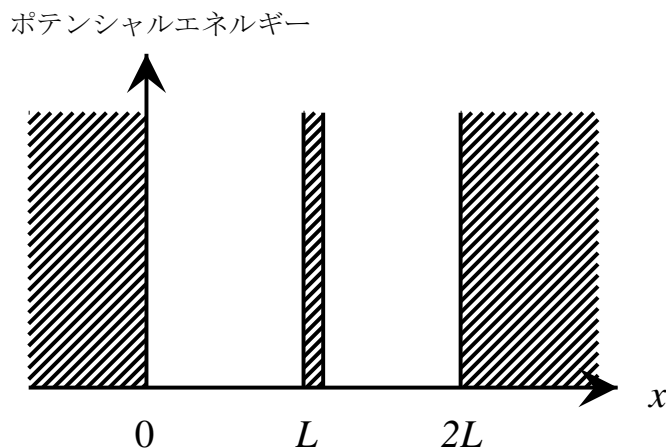


2002 年度 入学試験 物理専門科目

問題 1



高さ無限大の壁に囲まれたはば $2L$ の一次元井戸型ポテンシャルに、高さ無限大で幅が L に比べて十分小さいポテンシャル障壁を設け、質量 m の粒子を左半分（幅 L ）に閉じ込める（図 1）。井戸型ポテンシャルの底をエネルギーの原点とする。

1. 粒子が量子力学的な基底状態にあるとして、そのエネルギー E_0 を求めよ。
2. ポテンシャル障壁を突然取り去って、粒子が幅 $2L$ のポテンシャル全体を動けるようにする。この時、粒子が基底状態にある確率を求めよ。また、エネルギー期待値はいくらか。
3. ポテンシャル障壁を取り去った時刻から t 秒後の粒子の波動関数を $\psi(x, t)$ とする。今仮に $\psi(x, t)$ がわかったとしよう。時刻 t において粒子の位置を観測したとき、粒子が井戸の左半分で見つかる確率は、この $\psi(x, t)$ を用いてどのように書けるか。ただし、 $\psi(x, t)$ は規格化されているとする。
4. 上記の $\psi(x, t)$ の表式を求めよ。ただし級数和はそのまま残して良い。
5. 今度は設問 1 の状態からポテンシャル障壁を極めてゆっくりと右端まで動かす場合について考えよう。このようなゆっくりとしたポテンシャルの変化に対しては断熱定理が成り立ち、粒子は連続的に移り代わることで量子数の同じ固有状態にとどまる。このことを使って、粒子が幅 $2L$ のポテンシャル井戸全体を動けるようにした後の粒子のエネルギー期待値を、設問 1 で求めた E_0 を用いて表せ。
6. 上記の断熱定理が成り立つことを、以下の手順で示せ。左側のポテンシャル井戸幅が a の時に粒子が取りうる固有状態を $\phi_n(x, a)$ その固有エネルギーを $e_n(a)$ (n は負でない整数) と書く。 $\phi_n(x, a)$ は規格直交化されているものとする。 $t = 0$ で基底状態にいた粒子の、時間 t での波動関数を次のように展開する。

$$\phi(x, t) = \sum_n c_n(t) \phi_n(x, a) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t e_n(a) d\tau} \quad \cdots (1)$$

a が時間に依存することに注意して、時間に依存する波動方程式から、係数ベクトル C_n の満たすべき関係式

が次の形に書けることを示し、 a や t によらない係数行列 J_{mn} の表式を求めよ。

$$\frac{dc_n(t)}{dt} = - \sum_m c_m(t) \frac{1}{a} \frac{da}{dt} J_{mn} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t e_n(a) - e_m(a) d\tau\right) \quad \dots (2)$$

ただし、 $J_{mn} = 0$ である。次にこの関係式を用いて、ある条件の下で断熱定理が成り立つことを説明せよ。

7. ポテンシャル井戸の左半分に閉じ込められた粒子を、運動エネルギー e_0 の n 粒子だとする。設問 5 と同様に壁をゆっくりと（断熱的）右端まで動かしたあとのエネルギーが、設問 5 で求めた量子系の結果と同じであることを示せ。ただし、粒子は壁と弾性衝突（跳ね返り係数 1）であるとし、壁を動かしている間に粒子は壁と十分多くの回数衝突するとせよ。

問題 2

イオン半径のほぼ等しい 2 種の元素 A、B を高温で溶かして均一に混ぜ合わせて、その後急冷して、温度 T で合金（固溶体）を作る。元素 A、B は濃度比によらず格子定数が一定の単純立方格子を作ると仮定する。また、原子 A と A、B と B が最近接で隣合う時の相互作用エネルギーは等しくその大きさを a 、A と B が最近接で隣合うときの相互作用エネルギーの大きさを b であるとし、これ以外には相互作用は働かないとする。A とうし、B とうしがとなりあう方が、A、B がとなりあうよりもエネルギーが低く、 $a < b$ が満たされているとする。ただし、合金中の A、B の原子数濃度は等しいとする。

1. 格子点 i が A 原子で占められている時を $\sigma_i = 1$ 、B 原子で占められている時を $\sigma_i = -1$ とする変数 σ_i を使うと、この合金のモデルのハミルトニアンは、

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} (P\sigma_i\sigma_j + Q) \quad \dots (1)$$

という形に書けることを示し、 P と Q を a, b を用いてあらわせ。ただし、 $\langle i,j \rangle$ は最近接格子の組みである。ここで今の場合、A、B が 50% ずつなので、対称性から化学ポテンシャルの項 $-\mu \sum_i \sigma_i$ は必要ないことを注意しておく。

2. この系の場合、 σ_i の平均値 $p = \langle \sigma_i \rangle$ の値はいくらか。
3. ハミルトニアンの中の相互作用を表す項 $\sigma_i\sigma_j$ を定数 m を用いて、 $(\sigma_i + \sigma_j)m - m^2$ と置き換える近似を行ない、

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} P((\sigma_i + \sigma_j)m - m^2) + Q \quad \dots (2)$$

と表す。 m を設問 2 で決まっている σ_i の一様な平均値 $m = p = \langle \sigma_i \rangle = \langle \sigma_j \rangle$ で与えるならば、この近似は相互作用の相手を平均値で置き換えることになり、「平均場近似」と呼ばれる。しかし、ここではより一般に m をパラメタと考える。すなわち、上記の近似での平均値 m が設問 2 で与えられる系全体の平均値 p と関係なく与えられるとした時に、上記のハミルトニアンで与えられる系の分配関数 Z と自由エネルギー F を m 、 N, a, b および温度 T の関数として表せ。ただし系の全格子点数は N であり、周期的境界条件下にあるとしてよい。以下、ボルツマン定数を k_B とする。

4. 設問 3 で求めた自由エネルギー F を m が小さいと考えて m の 4 次まで展開した表式は $F = u + vm^2 + wm^4$ と書ける。 u, v, w を N, T, a, b を用いて表せ。
5. もしも m が自由に選べて、設問 4 で展開して 4 次まで求めた自由エネルギーが最小になる m が実現されるとすると、 m は温度の関数としてどのように振舞うか。 $k_B T > 2(b - a)$ の範囲でおおざっぱに m と T の関係を表すグラフもかけ。
6. 設問 4 で求めた自由エネルギーの表式を用いて、この系の温度を下げてくる時に、この合金系の熱平衡状態でどのような相転移が生ずるか、説明せよ。ただし A、B の組成比が決まっている時に、物体全体では σ_i の平均値 m の値は設問 2 の値で決まってい固定されていることに注意せよ。

問題 3

真空中に無限に長い直線状導線と半径 $R[\text{m}]$ の無限に長い中空の円筒導体が図 1 のように置かれている。導線は円筒の中心 O から x 軸方向に $x_0[\text{m}]$ ($0 \leq x_0 < R$) の位置にあるものとする。任意の点 A (中心 O から距離 $r[\text{m}]$ 、 x 軸からの角度 $\phi[\text{rad}]$) での動径方向と円周方向の電場を $E_r, E_\phi[\text{V/m}]$ 、磁束密度を $B_r, B_\phi[\text{Wb/m}^2]$ として、以下の設問に答えよ。ただし、真空中の誘電率と透磁率を ϵ_0, μ_0 とし、SI 単位系 (MKSA 単位系) を用いるものとする。

まず、導線が円筒の中心 O にある場合 ($x_0 = 0$) を考える。以下の設問に答えよ。

- 導線に電流 $I[\text{A}]$ が紙面の下から上の方に、円筒導体にはその反対方向に電流 $I[\text{A}]$ が一様に流れているとする。円筒内 ($r < R$) 及び円筒外 ($r > R$) の各領域で、磁束密度 $B_r, B_\phi[\text{Wb/m}^2]$ を求めよ。
- 導線が $\lambda[\text{C/m}]$ の線電荷密度 (単位長さ当りの電荷) で一様に帯電している場合を考える。ただし、円筒は接地されているものとする。
 - 円筒内 ($r < R$) 及び円筒外 ($r > R$) の各領域で、電場 $E_r, E_\phi[\text{V/m}]$ を求めよ。
 - 円筒面に生じる面電荷密度 $\sigma[\text{C/m}^2]$ と単位長さ当りの総電荷量 $\lambda_t[\text{C/m}]$ を求めよ。
 - 円筒が接地されずに絶縁されていた場合、電場は円筒内と円筒外でどうなるか。ただし、絶縁前に帯電はされていないものとする。

次に、導線が円筒導体の中心 O からずれている場合 ($0 < x_0 < R$) を考える。以下の問いに答えよ。

3. 設問 1 と同様に、導線に電流 I [A] が紙面の下から上の方に、円筒導体にはその反対方向に電流 I [A] が一様に流れている。円筒外 ($r > R$) での磁束密度 B_r, B_ϕ [Wb/m²] を求めよ。
4. 設問 2 と同様に、導線が λ [C/m] の線電荷密度 (単位長さ当りの電荷) で一様に帯電している。ただし、円筒は接地されているものとする。

(a) 円筒導体に対する電気映像が、中心 O から x 軸方向に R^2/x_0 離れた位置にある線電荷密度 $-\lambda$ の無限に長い導線であることを示し、円筒内での電場 E_r, E_ϕ [V/m] を求めよ。

(b) 円筒面に生じる面電荷密度 σ [C/m²] を求めよ。

(c) 円筒を左右半分に分けて考えた時、 $x > 0$ の部分 ($0^\circ \leq \phi < 90^\circ$ 及び $270^\circ < \phi \leq 360^\circ$) と $x < 0$ の部分 ($90^\circ < \phi < 270^\circ$) の半円筒面に帯電する単位長さ当りの電荷 λ_+, λ_- [C/m] をそれぞれ求め、

$$\frac{\lambda_+ - \lambda_-}{\lambda_+ + \lambda_-} = S \cdot x_0 \quad \dots (1)$$

となる S を求めよ。ただし、 $x_0 \ll R$ として考えよ。

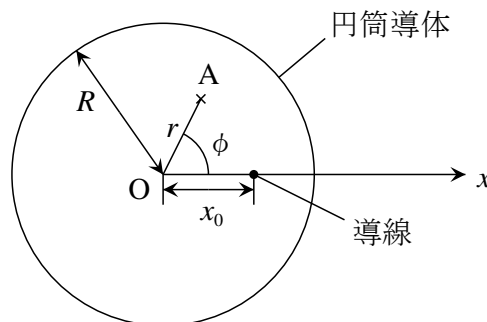


fig. 1:

問題 4

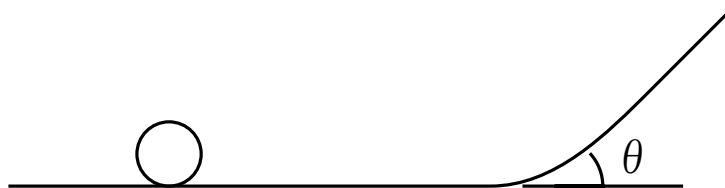
1. 半径 a 、厚さ $d(\ll a)$ 、一様な密度 ρ の薄い円盤の、中心を通り面に垂直な軸のまわりの慣性モーメント I_z 、および中心を通り面に平行な軸のまわりの慣性モーメント I_x を求めよ。

2. 半径 a 、質量 M の一様な球の、質量中心を通る軸のまわりの慣性モーメントが

$$I = \frac{2}{5}Ma^2 \quad \dots (1)$$

であることを示せ。

3. この球を摩擦のある水平な面に置き、中心の高さを中心に向かって水平に突いて初速 v_0 を与えた。球と面の静止摩擦係数を μ 、動摩擦係数を μ' とするとき、球が滑らずに転がるようになるまでの時間と、それまでに質量中心が進む距離を求めよ。また滑らずに転がるようになってからの質量中心の速さ v と回転の角速度 ω を求めよ。ただし、以下の設問も含め、転がり摩擦は無視するものとする。
4. 図 1 のように、面が前方で傾斜角 θ の上り斜面になっているとする。 θ がある値より大きいと、滑らずに転がってきた球は滑りながら斜面を上るようになる。その θ の値を求めよ。ただし、斜面の下端は図 1 のように十分短い範囲で緩やかに変化しており、斜面全体にわたって摩擦係数は水平な部分と同じであるとする。



5. 前方の斜面の部分に摩擦があり球が滑らずに転がって上る場合と、斜面の部分で摩擦がない場合では、球はどちらが高くまで上ることができるか。理由を付けて答えよ。

問題 5

物理実験において、測定値とその誤差の取り扱いは非常に重要である。これらに関する以下の設問に答えよ。

1. 実験誤差は大きく系統誤差と統計誤差の 2 つに分けられる。統計誤差は測定値をばらつかせるもので、多くの場合には一定の確率分布に従う。一方、系統誤差とはどういう内容のものか。例を挙げて簡潔に (100 字程度で) 説明せよ。

以下の設問では、統計誤差だけを考え、その確率分布はガウス分布に従うと仮定する。

2. ある物理量の測定を同一条件で N 回行なったとする。これらの測定は独立で、 i 回目の測定値が x_i であったとする。もっとも確からしい物理量の値 (最尤値) X は最小二乗法の考え方により、

$$S = \sum_{i=1}^N (x_i - X)^2 \quad \dots (1)$$

を最小にする X として求められる。 X を求めよ。

3. 設問 2 の場合、測定の標準偏差はどのように求められるか。
4. 設問 2 の場合、最尤値 X の誤差 (真の値からの差の絶対値) δX はどのように推定されるか。 N を大きくしたときに、その誤差はどのようになるか。
5. 設問 2 および 4 の結果、最尤値とその誤差がそれぞれ X 、 δX であった。一方、独立な物理量の測定を同様に行ない、最尤値とその誤差がそれぞれ δY 、 Y であった。このとき、物理量の和、 $X + Y$ 、に対する誤差を導け。結果だけでなく、どうしてそうなるかを説明せよ。ただし、 $\delta X \ll |X|$ 、 $\delta Y \ll |Y|$ とする。
6. 設問 5 と同様に、物理量の積 XY 、および商 X/Y に対する誤差を導け。
7. ある物理量 X に対する M 個の設定値 $X_k (k = 1, \dots, M)$ について、それと相関のある物理量 Y を測定した。1 つの設定値 X_k に対して N 回の測定を繰り返し、設問 2 および 4 の方法で、最尤値 Y_k とその誤差 δY_k を求めた。 X_k と Y_k の間には直線関係が予想されたので、 $Y_k = pX_k + q$ の関係式で近似したい。最小二乗法の考え方をを用いて、もっとも確からしい p と q の値を求めよ。ただし、 X_k の誤差はないものとする。

問題 6

図 1 に示すように炭素イオン（荷電状態 $q = +2$ ）が水素プラズマを通過するときの荷電状態の変化およびエネルギー損失を測定する実験を行った。炭素イオンの入射エネルギーは核子あたり 350keV （速度は $8.2 \times 10^6\text{m/s}$ ）である。以下の設問に筋道を示して答えよ。必要であれば以下の値を用いよ。

炭素の質量数 $A = 12$ 、原子番号 $Z = 6$ 、光速 $3.0 \times 10^8\text{m/s}$ 、核子質量 $m_p = 1.7 \times 10^{-27}\text{kg}$ 、電荷単位 $e = 1.6 \times 10^{-19}\text{C}$ 。また、必要であれば $\exp(2.0) = 7.4$ の値を用いよ。

この実験において水素プラズマは陽子と電子に完全に電離し、それぞれの密度は空間的に一様で n であり、また時間的にも定常な状態であるとする。その厚さを d とする。

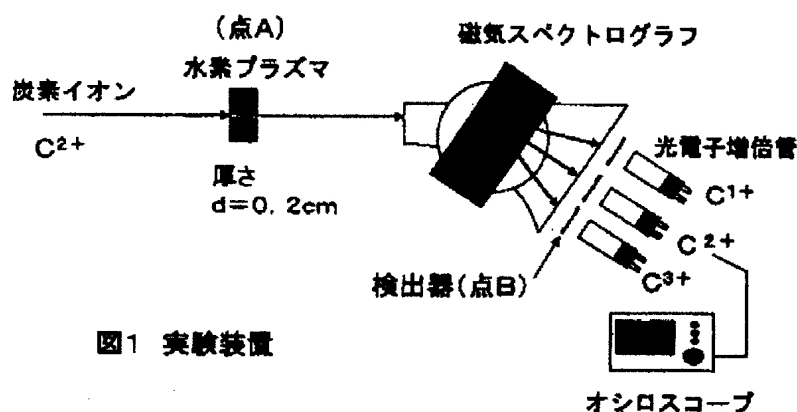


図 1 実験装置

図 2: 実験装置

- 炭素イオンは水素プラズマ内の陽子および自由電子と相互作用をして、電子が剥ぎ取られる電離と、自由電子を捕獲する再結合が行われ荷電状態が変化する。その反応断面積をそれぞれ σ_i 、 σ_r とする。これらの値は衝突のエネルギー、運動量によらないものとする。プラズマに N_0 個の $q = +2$ のイオンが入射されるとする。以下の設問において、一度変化した炭素イオンの荷電状態がさらに変化する現象は無視してよい。
 - プラズマ表面から炭素イオンの進む方向に向かっての距離を x とするとき ($0 \leq x \leq d$)、 x の点で $q = +2$ に留まっているイオンの数 $N_2(x)$ を表す式を求めよ。
 - イオンは再結合により $q = +1$ 、電離により $q = +3$ 、となるが、入射点から x までの間に生成される、それぞれのイオンの数 $N_1(x)$ 、 $N_3(x)$ を表す式を求めよ。
 - $\sigma_i = 1.0 \times 10^{-17}\text{cm}^2$ 、 $\sigma_r = 1.0 \times 10^{-22}\text{cm}^2$ 、 $n = 1 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ 、 $d = 0.2\text{cm}$ とする時、プラズマ通過後、荷電状態が $q = +1, +2, +3$ 状態となっている割合はいくらか。
- プラズマ通過後の荷電状態を調べるために図 1 に示すように磁気スペクトログラフ（図中で紙面に垂直に磁場をかけ、荷電粒子を曲げる装置）を用いて炭素イオンの荷電分布を調べた。スペクトログラフの磁束密度 $B = 0.1\text{T}$ （ここで $\text{T} = \text{Wb/m}^2$ ）とする時、スペクトログラフ内での $q = +1, +2, +3$ に対応する曲率半径 r_{ho1, ρ_2, ρ_3} はいくらか。
- 上記磁気スペクトログラフの磁場を測定したい。
 - 磁束密度の方向、つまり S 極と N 極を確かめたい。電池と針金を持ちいて確かめるにはどうすればよい。図を描いて説明せよ。
 - 磁束密度 B を測定する方法を一つあげ、その原理を簡単に説明せよ。

4. プラズマ中でのイオンのエネルギー損失 ΔE を、プラズマで g ち (図中の点 A) から検出器 (点 B) までの飛行時間を測定して求める。プラズマが無いときとある時の飛行時間差 Δt と ΔE の関係式を求めよ。但し点 A から点 B までの距離を L_0 とする。 $L_0 = 4\text{m}$ 、炭素イオンのエネルギーが核子あたり $E = 350\text{keV}$ の時、 $\Delta t = 5$ ナノ秒であった。 ΔE はいくらになるか。
5. 前問において用いるイオン検出器として、プラスチックシンチレーター、NaI シンチレーターの 2 種類を用意した。上記の実験に用いるのはどちらのシンチレーターが適当であるかを理由を示して述べよ。

問題 7

相対論的な高エネルギー陽子 (p) ビームを静止している陽子 (p) ターゲットに照射することにより、陽子 (p) と反陽子 (\bar{p}) の対を生成する反応:

$$p + p \longrightarrow p + p + p + \bar{p}$$

を考える。ここで陽子の質量を $m_p (= 1.7 \times 10^{-27} \text{kg})$ 、陽子の電荷を $e (= 1.6 \times 10^{-19} \text{C})$ 、真空中の光速を $c (= 3.0 \times 10^8 \text{m/s})$ とする。

1. 左手座標系で $+z$ 方向に磁束密度の大きさが B (Wb/m^2) の一様磁場をかけたとする。実験室系で運動量の大きさが P_p (kg m/s) の高エネルギー陽子が x 軸上を $+x$ 方向に磁場と垂直に入射された場合、陽子は回転運動を始める。その回転軸と回転方向を磁場と陽子の運動方向も含めて図示せよ。また、その回転運動の曲率半径を P_p 、 B 、 e を用いて表せ。
2. 陽子と反陽子の持つ固有の物理量のうち、等しくなる例と異なる例をそれぞれ 2 つずつ挙げよ。
3. 設問 2. で挙げた陽子と反陽子の性質の差異を用いて、陽子と反陽子を区別する手段を 2 通り簡潔に述べよ。
4. 上記反応の始状態で x 軸上を $+x$ 方向に入射されたビーム陽子が実験室系で持つ運動量の大きさを P_p とする。ビーム陽子とターゲット陽子の実験室系での全エネルギーと運動量を P_p 、 m_p 、 c を用いて各々書き表せ。また、ビーム陽子が重心系で持つ運動量の大きさを P_p^* とする。ビーム陽子とターゲット陽子の重心系での全エネルギーと運動量を P_p^* 、 m_p 、 c を用いて各々書き表せ。ただし、本設問以下においては磁場はかかっていないものとする。
5. 上記反応を生じさせるのに必要な高エネルギー陽子ビームの実験室系での最低運動エネルギー E_{\min} を m_p と c を用いて表せ。
6. 陽子ビームの運動エネルギーを上記反応の起こる最低運動エネルギー E_{\min} とする。この反応の始状態を重心系で見たときに、実験室系で静止していたターゲット陽子の重心系での速さ v^* は光速 c の何倍になるかを計算せよ。また、始状態の反陽子の実験室系での運動量の大きさを m_p と c を用いて表せ。

問題 8

図 1 は、ある球状タンパク質の熱転移（熱によるアンフォールディング転移）を、示差走査型熱量計と 230nm における円二色性を用いて測定した結果を示す。測定は 1 気圧の一定圧力下にて行った。A は、タンパク質水曜鋭気の熱量計データ、B はタンパク質を溶かした緩衝溶液の熱量計データ、C は円二色性の温度依存性を示す。図 1 のデータより、温度 T におけるアンフォールディング転移の熱力学量（標準 Gibbs 自由エネルギー変化 $\Delta G(T)$ エンタルピー変化 $\Delta H(T)$ エントロピー変化 $\Delta S(T)$ など）を求めることができる。図 2 は、このようにして得られた熱力学量をもとにして、 ΔG の温度依存性を描いた理論曲線である。以下の問に答えよ。ただし、このタンパク質の熱転移は二状態転移で近似できるものとする。

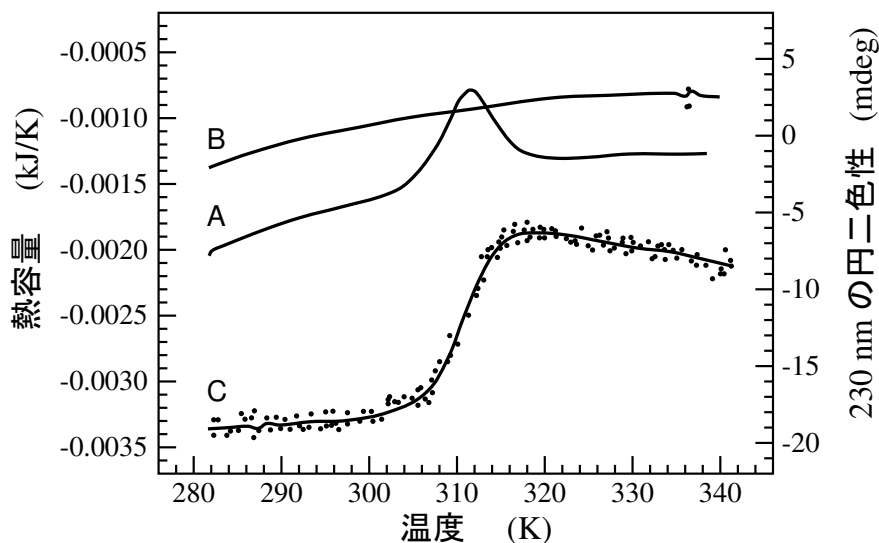


図 3: ある球状タンパク質の熱転移。A: 示差走査型熱量計による測定結果。B: 示差走査型熱量計のベースライン（A と同じ測定を溶媒緩衝液に対して行った）。C: 円二色性の測定結果（点は測定点、実線は転移曲線を示す）。

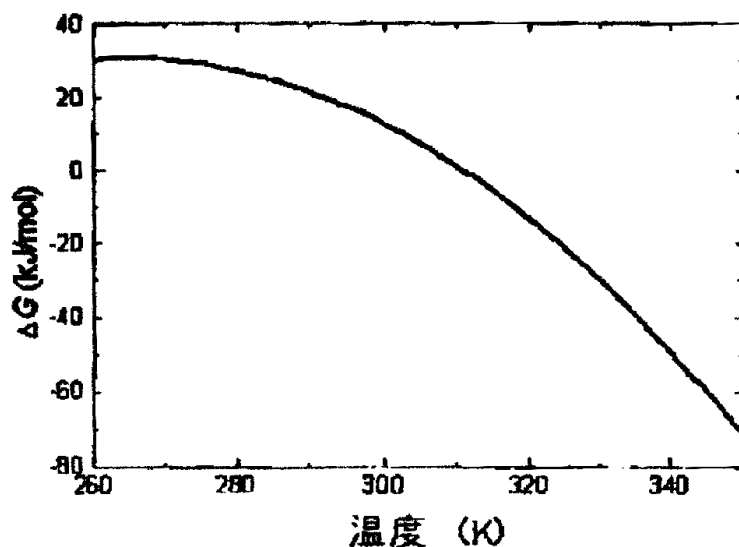
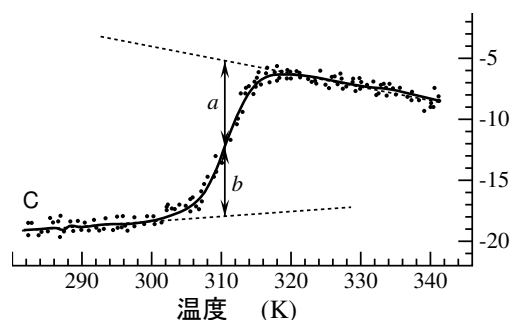


図 4: ΔG の温度依存。

1. 二次相転移が成立するので、図 1 中の C の転移曲線より転移前後の円二色性の温度依存を直線的に外挿し、転移領域での転移の割合 f_{app} を $f_{\text{app}} = b/(a + b)$ として求めることができる（下図参照）。このとき、転移領域における転移の平衡定数 K と標準自由エネルギー変化 ΔG はどのように与えられるかを示せ。



2. 平衡定数 K と熱転移の vant' Hoff エンタルピー変化 ΔH_{vH} に関する以下の関係式

$$\Delta H_{\text{vH}} = RT^2 \frac{\partial \ln K}{\partial T} \quad \dots (1)$$

を導け。ただし、ここで R は気体定数を表す。必要であれば、自由エネルギーとエンタルピーおよびエントロピーに関する関係式 $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ を用いてよい。

3. 熱量計により直接観測したエンタルピー変化 ΔH_{cal} を図 1 中の A と B より求めることができる。その方法について、必要であれば図を描いて、説明せよ。
4. ΔH_{vH} と ΔH_{cal} の間にはどのような関係が成立するか。また、熱転移が二状態間転移では近似できず、中間状態を伴う場合、これらの間の関係はどうか。
5. 熱転移点の温度 T_m 、熱転移に伴う定圧熱容量変化 ΔC_p とし、 C_p は温度に依らず一定と見なすことができる。このとき、任意の温度 T における、自由エネルギー変化 $\Delta G(T)$ は以下の関係式で表されることを示せ。

$$\Delta G(T) = \Delta H(T_m) + \Delta C_p \cdot (T - T_m) - T \left(\Delta S(T_m) + \Delta C_p \ln \frac{T}{T_m} \right) \quad \dots (2)$$

6. 図 1 中の C のデータでは、230nm の円二色性の強度が熱転移に伴って減少している。円二色性とタンパク質の立体構造との関係について述べ、熱転移に伴う円二色性の変化が立体構造のどのような変化によりもたらされたかを説明せよ。
7. タンパク質の熱転移は、一般に、大きな ΔC_p を伴うため、 ΔG の温度依存には図 2 のような曲率が生じ、タンパク質は T_m における熱転移とともに、低温側の T_c においても冷却転移を示す（ T_c が水の氷点より低くなり、現実には観測できないことが多い）。タンパク質の熱転移と冷却転移の起こる分子的なメカニズムについて、それぞれ、知れることを述べよ。

問題 9

慣性も面と I を持った異核 2 原子分子の回転運動について、次の問に答えよ。ただし、ボルツマン定数を k_B とし、比熱は 1 分子あたりの比熱とする。

1. 古典統計力学を使って、この系の温度 T での回転運動の比熱を求めよ。
2. この系の回転運動を表すハミルトニアンは

$$H = \frac{L^2}{2I} = \frac{\hbar^2}{2I} \cdot \frac{-1}{\sin^2 \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad \dots (1)$$

である。回転量子数 l ($l = 0, 1, 2, \dots$) を使って、このハミルトニアンの固有値 E_l とその縮重度 g_l を表せ (導出過程は不要)。

3. この系の分配関数 Z とエネルギー期待値 $\langle E \rangle$ を、 E_l 、 g_l 、温度 T を使って表せ。
4. 低温極限で有効な近似を用いて Z の表式を求め、その近似の範囲で、系の比熱 $C(T)$ を E_l 、 g_l 、 T を使って表せ。またその近似が成り立つ条件について述べよ。

次に慣性モーメント I の等角 2 原子分子の回転運動について考える。2 つの原子の原子核はともにスピン $1/2$ のフェルミ粒子であるとして、次の問に答えよ。ただし電子系の合成スピンはゼロであるとする。

1. 核の合成スピンはどのような値を取りうるかを考え、それぞれの場合について回転運動のエネルギー固有値と縮重度を求めよ。
2. 設問 5 で求めたエネルギー固有値の具体的な表式を使って、低温極限での回転運動の比熱を求めよ。
3. 十分高温で熱平衡に達した分子気体を急冷した直後に測定した低温比熱 C_1 と、熱平衡を保ちながらきわめてゆっくり冷却した後測定した低温比熱 C_2 では、違いがあったという。その理由として考えられることを簡単に述べよ。ただしいずれの場合も、分子気体は冷却後も気体のままであったとする。

問題 1 解答

- 固有値は $E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL}$ 、固有関数は $\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$ と求まるので、 $n = 1$ を代入する。
- u_n を障壁を取り去ったあとの固有関数とする。
これらでの基底状態の展開係数 $a_n = \langle u_n | \psi_{init} \rangle$ は前問を使うと、

$$a_n = \int_0^L \left(\sqrt{\frac{1}{L}} \sin \frac{n\pi x}{2L} \right) \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L} \right) dx \quad \dots (1)$$

積分を実行して a_n は

- n が偶数の時 0
- $n = 4m + 1$ の時 $\frac{-4\sqrt{2}}{(n^2-4)\pi}$
- $n = 4m + 3$ の時 $\frac{4\sqrt{2}}{(n^2-4)\pi}$

となるから、求める確率 $P = |a_1|^2 = \frac{32}{9\pi^2}$ となる。

期待値は展開する固有関数系によらないので E_0

- $\int_0^L |\psi(x)|^2 dx$
- $\psi(x, t) = \sum_n a_n u_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$ に、 a_n, u_n, E_n の値を代入する。
- $E_0/4$
- 波動方程式に代入して整理して両辺に ψ^* をかけて積分すると

$$J_{mn} = a \int_0^a \psi_n^* \frac{\psi_m}{da} dx \quad \dots (2)$$

$\psi_n^*(a, t)$ の値は最初の問題で求まっているからこれを代入して

$$J_{mn} = \frac{2nm(-1)^{n-m}}{n^2 - m^2} \quad \dots (3)$$

となり a や t によらない。断熱定理は $\frac{da}{dt}$ が a に比べ小さいという意味で壁がゆっくり動く時に成り立つ。

- 古典的粒子が壁にぶつかって壁を動かしたときにした仕事の分だけエネルギーを失ったと考えてみると、壁の位置変化 Δa 、粒子のエネルギー変化 ΔE とすると、

$$\Delta E = -(2mv)(2a/v)^{-1} \Delta a \quad \dots (4)$$

これを整理すると $\frac{\Delta E}{E} = -2 \frac{\Delta a}{a}$ より、 E が a の 2 乗に反比例することがわかる。

問題 2 解答

1. $P = (a - b)/2, Q = (a + b)/2$

2. 0

3. 格子の形を考慮すると一粒子ハミルトニアンは

$$H = 3(a - b)m\sigma_i + 3/2((a + b) - (a - b)m^2) \quad \dots (1)$$

であるから、

$$Z = \left(2 \cosh \frac{3(a - b)m}{kT} \right)^N e^{-\frac{3N}{2kT}((a+b)-(a-b)m^2)} \quad \dots (2)$$

$$F = -kTN \log \left(2 \cosh \left(\frac{3(a - b)m}{kT} \right) \right) + \frac{3N}{2}((a + b) - (a - b)m^2) \quad \dots (3)$$

となる。

4. $\log(2 \cosh(x))$ を展開すると $\log 2 + \frac{x^2}{2} - \frac{x^4}{12}$ になることを利用して

$$u = \frac{3N}{2}(a + b) - kTN \log 2 \quad \dots (4)$$

$$v = -\frac{9(b - a)^2 N}{2kT} + \frac{3N(b - a)}{2} \quad \dots (5)$$

$$w = \frac{27N(a - b)^4}{4(kT)^3} \quad \dots (6)$$

5. F を m で微分してそれを 0 とおく。無次元パラメータ $\xi = kT/(b - a)$ を導入すると、 $\xi < 3$ で m が 0 でない値をとり、 $m = \frac{\xi}{3} \sqrt{3 - \xi}$ となるのでこれをグラフに書けば良い。

6. 相分離

問題 3 解答

1. ● $r < R$ のとき

アンペールの法則より、

$$2\pi r \cdot B_\phi = \mu_0 I \text{ から } B_\phi = \frac{\mu_0 I}{2\pi r} [\text{Wb/m}^2] \quad \dots (1)$$

$$(\text{向きは紙面の上から見て反時計回り}) \quad \dots (2)$$

$$B_r = 0 [\text{Wb/m}^2] \quad \dots (3)$$

- $r > R$ のとき

導線を通る電流と円筒を通る電流の向きが逆なので、アンペールの法則より、

$$B_r = 0 [\text{Wb/m}^2] \quad \dots (4)$$

$$B_\phi = 0 [\text{Wb/m}^2] \quad \dots (5)$$

2. (a)

- $r < R$ のとき

ガウスの法則より

$$(2\pi r)\Delta l E_r = \frac{\lambda \Delta l}{\epsilon_0} \quad \dots (6)$$

$$\text{ゆえに中心から外へ向かう向きに } E_r = \frac{\lambda}{2\pi\epsilon_0 r} [\text{V/m}] \quad \dots (7)$$

$$\text{また、} E_\phi = 0 [\text{V/m}] \quad \dots (8)$$

- $r > R$ のとき

接地されているので円筒には $-\lambda$ の電荷が誘起されるので円筒の外から見ると内部の総電荷は 0 になる。
よってガウスの法則より、

$$E_r = 0 [\text{V/m}] \quad \dots (9)$$

$$E_\phi = 0 [\text{V/m}] \quad \dots (10)$$

$$\dots (11)$$

- (b)

接地されているの円筒には $-\lambda$ の電荷が誘起される。よって、

$$\lambda_t = -\lambda [\text{C/m}] \quad \dots (12)$$

このとき円筒面内に生じる面電荷密度は σ は、

$$\sigma = -\frac{\lambda}{2\pi R} [\text{C/m}^2] \quad \dots (13)$$

- (c)

絶縁前に帯電していないので、円筒面上の全電荷は 0 となり、この円筒面から出る電束は 0 である。ゆえに、
電場は円筒内と円筒外で等しくなり、 $E_r = \frac{\lambda}{2\pi\epsilon r} [\text{V/m}]$, $E_\phi = 0 [\text{V/m}]$ となる。

3. $r > R$ においては、円筒上の電流が作る磁場は、原点に置いた無限に長い導線を通る電流が作る磁場と等しい。そこで、原点に置かれた無限に長い導線を通る電流（流れる向きは紙面の上から下）と x_0 に置かれた無限に長い導線を通る電流（流れる向きは紙面の下から上）の作る磁場の重ね合わせを考えればよい。ここ

で、原点からの距離 r_1 [m]、 x 軸からの角度 ϕ_1 [rad] での磁場を B_{r1} [Wb/m²]、 x_0 からの距離 r_2 [m]、 x 軸からの角度 ϕ_2 [rad] での磁場を B_{r2} [Wb/m²] とする。このとき、

$$B_{r1} = 0 \quad B_{\phi1} = \frac{\mu I}{2\pi r_1} \quad \dots (14)$$

$$B_{r2} = 0 \quad B_{\phi2} = \frac{\mu I}{2\pi r_2} \quad \dots (15)$$

$$\dots (16)$$

重ね合わせて、

$$B_\phi = -B_{\phi1} + B_{\phi2} \cos \alpha = -\frac{\mu I}{2\pi} \left(\frac{1}{r_1} - \frac{\cos \alpha}{r_2} \right) \quad \dots (17)$$

$$B_r = -B_{\phi2} \sin \alpha = -\frac{\mu I}{2\pi r_2} \sin \alpha \quad \dots (18)$$

ただし、

$$r_1 = r \quad \dots (19)$$

$$r_2 = \sqrt{r_1^2 + x_0^2 - 2r_1 x_0 \cos \phi_1} \quad \dots (20)$$

$$= \sqrt{r^2 + x_0^2 - 2rx_0 \cos \phi_1} \quad \dots (21)$$

$$\phi_1 = \phi \quad \dots (22)$$

$$\alpha = \phi_1 - \phi_2 \quad \left(\alpha < \frac{\pi}{2} \right) \quad \dots (23)$$

また、

$$\frac{x_0}{\sin \alpha} = \frac{r_2}{\sin \phi_1} \text{ より、} r_2 \sin \alpha = x_0 \sin \phi_1 \quad \dots (24)$$

$$\frac{\cos \alpha}{r_2} = \frac{\sqrt{1 - \sin^2 \alpha}}{r_2} \quad \dots (25)$$

を用いて整理すると、

$$B_r = \frac{\mu I x_0 \sin \phi}{2\pi(r^2 + x_0^2 - 2rx_0 \cos \phi)} \quad [\text{Wb/m}^2] \quad \dots (26)$$

$$B_\phi = -\frac{\mu I}{2\pi} \left(\frac{1}{r} - \frac{r - x_0 \cos \phi}{r^2 + x_0^2 - 2rx_0 \cos \phi} \right) \quad [\text{Wb/m}^2] \quad \dots (27)$$

4. (fig.5) のように O,B,C,D,E をとる (問題文の図にある A と同一平面上であり、C,B の x 座標はそれぞれ $x_0, \frac{R^2}{x_0}$ である。)

このとき $\triangle ODB, \triangle OCD$ は $x_0 : R = R : \frac{R^2}{x_0}$ より相似なので $DB = l_1$ とすると、 $CD = \frac{R}{x_0} l_1$ となる。ここで B から ρ_2 かつ C から ρ_3 離れた点の電位は $\frac{\lambda}{2\pi\epsilon_0} \ln \frac{\rho_2}{\rho_3} + (\text{定数})$ と表されるので、 $\rho_2 = l_2, \rho_3 = \frac{R}{x_0} l_2$ とすると、 $\frac{\rho_2}{\rho_3} = \frac{x_0}{R} = (\text{定数})$ となるので、円筒面での電位が等電位となり接地された条件を満たすので、電気映像は $\frac{R^2}{x_0}$ 離れた $-\lambda$ の無限に長い導線である。

次に円筒内での磁場を求める。 $\angle DCB = \phi_2, \angle DBE = \phi_3, DC = r_2, DB = r_3$ とする。このとき B,C における導線上の電荷が作る電場 $E_{r2}, E_{r3}, E_{\phi2}, E_{\phi3}$ は

$$E_{r2} = \frac{\lambda}{2\pi\epsilon_0 r_2} \quad E_{\phi2} = 0 \quad \dots (28)$$

$$E_{r3} = -\frac{\lambda}{2\pi\epsilon_0 r_3} \quad E_{\phi3} = 0 \quad \dots (29)$$

$$\dots (30)$$

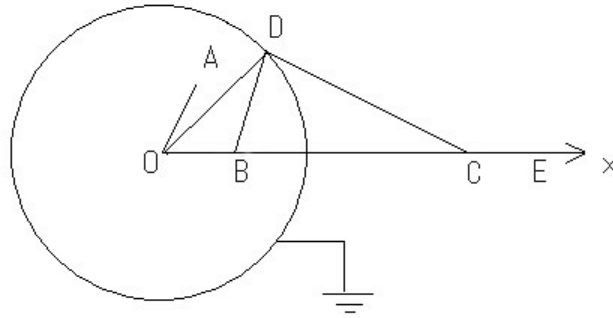


fig. 5:

よって、A 点での電場はこれらを重ね合わせて、

$$E_r = E_{r2} \cos \theta_2 + E_{r3} \cos \theta_3 = \frac{\lambda}{2\pi\epsilon_0} \left(\frac{\cos \theta_2}{r_2} - \frac{\cos \theta_3}{r_3} \right) \quad \dots (31)$$

$$E_\phi = E_{r2} \sin \theta_2 + E_{r3} \sin \theta_3 = \frac{\lambda}{2\pi\epsilon_0} \left(\frac{\sin \theta_2}{r_2} - \frac{\sin \theta_3}{r_3} \right) \quad \dots (32)$$

$$\dots (33)$$

ただし、 $i = 2, 3$ について

$$\theta_i \equiv \phi_i - \phi \quad \dots (34)$$

$$r_i^2 = r^2 + x_i^2 - 2rx_i \cos \phi \quad (x_2 = x_0, x_3 = \frac{R^2}{x_0}) \quad \dots (35)$$

また、 $i = 2, 3$ について

$$\text{正弦定理より、} \frac{\sin \theta_i}{r_i} = \frac{x_i}{r_i^2} \sin \phi \quad \dots (36)$$

$$\frac{\cos \theta_i}{r_i} = \pm \frac{\sqrt{1 - \sin^2 \theta_i}}{r_i} = \frac{r - x_0 \cos \phi}{r_i^2} \quad \dots (37)$$

$$\dots (38)$$

となるので、

$$E_\phi = \frac{\lambda}{2\pi\epsilon_0} \left(\frac{x_0}{r^2 + x_0^2 - 2rx_0 \cos \phi} - \frac{x_0 R^2}{x_0^2 r^2 + R^4 - 2rx_0 R^2 \cos \phi} \right) \sin \phi \quad [\text{V/m}] \quad \dots (39)$$

$$E_r = \frac{\lambda}{2\pi\epsilon_0} \left(\frac{r - x_0 \cos \phi}{r^2 + x_0^2 - 2rx_0 \cos \phi} - \frac{x_0^2 r - x_0 R^2 \cos \phi}{x_0^2 r^2 + R^4 - 2rx_0 R^2 \cos \phi} \right) \quad [\text{V/m}] \quad \dots (40)$$

(b) 円筒面に生じる面電荷密度は

$$\sigma = -\epsilon_0 E_r|_{r=R} = \frac{\lambda}{2\pi(R^2 + x_0^2 - 2Rx_0 \cos \phi)} \left(R - \frac{x_0^2}{R} \right) \quad [\text{C/m}^2] \quad \dots (41)$$

(c) $x_0 \ll R$ より、

$$\sigma = \frac{\lambda}{2\pi R^2(1 + \frac{x_0^2}{R^2} - 2\frac{x_0}{R} \cos \phi)} (R - \frac{x_0^2}{R}) \simeq \frac{\lambda}{2\pi R^2} (R - \frac{x_0^2}{R}) (1 + 2\frac{x_0}{R} \cos \phi) \quad \dots (42)$$

よって、

$$\lambda_+ = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sigma R d\phi + \int_{\frac{3\pi}{2}}^{2\pi} \sigma R d\phi \quad \dots (43)$$

$$= \frac{\lambda}{2\pi R} (R - \frac{x_0^2}{R}) (\pi + 4\frac{x_0}{R}) \quad [C/m] \quad \dots (44)$$

$$\lambda_- = \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} \sigma R d\phi \quad \dots (45)$$

$$= \frac{\lambda}{2\pi R} (R - \frac{x_0^2}{R}) (\pi - 4\frac{x_0}{R}) \quad [C/m] \quad \dots (46)$$

これより、

$$\frac{\lambda_+ - \lambda_-}{\lambda_+ + \lambda_-} = \frac{4x_0}{\pi R} \quad \dots (47)$$

となり、

$$S = \frac{4}{\pi R} \quad [1/m] \quad \dots (48)$$

となる。

問題 4 解答

1. 慣性モーメント I は、軸からの距離を r として、

$$I = \int_V d^3r r^2 \rho \quad \dots (1)$$

と表される。

従って、中心を通り面に垂直な軸を取った場合の円盤の慣性モーメント I_z は、円盤の面上での中心からの距離を r 、回転角を θ 、厚さの方向を z として表した円柱座標 (r, θ, z) を用いて

$$I_z = \int_0^d dz \int_0^a dr \int_0^{2\pi} d\theta r r^2 \rho = 2\pi\rho \int_0^a r^3 = \frac{1}{2}\pi\rho da^4 \quad \dots (2)$$

一方、中心を通り面に平行な軸を取った場合の慣性モーメント I_x は、中心を原点とし、軸を x 軸、円盤の面を xy 平面とした正規直交座標を用いて

$$I_x = \int_{-a}^a dx \int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} dy \int_{-\sqrt{a^2-x^2}}^{\sqrt{a^2-x^2}} dz (z^2 + y^2) \rho = \frac{1}{4}\pi\rho da^4 + \frac{1}{12}\pi\rho d^3 a^2 \quad \dots (3)$$

$d \ll a$ として小さな項を無視すれば

$$I_x = \frac{1}{4}\pi\rho da^4 \quad \dots (4)$$

となる。

2. 極座標で計算すると、中心軸からの距離は $r \sin \theta$ となる。

また、球が一様であれば、密度 ρ は $\rho = \frac{3M}{4\pi a^3}$ によって与えられる。

この ρ を用いて、慣性モーメント I は

$$I = \int_0^a dr \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\phi r^2 r^2 \sin^2 \theta = 2\pi\rho \left(1 - \frac{2}{3}\right) \int_0^a dr r^4 = \frac{8}{15}\pi\rho a^5 \quad \dots (5)$$

ρ を代入すると、

$$I = \frac{2}{5}Ma^2 \quad \dots (6)$$

が得られる。

3. 運動を始めた球は摩擦力を受けながら運動し、並進運動の速度 v が回転の速度 $a\omega$ と等しくなったときに、球の面との接点が面に対して静止する。これ以降は球は転がって運動し始め、摩擦が働かなくなって¹一定の速度および角速度で運動するようになる。

球が滑っているとき、接点で働く摩擦力の大きさは、球を支える垂直抗力が Mg であることから $Mg\mu'$ であり、初速による球の進行方向と逆向きに働く。

運動方程式を立てると、並進運動の速度 v については

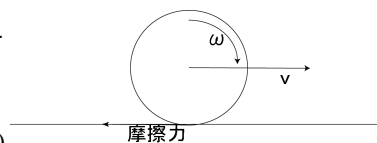
$$M \frac{dv}{dt} = -Mg\mu' \quad \dots (7)$$

回転については、正の向きの回転によって球がはじめの進行方向と同じ向きに進むように ω の正の方向を取って

$$I \frac{d\omega}{dt} = Mg\mu' a \quad \dots (8)$$

I は慣性モーメントであり、前の問題より $I = \frac{2}{5}Ma^2$ である。

¹ 球と面の接点は常に面に対して静止



初期条件 $v = v_0, \omega = 0$ から、球の運動は

$$v = v_0 - Mg\mu' t \quad \dots (9)$$

$$\omega = \frac{5g\mu'}{2a} t \quad \dots (10)$$

に従う。

回転を始めるときの条件 $v = a\omega$ より、このときの時刻を求めると

$$t = \frac{2v_0}{7g\mu'} \quad \dots (11)$$

このときの速度および角速度は、

$$v = \frac{5}{7}v_0, \quad \omega = \frac{5v_0}{7a} \quad \dots (12)$$

4. 球が坂を上り始めると、重力および接点での摩擦に従って運動し始める。坂を上る方向の速度を v 、球が坂を上る方向に運動するような回転の方向を ω と取り直す。

斜面の下端は十分短い範囲で緩やかに変化しているため、球は問 3 で求めた速度および角速度を保ったまま斜面を上り始めると考えて良い。

坂を上る方向を力の正の向きにとって、摩擦力を f として表すと、球の速度及び角速度が従う運動方程式は

$$M \frac{dv}{dt} = -Mg \sin \theta + f \quad \dots (13)$$

$$I \frac{d\omega}{dt} = -af \quad \dots (14)$$

によって与えられる。

重力は球全体に様に働き、垂直抗力は球の中心に向かって働くので、これらによるモーメントは考えなくて良い。

球に働く垂直抗力が $Mg \cos \theta$ であるから、 f は最大で $Mg\mu \cos \theta$ までの大きさを取る。

斜面が緩やかであれば、球は接点が面に対して静止し続ける条件 $v = a\omega$ を満たすように運動し、転がったまま斜面を上る。このとき、 $\dot{v} = a\dot{\omega}$ を満たすので、 f は

$$-\frac{a^2 f}{I} = -g \sin \theta + \frac{f}{m}$$

即ち

$$f = \frac{2Mg}{7} \sin \theta \quad \dots (15)$$

を満たす。

斜面が急な場合、 f の最大の条件から式 (15) を満たすような f が存在なくなると、球の接点は面に対して静止できずに滑り出すことになる。

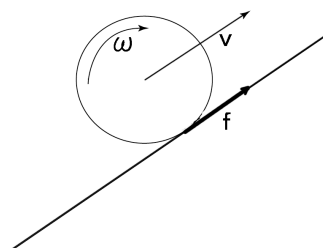
従って、球が滑り出すような最小の θ は

$$Mg\mu \cos \theta = \frac{2Mg}{7} \sin \theta \quad \dots (16)$$

によって与えられる。 θ を計算すると、

$$\theta = \arctan\left(\frac{7\mu}{2}\right) \quad \dots (17)$$

この場合、摩擦力は $f = Mg\mu \cos \theta$ となり、 $\dot{v} < a\dot{\omega}$ となって球は空回りし始める。滑り出した後は $f = Mg\mu' \cos \theta < Mg\mu \cos \theta$ より $\dot{v} < a\dot{\omega}$ の関係が続くため、球は空回りし続けることになる。



5. 球が最大の高さまで上ったとき、並進運動速度 v は 0 となる。

摩擦があつて球が滑らずに上る場合、 $v = a\omega$ より、最大の高さまで上った時点で $v = \omega = 0$ となつて、球の運動エネルギーは 0 になる。転がって運動している限り摩擦力は仕事をしないので、系の力学的エネルギーは保存されている。従つて、この場合、斜面を上り始めたときの球の全運動エネルギーと等しい位置エネルギーを得る高さまで球は斜面を上ることができる。

一方、摩擦がない場合、球にモーメントは働かないので回転は止まらず、最大の高さまで上った時点でも球は運動エネルギーを持つ。このときの位置エネルギーは斜面を上り始めたときの球の全運動エネルギーよりも低い。

以上より、摩擦がある場合の方が球は高い位置まで上ることができる。

問題 5 解答

1. 測定値を真の値から一様にずらすような誤差。例えば、ある温度 T で定規で棒の長さを測る場合、定規の変形による目盛間隔の一様なずれや、温度制御が不十分なために棒の熱膨張によるずれが原因となりうる。原理的には完全除去可能。

2. S が極小値をとればよいので、 S を X について偏微分して、

$$\sum_{i=1}^N (x_i - X) = 0 \quad \dots (1)$$

より、

$$X = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad \dots (2)$$

が得られる。これは測定値 x_i の算術平均になっている。

3. 最尤法を用いてとく。尤度関数 L を以下のように定義する。

$$L \equiv \frac{1}{(\sqrt{2\pi}\sigma)^N} \exp -\frac{S}{2\sigma^2} \quad \dots (3)$$

L が極大値をとるような σ が測定の標準偏差なので、

$$\frac{\partial L}{\partial \sigma} = 0 \quad \dots (4)$$

を計算して、

$$\sigma = \sqrt{\frac{S}{N}} \quad \dots (5)$$

が得られる。 X の値は前問で求めたものである。

標準偏差の式としては N ではなく $N-1$ となっているものもありますが、そちらを導くのは少し面倒です。限られた時間内での解答と言う意味では上記のものでもよいように思います。テイラーという人の”計測における誤差解析入門”という本がきちんと導いていたので、気になる方は参照して下さい。東京化学同人から翻訳が出てます。

4. まず、2 変数関数について誤差の伝播則を導く。この導出はもっと変数が多い場合にもあてはまる。独立変数 x, y の関数 $f(x, y)$ を考える。 x_i, y_i は測定値で、誤差は小さいと仮定する。最尤値 X, Y のまわりでテイラー展開して 1 次の項まで残すと、

$$f(x_i, y_i) - f(X, Y) = \frac{\partial f}{\partial X}(x_i - X) + \frac{\partial f}{\partial Y}(y_i - Y) \quad \dots (6)$$

となる。 $f(x, y)$ の標準偏差 σ_f^2 は

$$\sigma_f^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [f(x_i, y_i) - f(X, Y)]^2 \quad \dots (7)$$

なので、はじめの等式を両辺を 2 乗して和をとると、

$$\sigma_f^2 = \left(\frac{\partial f}{\partial X}\right)^2 \sigma_x^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial Y}\right)^2 \sigma_y^2 + 2 \frac{\partial f}{\partial X} \frac{\partial f}{\partial Y} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - X)(y_i - Y) \quad \dots (8)$$

が得られる。この式の右辺第 3 項は x と y が独立変数なので、多数回の測定では消える。よって、誤差の伝播は以下の式に従う。

$$\sigma_f^2 = \left(\frac{\partial f}{\partial X}\right)^2 \sigma_x^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial Y}\right)^2 \sigma_y^2 \quad \dots (9)$$

これを独立な n 変数に拡張して、問題 2 でもとめた X を x_1, x_2, \dots, x_n の関数とみなして適用する。 x_i は同一の物理量の測定値なので、標準偏差はすべて等しく前問で求めた σ である。また、 $\partial X / \partial x_i = 1/N$ がすべての i について成り立つから、最尤値 X の標準偏差、つまり誤差 δX は、

$$\delta X = \sqrt{N \frac{1}{N^2} \sigma^2} = \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \quad \dots (10)$$

となる。 N を大きくした場合、 σ はほとんど変化しない（ずうっと同じ条件のもとで測定をしているので、誤差も同じような出現の仕方をするはずです。）ので、 δX はゆるやかに減少していくことになる。

5. 誤差は前問で導いた法則に従って伝播するので、 $X + Y$ について伝播則を適用すると、

$$\delta(X + Y) = \sqrt{\delta X^2 + \delta Y^2} \quad \dots (11)$$

である。

6. 前問と同様に、

$$\delta(XY) = \sqrt{Y^2 \delta X^2 + X^2 \delta Y^2} \quad \dots (12)$$

$$\delta(X/Y) = \frac{X}{Y} \sqrt{\frac{\delta X^2}{X^2} + \frac{\delta Y^2}{Y^2}} \quad \dots (13)$$

と計算できる。

7. 表記を簡単にするため、以下の量を定義しておきます。まず、重み w_k を、

$$w_k \equiv \frac{1}{\sigma_{Y_k}^2} \quad \dots (14)$$

次に、 Δ として、

$$\Delta \equiv \sum_{k=1}^M w_k X_k^2 - \left(\sum_{k=1}^M w_k X_k \right)^2 \quad \dots (15)$$

なお、 σ_{Y_k} と、 δY_k は、以下の関係があります。問題 4 を参照して下さい。

$$\frac{\sigma_{Y_k}}{\sqrt{N}} = \delta Y_k \quad \dots (16)$$

これで準備完了です。文体を変えて解答に入ります。

尤度関数 L を以下のように定義する。

$$L \equiv \frac{1}{\prod_{k=1}^M \sqrt{2\pi\sigma_{Y_k}}} \exp \left[- \sum_{k=1}^M \frac{w_k (Y_k - pX_k - q)^2}{2} \right] \quad \dots (17)$$

これを最大にするような p, q もっとも確からしい値なので、

$$\frac{\partial L}{\partial p} = 0 \quad \dots (18)$$

$$\frac{\partial L}{\partial q} = 0 \quad \dots (19)$$

を計算して、以下の式が得られる。

$$p \sum_{k=1}^M w_k X_k + q \sum_{k=1}^M w_k = \sum_{k=1}^M w_k Y_k \quad \dots (20)$$

$$p \sum_{k=1}^M w_k X_k^2 + q \sum_{k=1}^M w_k X_k = \sum_{k=1}^M w_k X_k Y_k \quad \dots (21)$$

(ちなみに、この連立方程式を行列で書いた時の係数行列の行列式が Δ です。) これらを解いて、

$$p = \frac{\sum_{k=1}^M w_k X_k Y_k \sum_{k=1}^M w_k - \sum_{k=1}^M w_k X_k \sum_{k=1}^M w_k Y_k}{\Delta} \quad \dots (22)$$

$$q = \frac{\sum_{k=1}^M w_k X_k^2 \sum_{k=1}^M w_k Y_k - \sum_{k=1}^M w_k X_k \sum_{k=1}^M w_k X_k Y_k}{\Delta} \quad \dots (23)$$

この式に σ_{Y_k} と δY_k の関係式を用いれば答が得られる。

このような問題を重みつき最小 2 乗法というそうです。

問題 6 解答

1. (i) $x + \Delta x$ における $q = +2$ のイオンの数を $N_2(x + \Delta x)$ とする。ここで、

$$\sigma = \sigma_i + \sigma_r \quad \dots (1)$$

とすると、

$$N_2(x + \Delta x) = N_2(x) - N_2(x) \times n\sigma\Delta x \quad \dots (2)$$

となる。これから、

$$\frac{N_2(x + \Delta x) - N_2(x)}{\Delta x} = -N_2(x) \times n\sigma \quad \dots (3)$$

となる。 $\Delta x \rightarrow 0$ として、

$$\frac{dN_2(x)}{dx} = -n\sigma N_2(x) \quad \dots (4)$$

をえる。 $N_2(0) = N_0$ を考慮してこの微分方程式の解は

$$N_2(x) = N_0 \exp(-n\sigma x) \quad \dots (5)$$

となる。

- (ii) (i) と同様にして、

$$N_1(x + \Delta x) = N_1(x) + n\sigma_i N_2(x) \Delta x \quad \dots (6)$$

より、

$$\frac{dN_1(x)}{dx} = n\sigma_i N_2(x) \quad \dots (7)$$

を得る。

ここで、 $N_2(x) = N_0 \exp(-n\sigma x)$ と、 $N_1(0) = 0$ から、この微分方程式の解は、

$$N_1(x) = \frac{\sigma_i}{\sigma} \times N_0 \times (1 - \exp(-n\sigma x)) \quad \dots (8)$$

である。

同様にして、

$$N_3(x) = \frac{\sigma_r}{\sigma} \times N_0 \times (1 - \exp(-n\sigma x)) \quad \dots (9)$$

をえる。

- (iii) $\sigma_i = 1.0 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$, $\sigma_r = 1.0 \times 10^{-22} \text{ cm}^2$, $n = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $d = 0.2 \text{ cm}$ である。よって、

$$\begin{aligned} N_2(0.2) &= N_0 \exp(-0.2 \times n \times \sigma_i) \times \exp(-0.2 \times n \times \sigma_r) \\ &= N_0 \exp(-2) \times \exp(-2 \times 10^{-5}) \\ &\approx N_0 \exp(-2) \\ &= N_0 \times 1/7.4 \end{aligned} \quad \dots (10)$$

である。また、

$$N_1(x) = \frac{\sigma_i}{\sigma} \times N_0 \times (1 - N_2(x)) \quad \dots (11)$$

より、

$$\begin{aligned} N_1(0.2) &= \frac{1.0 \times 10^{-17}}{1.0 \times 10^{-17} + 1.0 \times 10^{-22}} \times N_0 \times (1 - N_2(0.2)) \\ &\approx 1 \times N_0 \times (1 - 1/7.4) \\ &= N_0 \times 6.4/7.4 \end{aligned} \quad \dots (12)$$

である。

同様に、

$$N_3(x) = \frac{\sigma_r}{\sigma} \times N_0 \times (1 - N_2(x)) \quad \dots (13)$$

より、

$$\begin{aligned} N_3(0.2) &= \frac{1.0 \times 10^{-22}}{1.0 \times 10^{-17} + 1.0 \times 10^{-22}} \times N_0 \times (1 - N_2(0.2)) \\ &= \frac{1}{1 + 10^5} \times N_0 \times (1 - 1/7.4) \\ &\approx 10^{-5} \times N_0 \times 6.4/7.4 \\ &= N_0 \times 6.4/7.4 \times 10^{-5} \end{aligned} \quad \dots (14)$$

である。

以上から、

$$N_1(0.2) : N_2(0.2) : N_3(0.2) = 6.4 : 1 : 6.4 \times 10^{-5} \quad \dots (15)$$

となる。

2. 磁束密度 B における、質量 m 、電荷 q の粒子の曲率半径 ρ は、

$$m \frac{v^2}{\rho} = qvB \quad \dots (16)$$

より、

$$\rho = \frac{mv}{qB} \quad \dots (17)$$

となる。ここで、

$$m = 12 \times 1.7 \times 10^{-27} \quad \dots (18)$$

である。よって、

$$\begin{aligned}
 \rho_1 &= \frac{20.4 \times 10^{-27} \times 8.2 \times 10^6}{1 \times 1.6 \times 10^{-19} \times 0.1} \\
 &= 5.1 \times 2.1 \\
 &= 10.71 \approx 11(m)
 \end{aligned}
 \quad \dots (19)$$

である。また、 $\rho_2 = \rho_1/2$ より、

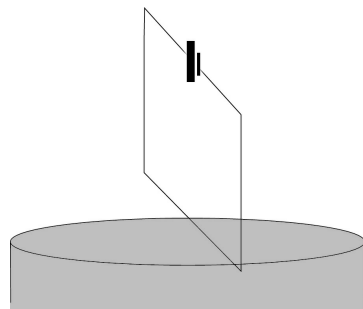
$$\begin{aligned}
 \rho_2 &= 10.7/2 \\
 &= 5.35 \\
 &\approx 5.4(m)
 \end{aligned}
 \quad \dots (20)$$

であり、同様に、 $\rho_3 = \rho_1/3$ より、

$$\begin{aligned}
 \rho_3 &= 10.7/3 \\
 &\approx 3.6(m)
 \end{aligned}
 \quad \dots (21)$$

である。

3. (i) 右図の装置を用いて、針金がどちらに動くかで B の向きを決定する。



- (ii) 磁気モーメント μ を角運動量 $J = \hbar I$ を用いて、 $\mu = \gamma J$ で定義する。これは静磁場 $H = \frac{B}{\mu_0}$ 内では、角速度 $\omega = -\gamma H$ で回転運動をする。この ω の大きさを測ることで、磁場の大きさを決定する。

4. プラズマがない時の速度、エネルギーを v_0 、 E_0 、ある時の速度、エネルギーを v_1 とする。すると、

$$\frac{1}{2}mv_0^2 = E_0 \quad \dots (22)$$

$$\frac{1}{2}mv_1^2 = E_0 - \Delta E \quad \dots (23)$$

となる。

これから、

$$\Delta E = \frac{1}{2}m \times (v_0^2 - v_1^2) \quad \dots (24)$$

である。また、

$$\frac{L}{v_1} - \frac{L}{v_0} = t \Leftrightarrow v_1 = \frac{v_0 L}{v_0 \Delta t + L} \quad \dots (25)$$

である。

(25),(26) から

$$\Delta E = \frac{1}{2}mv_0^2 \times \left(1 - \frac{L^2}{(v_0 \Delta t + L)^2}\right) \quad \dots (26)$$

値を代入して、

$$\begin{aligned}\Delta E &= 350 \times \left(1 - \frac{16}{(4 + 8.2 \times 5 \times 10^{-3})^2}\right) \\ &= 350 \times (1 - (1 + 10.25 \times 10^{-3})^{-2}) \\ &= 350 \times (1 - (1 - 2 \times 10.25 \times 10^{-3})) \\ &= 350 \times 20.5 \times 10^{-3} \\ &= 7.175\end{aligned}$$

よって、 $\Delta E = 7.2(keV)$ である。

5. この実験のように、高速粒子の測定にはプラスチックシンチレーターのほうが向いている。なぜなら、*NaI* シンチレーターは蛍光減衰時間がプラスチックシンチレーターに比べて、100 倍以上長くて、早い計測には向かないからである。

問題 7 解答

1. 運動方程式は、

$$\dot{\mathbf{p}} = e\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad \left(\mathbf{p} = \frac{m_0 \mathbf{v}}{\sqrt{1-\beta^2}} \right) \quad \dots (1)$$

と書ける。式 (1) の両辺に \mathbf{p} を内積して、

$$\begin{aligned} \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{p}} &= e\mathbf{p} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) = 0 \\ \frac{d}{dt} \mathbf{p}^2 &= 0 \\ p^2 &= \text{Const.} = P_p^2 \end{aligned} \quad \dots (2)$$

さて、式 (1) を陽に書くと、

$$\begin{pmatrix} \dot{p}_x \\ \dot{p}_y \\ \dot{p}_z \end{pmatrix} = e \begin{pmatrix} v_y B \\ -v_x B \\ 0 \end{pmatrix}$$

$v_x = \dot{x}$ 等より、

$$\begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} eyB + C_1 \\ -exB + C_2 \\ C_3 \end{pmatrix}$$

今、 $t = 0$ で $x = y = z = 0$ 、 $p_x = P_p$ 、 $p_y = p_z = 0$ とすると、

$$\begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} eyB + P_p \\ -exB \\ 0 \end{pmatrix}$$

これを式 (2) に代入して、

$$\begin{aligned} (eyB + P_p)^2 + (-exB)^2 &= P_p^2 \\ x^2 + \left(y + \frac{P_p}{eB} \right)^2 &= \left(\frac{P_p}{eB} \right)^2 \end{aligned} \quad \dots (3)$$

よって陽子は中心 $(0, -\frac{P_p}{eB}, 0)$ 、半径 $\frac{P_p}{eB}$ の円運動をする。(図略)

2. 等しい物理量: (静止) 質量、寿命、スピン 等異なる物理量: 電荷、磁気モーメント
3. 陽子と反陽子は電荷が反対であることを用いる。
- (i) 電場をかけ、陽子と反陽子を splitting させる。
- (ii) 磁場をかけ、陽子と反陽子の回転方向が逆であることを利用する。
4. 実験室系ではターゲットは静止しているので、全運動量 \mathbf{P} は、

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} P_p \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P_p \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ビーム陽子とターゲット陽子にはそれぞれ相対論的な関係式

$$E^2 = (pc)^2 + (m_p c^2)^2$$

が成立するから、全エネルギー E は、

$$E = \sqrt{(P_p c)^2 + (m_p c^2)^2} + m_p c^2$$

となる。重心系 ($\mathbf{p}_{beam} + \mathbf{p}_{target} = 0$) でも同様に

$$\mathbf{P} = 0$$

$$E = 2 \sqrt{(P_p^* c)^2 + (m_p c^2)^2}$$

となる。

5. 重心系での全エネルギー M が生成粒子の (静止) 質量の和より大きいときに反応が起こる。4 元ベクトルの内積は Lorentz invariant だから、実験室系と重心系でこの値は等しく、

$$\left(\frac{E_{beam} + E_{target}}{c} \right)^2 - (\mathbf{p}_{beam} + \mathbf{p}_{target})^2 = \left(\frac{M}{c} \right)^2$$

$$M = \sqrt{2(m_p c^2)^2 + 2m_p c^2 E_{beam}}$$

$M \geq 4m_p c^2$ であれば良いので、 $E_{beam} = E_{min} + m_p c^2$ に注意して、

$$E_{min} = 6m_p c^2$$

6. ターゲット陽子に固定した実験室系から x 軸方向に v^* だけ boost した系が重心系になるとする。(この時ターゲット陽子の速度は $-v^*$ となる。) このとき、 E, \mathbf{P} は Lorentz 変換に従い、 E', \mathbf{p}' に変換される。具体的には $\beta^* = \frac{v^*}{c}$ として、

$$\begin{cases} p_{beam}^{'x} = \frac{p_{beam}^x - \beta^* \frac{E_{beam}}{c}}{\sqrt{1 - \beta^{*2}}} \\ p_{target}^{'x} = \frac{p_{target}^x - \beta^* \frac{E_{target}}{c}}{\sqrt{1 - \beta^{*2}}} \end{cases}$$

いま、 $E_{kin} = E_{min} = 6m_p c^2$ より、 $E_{beam} = 7m_p c^2$ 、 $E_{target} = m_p c^2$ 、 $p_{target}^x = 0$ であり、ビーム粒子についての相対論的な関係式より $p_{beam}^x = 4\sqrt{3}m_p c$ が導ける。これらを上式に代入して、 $p_{beam}' + p_{target}' = 0$ を用いれば、

$$\beta^* = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$E_{kin} = E_{min}$ の時、終状態の運動量は z 成分のみで、4 粒子に等分配される (重心系でみると生成した粒子はすべて静止しているので、生成した粒子の運動量の大きさは等しい) ので、 $p_{\bar{p}} = \sqrt{3}m_p c$

問題 8 解答

1. 物質 k の一分子当たりの標準自由エネルギーを $\mu_k^0(T)$, 一分子当たりの自由エネルギーを $\mu_k(T, p)$ とおくと, 活量 a_k は以下の式で定義される:

$$\mu_k(T, p) = \mu_k^0(T) + k_B T \ln a_k. \quad \dots (1)$$

また, 物質 k と物質 k' の間での 二状態転移における 平衡定数 $K(T)$ は次式で定義される:

$$K(T) = \frac{a_{k'}}{a_k}. \quad \dots (2)$$

反応系を理想溶液で近似すると, 活量はモル分率によって近似される. すなわち, 所与の転移の割合 f_{app} を用いて, 平衡定数は次のように計算される:

$$K(T) = \frac{f_{app}}{1 - f_{app}}. \quad \dots (3)$$

一方で式 (1), (2) より,

$$K(T) = \exp \left(\frac{\mu_{k'}(T, p) - \mu_{k'}^0(T) - (\mu_k(T, p) - \mu_k^0(T))}{k_B T} \right),$$

となるが, 各温度において熱平衡状態に達していたのであれば, $\mu_k(T, p) = \mu_{k'}(T, p)$ が成り立つ. これより上の式は以下のように変形できる:

$$K(T) = \exp \left(- \frac{\mu_{k'}^0(T) - \mu_k^0(T)}{k_B T} \right). \quad \dots (4)$$

以上から標準自由エネルギー ΔG は分子数 N と転移の割合 f_{app} によって,

$$\begin{aligned} \Delta G &= N (\mu_{k'}^0(T) - \mu_k^0(T)), \\ &= -N k_B T \ln K(T), \\ &= RT \ln \frac{1 - f_{app}}{f_{app}}, \end{aligned} \quad \dots (5)$$

と計算される. ただし, 得られた ΔG は二状態転移を仮定しているため, model dependent である.

2. Gibbs の自由エネルギーは, $G = H - TS$ によって表されるので,

$$S = - \frac{\partial G}{\partial T},$$

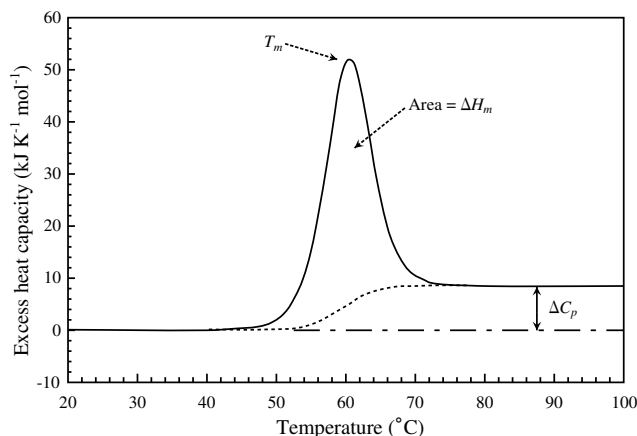
が成り立つ. 故に, 偏微分の線形性から,

$$\Delta S = - \frac{\partial \Delta G}{\partial T}. \quad \dots (6)$$

$\Delta G = \Delta H - T \Delta S$ を, 上の式と式 (5) の二行目を用いて変形すると,

$$\begin{aligned} \Delta H &= -RT \ln K + T \frac{\partial}{\partial T} RT \ln K, \\ &= RT^2 \frac{\partial \ln K}{\partial T}, \end{aligned} \quad \dots (7)$$

が得られる. これは二状態転移を前提とした van't Hoff のエンタルピー変化に他ならない.



3. 溶液の DSC の読みから溶質の DSC の読みを引いた上に, C_p の変化によって生じる back ground を引く. 残されたピークの面積が ΔH_{cal} となる.

ΔH_{cal} は back ground の引き方に不定性が残るものの, ただし図は本問用に作ったものではなく, Chem.Rev.1997, 97,1251-1267 から転載した.

model independent である.

4. 二状態転移が事実であれば,

$$\Delta H_{cal} = \Delta H_{vH}, \quad \dots (8)$$

他に中間状態をとまなうのであれば,

$$\Delta H_{cal} \neq \Delta H_{vH}, \quad \dots (9)$$

となる. むしろ, 二種類の enthalpy の比 $\Delta H_{cal}/\Delta H_{vH}$ が, 1 からどの程度ずれているかが反応機構が二状態遷移で記述できるか否かの指標となる.

5. 低圧条件下では,

$$\begin{aligned} dH &= C_p dT, \\ dS &= \frac{\delta Q}{T}, \\ &= \frac{C_p dT}{T}, \end{aligned}$$

が成り立つため, C_p が一定の系ではある温度 T_0 について,

$$\begin{aligned} H(T) &= H(T_0) + C_p(T - T_0), \\ S(T) &= S(T_0) + C_p \ln \frac{T}{T_0}, \end{aligned}$$

が成り立つ. これを用いると, 異なる C_p の二系間での自由エネルギーの変化は, $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ に基づいて,

$$\begin{aligned} \Delta G(T) &= \Delta H(T) - T\Delta S(T), \\ &= \Delta H(T_m) + \Delta C_p(T - T_m) \\ &\quad - T \left(\Delta S(T_m) + \Delta C_p \ln \frac{T}{T_m} \right), \end{aligned} \quad \dots (10)$$

と計算される. ただし, T_0 として転移温度 T_m をとった.

$\Delta G(T)$ は, $T = T_m \exp\left(-\frac{\Delta S(T_m)}{\Delta C_p}\right)$ でピークを持つ上に凸な関数である. $\frac{\Delta S(T_m)}{\Delta C_p}$ が小さいならば, $\Delta G(T)$ は $T = T_m$ 以外に低温側にもう一つ零点をもつことが可能である.

6. 有機化合物の立体構造のうち, ある種の官能基, 不斉炭素原子及び α -ヘリックスは, 左右の円偏光についての吸収率が系統的に異なっていることが知られている. folding-unfolding 転移においては, 主に α -ヘリックスの螺旋構造が解けることによって円二色性が変化するとされる.
7. 注:論文に疎水, 親水基と水との相互作用が比熱の gap を生じているとの記述もあり, 解答として満足なものが間に合いませんでしたので改訂もしくは訂正に譲ります.

問題 9 解答

参考) オルソ水素、パラ水素

1. Hamiltonian の回転部分は、 $H_{rot} = \frac{1}{2I} \left(p_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2 \theta} p_\phi^2 \right)$ と書けるので partition function は、

$$\begin{aligned} Z_{rot} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^\infty dp_\theta \int_{-\infty}^\infty dp_\phi \exp \left\{ -\frac{1}{k_B T} \frac{1}{2I} \left(p_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2 \theta} p_\phi^2 \right) \right\} \\ &= \frac{2Ik_B T}{\hbar^2} \end{aligned}$$

である。従って Helmholtz の free energy は、

$$F = -k_B T \ln Z_{rot} = -k_B T \ln \frac{2Ik_B T}{\hbar^2}$$

となる。 $S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V$ $C = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)$ だから、

$$C = k$$

$$(\text{別}) \langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_{rot} = k_B T, C = \frac{\partial E}{\partial T} = k$$

2. $\Lambda \equiv \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$ の固有値は $l(l+1)$ であるから、

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}$$

縮重度は $g_l = 2l+1$ 。

3. partition function は

$$Z_{rot} = \sum_{l=0}^{\infty} g_l \exp \left(-\frac{E_l}{k_B T} \right)$$

またエネルギーは $\beta \equiv \frac{1}{k_B T}$ として、 $\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_{rot}$ であるから、 β の微分を T の微分に書き換えて、

$$\langle E \rangle = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} g_l \exp \left(-\frac{E_l}{k_B T} \right) \right\}$$

4. 低温ではほとんど回転励起はしないと考えられるので、級数を $l=1$ までとって、

$$Z_{rot} = 1 + 3 \exp \left(-\frac{E_1}{k_B T} \right)$$

とできる。 $(E_0$ は簡単なので、数字に直してしまった。)

$$\begin{aligned} C &= \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \\ &= \frac{\partial}{\partial T} \frac{3E_1}{\exp \left(\frac{E_1}{k_B T} \right) + 3} \\ &= \frac{3E_1^2}{k_B T^2} \frac{\exp \left(\frac{E_1}{k_B T} \right)}{\left[\exp \left(\frac{E_1}{k_B T} \right) + 3 \right]^2} \end{aligned}$$

5. 核の合成スピンは 1, 0, -1 をとりうる。このうち $s=1, -1, 0$ の片方は spin triplet を作り (対称スピン波動関数)、 $s=0$ のもう片方は spin singlet を作る (反対称スピン波動関数)。このスピン波動関数を用いて全体の波動関数は、(回転波動関数) \times (スピン波動関数) で表される。さて、核が fermion であることから、この波動関数は全体として反対称でなくてはならず、

1. (対称) \times (反対称)

2. (反対称) \times (対称)

のみ許される。ここで、回転の波動関数が l :even の時対称、 l :odd の時反対称であることを考えると、エネルギー固有値は、

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}$$

で変わらず、ただ 1. の時 l :even、2. の時 l :odd になる。同様に縮重度は $g_l = 2l + 1$ で 1. の時 l :even、2. の時 l :odd になる。

6. 5. の事情を加味すると partition function は、

$$Z_{rot} = 3Z_{rott} + 1Z_{rots}$$

となる。ただし、

$$Z_{rott} \equiv \sum_{l=0, \text{even}} (2l+1) \exp\left(-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Ik_B T}\right)$$

$$Z_{rots} \equiv \sum_{l=\text{odd}} (2l+1) \exp\left(-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Ik_B T}\right)$$

低温極限では 4. と同様にして求められる。やはり $l=1$ までをとると、 $Z_{rott} = 1, Z_{rots} = 3 \exp\left(-\frac{\hbar^2}{Ik_B T}\right)$ となるので、比熱は

$$C = \frac{3}{4}C_{rott} + \frac{1}{4}C_{rots} = 0$$

7. 核が spin triplet を作っている場合の分子と singlet を作っている場合の分子の数を考えてみる。partition function の比が個数比になることに注意する。即ち、

$$n \equiv \frac{N_{rott}}{N_{rots}} = \frac{3Z_{rott}}{1Z_{rots}}$$

十分高温では Z の中の exponent を Taylor 展開して一次項を取るという近似が許されるので、実際計算してみると $n=3$ と見なせる。同様の計算を低温極限で行うと、 $n=0$ となる。実際の実験では高温状態から冷却すると準静的過程にくらべ、急速に冷却することになる。するとともはや平衡状態の統計力学は正しい結果を与えず、実際には $n=3$ で「凍り付いたまま」低温状態に移行することになる。すると比熱は $C = \frac{3}{4}C_{rott} + \frac{1}{4}C_{rots}$ で計算できることになる。一方で低温極限では $n=0$ となるので、比熱は $C = C_{rots}$ で与えられることになる。 C_{rott} と C_{rots} は高次項を計算してみれば分かるように微妙に違うので、上の二通りの場合で比熱が異なることになる。