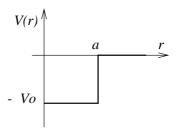
# 1995年度 入学試験 物理専門科目

## 専攻問題1

質量 m の粒子が半径 a 深さ  $V_0$  の井戸型ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & (r \le a) \\ 0 & (r > a) \end{cases}$$

の中を運動する。次の設問に答えよ。



1. 波動関数を極座標  $(r, \theta, \phi)$  で

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R_{\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

のように表したとき  $R_\ell(r)$  が従う方程式を書け。ただし、ラプラシアンを極座標で書くと

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{\Lambda}}{r^2}$$

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{\Lambda}}{r^2} \qquad \qquad \hat{\Lambda} = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

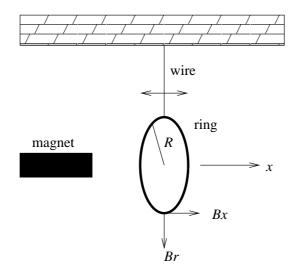
のように表される。また、 $Y_{\ell m}( heta,\phi)$  は球面調和関数で演算子  $\hat{\Lambda}$  の固有関数である。

$$\hat{\Lambda}Y_{\ell m}(\theta,\phi) = -\ell(\ell+1)Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

- 2.  $V_0$  のある値については s 状態 ( $\ell=0$ ) に束縛状態が一つだけあり、その束縛エネルギー  $\varepsilon$  は  $V_0$  に比べて十分 小さい $(0 < \varepsilon \ll V_0)$ 。
  - (i) ポテンシャルの深さ $V_0$ を求めよ。
  - (ii) 上の束縛状態での井戸の外 (r > a) に粒子が存在する確率を計算せよ。
- 3. 次に同じポテンシャルによる散乱を考える。各ℓでrの十分大きいところで

$$R_{\ell}(r) \sim A_{\ell} \frac{\sin{(kr - \frac{1}{2}\ell\pi + \delta_{\ell})}}{r}$$

で表されているとき、 $\delta_\ell$  を位相のずれという。(ii) と同じ  $V_0$  の値について入射エネルギーが  $E=\frac{9V_0}{16}$  のとき、 s 波 ( $\ell=0$ ) の位相のずれの正接  $tan \delta_0$  を求めよ。



磁場中におかれた単振り子の一次元振動について考える。図に示すように、振り子は導線を円形にしたリングと、それを吊す絶縁体のワイヤーからできている。導線の太さはリングの半径 R に比べて十分細い。静止状態でのリングの中心軸を x 軸にとり、リングの x 座標の平衡位置からのずれを x(t) とする。振り子の振幅は十分小さく、リングの中心軸は常に x 軸に一致しているとみなせるとする。磁場がないときのリングの運動方程式は

$$m\left(\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} + \omega_0^2x\right) = f(t) \tag{1}$$

とあらわすことができる。ここで、m は振り子の質量、 $\omega_0$  は固有角振動数。f(t) は外力である。図のように x 軸に沿って細長い棒磁石が置かれており、x 軸に関して軸対称な磁場をつくっている。磁束密度のリングの中心から半径方向の成分を  $B_r$ 、x 方向の成分を  $B_x$  とする。リングの導線の位置での磁場に関して、 $B_r$  は振動の範囲以内では一様とみなせるとする。このような磁場中に置かれたリングの振動について、以下の問題に答えよ。ただし、1 から 3 の問題においては、リングのインダクタンスは無視できるものとする。

- 1. まずリングの一周の抵抗値が r の場合を考える。リングを磁場中で振動させると、その運動は電磁誘導の作用により減衰する。このとき、最初にリングがもっていた運動エネルギーはどこに失われたかを述べよ。また、このエネルギー損失の割合を大きくするためには、抵抗値 r が大きい方がよいか、小さい方がよいか、理由をつけて答えよ。
- 2. (i) 運動にともない、リングに発生する誘導起電力eが

$$e = -2\pi R B_r \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}$$

となることを示せ。

- (ii) 磁場中でのリングの運動方程式を求めよ。
- 3. 次に、リングを静止させた状態で、 $f(t) = p_0 \delta(t)$  ( $\delta(t)$  は Dirac の  $\delta$  関数、 $p_0$  は定数) の外力を与えたときの  $t \ge 0$  における振動を時間の関数として求め、その概略を図示せよ。
- 4. (i) 抵抗値 r がある程度小さくなると、リングの自己インダクタンス L が運動に効き始める。抵抗とインダクタンスの間にどのような関係があるとき、インダクタンスによる効果が支配的になるかを答えよ。
  - (ii) この条件が成立する場合について、磁場中でのリングの運動方程式を求め、式 (1) で表されるような振動がどのような影響を受けるかを述べよ。

一次元の自由電子系を考える。系の長さをL、温度をT、電子数をNとする。一様な磁場Hのもとで、ハミルト ニアンは、

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \left( \frac{p_i^2}{2m} - \mu_i H \right)$$

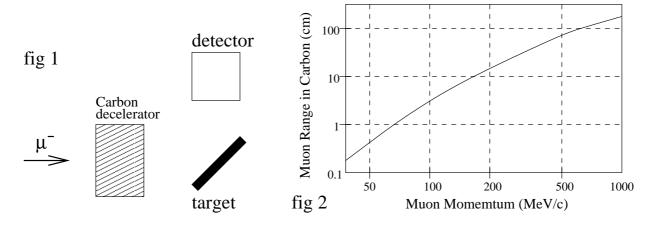
と書かれるものとする。ただし、m は電子の質量、 $p_i, \mu_i$  はそれぞれ i 番目の電子の運動量とスピン磁気モーメン トであり、 $\mu_i$  は  $\pm \mu_{\rm B}(\mu_{\rm B}$  はボーア磁子) の値だけをとる。また、L は十分大きくて、電子状態に対する系の境界の影 響は無視できるものとする。

- 1. 電子はボルツマン統計に従うものと仮定して次の問に答えよ。
  - (i) H = 0 の場合に、カノニカルアンサンブルにおける分配関数を求めよ。
  - (ii) それを用いて系の内部エネルギーを求めよ。
  - (iii)  $H \neq 0$  の場合は分配関数はどう書かれるか。
  - (iv) それを用いて比熱を求めよ。

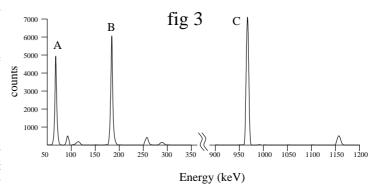
  - (vi) 帯磁率  $\chi = \lim_{H\to 0} (M/H)$  を求めよ。
- 2. 電子がフェルミ統計に従うことを考慮して次の問に答えよ。
  - (i) T=0, H=0 における系の内部エネルギーをフェルミエネルギー  $\varepsilon_{\rm F}$  と N を用いて表せ。
  - (ii) T=0 において、磁化 M と磁場 H の間の関係を求めよ。(結果は、 $\mu_{ ext{\tiny B}}H$  と  $2arepsilon_{ ext{\tiny F}}$  の大小関係によって異なる ことに注意せよ。)
  - (iii) 帯磁率  $\chi$  を求めよ。 $\mathbf{1}$  の (vi) で求めた  $\chi$  の T=0 における振る舞いとの違いについて、物理的な理由をつ けて説明せよ。

図 1 のような装置によって、標的中に、負ミュオン  $(\mu^-)$  を静止させると、ミュー原子  $(\mu^-)$  が原子核のクーロン場に束縛された原子) が生成される。生成当初、 $\mu^-$  はミュー原子の高い励起状態にあるが、 $10^{-12}$  秒程度の短時間に X 線などを出して基底状態に落ちる。これに関連し、以下の問に答えよ。ただし、簡単のために、電子の影響は 無視して良い。つまり、ミュー原子は、原子核の回りに負ミュオンが一個だけまわっている「水素様原子」とみな せるものとする。なお、必要に応じて、以下の数値を参照せよ。

 $m_e$  (電子質量) =  $0.511\,\mathrm{MeV/c^2}$  水素原子の  $1\mathrm{s}$  電子の束縛エネルギー =  $13.6\,\mathrm{eV}$   $m_\mu$  (ミュオン質量) =  $106\,\mathrm{MeV/c^2}$  ボーア半径 =  $0.529\times10^{-10}\,\mathrm{m}$   $m_p$  (陽子質量) =  $938\,\mathrm{MeV/c^2}$ 



- 1. <u>運動エネルギー</u>120MeV の  $\mu^-$  を図 1 のように炭素の板によって減速し、薄い標的に静止させたい。炭素板の厚さをどの様に選べばよいか。図 2 のグラフを参考にして概算せよ。但し、図 2 はミュオンの炭素中での飛程を、入射粒子の 運動量 の関数で示したものである。
- 2. ある単元素標的を用い、図 1 の装置でミュー原子が励起状態から基底状態に向かって次々に遷移する際に放出される X 線を測定したところ、図 3 のようなエネルギースペクトルが得られた。図中に強く見えているピークのうち、B のピークは、 $\mu^-$  原子の  $3d \rightarrow 2p$  遷移によるものであるという。図中の A,C のピークは、各々どの様な遷移によるものか。推測せよ。(注:ミュー原子の X 線遷移は、 $3d \rightarrow 2p$  の様に、主として電気双極子遷移であることが知られている。)
- 図3のデータをもとに、標的の原子番号
   Zを推定せよ。
- 4. 標的核が原子番号 Z = 82、質量数 A = 208 である場合、核を点電荷とみなして、ミュー原子の 1s 軌道半径を概算し、これを標的核半径と比較せよ。
- 5. 実際には原子核は点電荷ではなく、有限 の核半径を持つ。この効果が、図3の様 なスペクトルにどの様に現れるかを、簡 潔に論じよ。



最近、炭素原子からなる、原子スケールの半径をもつ円筒状の物質(図1、各六角形の頂点が炭素原子を表す)が 合成されている。この系での電子状態を調べてみよう。(電子のスピンは無視する。)

- 1. 先ず、原子構造を無視して、図2のように電子が円筒の面を自由に運動するという模型を考える。
  - (i) 電子に対する Schrödinger 方程式を書き、その固有値および固有関数を求めよ。電子の質量を m とし、円 筒 (半径 r) の軸方向には長さ L の周期的境界条件があるとせよ。
  - (ii) 円筒の代わりに、直線の上を電子が自由運動するとしたときに、状態密度 D(E) を、導き方を示しながら 求めよ。(D(E) は E と E+dE とのエネルギー間隔 (dE は微小) 中の状態数が D(E)dE で与えられるよう な量である)。長さLの周期的境界条件があるとしてよい(Lは十分大きいとする)。 これを参考にして、円筒上の問題での状態密度を求め、∠≫rのときにその概形を書け。
- 2. 次に、円筒は原子の連なりであることを取り入れよう。ここでは簡単のために円筒の円周方向だけについてこ の効果を考えよう。即ち、円筒の円周に沿って原子の鎖を切り出し原子からなる輪を孤立したものとして考 える。
  - (i) この輪が、図3のように3原子から成るとする。各原子に局在した基底波動関数を  $\phi_n$  (n は原子の番号) として、隣合う原子  $(n,\ell)$  間を電子が跳び移る過程をハミルトニアン  $\mathcal H$  の行列要素  $\langle \phi_n | \mathcal H | \phi_\ell \rangle$  で表すと、 基底  $(\phi_1,\phi_2,\phi_3)$  で張られる  $\mathcal H$  の行列は

$$\begin{pmatrix} \varepsilon & t & t \\ t & \varepsilon & t \\ t & t & \varepsilon \end{pmatrix} \qquad t < 0$$

となる。ここで  $\varepsilon$  は原子のエネルギー準位とする。この固有エネルギーを全て (縮退度を含めて) 求めよ。

(ii) このような輪が、一般に N 個の原子から成り (図 4)、 $\mathcal H$  の行列は同様に最近接の原子間を電子が跳び移 るための t を非対角要素にもつ  $N \times N$  の行列とする。これを対角化するために固有関数が  $\psi = \sum_{n=1}^{N} c_n \phi_n$ という線形結合で表されるとして、その係数が

$$c_n \propto \exp(inka)$$
 a は格子定数

という形を解にもつことを示し、固有エネルギーを求めよ。ここで波数kのとり得る値を与えよ。

(iii) N が大きいときには、長波長つまり小さな k をもつ固有関数が存在する。このとき、エネルギーの k へ の依存性は、小さな k に対しては (定数項は別として) 自由電子のように振る舞うことを示せ。そこでは 電子の質量に対応する量はどのように与えられるか。

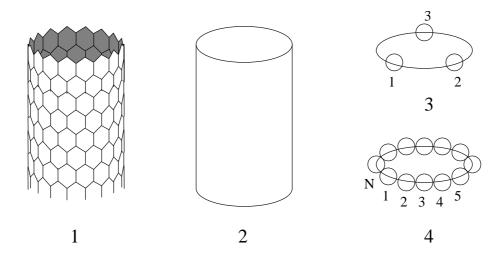


図 1 は、ロータリー・ポンプ P1 と油拡散ポンプ P2 を組み合わせて、測定槽 C を  $10^{-4}$  ~  $10^{-5}$  Pa 程度の真空に排気する装置である。S1,S2 はポンプの電源スイッチ、V1 ~ V5 は真空バルブ、W は給水バルブ、G1,G2 は真空計である。(注: 1 Pa = 1 N/m² =  $7.5 \times 10^{-3}$  Torr)

- 1. 最初 S1,S2 は off,V1 から V2 および W は閉の状態にあるとする。C を排気するために行なうべき操作とその目的を、操作の順に番号をつけて列挙せよ。なお、途中で 20 分~30 分待つことが必要であるが、これも操作の1項目として扱うこと。また、真空度のチェックも操作の1項目とし、どの真空計で何 Pa (何 Torr)程度になったことをチェックするか、真空度のオーダーを記せ。(注: 必ずしも決まった順序がない部分は、妥当な順序を一通りだけ示せばよい。)
- 2. (i) 図 2(a) はロータリー・ポンプの模式図である。このポンプの動作原理を説明する下の文の [ ],( ),{} に言葉 または記号を入れよ。

ただし[]には[油、吸気口、空気、真空、滑り板、排気口、バネ、弁、偏心、ポンプ]のいずれかの言葉 (解答に使わないものも含まれている)、

- ()には図中の部分を示す記号 a,b,c,...等(解答に使わないものも含まれている)、
- {} には式を、

例: (1)a, (2)b, [3] 油,...,{18} $V_1 \times V_{min}$  のように記せ。

「固定シリンダー (1) の中心軸にローター (2) が [3] して取り付けられている。シリンダーには [4](5) が はめられており、[6](7) からの力を受けている。シリンダー内は、ローターとシリンダーとの接触部 (8)、および [4] とローターとの接触部によって、2 つの空間に分けられている。上部に貯められた [9](10) がシリンダー内にしみ出してすべての接触面の隙間を埋め、それぞれの空間を気密に保っている。ローターが矢印の向き (時計方向) に回転すると、[11] が [12](13) から空間 (14) に取り込まれる。一方、空間 (15) ではすでに取り込まれた [11] が圧縮されつつある。(15) 内の圧力が 1 気圧を少し越えると、[16](17) が押し上げられ、[11] は排出される。[9] は気密保持と潤滑剤の役割のほかに、重要な役割がある。今、空間 (14)(15) の体積をそれぞれ  $V_1, V_2$  とする。 $V_2$  の最小値を  $V_{min}$  とすると、到達真空度はおよそ  $P_{min} = \{18\}$  Paで与えられると期待される。ところが実際のポンプの到達真空度は  $P_{min}/1000$  に達する。これは [9] が体積  $V_{min}$  を充満するのに十分な量、空間 (15) にしみ出しており、[11] は [9] 中に浮かぶ体積  $V_{min}/1000$  程度の泡にまで圧縮されて [9] とともに排出されているからである。」

- (ii) 図 2(b) は油拡散ポンプの模式図である。この真空ポンプの動作原理を、必要に応じて図中の部分 A,B,C,... 等の役割に触れながら、6 行以内で述べよ。また、油拡散ポンプが正常に動作するためには図 1 のように ロータリー・ポンプ等を併用する必要がある。その理由を 2 行以内で述べよ。
- 3. (i) 数密度 n の気体中の分子の平均自由行程 l を求めよ。ただし、気体分子を直径 d の剛体球と考えてよいものとする。
  - (ii) 窒素分子を直径  $0.3\,\mathrm{nm}$  の剛体球とするとき、温度  $300\,\mathrm{K}$  で、 $l=1\,\mathrm{cm}$  になるのは圧力 p が何  $\mathrm{Pa}$  のときか。

h

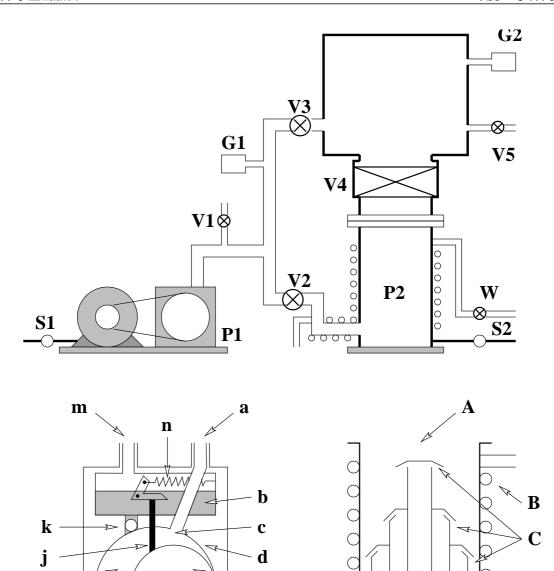
g

**D** 

- **E** 

(88888888888





F

1. 細胞内での拡散過程による物質輸送は、移動距離が短いときは、他の生物的な反応速度などと比べて十分速い が、移動距離が長くなるにつれ、急激に遅くなる。このことを半定量的に示すために、次のような場合を考察 しよう。

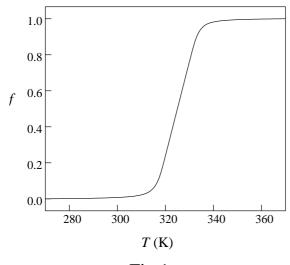
真核生物の細胞の典型的な大きさは  $20\,\mu\mathrm{m}$  であり、原核生物 (バクテリアなど) の典型的な大きさは  $1\,\mu\mathrm{m}$  であ る。典型的なタンパク質分子 (拡散定数: $10^{-7}\,\mathrm{cm}^2/\mathrm{s}$ ) がそれぞれの細胞のなかで、細胞の大きさである  $1\,\mu\mathrm{m}$  だ け、一次元的な拡散によって移動するのに必要な時間を概算せよ。

2. 神経細胞は細胞体・樹状突起・軸索からなるが、軸索の長さは1mである場合もある。その場合は、細胞体 で合成されたタンパク質が一次元的な拡散で軸索の先端に達する時間は、典型的なタンパク質では約1600年 かかることが上記と同様な概算の結果わかるので、物質輸送を拡散過程に頼ることは出来ないことは明白で

このような状況に対処するために真核細胞では特別な機能を持つタンパク質のシステムがいくつか出現した。 それらを簡単に列記し、そのうちの一つに関しては、そのシステムを構成するタンパク質とその特性について も触れつつ、詳しく述べよ。

- 1. 同種のアミノ酸からなるポリペプチド鎖(ホモポリペプチド鎖)のヘリックス コイル転移について考えてみ よう。ヘリックス - コイル転移のジッパーモデル (zipper model) では、鎖中に連続した一個のヘリックスセグ メントのみが許される。つまり ...ccchhhhhccc...や...hhhhhcccccc...のコンフォメーションは許されるが、 ...hhhhhcccchhhh...や...ccchhhhccchhhhccchhhcccc...などは許されない(ここで、h と c は、それぞれ、ヘリッ クス状態とコイル状態にある残基を表す)。このとき、残基数 n からなる鎖の分配関数 Z はどのように表され るか。但し、ヘリックス - コイル転移の開始パラメータ $\sigma$ 、伸長パラメータsとおき、各残基に対して: (1) コ イル状態の統計重率は 1 とし; (2) コイル状態に続くヘリックスの統計重率は  $\sigma \times s$  とし; (3) ヘリックス状態 に続くヘリックスの統計重率は

  sとせよ。また、鎖の末端はコイル状態につながっているのと等価と考えよ。
- 2. 分子量2万以下の単一ドメインからなる球状タンパク質のアンフォールディング転移は、多くの場合、二状態 転移で表され、各タンパク質分子は転移領域で天然状態(N 状態)とアンフォールドした状態(U 状態)のいず れか二つの状態しか取ることができない。これは合成ポリペプチド鎖のヘリックス - コイル転移が、転移領域 で取り得る各分子の状態を考えたときに、多状態の転移であることと対照的である。球状タンパク質と合成ポ リペプチド鎖のこのような違いをもたらす物理的要因は何か。「球状タンパク質の天然構造」と「合成ポリペ プチド鎖のヘリックス構造」の特徴に着目して答えよ。
- 3. 図1は、ある球状タンパク質の熱によるアンフォールディング転移を表し、縦軸はU状態の割合(f)、横軸は 温度 (T) を示す。アンフォールディング転移が二状態転移  $\mathbb{N} \leftrightarrow \mathbb{U}$  で表されるとすると、転移の平衡定数 K と 転移に伴う標準自由エネルギーの変化 △G はどのよう にして求められるか。
- 4. 図1に示されたタンパク質の熱によるアンフォールディング転移のエンタルピーの変化 ΔH は、圧力一定の条 件下では、 $\Delta H = -R \frac{\partial \ln K}{\partial (1/T)}$  により得られることを示せ。ここで、R は気体定数とする。
- 5. 図 2 は、図 1 より得られた平衡定数 K の対数を温度の逆数 (1/T) に対してプロットしたものであり、ファン トホッフのプロットという。水溶液中での球状タンパク質のアンフォールディング転移のファントホッフのプ ロットは、一般に、直線ではなく、図2のように上に凹の曲率を示す。この事実から、タンパク質の天然構造 を安定化している相互作用に関しどのようなことがいえるか。タンパク質を構成するアミノ酸を非極性溶媒中 より水中に移すときの移行(transfer)の自由エネルギーの温度依存との関連に触れつつ述べよ。





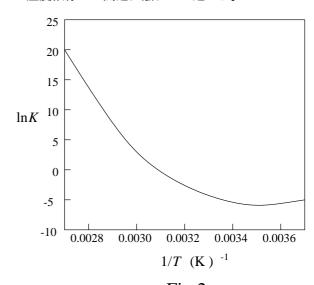


Fig.2

#### 専攻問題1解答

1. Schrödinger 方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\Psi = E\Psi$$

で、ラプラシアンを極座標で表し、波動関数の動径部分  $R_l$  が満すべき方程式を抽出すると、以下の通りとなる。

$$\left(\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R_l = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)R_l$$
 ... (1)

2. (i) s 状態を考えるので l=0 であり、また、 $\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}=\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r$  に注意すると、 $R_0$  が満す方程式は、

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}(rR_0) = -\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - \varepsilon)(rR_0) \quad (井戸の中)$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}(rR_0) = \frac{2m}{\hbar^2}\varepsilon(rR_0) \qquad (井戸の外)$$
… (2)

これより、 $R_0$  は、全体を定数倍する任意性を除けば、

$$R_{0} = \begin{cases} \frac{1}{r} \sin\left(\frac{\sqrt{2m(V_{0} - \varepsilon)}}{\hbar}r + \delta\right) & (r < a) \\ \frac{C_{1}}{r} \exp\left(-\frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}r\right) + \frac{C_{2}}{r} \exp\left(\frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}r\right) & (r > a) \end{cases}$$
 \(\therefore\tag{3}

 $(C_1, C_2, \delta$  は定数) と書ける。

ここで、波動関数の規格化可能性より、 $C_2=0$ 。また原点で、ポテンシャルが特異性を持たないことより、 $\delta=0$  と決まる。

残った定数  $C_1$  は、r = a で (3) の第 1、第 2 式が滑らかにつながるように決定される。この条件は、

$$\begin{cases}
\frac{1}{a}\sin\left(\frac{\sqrt{2m(V_0 - \varepsilon)}}{\hbar}a\right) = \frac{C_1}{a}\exp\left(-\frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}a\right) \\
\frac{\sqrt{2m(V_0 - \epsilon)}}{\hbar}\cot\left(\frac{\sqrt{2m(V_0 - \varepsilon)}}{\hbar}a\right) = -\frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}
\end{cases} \dots (4)$$

 $0 < \varepsilon \ll V_0$  より、 $\varepsilon/V_0 = 0$  としてよい。すると、(4) 第 2 式より、

$$\cot\left(\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}a\right) = -\sqrt{\frac{\varepsilon}{V_0}} = 0$$

$$\implies \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}a = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots)$$

s 状態に束縛状態がただ一つあるということは、その束縛状態の固有関数が r < a に節を持たないことを意味する。即ち、n=0 である。

$$\therefore V_0 = \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \left(\frac{\hbar}{a}\right)^2 / 2m$$
$$= \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

(ii) このとき、(4) 第1式は、

$$\sin\left(\frac{\pi}{2}\right) = C_1 \exp\left(-\frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}a\right)$$

となり、

$$C_1 = \exp\left(\frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}a\right)$$

よって、求める確率は、

$$\begin{split} \frac{\int_{a \leq r < +\infty} |\Psi|^2 d^3 r}{\int_{0 \leq r < +\infty} |\Psi|^2 d^3 r} &= \frac{\int d\Omega |Y_{00}|^2 \int_a^{+\infty} dr \cdot r^2 |R_0|^2}{\int d\Omega |Y_{00}|^2 \int_0^{+\infty} dr \cdot r^2 |R_0|^2} \\ &= \frac{\int_a^{+\infty} dr \exp(2 \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar} a) \exp(-2 \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar} r)}{\int_0^a dr \sin^2(\frac{\pi}{2} \frac{r}{a}) + \int_a^{+\infty} dr \exp(2 \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar} a) \exp(-2 \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar} r)} \\ &= \frac{\frac{\hbar}{2\sqrt{2m\varepsilon}}}{\frac{a}{2} + \frac{\hbar}{2\sqrt{2m\varepsilon}}} \\ &= \frac{1}{1 + \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{r} a} \end{split}$$

3.  $(\sqrt{2mV_0}/\hbar)a = \pi/2$  であること、及び、井戸の内では  $E-V = (25/16)V_0$ 、井戸の外では  $E-V = (9/16)V_0$  であることに注意すると、 $R_0$  が従う方程式は、

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}(rR_0) = \begin{cases}
-\left(\frac{5\pi}{8}\right)^2 \frac{1}{a^2}(rR_0) & (井戸の中) \\
-\left(\frac{3\pi}{8}\right)^2 \frac{1}{a^2}(rR_0) & (井戸の外)
\end{cases}$$
... (5)

2(i) と同様の考察により、 $R_0$  は、

$$R_0 = \begin{cases} \frac{1}{r} \sin\left(\frac{5\pi}{8} \frac{r}{a}\right) & (r < a) \\ \frac{C}{r} \sin\left(\frac{3\pi}{8} \frac{r}{a} + \delta_0\right) & (r > a) \end{cases}$$
 \(\therefore\tag{6}

(C は定数) と書ける。これらが、r=a で滑らかにつながることより、 $rR_0$  の対数微分が r=a で一致する。よって、

$$\frac{5\pi}{8}\cot\left(\frac{5\pi}{8}\right) = \frac{3\pi}{8}\cot\left(\frac{3\pi}{8} + \delta_0\right)$$

$$\iff \tan\left(\frac{3\pi}{8} + \delta_0\right) = \frac{3}{5}\tan\left(\frac{5\pi}{8}\right)$$

加法定理を用いて、左辺の tan を分解して整理すると

$$\iff \tan \delta_0 = \frac{\frac{3}{5} \tan \frac{5\pi}{8} - \tan \frac{3\pi}{8}}{1 + \frac{3}{5} \tan \frac{3\pi}{6} \tan \frac{5\pi}{6}} \cdots (7)$$

一方

$$\tan\frac{5\pi}{8} = \tan\left(\pi - \frac{3\pi}{8}\right) = -\tan\frac{3\pi}{8}$$

及び、tan の加法定理

$$1 = \tan\left(\frac{5\pi}{8} - \frac{3\pi}{8}\right)$$
$$= \frac{\tan\frac{5\pi}{8} - \tan\frac{3\pi}{8}}{1 + \tan\frac{5\pi}{0}\tan\frac{3\pi}{8}}$$

より、

$$\tan\frac{3\pi}{8} = 1 + \sqrt{2}, \qquad \tan\frac{5\pi}{8} = -1 - \sqrt{2}$$

なので、これを(3)に代入して計算すると、

$$\tan \delta_0 = \frac{8 + 2\sqrt{2}}{7}$$

となる。

#### 専攻問題2解答

1. 運動エネルギーは、リングの抵抗から発するジュール熱となって失われる。リングに発生する起電力が V の とき (  $V = -\frac{d\Phi}{dt}$  より V は r に依らない ) ジュール熱が

$$VI = \frac{V^2}{r}$$

であることから運動エネルギーの損失の割合は抵抗が小さい方が大きい。

2. (i) リングが磁場中を運動するとローレンツ力によりリングの周に電場が生じる。電場の強さ E を磁石側から見てリングの左周りを正として表すと

$$E = -\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}B_r$$

となる。よってリング一周での電位差である e は

$$e = 2\pi RE = -2\pi RB_r \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}$$

である。

(ii) リングに発生する誘導起電力によって流れる電流 I は、

$$I = \frac{e}{r} = -\frac{2\pi RB_r}{r} \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}$$

磁場との相互作用によりリングは次の力  $f_I$  を受ける。

$$f_I = IB_r 2\pi R = -\frac{(2\pi RB_r)^2}{r} \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}$$

よって、リングの運動方程式は以下の通り。

$$m\left(\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} + \omega_0^2 x\right) = -\frac{(2\pi R B_r)^2}{r} \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + f(t)$$

3. 前問の結果で  $\gamma \equiv (2\pi RB_r)^2/mr$  と書き改め撃力  $f(t) = p_0\delta(t)$  を代入すると次の運動方程式を得る。

$$\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} + \gamma \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + \omega_0^2 x = \frac{p_0}{m} \delta(t)$$

この方程式を  $[-\Delta t, +\Delta t]$  の間で積分して  $\Delta t \rightarrow +0$  の極限をとる。すなわち、

$$\lim_{\varDelta t \to +0} \int_{-\varDelta t}^{+\varDelta t} \left[ \frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} + \gamma \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + \omega_0^2 x \right] = \lim_{\varDelta t \to +0} \int_{-\varDelta t}^{+\varDelta t} \frac{p_0}{m} \delta(t)$$

$$\lim_{\Delta t \to +0} \left[ \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} \right|_{-\Delta t}^{+\Delta t} + \gamma x \left|_{-\Delta t}^{+\Delta t} + \frac{1}{2} \omega_0^2 x^2 \right|_{-\Delta t}^{+\Delta t} \right] = \frac{p_0}{m}$$

xの値は t=0 において連続であるべきなので、この左辺第 2 項と第 3 項は  $\Delta t \to 0$  の極限で消える。第 1 項は残りこれはリングの速度が t=0 で不連続であることを示す。すなわち t=+0 での速度が得られる。 t=+0 では、撃力は既に働いていないので、t>0 での運動方程式は次のように簡単化される。

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \gamma \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 x = 0 \qquad t > 0 \qquad x|_{+0} = 0 \quad \frac{dx}{dt}\Big|_{+0} = \frac{p_0}{m}$$

この線形の斉次微分方程式を解く。 $x=e^{\lambda t}$ の型の解を仮定してこの方程式に代入すると次の結果を得る。

$$\lambda_{\pm} = \frac{-\gamma \pm \sqrt{\gamma^2 - 4\omega_0^2}}{2}$$

 $\gamma^2 - 4\omega_0^2 \ge 0$  の場合には  $\lambda_\pm$  は両者とも負の実数である。x の解は初期条件を考慮して次のようになる。

$$x = \frac{p_0}{m\sqrt{\gamma^2 - 4\omega_0^2}} \left(e^{\lambda_+ t} - e^{\lambda_- t}\right)$$

$$= \frac{p_0}{m\sqrt{\gamma^2 - 4\omega_0^2}} \left[ \exp\left(\frac{-\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 4\omega_0^2}}{2}t\right) - \exp\left(\frac{-\gamma - \sqrt{\gamma^2 - 4\omega_0^2}}{2}t\right) \right]$$

他方、 $\gamma^2 - 4\omega_0^2 < 0$  の場合には  $\lambda_\pm$  は両者とも複素数である。x の解は初期条件を考慮して次のようになる。

$$x = \frac{p_0}{m\sqrt{4\omega_0^2 - \gamma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\gamma t\right) 2\sin\left(\frac{\sqrt{4\omega_0^2 - \gamma^2}}{2}t\right)$$

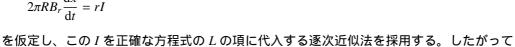
このxの時間発展の様子は右下の図の様である。

4. (i) 自己インダクタンスの効果がある場合の リングを流れる電流 / の満たすべき方程

$$2\pi R B_r \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} - L \frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}t} = rI$$

であるが、Lの項が比較的小さいと仮定 して第0次近似で

$$2\pi R B_r \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = rI$$



 $I = \frac{2\pi RB_r}{r} \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} - L \frac{2\pi RB_r}{r^2} \frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}$ 

となる。 I の表式の右辺第 2 項はインダクタンスの影響の項である。 これよりインダクタンスの効果が支 配的となる条件は

 $\gamma^2 - 4\omega^2 < 0$ 

$$\left| \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} \right| \ll \frac{L}{r} \left| \frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} \right|$$

である。このxの微分の量の大きさを見積もるために設問3で得られた式の $t \sim 0$ 付近での値を用いると、

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} \sim \frac{p_0}{m}$$
  $\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} \sim -\frac{p_0}{m}\gamma$ 

これを代入して整理して、

$$r^2 \ll \frac{(2\pi RB_r)^2}{m}L$$

この条件が満たされる時にインダクタンスによる効果が支配的となる。

(ii) インダクタンスによる効果が支配的な場合、運動方程式は下のようになる。

$$m\left(\frac{d^2x}{dt^2} + \omega_0^2x\right) = L\frac{(2\pi RB_r)^2}{r^2}\frac{d^2x}{dt^2} + f(t)$$

すなわち、

$$(m-\alpha)\left(\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} + \frac{m}{m-\alpha}\omega_0^2x\right) = f(t)$$
 where  $\alpha = L\frac{(2\pi RB_r)^2}{r^2} \ge 0$ 

つまり、リングの質量が減少して固有振動数が増加したと考えることができる。

#### 専攻問題3解答

1. (i) この電子系では電子同士の相互作用はないので、N 個の電子は独立に振舞う。全体の分配関数 Z は 1 電子系の分配関数  $Z_1$  によって

$$Z = Z_1^N$$

と表される。 $Z_1$  を求める。一次元の運動量空間はh/L 単位に離散化されている。つまり、

$$p_n = \frac{h}{L}n \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$$

エネルギー $\varepsilon$ も離散値となり、H=0のとき、

$$\varepsilon_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\frac{hn}{L}\right)^2 \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$$
 \ldots (1)

となる。よって、

$$Z_1 = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-\beta \varepsilon_n} = \frac{L}{h} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{h}{L} e^{-\frac{\beta}{2m} \left(\frac{hn}{L}\right)^2}$$

 $h/L \ll 1$  なので、 $\mathrm{d}x = h/L, \ x = nh/L$  としてこの和を積分に変換する。

$$Z_1 = \frac{L}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \ e^{-\frac{\beta}{2m}x^2} = \frac{L}{h} \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}}$$

よって全電子の分配関数は、同種粒子で区別できないことに注意して、

$$Z = \frac{1}{N!} \left( \frac{L}{h} \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \right)^{N}$$

となる。

(ii) 内部エネルギー 〈E〉 は分配関数より

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = N \frac{k_{\rm B} T}{2}$$

と導かれる。

(iii) 磁場のある場合のエネルギー $\varepsilon$  は次のようになる。

$$\varepsilon_n = \frac{p^2}{2m} - \mu H = \frac{h^2}{2mL^2} n^2 - \mu H \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$$
 \cdots (2)

この時の N 電子系、1 電子系の分配関数をそれぞれ Z'、 $Z'_1$  と表す。

$$Z'_{1} = \sum_{\mu} \sum_{n} e^{-\beta \varepsilon_{n}} = \sum_{n} e^{-\beta \frac{\rho_{n}^{2}}{2m}} \sum_{\mu} e^{+\beta \mu H} = \frac{L}{h} \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \left( e^{+\beta \mu_{B} H} + e^{-\beta \mu_{B} H} \right)$$

$$Z' = \frac{1}{N!} Z'^{N}_{1} = \frac{1}{N!} \left( \frac{L}{h} \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \left( e^{+\beta \mu_{B} H} + e^{-\beta \mu_{B} H} \right) \right)^{N} = \frac{1}{N!} \left( \frac{2L}{h} \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \cosh(\beta \mu_{B} H) \right)^{N}$$

となる。

(iv) 内部エネルギー  $\langle E \rangle$  は、

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z' = N \frac{k_{\rm B}T}{2} - \mu_{\rm B} N H \tanh(\beta \mu_{\rm B} H)$$

よって比熱 C は、

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = -\frac{1}{k_{\rm B} T^2} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial \beta} = \frac{1}{2} N k_{\rm B} + N k_{\rm B} \left( \frac{\beta \mu_{\rm B} H}{\cosh(\beta \mu_{\rm B} H)} \right)^2$$

(v) 磁化 M は一電子の磁気モーメントの熱平均  $\langle \mu \rangle$  を用いて

$$M = \frac{1}{L} \sum_{i} \langle \mu_i \rangle = \frac{N}{L} \langle \mu \rangle$$

と表される。この $\langle \mu \rangle$ は

$$\langle \mu \rangle = \frac{\partial}{\partial (\beta H)} \ln Z_1' = \mu_{\rm B} \tanh (\beta \mu_{\rm B} H)$$

よって、

$$M = \frac{N\mu_{\rm B}}{L} \tanh \left(\beta \mu_{\rm B} H\right)$$

(vi) 帯磁率  $\chi$  は

$$\chi = \lim_{H \to 0} \frac{M}{H} = \frac{\partial M}{\partial H} \Big|_{H=0} = \frac{N}{L} \beta \mu_{\rm B}^2 \frac{1}{\cosh^2(\beta \mu_{\rm B} H)} \Big|_{H=0} = \frac{N}{L} \frac{\mu_{\rm B}^2}{k_{\rm B} T}$$

2. (i) 電子のエネルギーは式 (1) で与えられており、これから逆に指定のエネルギー以下の状態の数  $n_{\varepsilon}^{<}$  が求ま る。すなわち、

$$n_{\varepsilon}^{<} = 2\sqrt{\frac{2mL^2}{h^2}}\sqrt{\varepsilon}$$

磁場が無い場合にはスピンは縮退していて、エネルギーの低い状態から一つの状態に2つの電子が入って いく。そのエネルギーの上端が  $\varepsilon_{\scriptscriptstyle F}$  である。よって電子の総数 N は  $2n_{\varepsilon_{\scriptscriptstyle F}}^{\scriptscriptstyle <}$  で与えられることになり、

$$N = 2n_{\varepsilon_{\rm F}}^{<} = 4\sqrt{\frac{2mL^2}{h^2}}\sqrt{\varepsilon_{\rm F}}$$

である。上の2式を整理して

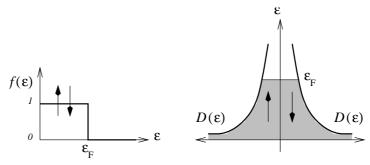
$$n_{\varepsilon}^{<} = \frac{N}{2\sqrt{\varepsilon_{\rm F}}} \sqrt{\varepsilon}$$

を得る。これから状態密度  $D(\varepsilon)$  は、

$$D(\varepsilon) = \frac{\mathrm{d}n_{\varepsilon}^{<}}{\mathrm{d}\varepsilon} = \frac{N}{4\sqrt{\varepsilon_{\mathrm{F}}}} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$$

となる。

さて、T=0 において、fermion の分布関数  $f(\varepsilon)$  は左下図のようになっており、 $\varepsilon<\varepsilon_{ ext{F}}$  の各状態に一様に 電子が分布している。また状態密度  $D(\varepsilon)$  は電子のスピンを考慮して縦軸にエネルギー、右軸に下スピン の状態密度、左軸に上スピンの状態密度を描くと右下図のようになっている。



平均エネルギー  $\langle E \rangle$  を求める。上下スピン 2 種に電子があることに注意して  $\varepsilon$  の平均値を求めると

$$\langle E \rangle = 2 \int_0^\infty d\varepsilon \ \varepsilon f(\varepsilon) D(\varepsilon) = 2 \int_0^{\varepsilon_{\rm F}} d\varepsilon \ \varepsilon D(\varepsilon) = \frac{N}{2 \sqrt{\varepsilon_{\rm F}}} \int_0^{\varepsilon_{\rm F}} d\varepsilon \ \sqrt{\varepsilon} = \frac{\varepsilon_{\rm F} N}{3}$$

となる。

(ii) 磁場のある場合の電子のエネルギー状態は式 (2) で与えられており、状態密度  $D_{\mu=\pm\mu_{\rm B}}(\varepsilon)$  を前問と同様に求めると

$$D_{\mu=\pm\mu_{\rm B}}(\varepsilon) = \frac{N}{4\,\sqrt{\varepsilon_{\rm F}}} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon \pm \mu_{\rm B} H}}$$

 $\varepsilon_{\rm F}$  は磁場の無い場合のフェルミエネルギーである。磁場のある場合のフェルミエネルギーを  $\varepsilon_{\rm F}'$  とする。状態密度はスピンによって異なることになり、上スピン ( $\mu=+\mu_{\rm B}$ ) の状態分布は  $-\mu_{\rm B}H<\varepsilon<\varepsilon_{\rm F}'$  であり、下スピン ( $\mu=-\mu_{\rm B}$ ) の状態分布は  $+\mu_{\rm B}H<\varepsilon<\varepsilon_{\rm F}'$  である。

 $\varepsilon_{\text{F}}' \geq \mu_{\text{B}}H$  の場合には上下どちらのスピンの電子もあるが、 $\varepsilon_{\text{F}}' < \mu_{\text{B}}H$  の場合には下スピンがなくなりすべて上スピンとなる。この様子を下図に示す。

上スピンの電子の個数を  $N_+$ 、下スピンの電子の個数を  $N_-$  とする。

$$\begin{split} N_{+} &= \int_{-\mu_{\rm B}H}^{\varepsilon_{\rm F}'} \!\! \mathrm{d}\varepsilon \,\, \frac{N}{4 \, \sqrt{\varepsilon_{\rm F}}} \, \frac{1}{\sqrt{\varepsilon + \mu_{\rm B}H}} = \frac{N}{2 \, \sqrt{\varepsilon_{\rm F}}} \, \sqrt{\varepsilon_{\rm F}' + \mu_{\rm B}H} \\ N_{-} &= \int_{+\mu_{\rm B}H}^{\varepsilon_{\rm F}'} \!\! \mathrm{d}\varepsilon \,\, \frac{N}{4 \, \sqrt{\varepsilon_{\rm F}}} \, \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - \mu_{\rm B}H}} = \frac{N}{2 \, \sqrt{\varepsilon_{\rm F}}} \, \sqrt{\varepsilon_{\rm F}' - \mu_{\rm B}H} \end{split}$$

磁化 M は  $\pm \mu_{\rm B}$  の磁気モーメントの平均なので

$$M = \frac{N_{+}}{L}\mu_{\rm B} - \frac{N_{-}}{L}\mu_{\rm B} = \frac{\mu_{\rm B}}{L}(N_{+} - N_{-})$$

となる。

 $\varepsilon_{\text{F}}' < \mu_{\text{B}}H$  の場合には  $N_{-}=0$  となり、 $N_{+}=N$  となる。よって

$$M = \frac{\mu_{\rm B} N}{I} \qquad (\varepsilon_{\rm F}' < \mu_{\rm B} H)$$

 $\varepsilon_{\text{F}}' \geq \mu_{\text{B}}H$  の場合には少々面倒で

$$N_{+}^{2} - N_{-}^{2} = \frac{\mu_{\rm B} N^{2}}{2\varepsilon_{\rm E}} H$$
 &  $J = N_{+} - N_{-} = \frac{\mu_{\rm B} N}{2\varepsilon_{\rm E}} H$ 

が得られる。よって

$$M = \frac{\mu_{\rm B}^2 N}{2L\varepsilon_{\rm F}} H = \frac{16mL\mu_{\rm B}^2}{h^2 N} H \qquad (\varepsilon_{\rm F}' \ge \mu_{\rm B} H)$$

となる。ところで、 $\varepsilon_{\mathbb{F}}' = \mu_{\mathbb{F}}H$  の場合に  $N_{+} = N$  であることから

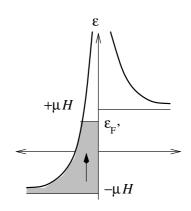
$$2\varepsilon_{\rm F} = \mu_{\rm B}H$$

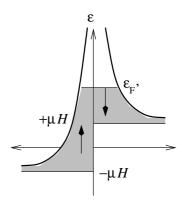
の関係が得られる。すなわち先の  $\varepsilon_{\rm F}'$  と  $\mu_{\rm B}H$  の大小の条件は  $2\varepsilon_{\rm F}$  と  $\mu_{\rm B}H$  の大小の条件に置き換えることができる。

(iii) 帯磁率 <sub>2</sub> は

$$\chi = \lim_{H \to 0} \frac{M}{H} = \frac{16mL\mu_{\rm B}^2}{h^2N}$$

となり、一定の値を持つ。 $\mathbf{1}(\mathrm{vi})$  でのボルツマン分布では  $T\to 0$  で発散していたのとは明らかに異なる。物理的には、ボルツマン統計は、エネルギー E の状態の起こる確率は、 $e^{-\beta E}$  に比例するとしているため、 $T\to 0$  では、ほとんどすべての粒子が最低エネルギー状態へ縮退してしまう。従って、 $T\simeq 0$  で磁場をかけると、わずかな磁場であってもほぼすべての電子が  $E=-\mu_\mathrm{B}H$  の状態へ縮退し (スピンがすべて上向き)、磁化  $M=N\mu_\mathrm{B}/L$  となる。従って、磁化率は  $\infty$  となる。しかし、このように一つの状態に N 個の電子が詰まるという状態は Pauli の排他律を考えれば起こるはずはなく、当然フェルミ統計に基づく結果とは、異なってくる。





#### 専攻問題4解答

1. 何 cm の厚さの炭素減速材を使えば入射粒子の運動エネルギーをすべて奪えるかを考える。運動エネルギーを Tとすると、

$$T = E - mc^2 = \sqrt{(mc^2)^2 + (pc)^2} - mc^2$$

これより

$$pc = \sqrt{(T + mc^2)^2 - (mc^2)^2} \approx 200 \,\text{MeV}$$

よって図2より、17cmの炭素減速材を用いればよい。

2. 電気双極子遷移のみを考えればよいので、主量子数と方位量子数が1減少する遷移を考える。このとき、X線 スペクトルのエネルギーEは、遷移先の準位の主量子数をnとして

$$E \propto \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2}\right)$$

で表される。ただし、量子欠損は考えていない。

A,B のスペクトルの主量子数を  $n_A$ ,  $n_B$  として、エネルギー  $E_A$ ,  $E_B$  の比は、

$$\frac{E_A}{E_B} = \frac{\frac{1}{n_A^2} - \frac{1}{(n_A + 1)^2}}{\frac{1}{n_B^2} - \frac{1}{(n_B + 1)^2}}$$

となる。

 $n_B = 2$  と図 3 のデータから計算して  $n_A = 3$  と分かる。

与えられた遷移が  $3d \rightarrow 2p$  の遷移なので、 A は、 3d へ落ちる遷移でなくてはならない。よって、A は  $4f \rightarrow$ 3d の遷移である。

C は、もっとも大きなエネルギーのピークであることと、2p から落ちる遷移がなくてはならないことから、2p → 1s の遷移である。

3. ボーアモデルでは、電子のエネルギー準位  $E_n$  は

$$E_n \propto \frac{Z^2 m_e}{n^2}$$

である。ボーアモデルをミュー原子に適応する。Z=1、n=1 の水素原子の 1s 状態の電子の束縛エネルギー が  $13.6\,\mathrm{eV}$  であることを利用して負ミュオンのエネルギー準位  $E_n$  は

$$E_n = \frac{Z^2}{n^2} \frac{m_\mu}{m_e} \times 13.6 \,\text{eV}$$

となる。Zを決めるに当たってBの遷移を使う。

$$190 \times 10^3 = \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{3^2}\right) \times \frac{106}{0.511} \times 13.6 \times Z^2 \qquad \therefore \quad Z \approx 22$$

よって標的の原子番号は22(Ti)と予想される。

4. ボーアモデルでは電子の軌道半径  $r_n$  は

$$r_n \propto \frac{n^2}{Zm_e}$$

である。前問と同様にこれをミュー原子に適応する。水素原子の 1s 電子の軌道半径の期待値が  $a_B$  であること から、ミュー原子の 1s 軌道半径は Z=82 なので

$$r = \frac{m_e}{Zm_u} a_B \approx 3.11 \times 10^{-15} \,\mathrm{m}$$

となる。

標的核半径は、質量数と原子核の半径との間の関係式

$$r_N \approx 1.3 \times 10^{-15} \times A^{\frac{1}{3}} \,\mathrm{m}$$

を用いて、

$$r_N \approx 7.70 \times 10^{-15} \,\mathrm{m}$$

となるので、ミュー原子の 1s 軌道半径の方が小さい。

5. ミュー原子の原子核の半径が 1s 軌道半径よりも大きいため、ミュオンが感じる中心の原子核の電荷は実際の電荷よりも小さい。なので、中心が点電荷であると仮定した場合よりもミュオンの 1s エネルギーは不安定になる。つまり高くなる。2p 軌道との準位差が縮まるので生成される X 線のエネルギーは低くなる。よって図3 のようなスペクトルのピークの位置は左に移動する。

また、クーロン相互作用の場合の、主量子数が同じで軌道運動量の同じ状態の偶然縮退 がとける。当然原子中の電子との相互作用も縮退をとくように働くが、 $\mu$  粒子の軌道は充分内側なので、それらはあまり影響しないと考えられる。

#### 専攻問題5解答

1. (i) 自由電子の Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi=E\psi$$

円筒座標系で考える。ラプラシアンは

$$\triangle = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

であるが、電子は円筒面上のみ動くので動径方向の偏微分は作用しても消えてしまう。よって

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi(\theta,z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(\theta,z) = E\psi(\theta,z)$$

となる。 $\psi(\theta, z) = \Theta(\theta)Z(z)$  と変数分離する。

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial^2\Theta}{\partial\theta^2} = E_\theta\Theta \qquad \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2Z}{\partial z^2} = E_zZ \qquad (E = E_\theta + E_z)$$

従って、上式を満たす固有関数は

$$\Theta(\theta) = e^{ik_{\theta}r\theta}$$
  $Z(z) = e^{ik_{z}z}$   $(k_{\theta} = \frac{\sqrt{2mE_{\theta}}}{\hbar} \quad k_{z} = \frac{\sqrt{2mE_{z}}}{\hbar})$ 

周期的境界条件  $\Theta(\theta+2\pi)=\Theta(\theta)$ 、 Z(z+L)=Z(z) より

$$k_{\theta} = \frac{n_{\theta}}{r}$$
  $k_z = \frac{2\pi n_z}{L}$   $(n_{\theta}, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$ 

以上より固有関数  $\psi(\theta,z)$  と固有エネルギー E は

$$\psi(\theta, z) = \Theta(\theta)Z(z) = e^{i(n_{\theta}\theta + \frac{2\pi n_{z}}{L}z)}$$

$$E = E_{\theta} + E_{z} = \frac{\hbar^{2}}{2m} \left\{ \left( \frac{n_{\theta}}{r} \right)^{2} + \left( \frac{2\pi n_{z}}{L} \right)^{2} \right\}$$
  $(n_{\theta}, n_{z} = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$ 

である。

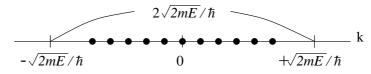
(ii) 長さ L の周期的境界条件をもつ 1 次元の系の波動関数として Z(z) が前問で得られている。それによると  $k_z$  の波数空間は  $2\pi/L$  で離散化している。またエネルギー  $E_z$  に対応する波数は

$$k_z = \pm \frac{\sqrt{2mE_z}}{\hbar}$$

であるので、エネルギーが  $E_z$  以下である状態の数  $N(E_z)$  は

$$N(E_z) = 2 \cdot \frac{L}{2\pi} \frac{\sqrt{2mE_z}}{\hbar} = \frac{L\sqrt{2mE_z}}{\pi\hbar}$$

となる。下図参照。

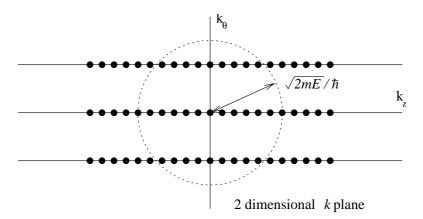


1 dimensional k plane

よって 1 次元の状態密度  $D^{(1)}(E_z)$  は

$$D^{(1)}(E_z) = \frac{dN(E_z)}{dE_z} = \frac{L}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{1}{\sqrt{E_z}}$$

これをもとに、円筒上の 2 次元 k 空間における状態の数を数える。 $k_z=\frac{2\pi}{L}n_z,\ k_\theta=\frac{n_\theta}{r}$  が張る平面を考えると、L は r に比べ十分に大きいから、次の図のように  $k_z$  方向にほぼ連続で、 $k_\theta$  方向には離散化した平面になっている。各  $k_\theta$  で、 $k_z$  に関する状態密度  $D^{(1)}(E_z)$  を足し上げたものが求める 2 次元状態密度  $D^{(2)}(E)$  になっている。



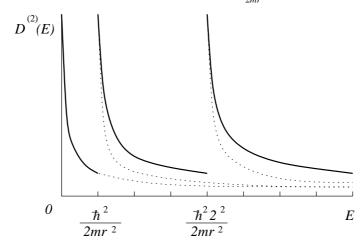
半径  $\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  の円を考えると、 $k_{ heta}=rac{n_{ heta}}{r}$  での状態密度  $D_{n_{ heta}}^{(1)}(E)$  は

$$D_{n_{\theta}}^{(1)}(E) = D^{(1)} \left( E - \frac{\hbar^2 n_{\theta}^2}{2mr^2} \right) = \frac{L}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \left( E - \frac{\hbar^2 n_{\theta}^2}{2mr^2} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

従って、求める状態密度  $D^{(2)}(E)$  は、( $k_{\theta}$  方向に十分密でないので、積分公式が使えないことに注意。)

$$D^{(2)}(E) = D_{n_{\theta}=0}^{(1)}(E) + 2\sum_{n_{\theta}=1}^{n_{\theta_{\text{max}}}} D_{n_{\theta}}^{(1)}(E)$$
$$= \frac{L}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \left\{ E^{-\frac{1}{2}} + 2\sum_{n=1}^{n_{\theta_{\text{max}}}} \left( E - \frac{\hbar^2 n_{\theta}^2}{2mr^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \right\}$$

ただし、 $n_{\theta_{\max}}$  は  $\frac{\hbar^2 n_{\theta_{\max}}^2}{2mr^2} \leq E$  を満たす最大の整数である。  $L\gg r$  のとき、状態密度の概形は次の図のとおりである。 $E=\frac{\hbar^2 n^2}{2mr^2}$  ごとに大きなとびが現れる。



状態密度の概形。

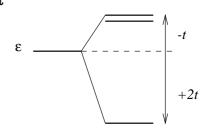
2. (i) 与えられたハミルトニハン  $\mathcal H$  の行列表現の固有値 E を求めれ ば良い。

$$\begin{vmatrix} \varepsilon - E & t & t \\ t & \varepsilon - E & t \\ t & t & \varepsilon - E \end{vmatrix} = (\varepsilon - E + 2t)(\varepsilon - E - t)^2$$

よって固有値 E は

$$E = \varepsilon + 2t(1 \, \underline{\mathbf{\pi}}), \quad \varepsilon - t(2 \, \underline{\mathbf{\pi}})$$

となり、エネルギーの縮退が解ける。この様子を右図に示す。



(ii) 輪を回る電子の固有波動関数が各原子に局在した電子の固有波動関数の線形結合で記述できるとする。すなわち、

$$\psi = \sum_{n=1}^{N} c_n \phi_n$$

このとき、

$$\begin{pmatrix}
\varepsilon & t & 0 & 0 & t \\
t & \varepsilon & \ddots & \ddots & 0 \\
0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\
\vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\
0 & & \ddots & \ddots & \varepsilon & t \\
t & 0 & & 0 & t & \varepsilon
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
c_1 \\
c_2 \\
\vdots \\
\vdots \\
c_{N-1} \\
c_N
\end{pmatrix} = E
\begin{pmatrix}
c_1 \\
c_2 \\
\vdots \\
\vdots \\
c_{N-1} \\
c_N
\end{pmatrix}
\dots (1)$$

をみたす $c_n$  および、E をもとめればよい。そこで、

$$c_n = ce^{inka}$$
  $(n = 1, 2, \cdots, N)$ 

を仮定してみる。すると、この連立方程式の任意の式は

$$tc_{n-1} + \varepsilon c_n + tc_{n+1} = Ec_n$$
  $\therefore E = \varepsilon + 2t \cos ka$ 

従って、この E および、 $c_n$  の組は確かに (1) の解になっている。 次に、k のとり得る値であるが、 $c_{N+1}=c_1$  の周期条件があるため

$$k = \frac{2\pi}{aN}\ell \qquad (\ell = 0, 1, \cdots, N - 1)$$

となる。 したがって、(1) をみたす N 個の固有値

$$E = \varepsilon + 2t \cos ka$$
  $k = \frac{2\pi}{aN}\ell$   $(\ell = 0, 1, \dots, N-1)$ 

が得られた。

(iii) 前問の結果より、大きい N には小さな k が存在する。 $ka \ll 1$  では、

$$E = \varepsilon + 2t\cos(ka) \simeq \varepsilon + 2t\left(1 - \frac{(ka)^2}{2}\right) = \varepsilon + 2t - ta^2k^2$$

と近似できるが、 $-ta^2>0$  より、エネルギーの k 依存性は、定数項  $\varepsilon+2t$  を別として、自由電子  $E=\frac{\hbar^2}{2m^*}k^2$  の様に振舞う。すなわち、

$$-ta^2 = \frac{\hbar^2}{2m^*} \qquad \therefore \quad m^* = -\frac{\hbar^2}{2ta^2}$$

質量 m\* がこのように与えられる自由電子と見ることができる。

#### 22

#### 専攻問題6解答

1. やや細かいところもあると思うが、以下のようになるだろう。

操作 目的 1 すべてのバルブが閉じていることと、S1, S2, 真空計の破損や思わぬリークなどを防ぐため G1,G2, のスイッチが off であることを確認する 2 S1 を on にする 3 P1 の音が静かになったらゆっくり V3 を開く P1 のポンプ内の空気が引けるのを待つため 4 再び P1 の音が静かになったら G1 を on にする P2 を使用し始めて良いかを確認するため 5 G1 が 6 Pa(0.05 Torr) 程度以下になったことをチェッ (同上) クする 6 V3を閉じる P2 内の空気を引くため 7 V2を開く (同上) 8 Wを開く P2 内の油の炭化を防ぐため 9 S2 を on にする 10 20 分から 30 分待つ P2 が暖まるのを待つため P2 の準備中に C が 6 Pa 以上になることがあ 11 V2を閉じる るが、それを再び 6 Pa 以下にするため 12 V3 を開く (同上) 13 G1 が 6 Pa(0.05 Torr) 程度以下になったことをチェッ (同上) クする 14 V3 を閉じる (P2 のポンプを使用するため) 15 V2 を開く (同上)

15V2 を開く(同上)16V4 を開く(同上)17ある程度時間が経ったら G2 を on にする

18~~G2~が  $10^{-4} \sim 10^{-5}~$  Pa 程度であることをチェックす

る

注: G2 が具体的に与えられていないので、17. で on にする時の条件を書かなかったが、G2 が、電離真空計 (イオンゲージ) なら、C 内が 0.1 Pa $(10^{-3}$  Torr) 以下になった時に on にすれば良い。しかしこの場合でも G1 が C に直結していないので、どう確認するかが問題になる。

2. (i) 解答は以下の通り

 (1) d
 (2) e
 [3] 偏心 [4] 滑り板

 (5) j
 [6] パネ
 (7) n
 (8) f

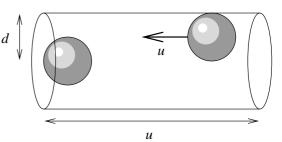
 [9] 油 (10) b
 [11] 空気 [12] 吸気口

 (13) a
 (14) c
 (15) h
 [16] 弁

 (17) k
 {18} V<sub>min</sub>/(V<sub>1</sub> + V<sub>2</sub> - V<sub>min</sub>)

(ii) ボイラーEで、油Dを加熱する。発生した油蒸気はノズルCから下向きに噴射され、吸気口Aから入ってくる残留ガス分子に下向きの運動量を与え、気体を圧縮する。圧縮された気体は、ロータリーポンプ等で排気口Fから排気する。また油が蒸気のままでいると油の分子が吸気口に流れてポンプ作用を失い排気速度が落ちる上に、蒸気温度が高くなり過ぎて油が分解して使用不可能になる。これを防ぐために水冷パイプBで必ず冷却しながら使用する。

ロータリーポンプを併用する理由は排気口付近の気体分子の密度が大きいと油拡散ポンプ内に逆流し、真 空度を上げられないからである。 3. (i) 平均自由行程を概算する方法と Maxwell-Boltzmann 分布を用いて精密に計算する方法の 2 通りを示す。まず、概算により平均自由行程を見積もる。数密度 n の分子が静止していて、その中を同じ分子 1 個が速さ u で走る状況を考える。右図はこの状況を走る分子に乗って眺めた図である。



単位時間にこの分子と衝突する分子はその球の中心が図に示した大きさの円柱内部にあるものである。その衝突回数 N は  $N=\pi d^2un$  である。分子の平均衝突時間間隔は 1/N で与えらるので平均自由行程 l は

$$l = \frac{1}{N}u = \frac{1}{\pi d^2 n}$$

と得られる。これが概算値である。

次に Maxwell-Boltzmann 分布を用いて平均自由行程を精密に計算する。

単位体積中にn 個ある分子のうち 1 つの分子に注目した時に、その分子の速度が $[\vec{v}_1, \vec{v}_1 + d\vec{v}_1]$  の範囲にある確率は Maxwell-Boltzmann 分布  $f(\vec{v})$  を用いて $f(\vec{v}_1)d\vec{v}_1$  と与えられる。

次に他の分子のうち、速度が  $[\vec{v}_2, \vec{v}_2 + d\vec{v}_2]$  の範囲にある分子の数密度は  $nf(\vec{v}_2)d\vec{v}_2$  と与えられる。 この  $\vec{v}_1$  の 1 個の分子と  $\vec{v}_2$  の多数の分子との衝突のみを考える。  $\vec{v}_1$  の分子に乗って眺めると、先の図のような状況となる。 相対速度 u は  $u = |\vec{v}_1 - \vec{v}_2|$  である。向かってくる分子の数密度は  $nf(\vec{v}_2)d\vec{v}_2$  であるので、単位時間のこの衝突回数  $N(\vec{v}_1, \vec{v}_2)$  は

$$N(\vec{v}_1, \vec{v}_2) = \pi d^2 |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| n f(\vec{v}_2) d\vec{v}_2$$

で与えられる。よってすべての  $\vec{v}_1, \vec{v}_2$  についての  $N(\vec{v}_1, \vec{v}_2)$  の和、つまり積分、を求めると、それは最初に注目した分子が単位時間に衝突する回数 N となる。

$$N = \iint d\vec{v}_1 d\vec{v}_2 \pi d^2 |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| n f(\vec{v}_1) f(\vec{v}_2)$$

Maxwell-Boltzmann 分布  $f(\vec{v})$  の速度依存性は  $A, \alpha$  を温度などにより決まる定数として  $f(\vec{v}) = Ae^{-\alpha v^2}$  と表される。よって、

$$N = \pi d^2 n \iint \mathrm{d}\vec{v}_1 \mathrm{d}\vec{v}_2 \, |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| A^2 e^{-\alpha(v_1^2 + v_2^2)}$$

となる。この積分を計算するために次の変数変換を行う。

$$\vec{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{v}_1 - \vec{v}_2) \qquad \vec{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{v}_1 + \vec{v}_2)$$

$$d\vec{v}_1 d\vec{v}_2 = \frac{\partial(\vec{v}_1, \vec{v}_2)}{\partial(\vec{u}_1, \vec{u}_2)} d\vec{u}_1 d\vec{u}_2 = d\vec{u}_1 d\vec{u}_2 \qquad v_1^2 + v_2^2 = u_1^2 + u_2^2$$

となるのでよって、

$$\begin{split} N &= \sqrt{2}\pi d^2 n \iint \mathrm{d}\vec{u}_1 \mathrm{d}\vec{u}_2 \, u_1 A^2 e^{-\alpha(u_1^2 + u_2^2)} = \sqrt{2}\pi d^2 n \int \mathrm{d}\vec{u}_1 \, u_1 A e^{-\alpha u_1^2} \int \mathrm{d}\vec{u}_2 \, A e^{-\alpha u_2^2} \\ &= \sqrt{2}\pi d^2 n \int \mathrm{d}\vec{v} \, v f(\vec{v}) \int \mathrm{d}\vec{v} \, f(\vec{v}) = \sqrt{2}\pi d^2 n \cdot \langle v \rangle \cdot 1 \end{split}$$

よって平均自由行程 lは

$$l = \frac{1}{N} \langle v \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\pi d^2 n}$$

と得られる。これが精密値である。

(ii)  $p = nk_BT$  より

$$p = \frac{1}{\sqrt{2}l\pi d^2} k_B T = \frac{1.38 \times 10^{-23} \,\text{J/K} \cdot 300 \,\text{K}}{\sqrt{2} \cdot 1 \times 10^{-2} \,\text{m} \times \pi \cdot (0.3 \times 10^{-9} \,\text{m})^2} = 1.04 \,\text{Pa}$$

#### 専攻問題7解答

1. 拡散方程式は t = 0 で x = 0 にあった分子の t 秒後の分布 f(x,t) に対し、

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \qquad (D: 拡散定数)$$

となる。この解は、初期条件  $f(x,0) = \delta(x)$  の下で、

$$f(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

で与えられる。これから、t 秒後の分子の平均移動距離  $\sqrt{\langle x^2 \rangle}$  を求めると、

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \ x^2 f(x, t) = 2Dt$$
  $\therefore \ \sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{2Dt}$ 

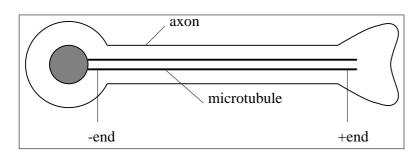
これに、 $x = 1[\mu m]$ 、 $D = 10^{-7}[cm^2/s]$ を代入すると、

$$t = 5 \times 10^{-2} [s] = 50 [ms]$$

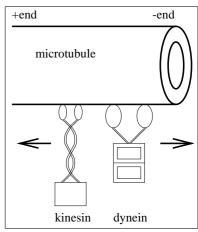
一方、 $x = 20[\mu m]$  の場合、t = 20[s] である。

2. 軸索輸送をするタンパク質には kinesin、dynein、tau protein がある。kinesin と cytoplasmic dynein による軸索 (axon) 輸送について説明する。

神経細胞の軸索には微小管 (microtubule) が通っていて、これに沿って軸索輸送が行なわれる。微小管は極性を持っていて、軸索内では細胞体側が -end になっていて、シナプス側が +end になっている。



kinesin は右図のように微小管に bind する部分と運ぶ細胞内の物質に bind する部分をもち、ATP を分解することにより、+end 方向に移動する。一方、dynein は kinesin とは逆方向の -end に向かって移動する。よって、kinesin と dynein によって相補的に軸索輸送は行なわれる。



#### 専攻問題8解答

は、多くの状態をとる。

1. ジッパーモデルでは、鎖中に連続したヘリックス部分が一ヶ所のみ許される。すべてのコンフォーメーションを考えて、統計重率を計算する。

コンフォーメーション ヘリックスの数 統計重率 ...cccc... 0 1 1通り ...cchcc... 1  $\sigma s$  n 通り ...cchhcc... 2  $\sigma s^2$  (n-1) 通り ...cch hcc... k  $\sigma s^k$  (n-k+1) 通り

これらをすべてサムアップすると、分配関数 Z は

$$Z = 1 + n\sigma s + (n-1)\sigma s^{2} + \dots + (n-k+1)\sigma s^{k} + \dots + \sigma s^{n}$$

$$= 1 + \sum_{k=1}^{n} (n-k+1)\sigma s^{k} = 1 + \frac{\sigma s^{2}[s^{n} + \frac{n}{s} - (n-1)]}{(s-1)^{2}}$$

2. 球状タンパク質の天然状態は、水素結合や、ジルフィス結合、疎水性相互作用などの様々な力による大きな安定性と大きな不安定性の微妙なバランスによって保たれている。そのため、ちょっとした構造の"くずれ"でも全体のバランスを失い、構造が急激にアンフォールディング状態へと変化してしまう。一方、ポリペプチド鎖のヘリックス構造は、数残基離れた、N-HとC=Oが水素結合をすることにより成り立っている。ランダムコイル状態のポリペプチド鎖に最初のヘリックスの核ができるには、数残基が正しく固定される必要があるので、難しい。ところが、一度核が形成されると後に続くヘリックスは、一つの残基を固定するだけでヘリックス構造になることができる。このようにして合成ポリペプチド鎖のヘリックス・コイル転移

3. 天然状態 (Natural) での 1 mol 当たりのエネルギー を  $E_N$  アンフォールディング状態での 1 mol 当たりのエネルギーを  $E_U$  とする

$$[N] = A \exp\left(-\frac{E_N}{N_A} \cdot \frac{1}{k_B T}\right) = A \exp\left(-\frac{E_N}{RT}\right)$$

$$[U] = A \exp\left(-\frac{E_U}{N_A} \cdot \frac{1}{k_B T}\right) = A \exp\left(-\frac{E_U}{RT}\right) \qquad \therefore \quad R = k_B N_A$$

$$K_{N \leftrightarrow U} = \frac{[U]}{[N]} = \exp\left(-\frac{E_U - E_N}{RT}\right) = \exp\left(-\frac{\Delta G}{RT}\right) \qquad \therefore \quad \Delta G = -RT \ln K$$

4. 3の結果から、 $\Delta G = \Delta H - T \Delta S$  より

$$-RT \ln K = \Delta H - T\Delta S \iff \ln K = \frac{\Delta S}{R} - \frac{\Delta H}{RT}$$

$$\frac{\partial \ln K}{\partial (1/T)} = -\frac{\Delta H}{R} \qquad \therefore \Delta H = -R\frac{\partial \ln K}{\partial (1/T)}$$

5. 図2では、低温になるにつれて直線から外れている。これは、タンパク質がフォールディングすることにより、エントロピーが増加する効果があることを意味している。なぜそうなるのかは、アミノ酸を非極性溶媒中から水中に移す時の自由エネルギーについて考えるとわかる。

アミノ酸の側鎖には非極性のものがある。ある非極性物質を水に移す時の自由エネルギーの変化量とエントロピー変化量は、

$$\Delta G_{Tr} = -RT \ln X \qquad \qquad \Delta S_{Tr} = \frac{\Delta H}{T} + R \ln X$$

で表される。ここで X はその物質の水中での溶解度である。非極性物質の  $\Delta G_{Tr}$  は正であり、これは、  $\Delta S_{Tr}$  が負であるためである。なぜエントロピー変化が負なのかというと、非極性の物質が水中にあると物質のまわりの水分子が、通常よりも規則正しい構造をとるためである。これはイオンが水に溶ける時にまわりにイオン雰囲気をつくることに似ている。疎水性の物質が存在することによりそのまわりの水分子の水素結合が切られているのだから、疎水性の物質に接する水分子をできるだけ少なくしようとする力が働くことが想像される。以上から、タンパク質の天然構造を安定化させる相互作用のうち、疎水性相互作用は、エントロピー力だということがわかる。