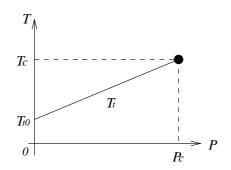
- 3. 上記の 1 次転移が起こるには、エントロピーの考察から、有効質量 m^* と相転移温度 T_t がどのような条件を満たさなければならないか?
- 4. いま、この電子系に圧力 P をかけたところ、相転移温度 T_t が上昇し、低温相の比熱より求まる有効質量 m^* が減少した (図参照)。有効質量および相転移温度の圧力依存性は、 m_0^* 、 T_{t0} を P=0 での有効質量、転移温度として、

$$m^* = m_0^* (1 + aP)^{-1}$$
 ... (3)

$$T_t = T_{t0}(1 + bP) \qquad \cdots (4)$$

(a>0,b>0) の実験式で与えられた。ある圧力 $P=P_c$ (臨界圧力) 以上で 1 次転移が消失するのは、a 、b が どのような条件を満たす場合か?

5. P_c 、および転移の消失する温度 $T = T_c$ (臨界温度) を、a、b、 m_0^* 、 T_{t0} を用いて表わせ。



一様密度 ρ_0 で非圧縮性の液滴を考えよう。液滴は、ある初期条件のもとでその内部に渦のない流れを生じ、時間 とともに形を変えていくものとする。

- 1. 液滴内部の速度分布を v(r,t) として、以下の問に答えよ。
 - (i) 連続の方程式を用いて、非圧縮性の条件をv(r,t)に対する式として表せ。また、流れに渦がないときに は、 $v = -\operatorname{grad} X$ となる速度ポテンシャル X(r,t) が存在してラプラスの方程式

$$\Delta \mathcal{X}(\mathbf{r},t) = 0$$
 ... (1)

を満たすことを示せ。

(ii) 上式の解は

$$X(\mathbf{r},t) = \sum_{\ell_{m}} a_{\ell m}(t) f_{\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi) \qquad \cdots (2)$$

と書ける。このとき、動径関数は

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right\} f_{\ell}(r) = 0 \qquad \cdots (3)$$

に従う。この方程式の液滴内部で正則な解は $f_\ell(r) = r^\ell$ であることを示せ。

その際、他の独立解は原点 (r=0) で正則でないことを確かめよ。

2. 液滴の重心から (θ, φ) 方向を見たとき、表面までの距離が

$$R(\theta, \varphi, t) = R_0 + q(t)Y_{20}(\theta, \varphi) \qquad \cdots (4)$$

と変動する場合を考える。以下では、変動の大きさ |q(t)| が R_0 に比べて十分に小さいものとする。

(i) 液滴表面までの距離は、内部から表面へ向かって液体が流れることによって変化する。そこで、

$$\frac{\partial}{\partial t}R(\theta,\varphi,t) = -\frac{\partial}{\partial r}X(r,\theta,\varphi,t)\Big|_{r=R} \qquad \cdots (5)$$

の関係が成り立つとして、速度ポテンシャル $\mathcal{X}(r,t)$ を $\dot{q}(t)$ (\equiv dq/dt) を用いて表せ。ただし、変形は微小 なので、右辺でr = Rを $r = R_0$ と近似して良いものとする。

- (ii) 液滴内部の速度分布 (v_x, v_y, v_z) を、 $Y_{20}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta 1)$ を使って求めよ。次に、液滴内部の全 運動エネルギーを計算せよ。ただし、積分は変形が小さいとして、半径 R_0 の球内で行なえば良い。
- (iii) 体積を保存した上記の変形にともない、液滴の表面積は球形のときより $2q^2(t)$ だけ増加することが知られ ている。液滴の表面張力を σ として、変形によるポテンシャル・エネルギーの変形を求めよ。
- 3. ここで、量子的サイズの液滴の運動を考えよう。
 - (i) 上記 2 の液滴の変形に伴うハミルトニアンは、お互いに正準共役な演算子 \hat{q} 、 \hat{p} を用いて

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \{ \hat{p}^2 + (M\omega \hat{q})^2 \}$$
 ... (6)

と表される。ここで、

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}(a_+ + a_-) \qquad \qquad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar M\omega}{2}}(a_+ - a_-) \qquad \qquad \cdots (7)$$

の関係にある演算子 a_+ および a_- (交換関係は $[a_-, a_+] = 1$) を導入すれば、そのハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hbar\omega(a_+ a_- + \frac{1}{2}) \qquad \cdots (8)$$

と書ける。M および ω を ρ_0, R_0, σ を用いて表せ。

(ii) ハイゼンベルク表示の演算子 $a_{-H}(t) \equiv e^{i\hat{H}t/\hbar}a_{-}e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ の運動方程式を考えて、

$$a_{-H}(t) = e^{-i\omega t}a_{-} \qquad \cdots (9)$$

が成り立つことを示せ。

(iii) 演算子 *a*_ の固有状態 |z₀⟩;

$$a_{-}|z_{0}\rangle = z_{0}|z_{0}\rangle,$$
 $z_{0} = i\sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}A_{0}$... (10)

を考える。 A_0 は実定数で、 R_0 に比べれば十分に小さい値であるとする。この $|z_0\rangle$ を初期状態とする状態 $|\psi(t)\rangle (=e^{-i\hat{H}t/\hbar}|z_0\rangle$ は、任意の時刻においてもやはり a_- の固有状態であることを示せ。また、その固有値 z(t) を求めよ。

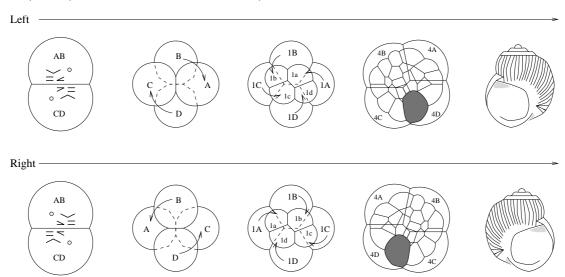
(iv) 状態 $|\psi(t)\rangle$ における \hat{q} および \hat{p} の期待値を求め、 A_0 が何を意味するかについて述べよ。また、 $A_0\to 0$ の とき、エネルギーの値がどうなるかを答えよ。

生物の身体はしばしば左右非対称性を示す。見かけ上対称な受精卵から発生する個体が非対称となる分子機構は まだほとんど理解されていない。しかし、ある巻き貝(Limneae)が右巻き型になるか左巻き型になるかは一つの遺 伝子の2種の対立遺伝子(S:左巻き型、s:右巻き型)で決まることが知られている。

下に説明する実験(1)と実験(2)の結論をよく読んで、下記の3つの問に答えなさい。

実験(1)

右巻き型と左巻き型の発生における左右非対称性は、下図に描かれているように、第2回目の細胞分裂に始 まり、それ以後の発生は鏡像対称的に進行する。第2分裂の頃にはまだ受精卵の染色体からのメッセンジャー RNA (mRNA) の合成は全く行われていない。(図中の ABC などは分裂した細胞につけられた名前である)



実験(2)

- 1) 純系右巻き (s/s) の雄個体と純系左巻き (S/S) 雌個体との交配をしたら、その第1世代 (F1) は全個体が左巻き であった。
- 2) その F1 雌雄を交配してできた第2世代 (F2) は全個体が左巻きであった。
- 3) その F2 雌雄を交配してできた第3世代 (F3) には右巻きと左巻きの個体が混在し、その比はおよそ 1:3 で あった。
- 1. 実験(2)の結果は、明確な遺伝現象ではあるがメンデルの法則にはあわない変則的なもののように見える。し かし実験(1)の結果を吟味して考えると、メンデルの法則で完全に理解できることを説明せよ。
- 2. 実験(2)とは逆に、純系左巻き(S/S)雄と純系右巻き(s/s)雌とを交配した場合、そのF1、F2、F3個体の巻き 方はどのようになるかを推論しなさい。
- 3. 非対称性生成の分子機構を明らかにするためには、この遺伝子の産物 (メッセンジャー RNA および蛋白質) に ついてどのような研究をするべきかを箇条書きにして論じ、S遺伝子産物の働きについてどのような可能性が あるかを論じなさい。

1. 蛋白質は熱や酸によりこわれた天然状態から変性状態に変る。この構造変化について蛋白質の熱力学を考えよう。

蛋白質の安定性は上記 2 つの状態の自由エネルギー差を用いて議論され、通常記号 ΔG^u ($G^{\overline{Q}}$ $G^{\overline{Q}}$) で表される。 ΔG^u は熱の出入りを表すエンタルピー ΔH^u と分子の無秩序を表すエントロピー ΔS^u の 2 項を用いて次の式で表現される。

$$\Delta G^{u} = \Delta H^{u} - T \Delta S^{u} \qquad \cdots (1)$$

ところで、 ΔG^u 、 ΔS^u の温度依存性は以下のようにカロリメトリー測定より求まる。

$$\Delta H^{u} = \Delta H_{m} + \int_{T_{m}}^{T} \Delta C_{p} dT = \boxed{\qquad a \qquad \qquad } \cdots (2)$$

$$\Delta S^{u} = \frac{\Delta H_{m}}{T_{m}} + \int_{T_{m}}^{T} \Delta C_{p} d(\ln T) = \boxed{b}$$
... (3)

ここで、 T_m と ΔH_m は変性中点の温度 (変性温度) と変性の潛熱である。また、 ΔC_p は 2 つの状態の比熱の差で温度によらない定数とする。式 (1),(2),(3) より、 ΔG^u の温度依存性は最終的に下の式で与えられる。

$$\Lambda G^u = \boxed{^c}$$

2. 蛋白質の一つであるリゾチームのカロリメトリー測定から pH7 で以下の値が得られた。

 $\Delta H_m = 100 \text{ kcal/mol}, \quad \Delta C_p = 2.3 \text{ kcal/mol} \cdot \text{K}, \quad T_m = 57^{\circ}\text{C}$

この値をもとに ΔG^u , ΔH^u , ΔS^u の温度変化を図示せよ。

この図よりリゾチームの最安定状態の温度 d を導け。またこの温度で $\Delta S^u = 0$ となることを導け。

3. 物質は低温で安定だが、蛋白質は高温のみならず低温で不安定となる(低温変性)。この理由について考察しよう。

 ΔG^u , ΔH^u , ΔS^u は無水状態 (真空中) の純粋に蛋白質構造の寄与 (添字を c で表す) と蛋白質と水との相互作用の項 (水和エネルギー、添字を h で表す) の 2 項に分解される。

$$\Delta G^{u} = \Delta G_{c}^{u} + \Delta G_{b}^{u} \qquad \cdots (4)$$

$$\Delta H^u = \Delta H_c^u + \Delta H_h^u \qquad \cdots (5)$$

$$\Delta S^{u} = \Delta S_{c}^{u} + \Delta S_{b}^{u} \qquad \cdots (6)$$

このうち蛋白質構造由来の項 ΔH_c^u , ΔS_c^u の温度依存性は小さい。この値を一定と考えると、 $\Delta G_c^u=0$ となる温度、すなわち真空中の変性温度は一点で定まり、低温変性はあり得ない。たとえば、 $\Delta H_c^u=870$ kcal/mol, $\Delta S_c^u=1700$ kcal/mol·K のとき真空中の変性温度は と見積もられる。水中では 2 の問題に見られるように $\Delta G^u=0$ となる点が 2 つある。従ってこれは ΔH_c^u , ΔS_c^u ではなく ΔH_h^u , ΔS_h^u の水和エネルギーにその起源があると考えなければならない。

4. 水との相互作用エネルギー(水和エネルギー)は以下で与えられる。

$$\Delta H_h^u = \Delta H_h^u(T_0) + \int_{T_0}^T \Delta C_p dT \qquad \cdots (7)$$

$$\Delta S_h^u = \Delta S_h^u(T_0) + \int_{T_0}^T \Delta C_p d(\ln T)$$
 (8)

ここでは T_0 は基準温度、例えば25℃。

$$\Delta H_h^u(T_0) = h_1(A_1^D - A_1^N) + h_2(A_2^D - A_2^N)$$
 ··· (9)

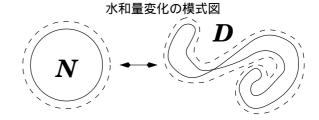
$$\Delta S_h^u(T_0) = s_1(A_1^D - A_1^N) + s_2(A_2^D - A_2^N)$$
 ··· (10)

$$\Delta G_h^u(T_0) = g_1(A_1^D - A_1^N) + g_2(A_2^D - A_2^N)$$
 ··· (11)

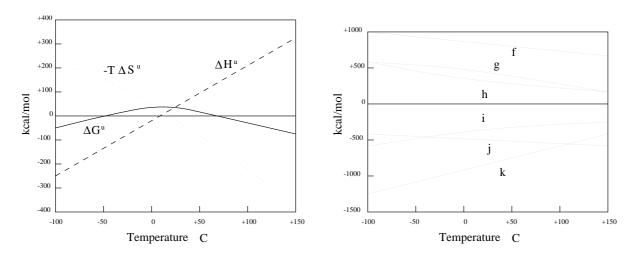
ここで $h_1,\,s_1,\,g_1$ は極性基のそして $h_2,\,s_2,\,g_2$ は非極性基の水和の熱力学パラメータである。 $A_1^D,\,A_1^N$ はそれぞれ水と接する極性基の変性状態と天然状態における総数である。非極性基も同様に定義する。

水和の熱エネルギーは表のように与えられる。

水和の刀字的ハフメーター			
	h	S	g
基	(kcal/mol)	$(cal/mol \cdot K)$	(kcal/mol)
極性基	-20	-40	-8
非極性基	-13	-40	-1



式 (9) ~ (11) と上表を用いると水和に伴う、各熱力学量は蛋白質の構造変化 (上図参照) が分かると自動的に求まる。まず $\Delta G_h^u(T_0)$, $\Delta S_h^u(T_0)$ が求まる。次に実験量 ΔC_p を用いて式 (7),(8) より温度変化がわかる。その結果が次の図に与えられている。



式 (4) ~ (6) の右辺に表れた 6 個の熱力学量が上の右の図の中の曲線のどれに対応するか示せ。ただし上図では $\Delta S^u_c, \Delta S^u_h(T_0)$ は $-T\Delta S^u_c, -T\Delta S^u_h(T_0)$ の形で表示されている。

5. 以上の考察から低温変性の起源について論ぜよ。

専攻問題1解答

1. (i) この系では換算質量が $m=\frac{m_e m_h}{m_e+m_h}$ 、電荷が $e^2 \to \frac{e^2}{\varepsilon}$ と置き換えられるので、Rydberg 定数は、

$$R_{\rm y} = \frac{m_e m_h e^4}{2\hbar^2 (m_e + m_h)} \frac{1}{\varepsilon^2}$$

と変更される。よって最低エネルギーは、

$$E_1 = -R_y = -\frac{m_e m_h e^4}{(m_e + m_h) 2\varepsilon^2 \hbar^2}$$

である。ついでに Bohr 半径 a は

$$a = \frac{\hbar^2 \varepsilon (m_e + m_h)}{m_e m_h e^2}$$

と変更される。以後この表式での R_y とaを用いる。

(ii) 1s 状態での r の期待値 ⟨r⟩ は

$$\langle r \rangle = \langle 1s|\hat{r}|1s \rangle = \int d\vec{r} \ \psi_{1s}^*(\vec{r}) \ r \psi_{1s}(\vec{r}) = \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\theta \ r^2 \sin\theta \cdot r \big| R_{10}(r) Y_{00}(\theta, \varphi) \big|^2$$

球面調和関数 Y_{00} は球面積分に対して規格化されているので

$$\int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \theta |Y_{00}(\theta, \varphi)|^2 = 1$$

である。先の積分を続けると、

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty dr \ r^3 \left[\frac{2}{\sqrt{a^3}} \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \right]^2 = \frac{a}{4} \int_0^\infty d\left(\frac{2r}{a}\right) \left(\frac{2r}{a}\right)^3 \exp\left(-\frac{2r}{a}\right) = \frac{a}{4} 3! = \frac{3a}{2}$$

となる。

2. (i) ハミルトニアンの摂動項を $\mathcal{H}' \equiv -\lambda \delta^3(\vec{r})$ で表すことにする。 $4\pi r^2 \delta^3(\vec{r}) = \delta(r)$ であることに注意する。 1s 状態のエネルギーの 1 次摂動 $E_{1s}^{(1)}$ は

$$\begin{split} E_{1s}^{(1)} &= \langle 1s|\mathcal{H}'|1s\rangle = -\lambda \int \! \mathrm{d}\vec{r} \; \psi_{1s}^{*(0)}(\vec{r}) \delta^3(\vec{r}) \psi_{1s}^{(0)}(\vec{r}) \\ &= -\lambda \int_0^\infty \! \mathrm{d}r \; r^2 \frac{\delta(r)}{4\pi r^2} |R_{10}(r)|^2 \int_0^\pi \! \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \! \mathrm{d}\varphi \; \sin\theta \, |Y_{00}(\theta,\varphi)|^2 = -\frac{\lambda}{4\pi} |R_{10}(0)|^2 = -\frac{\lambda}{a^3\pi} \end{split}$$

同様に 2s 状態のエネルギーの 1 次摂動 $E_{2s}^{(1)}$ は

$$E_{2s}^{(1)} = \langle 2s|\mathcal{H}'|2s\rangle = -\frac{\lambda}{4\pi}|R_{20}(0)|^2 = -\frac{\lambda}{8a^3\pi}$$

となる。2p の各状態の 1 次摂動は $R_{21}(0) = 0$ なので

$$E_{2p}^{(1)}=0$$

(ii) 1s 状態が 2s または 2p 状態に遷移する状況を考えるので、1 次摂動まで考慮した ψ_{1s} は

$$\psi_{1s} = \psi_{1s}^{(0)} + \sum_{i} c_i \psi_i^{(0)}$$
 $i = \{2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z\}$

と表される。この係数 c_i は次の通り。

$$c_{i} = \frac{\langle i | \mathcal{H}' | 1s \rangle}{E_{1}^{(0)} - E_{i}^{(0)}} = \frac{\langle i | \mathcal{H}' | 1s \rangle}{E_{1}^{(0)} - E_{2}^{(0)}} = \frac{\langle i | \mathcal{H}' | 1s \rangle}{-R_{y} + R_{y}/4} = -\frac{4}{3R_{y}} \langle i | \mathcal{H}' | 1s \rangle$$

2p の各状態の c_i は、 $\mathcal{H}' = -\lambda \delta^3(\vec{r})$ 、 $R_{21}(0) = 0$ を考慮すると 0 であることがわかる。2s の状態の c_i の み 0 でない値をもつ。

$$\begin{split} c_{2\mathrm{s}} &= \frac{4\lambda}{3R_{\mathrm{y}}} \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}r \ r^{2} \frac{\delta(r)}{4\pi r^{2}} R_{20}(r) R_{10}(r) \int_{0}^{\pi} \mathrm{d}\theta \int_{0}^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \ \sin\theta \, |Y_{00}(\theta,\varphi)|^{2} \\ &= \frac{4\lambda}{3R_{\mathrm{y}}} \cdot \frac{1}{4\pi} \cdot R_{20}(0) R_{10}(0) = \frac{\lambda}{3\pi R_{\mathrm{y}}} \cdot \frac{2}{\sqrt{8a^{3}}} \cdot \frac{2}{\sqrt{a^{3}}} = \frac{\sqrt{2}\lambda}{3\pi a^{3}R_{\mathrm{y}}} \end{split}$$

よって

$$\psi_{1s}(\vec{r}) = \psi_{1s}^{(0)}(\vec{r}) + \frac{\sqrt{2}\lambda}{3\pi a^3 R_{\rm v}} \psi_{2s}^{(0)}(\vec{r})$$

である。中心 $(\vec{r}=0)$ における電子密度は

$$|\psi_{1s}(0)|^2 \simeq |\psi_{1s}^{(0)}(0)|^2 + \frac{2\sqrt{2}\lambda}{3\pi a^3 R_{\rm y}} \psi_{2s}^{*(0)}(0) \psi_{1s}^{(0)}(0) = \frac{2}{a^3} \left(1 + \frac{2\lambda}{3a^3\pi R_{\rm y}}\right)$$

となり、 $\lambda = 0$ にくらべて()で囲んだ係数だけ密度が高くなっている。

- (iii) ポテンシャルが深くなって電子がより集まったから。
- 3. (i) エネルギー E の定常状態の波動関数の時間依存性は $e^{-iEt/\hbar}$ であるので、式 (10) は次のように時間発展する。ただし $t_0=0$ としている。

$$\psi(\vec{r}\,,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(\psi_{100}(\vec{r}\,) \cdot e^{-iE_1t/\hbar} + \psi_{200}(\vec{r}\,) \cdot e^{-iE_2t/\hbar} \Big)$$

 ψ_{100},ψ_{200} は実数なので $\psi(\vec{r},t)$ の複素共役は

$$\psi^*(\vec{r},t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Big(\psi_{100}(\vec{r}) \cdot e^{+iE_1 t/\hbar} + \psi_{200}(\vec{r}) \cdot e^{+iE_2 t/\hbar} \Big)$$

となるので確率密度は

$$\begin{split} |\psi(\vec{r},t)|^2 &= \frac{1}{2} \Big(|\psi_{100}|^2 + |\psi_{200}|^2 + \psi_{100} \psi_{200} \cdot e^{+i(E_1 - E_2)t/\hbar} + \psi_{200} \psi_{100} \cdot e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} \Big) \\ &= \frac{1}{2} \Big(|\psi_{100}|^2 + |\psi_{200}|^2 + 2\psi_{100} \psi_{200} \cdot \cos \frac{E_1 - E_2}{\hbar} t \Big) \end{split}$$

よって時間の周期関数である。その周期 T は、

$$T = \frac{2\pi\hbar}{E_2 - E_1} = \frac{8\pi\hbar}{3R_{\rm w}}$$

(ii) 式 (10) で表される状態を測定して ψ_{100} を見出す確率 P_1 は

$$P_1 = \left| \int \! d\vec{r} \ \psi_{100}^* \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{100}(\vec{r}) + \psi_{200}(\vec{r})] \right|^2 = \frac{1}{2}$$

この時、電子のエネルギーは E_1 である。 ψ_{200} を見出す確率 P_2 も同じである。 よって電子のエネルギーの平均値 $\langle E \rangle$ は

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2}(E_1 + E_2)$$

(iii) N 回の測定でエネルギー E_1 を n 回測定し、 E_2 を N-n 回測定する確率 P(n) は、

$$P(n) = \left(\frac{1}{2}\right)^n \left(\frac{1}{2}\right)^{N-n} {}_{N}C_n = \frac{{}_{N}C_n}{2^N}$$

である。次に $\Delta E \equiv (E_2-E_1)/2 = 3R_y/8$ と定義して $E_1 = \langle E \rangle - \Delta E$ 、 $E_2 = \langle E \rangle + \Delta E$ と表すことにする。N 回の測定でのエネルギーの平均値 $\bar{\epsilon}_N$ は

$$\bar{\varepsilon}_N = \frac{E_1 n + E_2 (N - n)}{N} = \langle E \rangle + \frac{\Delta E}{N} (2n - N)$$

となる。よって $\langle \delta^2 \rangle$ は

$$\langle \delta^2 \rangle = \langle (\bar{\varepsilon}_N - \langle E \rangle)^2 \rangle = \sum_{n=0}^N (\bar{\varepsilon}_N - \langle E \rangle)^2 P(n) = \sum_{n=0}^N \frac{\Delta E^2}{N^2} (2n - N)^2 \frac{{}^{N}C_n}{2^N}$$
$$= \frac{\Delta E^2}{2^N N^2} \left[4 \sum_{n=0}^N n^2 {}_{N}C_n - 4N \sum_{n=0}^N n_{N}C_n + N^2 \sum_{n=0}^N {}_{N}C_n \right]$$

ここで NCn の種々の公式

$$n_N C_n = N_{N-1} C_{n-1}$$
 $n^2 N C_n = N(N-1)_{N-2} C_{n-2} + N_{N-1} C_{n-1}$ $\sum_{n=0}^{N} N C_n = 2^N$

を思い出して計算を進めると、

$$\begin{split} \langle \delta^2 \rangle &= \frac{\Delta E^2}{2^N N^2} \Big[4N(N-1) \sum_{n=0}^N {}_{N-2} C_{n-2} + 4N \sum_{n=0}^N {}_{N-1} C_{n-1} - 4N^2 \sum_{n=0}^N {}_{N-1} C_{n-1} + N^2 \sum_{n=0}^N {}_{N} C_n \Big] \\ &= \frac{\Delta E^2}{2^N N^2} \Big[4N(N-1) 2^{N-2} + 4N 2^{N-1} - 4N^2 2^{N-1} + N^2 2^N \Big] \\ &= \frac{\Delta E^2}{N^2} \Big[N^2 - N + 2N - 2N^2 + N^2 \Big] \\ &= \frac{\Delta E^2}{N} = \frac{1}{N} \Big(\frac{3R_y}{8} \Big)^2 \end{split}$$

となる。確かに $N \to \infty$ で $\langle \delta^2 \rangle \to 0$ となる。

専攻問題2解答

1. (i) ΔV のポテンシャル中のエネルギー E_0 の電子の Schrödinger 方程式は以下の通り。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi_0(x) - \frac{\hbar^2}{m\lambda_0}\delta(x)\phi_0(x) = E_0\phi_0(x)$$
 ... (1)

(ii) 式 (1) の各項の $\phi_0(x)$ に式 (1) を代入すると、

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} e^{-ikx} \phi_0(k) - \frac{\hbar^2}{m\lambda_0} \delta(x) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} e^{-ikx} \phi_0(k) = E_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} e^{-ikx} \phi_0(k)$$

各項に $e^{ik'x}$ をかけてxで積分すると

[第 1 項]
$$\Longrightarrow$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \, \frac{\hbar^2 k^2}{2m} e^{-i(k-k')x} \phi_0(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \delta(k-k') \phi_0(k) = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \phi_0(k')$$

[第 2 項]
$$\Longrightarrow \frac{\hbar^2}{m\lambda_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, \delta(x) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \, e^{-i(k-k')x} \phi_0(k) = \frac{\hbar^2}{m\lambda_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \, \phi_0(k)$$

[第 3 項]
$$\Longrightarrow E_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} e^{-i(k-k')x} \phi_0(k) = E_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}k}{\delta(k-k')} \phi_0(k) = E_0 \phi_0(k')$$

よって式(1)の全体のこの計算の結果は

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \phi_0(k') - \frac{\hbar^2}{m\lambda_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \, \phi_0(k) = E_0 \phi_0(k')$$

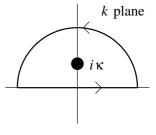
k, k' の記号を入れ換えることで式 (2) が示される。

(iii) 式 (2) で $E_0 = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$ とおいて整理することにより次式を得る。

$$\phi_0(k) = \frac{2m}{\hbar^2(k^2 + \kappa^2)} \cdot \frac{\hbar^2}{m\lambda_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \!\!\! \frac{\mathrm{d}k'}{2\pi} \, \phi_0(k')$$

ここで式 (4) の定義で C_0 を用いると式 (3) となる。式 (4) の $\phi_0(x)$ に式 (3) を代入して、 $C_0 \neq 0$ であるので C_0 で割って整理すると

$$\lambda_0 \pi = \int_{-\infty}^{+\infty} dk \, \frac{1}{k^2 + \kappa^2}$$



この積分は右図の経路の複素積分に拡張することができる。よって留数定理により

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk \, \frac{1}{k^2 + \kappa^2} = \oint_{-\infty} dk \, \frac{1}{k^2 + \kappa^2} = 2\pi i \lim_{k \to +i\kappa} (k - i\kappa) \frac{1}{k^2 + \kappa^2} = \frac{\pi}{\kappa}$$

となるので結局

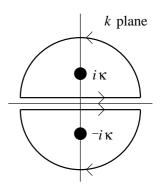
$$\kappa = \frac{1}{\lambda_0} \qquad \qquad E_0 = -\frac{\hbar^2}{2m\lambda_0^2}$$

であることがわかる。

(iv) 式 (1) の $\phi_0(x)$ に式 (3) を代入すると

$$\phi_0(x) = \frac{C_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \, \frac{e^{-ikx}}{k^2 + \kappa^2}$$

この積分は x の正負によって右図のように 2 種の経路の複素積分に 拡張することができる。よって留数定理により



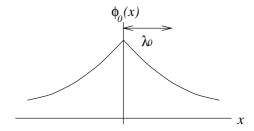
$$(x \ge 0$$
 の場合)
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}k \, \frac{e^{-ikx}}{k^2 + \kappa^2} = \oint_{\mathbb{R}^2} \mathrm{d}k \frac{e^{-ikx}}{k^2 + \kappa^2} = -2\pi i \lim_{k \to -i\kappa} (k + i\kappa) \frac{e^{-ikx}}{k^2 + \kappa^2} = \pi \frac{e^{-\kappa x}}{\kappa}$$

$$(x < 0$$
 の場合)
$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk \, \frac{e^{-ikx}}{k^2 + \kappa^2} = \oint_{r \cap \infty} dk \frac{e^{-ikx}}{k^2 + \kappa^2} = +2\pi i \lim_{k \to +i\kappa} (k - i\kappa) \frac{e^{-ikx}}{k^2 + \kappa^2} = \pi \frac{e^{+\kappa x}}{\kappa}$$

となるので結局

$$\phi_0(x) = \frac{C_0}{2\kappa} e^{-\kappa|x|} = \frac{C_0 \lambda_0}{2} e^{-\frac{|x|}{\lambda_0}}$$

が得られる。 λ_0 は波動関数の広がりの程度を表していることがわかる。



2. (i) Schrödinger 方程式は式(1)と同様に、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\phi(x) - \frac{\hbar^2}{m\lambda}\sum_n \delta(x - na)\phi(x) = \varepsilon\phi(x) \qquad \cdots (2)$$

である。設問 ${f 1}(ii)$ と同様にフーリエ変換を代入して $e^{ik'x}$ をかけて x で積分する。ここで式 (2) の左辺第 2 項についてのこの計算に注目する。

[第 2 項]
$$\Longrightarrow \frac{\hbar^2}{m\lambda} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ik'x} \sum_{n} \delta(x-na) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-ikx} \phi(k) = \frac{\hbar^2}{m\lambda} \sum_{n} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-i(k-k')na} \phi(k)$$

ここで式(7)のヒントにより、

よって式(2)の全体のこの計算の結果は、

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \phi(k') - \frac{\hbar^2}{m \lambda a} \sum_n \phi(k' - \frac{2\pi}{a} n) = \varepsilon \phi(k')$$

k, k' の記号を入れ換えることで式(6)が示される。

(ii) ϕ を式 (8),(9) から消去して $C_k \neq 0$ より

$$1 = \frac{2}{\lambda a} \sum_{n} \frac{1}{(k - \frac{2\pi}{a}n)^2 + \kappa^2} = \frac{1}{\lambda \pi \kappa} \sum_{n} \frac{(a\kappa/2\pi)}{(n - (ak/2\pi))^2 + (a\kappa/2\pi)^2}$$

を得る。この式は式(11)のヒントにより、

$$1 = \frac{1}{\lambda \kappa} \frac{\sinh{(a\kappa)}}{\cosh{(a\kappa)} - \cos{(ak)}}$$

となる。これより式(10)が導かれる。

(iii) 設問 $\bf 1$ と同様に $\kappa \sim 1/\lambda$ と仮定すれば $\lambda \ll a$ の条件は $1 \sim \lambda \kappa \ll a \kappa$ となる。この条件のもとで式 (10) を 近似すると

$$\cos(ak) = \frac{e^{a\kappa} + e^{-a\kappa}}{2} - \frac{1}{\lambda\kappa} \frac{e^{a\kappa} - e^{-a\kappa}}{2} \sim \frac{e^{a\kappa}}{2} \left(1 - \frac{1}{\kappa\lambda} \right)$$

$$\therefore \quad \kappa \sim \frac{1}{\lambda} \cdot \frac{1}{1 - 2e^{-a\kappa}\cos(ak)} \sim \frac{1}{\lambda} (1 + 2e^{-a\kappa}\cos(ak))$$

この κ を再び $e^{-a\kappa}$ の κ に代入することで

$$\kappa \sim \frac{1}{\lambda} [1 + 2e^{-\frac{a}{\lambda}} \cos{(ak)}]$$

が得られ式(12)が示された。

(iv) ε_k は

$$\varepsilon_k = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m\lambda^2} [1 + 2e^{-\frac{a}{\lambda}} \cos{(ak)}]^2$$

である。 $ak \ll 1$ の条件でこれを ak の 2 次まで展開すると、

$$\begin{split} \varepsilon_{k} &\sim -\frac{\hbar^{2}}{2m\lambda^{2}} \big[1 + 2e^{-\frac{a}{\lambda}} (1 - \frac{(ak)^{2}}{2}) \big]^{2} \\ &= -\frac{\hbar^{2}}{2m\lambda^{2}} \big[(1 + 2e^{-\frac{a}{\lambda}}) - e^{-\frac{a}{\lambda}} a^{2} k^{2} \big]^{2} \\ &\sim -\frac{\hbar^{2} (1 + 2e^{-\frac{a}{\lambda}})^{2}}{2m\lambda^{2}} + \frac{\hbar^{2} k^{2} (1 + 2e^{-\frac{a}{\lambda}}) e^{-\frac{a}{\lambda}} a^{2}}{m\lambda^{2}} \end{split}$$

よって式 (13) の形で ε_k が表され、

$$\varepsilon_0 = -\frac{\hbar^2 (1 + 2e^{-\frac{a}{\lambda}})^2}{2m\lambda^2} \qquad m^* = \frac{m\lambda^2 e^{\frac{a}{\lambda}}}{2a^2 (1 + 2e^{-\frac{a}{\lambda}})}$$

と表される。

3. (i) λ_0 や λ は電子の広がりを表していると思われる。それが格子間隔よりもずっと小さいので、不純物原子にとらえられた電子は x=0 に局在している。よってその電子の振舞いは設問 1 で求めた状況とほぼ同じである。ただしポテンシャルは不純物によるものと結晶の x=a 付近のものによるものの和である。すなわち、

$$V_{\rm ion}(x) + \Delta V(x) = -\frac{\hbar^2}{m\lambda}\delta(x) - \frac{\hbar^2}{m\lambda_0}\delta(x) = -\frac{\hbar^2}{m\lambda^*}\delta(x) \qquad \text{where} \quad \frac{1}{\lambda^*} = \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda_0}$$

よって電子のエネルギーは \bar{E}_0 は設問 $\mathbf{1}(iii)$ を参考にして

$$\bar{E}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m\lambda^{*2}}$$

となる。

(ii) 電子は前問同様に x=0 の原子に局在しているが、不純物のポテンシャルは結晶のそれにくらべて十分小さいので無視できる。よって電子の振舞いは設問 1 で求めた状況とほぼ同じである。ただしポテンシャルは結晶の x=a 付近のものである。よってエネルギーは \bar{E}_0 は設問 1(iii) を参考にして

$$\bar{E}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m\lambda^2}$$

となる。

専攻問題3解答

1. 時間空間の一様性より変換は1次変換とおける。それゆえ

$$x' = C c t + D x$$
 \tag{2}

「世界間隔の 2 乗が不変」より、 $-(ct')^2+x'^2=-(ct)^2+x^2$ であり、これに式 (1),(2) を代入して、各係数を比較することにより

$$A^2 - C^2 = 1$$
 $D^2 - B^2 = 1$ $AB = CD$

$$\therefore A = D = \cosh \theta \qquad C = B = \sinh \theta \qquad \cdots (3)$$

とおける。ただし $\theta=\theta(v)$ である。A と D の符号の関係は、 θ が 0 のとき A=D になることから上のように決まる。いま、S' 系が S 系に対し x 軸正方向に速度 v で動いている。このことより、S' 系の x'=0 の点は S 系では、x=vt であるので、x,t に依らない定数 y=y(v) を用いて

$$x' = \gamma(x - vt) \qquad \cdots (4)$$

とかける。式 (3) を式 (2) に代入して、式 (4) と比較すると

$$\tanh \theta = -\frac{v}{c}$$

従って

$$\cosh \theta = \frac{\pm 1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \qquad \sinh \theta = \frac{\mp v/c}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} \qquad \cdots (5)$$

v = 0 で (1) は x' = x になることから式 (5) の符号は上側になる。結局、式 (1),(2) は

$$ct' = \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} ct - \frac{(v/c)}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} x$$
$$x' = -\frac{(v/c)}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} ct + \frac{1}{\sqrt{1 - (v/c)^2}} x$$

となり求める変換がえられた。

2. S'系で等方に広がる波

$$\psi' = \exp\left[ik'(\sqrt{x'^2 + y'^2 + z'^2} - ct')\right]$$
 ... (6)

を考える。但し k' は S' 系から見た波数で、 $k' = 2\pi\nu_0/c$ である。

光源の前方 x'>0, y'=0, z'=0 で観測すると、 $\psi'=\exp[ik'(x'-ct')]$ である。これに設問 1 のローレンツ変換を行うと S 系では

$$\psi = \exp\left[ik'\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}(1+\beta)(x-ct)\right]$$

ただし $\beta = v/c$ である。[] の中の t の係数は、観測される振動数 v_1 を用いて $2\pi i v_1$ である。よって

$$v_1 = \frac{1+\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} \frac{ck'}{2\pi} = \sqrt{\frac{c+v}{c-v}} v_0$$

次に光源が原点を通過するとき、y 軸上の正の無限遠方で観測する。このとき x = x' = 0, z = z' = 0 であるので $\psi' = \exp[ik'(y' - ct')]$ である。これに設問 $\mathbf{1}$ のローレンツ変換を行うと S 系では

$$\psi = \exp\left[ik'\left(y - \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}ct\right)\right]$$

同様に、t の係数 = $2\pi i \nu_2$ として

$$v_2 = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \frac{ck'}{2\pi} = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} v_0$$

3. (i) 棒の両端 A、B を $x_{A}' = 0$, $x_{B}' = \ell$ とする。また、ローレンツ変換より

$$x_{A}' = -\frac{\beta}{\sqrt{1 - \beta^2}} ct + \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} x_{A} \qquad \cdots (7)$$

$$x_{B}' = -\frac{\beta}{\sqrt{1 - \beta^2}} ct + \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} x_{B} \qquad \cdots (8)$$

S 系からみた棒の長さとは、同じ t でみた $x_{\rm A}$ と $x_{\rm B}$ の間隔だから、式 (8) から式 (7) を引いて

$$x_{\rm B}' - x_{\rm A}' = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} (x_{\rm B} - x_{\rm A})$$

ここで $x_{B'} - x_{A'} = \ell$ だから、

$$x_{\rm B} - x_{\rm A} = \ell \sqrt{1 - \beta^2}$$

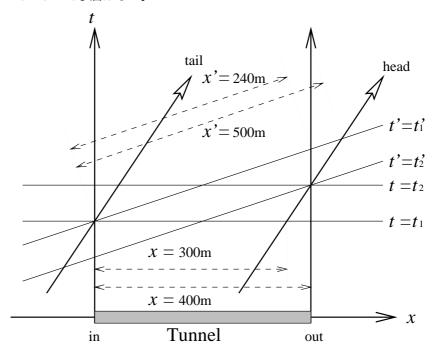
(ii)

$$500 \times \sqrt{1 - \left(\frac{4}{5}\right)^2} = 500 \times \frac{3}{5} = 300 [\text{m}]$$
 答え

(iii)

$$400 \times \frac{3}{5} = 240 [m]$$
 答え

(iv) ミンコフスキー時空で両者の関係を図示すると下図のようになる。図から明らかなように t_1, t_2 と t_1', t_2' の 関係は逆になっているので矛盾はない。



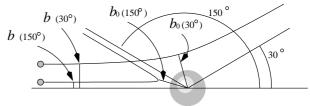
専攻問題4解答

- 1. 空気のせいで α 粒子の beam 強度が落ちる。
- 2. $^{208}_{89}$ Pb の核半径 r は $r = 1.2 \cdot 208^{1/3} \times 10^{-15}$ [m] = 7.08×10^{-15} [m]。 Coulomb potential は

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}\hbar c \frac{Z_{\alpha}Z_{\rm Pb}}{r} = \frac{1}{137} \times 200 \times 10^{-15} \, [{\rm MeV \cdot m}] \times \frac{2 \cdot 82}{7.08 \times 10^{-15} \, [{\rm m}]} = 33.8 \, [{\rm MeV}] \simeq 34 \, [{\rm MeV}]$$

lpha 粒子内の 4 つの核子間の結合エネルギーの埋め合わせとして得られる運動エネルギーにより、トンネル効果 を

起こして 34[MeV] の Coulomb 障壁を通り抜ける。 透過後は 9[MeV] の運動エネルギーを持つ。



- 3. $b_0(150^\circ) < b_0(30^\circ)$ であり、軌道は双曲線で対称で、 衝突径数は保存される。右図の通りである。
- 4. (i) スリットの断面積を $S[m^2]$ と表せば、 $d\sigma[m^2]$

の断面積内から来る粒子の流量は $I\mathrm{d}\sigma/S$ [個/秒] である。それが一つの原子核により散乱されて $\mathrm{d}\Omega$ [sr] の角度に広がる。他の NS 個の原子核からの散乱もこの角度に入るため、流量は NS 倍になる。よって $\Delta\Omega$ [sr] の角度に入る流量 Y [個/秒] は

$$Y = \frac{I d\sigma}{S} \cdot NS \cdot \frac{\Delta \Omega}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R NI \Delta \Omega$$

(ii) 6×10^{23} [個] が 197 [g] にあるので、1 [m²] の 1 [g] 中の個数、すなわち数密度 N は

$$N = 6 \times 10^{23}/197 = 3.05 \times 10^{21} \text{ [} \text{\mathbb{B}/m}^2\text{]}$$

(iii) 立体角とは、それが半径 1 [m] の球面上に張る面積である。

$$\Delta\Omega = 4 \times 10^{-4} \times (\frac{1}{0.2})^2 = 0.01 [sr]$$

(iv) α 粒子の生成は確率的なので、その計測数 C [個] はポアッソン分布あるいはガウス分布となる。よってその標準偏差は \sqrt{C} で与えられ、これが測定値の統計誤差となる。この誤差が 0.01 となるためには

これだけの α 粒子を測定しなければならない。

次に散乱角度 60° での計数率 Y を計算する。与えられたラザフォード散乱の公式より

$$\left(\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}\right)_{R} = \left(\frac{1}{137} \cdot 200 \times 10^{-15} \,[\mathrm{MeV}] \cdot 2 \cdot 79\right)^{2} \frac{1}{(9 \,[\mathrm{MeV}])^{2} \cdot \sin^{4} 30^{\circ}} = 1.05 \times 10^{-26} \,[\mathrm{m}^{2}/\mathrm{sr}]$$

 $Y = 1.05 \times 10^{-26} \,[\text{m}^2/\text{sr}] \cdot 3.05 \times 10^{21} \,[\text{個/m}^2] \cdot 10^8 \,[\text{個/秒}] \cdot 0.01 \,[\text{sr}] = 32.0 \,[\text{個/秒}]$

$$\therefore t = \frac{C}{Y} = \frac{10000 [個]}{32.0 [個/秒]} = 313 [秒]$$

- 5. 小角度 (最近接距離大) のとき、電子の遮蔽効果により原子核の電荷 eZ が小さく感じられる。 $Y \propto (\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega) \propto Z^2$ なのですなわち、Y が Rutherford 式からの予想に比べて小さくなる。
- 6. (i) 問題としている小角度では、 $(d\sigma/d\Omega)$ が非常に大きくなるので、 Y も大きくなる。これにより検出器 の dead time が大きくなって、Y が小さく観測されるのである。この対策として考えられる方法として、 時間分解能のいい module を使用する、入射 beam 強度を落して、測定時間を増やして、calibration する $(Y \to Y \cdot \frac{\text{real time}}{\text{live time}}$ にかえて plot)、などが考えられる。
 - (ii) 大角度散乱で Y が小さくなっている。これは最近接距離が核の半径と同程度になり、原子核反応が起こっていることを示す。($^{1}\%$ Au では核のポテンシャルが強力すぎる。 $^{2}\%$ A ℓ では弱いので、9 [MeV] の α でも十分近づけるのである)

3

専攻問題5解答

1. 磁場の向きに z 軸を取り、磁場の強さを H とすると、 $\vec{H}\cdot\vec{S_i}=HS_{\rm iz}$ となる。単位体積あたりの n 個のスピンの分配関数 Z は

$$Z = \sum_{S_{iz}} \exp(-\beta \mathcal{H}) = \sum_{S_{iz}} \exp(-\sum_{i} 2\mu_{B} H S_{iz} \beta) = \sum_{S_{iz}} \prod_{i} \exp(-2\mu_{B} H S_{iz} \beta)$$
$$= \prod_{i=1}^{n} \sum_{S_{iz}=\pm 1/2} \exp(-2\mu_{B} H S_{iz} \beta) = [2 \cosh(\mu_{B} H \beta)]^{n}$$

となる。自由エネルギーFと内部エネルギーUは

$$F = -\frac{1}{\beta} \log Z = -\frac{1}{\beta} n \log \left[2 \cosh \left(\mu_{\text{B}} H \beta \right) \right]$$
$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z = -n \mu_{\text{B}} H \tanh \left(\mu_{\text{B}} H \beta \right)$$

よって磁化M、帯磁率 χ 、比熱Cは、

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H} = n\mu_{\rm B} \tanh (\mu_{\rm B} H \beta)$$

$$\chi = \lim_{H \to 0} \frac{\partial M}{\partial H} = \lim_{H \to 0} n\mu_{\rm B}^2 \beta \operatorname{sech}^2 (\mu_{\rm B} H \beta) = n\mu_{\rm B}^2 \beta$$

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = -k_{\rm B} \beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta} U = nk_{\rm B} \mu_{\rm B}^2 \beta^2 H^2 \operatorname{sech}^2 (\mu_{\rm B} H \beta)$$

となる。

2. 低温相においては、n 個の電子のうち、 $k_{\rm B}T/\epsilon_F$ 程度の割合の電子が、およそ $k_{\rm B}T$ 程度のエネルギーの幅の中にある。従って、内部エネルギーの T=0 の時との差を ΔU とすると、

$$\Delta U \sim n \frac{k_{\rm B}T}{\epsilon_{\rm F}} \times k_{\rm B}T$$
 $\therefore C = \frac{\partial \Delta U}{\partial T} \propto T$



となる。

3. 1次相転移では、転移点 $T=T_t$ において、低温相の自由エネルギー F_L と高温相のそれ F_H は一致し、その一階 微分は一致しない。 $T>T_t$ で高温相となるためには、高温相の方が自由エネルギーが低くなくてはならない。 すなわち、

$$F_{\mathrm{L}}|_{T=T_{t}} = F_{\mathrm{H}}|_{T=T_{t}}$$

$$\frac{\partial F_{\mathrm{L}}}{\partial T}\Big|_{T=T_{t}} > \frac{\partial F_{\mathrm{H}}}{\partial T}\Big|_{T=T_{t}}$$

ところでエントロピーS は $S = -\partial F/\partial T$ で与えられるので、これより、

$$S_{\mathrm{L}}|_{T=T_t} < S_{\mathrm{H}}|_{T=T_t}$$

であることがわかる。これが1次相転移が起こるための条件である。具体的にこの量を計算する。

高温相では、磁場がかかっていないので、設問1.より

$$F_{\mathrm{H}}|_{T=T_{t}} = -\frac{n}{\beta}\log 2 \qquad \qquad S_{\mathrm{H}}|_{T=T_{t}} = nk_{\mathrm{B}}\log 2$$

低温相では、設問 2. で与えられた比熱の表式と定圧比熱の定義式から

$$c_{P} = T \left(\frac{\partial S_{L}}{\partial T} \right)_{p} = \frac{k_{B}^{2} m^{*}}{3 \hbar^{2}} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{\frac{1}{3}} T \qquad \qquad \therefore \quad S_{L}|_{T=T_{t}} = \frac{k_{B}^{2} m^{*}}{3 \hbar^{2}} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{1/3} T_{t}$$

よって1次相転移が起こるための条件は

$$\frac{k_{\rm B}^2 m^*}{3\hbar^2} \left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{1/3} T_t < nk_{\rm B} \log 2$$

である。

4. 1次相転移が臨界圧力 $P=P_c$ で消失するとは、 $S_L|_{T=T_t}=S_H|_{T=T_t}$ となることである。 $P<P_c$ で $S_L|_{T=T_t}< S_H|_{T=T_t}$ であったのが、圧力を上げることで $S_L|_{T=T_t}=S_H|_{T=T_t}$ となるためには、 $S_H|_{T=T_t}$ が定数であることから $S_L|_{T=T_t}$ が圧力に対して右図の様な増加関数でなければならない。 $S_L|_{T=T_t}$ を式 (3),(4) を用いて表すと、

$$S_{\rm L}|_{T=T_t} = \frac{k_{\rm B}^2 m_0^*}{3\hbar^2 (1+aP)} \left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{1/3} T_{t0} (1+bP)$$

これが P の増加関数となるためには

でなければならず、また $P \rightarrow \infty$ で $S_L|_{T=T_t} > S_H$, すなわち

$$nk_{\rm B}\log 2 < \frac{k_{\rm B}^2 m_0^*}{3\hbar^2} \left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{1/3} T_{t0} \frac{b}{a}$$

でなければならない。

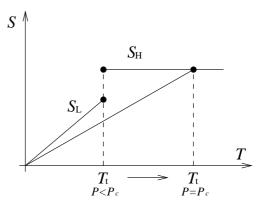
5. P_c の満たすべき方程式は前問より次の通り。

$$\frac{k_{\rm B}^2 m_0^*}{3\hbar^2 (1 + aP_c)} \left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{1/3} T_{t0} (1 + bP_c) = nk_{\rm B} \log 2$$

これより、

$$P_c = \frac{\kappa - 1}{b - a\kappa} \qquad T_c = T_{t0}(1 + bP_c) = T_{t0}\frac{(b - a)\kappa}{b - a\kappa}$$

where
$$\kappa \equiv \frac{3n\hbar^2 \log 2}{k_{\rm B} m_0^*} \left(\frac{8\pi}{3n}\right)^{1/3} \frac{1}{T_{t0}}$$



25

専攻問題6解答

1. (i) 連続の方程式は、

$$\operatorname{div}\rho\boldsymbol{v} + \frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = 0$$

であり、非圧縮性より $\rho={\rm const}$ したがって ${\rm grad}\,\rho=0$ である。渦無しなので v を任意の経路で周回積分しても 0。よって、2 点間の任意の経路の積分の値は一定となり、v に対するポテンシャル $v=-{\rm grad}\,\mathcal{X}$ が存在する。これの ${\rm div}\,$ を計算すると、以下の通りラプラスの方程式 (1) が示される。

$$\operatorname{div} \boldsymbol{v} = -\operatorname{div} \operatorname{grad} \mathcal{X} = -\triangle \mathcal{X} = 0$$

(ii) $f_{\ell}(r) = r^{\ell} \sum_{n} a_{n} r^{n}$ $(a_{0} = 1)$ と仮定し、これを式 (3) に代入する。

$$\sum_{n} \{(\lambda + n)(\lambda + n + 1) - \ell(\ell + 1)\}a_n r^{\lambda + n} - \sum_{n} \ell(\ell + 1)a_n r^{\lambda + n} = 0$$

$$\therefore \{(\lambda+n)(\lambda+n+1)-\ell(\ell+1)\}a_n=0$$

n=0 の項に関しては $a_0=1$ としているので $\lambda=\ell,-\ell-1$ となる。一般の n では、 $a_n=0 (n>0)$ となる。また、 $\lambda=-\ell-1$ では r=0 で f が正則でない。したがって、 $f_\ell(r)=r^\ell$ である。

2. (i) 前問の結果と式(2),(4)を式(5)に用いると

$$\dot{q}(t)Y_{20}(\theta,\varphi) = -\frac{\partial}{\partial r} \sum_{\ell,\ldots} a_{\ell m}(t)r^{\ell}Y_{\ell m}(\theta,\varphi) \Big|_{r=R_0} = -\sum_{\ell,\ldots} a_{\ell m}(t)\ell R_0^{\ell-1}Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

 $Y_{\ell m}$ の直交性より最右辺の和は $(\ell,m)=(2,0)$ 以外では $a_{\ell m}=0$ である。よって、

$$\dot{q}(t)Y_{20}(\theta,\varphi) = -2R_0a_{20}(t)Y_{20}(\theta,\varphi)$$
 $\therefore a_{20}(t) = -\frac{\dot{q}(t)}{2R_0}$

である。よって χ は式(2)より次の通り。

$$\mathcal{X} = a_{20}(t)r^2Y_{20}(\theta,\varphi) = -\frac{r^2}{2R_0}\dot{q}Y_{20}(\theta,\varphi)$$

(ii) ひたすら計算する。

$$\mathcal{X} = -\frac{\dot{q}}{8R_0} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3z^2 - r^2) = -\frac{\dot{q}}{8R_0} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (2z^2 - x^2 - y^2)$$

$$\mathbf{v} = -\operatorname{grad} \mathcal{X} = \frac{\dot{q}}{8R_0} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (-2x, -2y, +4z) = \frac{\dot{q}}{4R_0} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (-x, -y, +2z)$$

$$|\mathbf{v}|^2 = \frac{\dot{q}^2}{16R_0^2} \cdot \frac{5}{\pi} (x^2 + y^2 + 4z^2) = \frac{5\dot{q}^2}{16\pi R_0^2} r^2 (3\cos^2\theta + 1)$$

よって運動エネルギー Kは、

$$K = \frac{1}{2} \int_{V} dV \rho_{0} |\mathbf{v}|^{2} = \int_{0}^{R_{0}} r^{2} dr \int_{0}^{\pi} d\theta \sin\theta \ 2\pi \frac{\rho_{0}}{2} |\mathbf{v}|^{2} = \frac{5\rho_{0}\dot{q}^{2}}{16R_{0}^{2}} \int_{0}^{R_{0}} r^{4} dr \int_{0}^{\pi} d\theta \ (3\sin\theta\cos^{2}\theta + \sin\theta) = \frac{R_{0}^{3}\rho_{0}}{4}\dot{q}^{2}$$

(iii) (表面張力 $)=\sigma=\frac{\partial U}{\partial S}\left|_{_{V}}$ より、この体積を保存した変形におけるポテンシャルエネルギーの変化を ΔU 、表面積の変化を ΔS とすると、

$$\Delta U = \sigma \Delta S = 2\sigma q^2$$

3. (i) 2(iii) までより、 古典的ハミルトニアンは、

$$H = 2\sigma q^2 + \frac{R_0^3 \rho_0}{4} \dot{q}^2$$

 \dot{q} と p の対応を探るため、 $\dot{q} = \alpha p$ とおくと、

$$H = 2\sigma q^2 + \frac{R_0^3 \rho_0}{4} \alpha^2 p^2$$

p,q は正準共役な変数であるから、

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \iff \alpha p = \frac{R_0^3 \rho_0}{2} \alpha^2 p \qquad \therefore \quad \alpha = \frac{2}{R_0^3 \rho_0}$$

したがって、

$$H = 2\sigma q^2 + \frac{p^2}{R_0^3 \rho_0} \qquad \qquad \therefore \quad \hat{H} = 2\sigma \hat{q}^2 + \frac{\hat{p}^2}{R_0^3 \rho_0}$$

$$\therefore \quad M = \frac{R_0^3 \rho_0}{2} \qquad \qquad \omega = \sqrt{\frac{8\sigma}{R_0^3 \rho_0}}$$

(ii) 与えられた a_{-H} の時間微分を計算すると

$$\begin{split} \frac{\mathrm{d}a_{-\mathrm{H}}}{\mathrm{d}t} &= \frac{i}{\hbar}e^{i\hat{H}t/\hbar}\,\hat{H}a_{-}\,e^{-i\hat{H}t/\hbar} - \frac{i}{\hbar}e^{i\hat{H}t/\hbar}\,a_{-}\hat{H}\,e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \frac{i}{\hbar}e^{i\hat{H}t/\hbar}\left[\hat{H},\,a_{-}\right]e^{-i\hat{H}t/\hbar} \\ &= \frac{i}{\hbar}e^{i\hat{H}t/\hbar}\left(-\hbar\omega a_{-}\right)e^{-i\hat{H}t/\hbar} = -i\omega a_{-\mathrm{H}} \end{split}$$

t = 0 で $a_{-H} = a_{-}$ なので、積分して

$$a_{-H} = e^{-i\omega t}a_{-}$$

(iii) 前問の結果より、

$$e^{i\hat{H}t/\hbar}a_{-}e^{-i\hat{H}t/\hbar} = e^{-i\omega t}a_{-}$$

これに、|z₀⟩をかけると、

$$e^{i\hat{H}t/\hbar}a_{-}e^{-i\hat{H}t/\hbar}|z_{0}\rangle = e^{-i\omega t}a_{-}|z_{0}\rangle \iff e^{i\hat{H}t/\hbar}a_{-}|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t}z_{0}|z_{0}\rangle$$

両辺に $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ をかけることによって、

$$a_{-}|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}e^{-i\omega t}z_{0}|z_{0}\rangle = z_{0}e^{-i\omega t}|\psi(t)\rangle$$

したがって、 $|\psi(t)\rangle$ は a_- の固有状態。 固有値 z(t) は $z_0e^{-i\omega t}$ であることがわかる。

(iv) 前問より

$$a_{-}|\psi\rangle = z_{0}e^{-i\omega t}|\psi\rangle$$
 $\langle\psi|a_{+} = \langle\psi|z_{0}^{*}e^{+i\omega t}$

よって

$$\langle a_{+} \rangle = \langle \psi | a_{+} | \psi \rangle = \langle \psi | z_{0}^{*} e^{+i\omega t} | \psi \rangle = z_{0}^{*} e^{+i\omega t} = -i \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} A_{0} e^{+i\omega t}$$
$$\langle a_{-} \rangle = \langle \psi | a_{-} | \psi \rangle = \langle \psi | z_{0} e^{-i\omega t} | \psi \rangle = z_{0} e^{-i\omega t} = +i \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} A_{0} e^{-i\omega t}$$

したがって、

$$\begin{split} \langle \hat{q} \rangle &= i \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}} \Big(\langle a_{+} \rangle + \langle a_{-} \rangle \Big) = i \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}} i \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} A_{0} (-e^{+i\omega t} + e^{-i\omega t}) = A_{0} \sin \omega t \\ \langle \hat{p} \rangle &= i \sqrt{\frac{\hbar M\omega}{2}} \Big(\langle a_{+} \rangle - \langle a_{-} \rangle \Big) = i \sqrt{\frac{\hbar M\omega}{2\hbar}} i \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} A_{0} (-e^{+i\omega t} - e^{-i\omega t}) = M\omega A_{0} \cos \omega t \end{split}$$

これは液滴の振幅 A_0 の振動を表している。この液滴のエネルギー E の平均は

$$\langle E \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \hbar \omega \langle \psi | \hat{a}^{\dagger} \hat{a} + \frac{1}{2} | \psi \rangle = \frac{M \omega^2}{2} A_0^2 + \frac{\hbar \omega}{2}$$

 $A_0 = 0$ の状態は零点振動を表す。

専攻問題7解答

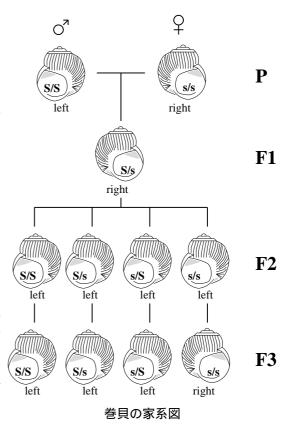
1. [解答例 1]

実験(2)では、子の巻き方は母貝の遺伝子型に対応している。(これがポイント、もちろんメンデルの法則に対応)これは実験(1)の結果の、左右非対称型が決定する時点で受精卵の染色体からの mRNA の合成が全く行われていないことに対応している。つまり、左右非対称性は卵中にある母貝由来の物質によって決定されていると考えられる。

[解答例 2]

実験(1)より、右巻き型と左巻き型の分化は第二分裂に始まるので、核中の遺伝子の情報の影響を受けて分化したのではないことがわかる。つまりこの遺伝現象は、子にそのまま引き継がれる卵細胞の細胞質により子の形質が決定される細胞質遺伝である。そのため、母親の遺伝子が示す形質が母親では発現せず、1世代遅れて次の代で現れる。よって実験(2)の結果が完全に理解できる。

F1 では母親が右巻き純系であるので右巻きになる。F2 では母親 (F1) が S/s であるので優性の左巻きになる。F3 では同様に母親の遺伝型があらわれ、右巻きと左巻きが 1:3 になる。



- 3. ◆S タンパク質のアッセイ系の確立
 - ●S タンパク質の単離
 - ●S 遺伝子の塩基配列の決定
 - ●S 遺伝子をベクターに組み込み、純系右巻きになる予定の卵に導入し、その個体が左巻きになるかみる。
 - ●この遺伝子により作られたタンパク質が、細胞分裂の際どのように回転方向を決定し回転を作っている のか調べる。
 - ●受精の後、しばらく m-RNA が作られないが、m-RNA の製造を止める情報がこの遺伝子に書かれているのか調べる。
 - ●大腸菌などで、S タンパク質を大量に発現させ S タンパク質の抗体を作る。
 - •大量に抗体を注射すると、抗体が S タンパク質に結合することによって S タンパク質の働きが阻害されるかもしれない。それによって起こる現象を観察する。
 - ●活性をもたせたまま蛍光物質を結合させた S タンパク質を作成し、それを卵に注射する。それを蛍光顕微鏡でみると卵中のどこで S タンパク質が作用しているかがわかる。
 - ●S タンパク質によって影響を受ける物質を探索する。
 - ●S タンパク質の構造を、X 線結晶解析、NMR で決定し、構造から S タンパク質の機能を推定する。

S 遺伝子産物の働きは、細胞分裂時に細胞質分裂に影響を与える (特に細胞骨格など) タンパクじゃないかと私 は考えるんですが、細胞周期に関係するかもしれませんし、ぜんぜん違うかもしれません。上にずらずら並べ た実験の結果をみないとなんとも言えません。論じろっていわれても結構困るかも。

専攻問題8解答

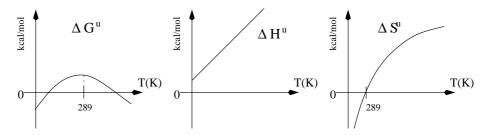
1

$$\Delta H^{u} = \Delta H_{m} + \int_{T_{m}}^{T} \Delta C_{p} dT = \Delta H_{m} + \Delta C_{p} (T - T_{m})$$

$$\Delta S^{u} = \frac{\Delta H_{m}}{T_{m}} + \int_{T_{m}}^{T} \Delta C_{p} d(\ln T) = \frac{\Delta H_{m}}{T_{m}} + \Delta C_{p} \ln \frac{T}{T_{m}}$$

$$\Delta G^{u} = \Delta H^{u} - T \Delta S^{u} = \Delta H_{m} \left(1 - \frac{T}{T_{m}} \right) + \Delta C_{p} \left\{ (T - T_{m}) - T \ln \frac{T}{T_{m}} \right\}$$

2. ΔG^u , ΔH^u , ΔS^u の温度変化は下図の通り。



最も安定になるのは $d(\Delta G^u)/dT = 0$ のときの温度である。

$$\frac{\mathrm{d}(\Delta G^u)}{\mathrm{d}T} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}T} \left(\Delta H^u - T \Delta S^u \right) = \frac{\mathrm{d}(\Delta H^u)}{\mathrm{d}T} - \Delta S^u - T \frac{\mathrm{d}(\Delta S^u)}{\mathrm{d}T}$$

$$= \Delta C_p - \Delta S^u - T \frac{\mathrm{d}(\ln T)}{\mathrm{d}T} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(\ln T)} \left(\frac{\Delta H_m}{T_m} + \int \Delta C_p d(\ln T) \right)$$

$$= \Delta C_p - \Delta S^u - \Delta C_p = -\Delta S^u$$

よって $\Delta S^u = 0$ となる 289 K で最安定。

3.

$$\Delta G^{u} = \Delta H_{c}^{u} + \Delta H_{h}^{u} - T(\Delta S_{c}^{u} + \Delta S_{h}^{u}) = (\Delta H_{c}^{u} - T\Delta S_{c}^{u}) + (\Delta H_{h}^{u} - T\Delta S_{h}^{u})$$

真空中だから水との相互作用の項を無視し、

$$\Delta G^{u} = \Delta H_{c}^{u} - T \Delta S_{c}^{u} = 870 - 1.7 \times T$$

よって真空中の変性温度は $\Delta G^u = 0$ から $T = 512 \, \mathrm{K}$ この一つのみ。

4. 自然状態のタンパク質は、水と接する外側に極性基が、内側に非極性基があるので、

$$(A_1^D - A_1^N) > (A_2^D - A_2^N)$$

となる。また、純粋にタンパク質構造に寄与する項の温度変化は小さく、特徴があまりないと考えられる。よって、まずグラフより水との相互作用の項と考える。結果は次のようになる。

$$\Delta H_h^u$$
 ··· \mathbf{j} ΔH^u のグラフのように直線的に右上がりなのはこれだけ $-T\Delta S_h^u$ ··· \mathbf{g} $-T\Delta S^u$ のグラフより ΔG_h^u ··· \mathbf{i} $\Delta G_h^u = \Delta H_h^u - T\Delta S_h^u$ より ΔH_c^u ··· \mathbf{f} $-T\Delta S_c^u$ ··· \mathbf{k} ΔG^u ··· \mathbf{h}

5. 低温変性の起源は水和エネルギーであり、各タンパク質により異なる ΔC_p や、自然状態と変性状態での水と接する極性・非極性基の差が変化することにより、変性温度が変化する。