# 1999年度 入学試験 物理専門科目

# 専攻問題1

図 1 のような 1 次元ポテンシャル *V(x)* すなわち

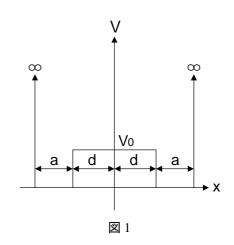
$$V(x) = \infty$$
  $(|x| > d + a$  のとき),

$$V(x) = 0$$
  $(d + a > |x| > d$  のとき),

$$V(x) = V_0$$
 (|x| < d のとき),

の中に質量 m の粒子が一個入っている系を考える。この ように、1次元シュレディンガー方程式でポテンシャルエ ネルギーが 1 次元座標 x の関数として V(x) = V(-x) を満 たすとき、ハミルトニアン

$$H(x) = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)$$



の固有関数  $\Psi$  は  $\Psi(x) = \Psi(-x)$  であるパリティが偶のものと  $\Psi(x) = -\Psi(-x)$  であるパリティが奇のものに分かれる ことに注意して、以下の問いに答えよ。但しħはプランク定数である。

- 1. この系のエネルギー固有値 E を決める式を  $E < V_0$  の条件が満たされている場合について求めよ。
- 2. 基底状態と第一励起状態の波動関数をそれぞれ  $|\Psi_0\rangle$  と  $|\Psi_1\rangle$  とし、エネルギー固有値をそれぞれ  $E=E_0,E_1$  と する。 $E_1 < V_0$  が満たされる場合に、 $|\Psi_0\rangle$  と  $|\Psi_1\rangle$  の概形を x の関数として描け。
- 3.  $V_0$  が有限で d が無限大の極限をとった時の  $E_0, E_1$  を  $\overline{E_0}, \overline{E_1}$  とする。 $\overline{E_0}, \overline{E_1}$  を一意的に決める式を求めよ。
- 4. d が大きいが有限であるとする。 $\overline{E_0}$  を用いて、 $\Delta \equiv E_1 E_0$  の d 依存性がどうなっているかを議論せよ。

 $V_0$  と d が大きいとき、規格化された波動関数  $|\Psi_0\rangle$  や  $|\Psi_1\rangle$  のほとんどの重みは d+a>|x|>d の中にあると考えて よい。したがって、 $|\Psi_0\rangle$  や  $|\Psi_1\rangle$  は近似的に右の井戸に粒子が存在し、わずかに |x| < d へ浸み出している状態  $|R\rangle$ と、左の井戸に粒子が存在し、わずかに |x| < d へ浸み出している状態  $|L\rangle$  の 1 次結合であらわされるとみなせる。  $|R\rangle$  と  $|L\rangle$  は規格化され、互いに直交しているとし、また、 $|Y_0\rangle$  や  $|Y_1\rangle$  よりも高い励起状態については無視して良 いとして、以下に答えよ。

- 5.  $|\Psi_0\rangle \geq |\Psi_1\rangle \approx |R\rangle \geq |L\rangle$  の 1 次結合で表せ。
- 7. t=0 に粒子の波動関数が右の井戸に存在する状態  $|R\rangle$  で表わされていたとき、トンネリングによって時刻 t に 粒子が左の井戸の状態  $|L\rangle$  に移っている確率を  $\Delta$  を用いて表わし、得られた  $\Delta$  依存性の物理的意味を議論せよ。

電離層では空気分子は電子と陽イオンに電離されたプラズマ状態にある。電離層を伝搬する電磁波を考える。電 離層は全体として中性であり電磁波に対して陽イオンは重いので動かず電子だけが動くとする。電子の質量はm、 電荷を -e とし、また電子密度は n として常に一様であるとし、伝搬する電磁波によって生ずる磁場が電子の運動 に及ぼす効果は無視できるものとする。平面波(周波数  $\omega$ 、波数 k)が電離層に垂直入射したとして以下の問いに 答えよ。なお Maxwell 方程式は

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = 4\pi \rho \qquad \qquad \nabla \cdot \boldsymbol{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \qquad \qquad \cdots (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho \qquad \nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \qquad \cdots (1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \qquad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \qquad \cdots (2)$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0 \qquad \qquad \nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0 \qquad \qquad \cdots \quad (3)$$

$$\nabla \times \boldsymbol{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \boldsymbol{j} \qquad \nabla \times \boldsymbol{B} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} + \mu_0 \boldsymbol{j} \qquad \cdots (4)$$

と書かれる(左が  $\mathrm{C.G.S.}$  系、右が  $\mathrm{M.K.S.}$  系 )。ここで E は電場、B は磁束密度、j は電流密度、 $arepsilon_0$  は真空の誘電 率、 $\mu_0$  は真空の透磁率をあらわす。必要ならば  $\nabla \times (\nabla \times A) = \nabla (\nabla \cdot A) - \nabla^2 A$  の公式を用いてよい。また C.G.S. 系、M.K.S. 系のいずれの単位系を用いてもよい。

- 1. プラズマ中に誘起される電流密度 j は、入射する電磁波の電場ベクトル E と電気伝導度  $\sigma$  を用い、 $j=\sigma E$ と書くことができる。まず外部磁場がゼロとして、電離層の電気伝導度  $\sigma$  を周波数  $\omega$  の関数として書け。
- ないことを示し、その物理的意味を説明せよ。ここで  $\omega_p$  はプラズマ周波数であり C.G.S. 系では  $\sqrt{4\pi ne^2/m}$ 、 M.K.S. 系では  $\sqrt{ne^2/m\varepsilon_0}$  で与えられる。

次に電磁波の伝搬方向に一定磁場  $B_0$  がかかったとする。このとき磁場に対して右回りと左回りに円偏光した電 磁波は異なる伝搬の仕方をする。z 方向に伝搬する円偏光した電磁波の電場ベクトルは  $E=E_0e^{i(kz-\omega t)}\frac{1}{4E}(\hat{x}\pm i\hat{y})$  $(\hat{x},\hat{y})$  は各 $\phi_{X}$  方向及び  $\phi_{X}$  方向の単位ベクトルで、 + 符号は右回り、 - 符号は左回り)と書けることを用い、以下 に答えよ。

- 3. 右回り左回りそれぞれの電磁波に対する電離層の電気伝導度を  $\omega,\omega_c$  の関数として書け。ここで  $\omega_c$  はサイク ロトロン周波数であり C.G.S. 系では  $eB_0/mc$ 、M.K.S. 系では  $eB_0/m$  で与えられる。
- 4. 右回り左回りそれぞれの電磁波に対する屈折率を  $\omega, \omega$ , 及び  $\omega$ , の関数として求めよ。またこのとき一方の電 磁波は $\omega < \omega_p$ でも電離層を伝搬できることを示せ。

低温を得る方法の 1 つに磁性体の断熱消磁がある。磁性体のモデルとして結晶格子の各格子点 i に 1/2 のスピンが 存在する系を考える。磁性体と外部磁場 H の相互作用は、

$$\mathcal{H}_1 = -\mu H \sum_i \sigma_i$$

と表される。ただし  $\sigma_i$  はスピンの向きに応じて +1 又は -1 の値を取る変数で、 $\mu$  は磁気モーメントである。以下 の設問ではスピン以外の自由度は考えなくて良い。

まず、異なる格子点上のスピン間に相互作用がないとして次の1.から3.の問いに答えよ。

- 1. 1 格子点あたりの自由エネルギーとエントロピーを温度 T、磁場 H の関数として求めよ。
- 2. i)H=0 の場合、ii)H が有限で小さいとき、iii)H が大きいとき、の3つの場合について、1格子点当たりのエ ントロピーを温度 T の関数として定性的にグラフで示せ。
- 3. 最初、磁場  $H_i$  のもとで、磁性体が温度  $T_i$  の熱浴と接して熱平衡状態にあった。次に熱浴との接触を絶ち、磁 性体を外界から孤立させて磁場を  $H_f$  までゆっくり下げた。このときの磁性体の温度  $T_f$  求めよ。

これまでは、スピン間の相互作用を無視しているために、3. の問いで  $H_f=0$  とすると不合理な結果が生じる。一 方現実の磁性体では、隣接する格子点上のスピンの間に相互作用が働き、このため低温で強磁性は反強磁性など の秩序状態が実現する。この事を考慮して以下の問いに答えよ。

- 4. 3. の問いで  $H_f = 0$  とすると、どのような不合理な結果が生じるか、述べよ。
- 5. 現実の磁性体に対して  $H_f = 0$  としたとき、磁性体の温度  $T_f$  はどうなるか、定性的に論じよ。
- 6. 最近接格子点上のスピン間に強さ J の相互作用があるとき、1 格子点当たりの自由エネルギーは

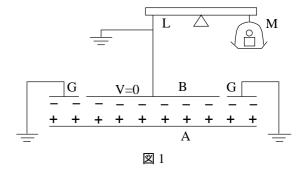
$$F = -kT \log 2 - \frac{(\mu H)^2 + J^2 z/2}{2kT}$$

で与えられることが知られている。ここで、k は Boltzmann 定数、z は 1 つの格子点に対する最近接格子点の 数である。

この系に対して、3.の問いで述べた断熱消磁を実行した。この過程で系の状態は常にある温度に対するカノニ カル分布で表されると仮定して、最終磁場  $H_f$  における温度  $T_f$  を  $H_f$  の関数として求め  $(0 \le H_f \le H_i)$ 、結果 を図示せよ。ただし  $kT\gg \mu H\gg |J|\sqrt{z}$  と仮定する。

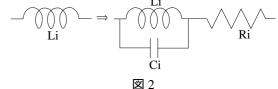
1. 図 1 は Kelvin の電気秤であり、天秤 L のおもり M の値を変化させることで、固定電極 A に加えた電圧を測 定できる。

B は接地された可動電極 (極板面積 S)、G は接地され たガード電極(固定)でBの周囲を取り囲んでいる。A、 G の極板間隔を d、重力加速度を g、空気の誘電率は真 空の誘電率  $\varepsilon_0$  と同じとして、以下の問いに答えよ。



- (i) Aに加えた電圧 V(Bに対する電位)を測定する手順を、実際に測定することを想定してなるべく詳しく記 述し、V を求める式を導け。(ちなみに、Kelvin は実際には A に既知の電位を与え誘電率  $arepsilon_0$  を測定するた めにこの秤を用いた。)
- (ii) ガード電極 G を配置する意味を答えよ。
- 2. 受動回路素子(抵抗 R、コンデンサー C、コイル L)のインピーダンスを正確に測定する方法にブリッジ法があ る。この方法は、未知のインピーダンス  $Z_x$  と既知の (可変) インピーダンス  $Z_t$ ( $i=1\sim3$ ) を使い、ブリッジを バランスすることで 2、を精密に測定する方法である。測定には必要に応じて周波数可変な信号源を用いるこ とが出来るものとして、以下に答えよ。
  - (i) 理想的なコイル  $L_x$  の未知のインダクタンス  $L_x$  を、既知の純抵抗  $R_1, R_2, R_3$  を用いてブリッジ法で測定す るための回路図を示し、 $L_x$  を求める方法を解説せよ。
  - (ii) 現実的には理想的な受動素子は存在せず、寄生成分と呼ばれる避けられないインピーダンス成分が存在する。 たとえばコイルのインダクタンス L<sub>i</sub> には、直列に巻 線抵抗 R<sub>i</sub>、並列に巻線間分布容量 C<sub>i</sub> が存在する(図 2)。(i) で考えた回路で用いた  $L_x$  に寄生成分がある

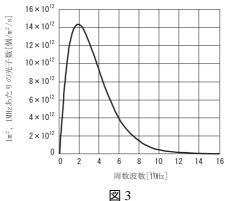
場合、寄生成分の値を推定する方法を簡潔に論じよ。

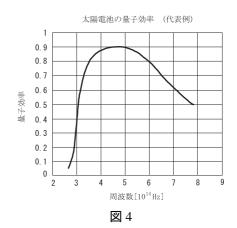


- 3. 太陽電池では、シリコンの pn 接合部分にバンドギャップ (約 0.6eV) よりも大きなエネルギーをもつ 1 個の光 子が当たったときに電子・正孔が生じ、それらが界面電場により互いに逆方向にドリフトすることで、2つの 電極間に光起電力が発生する。必要ならば、光速度  $c=3.0\times10^8$  [m/s]、素電荷  $e=1.6\times10^{-19}$  [C]、Planck 定 数  $h = 6.6 \times 10^{-34}$  [J·s]、Boltzman 定数  $k = 1.4 \times 10^{-23}$  [J/K] を用い、以下の問いに答えよ。
  - (i) 太陽電池に光を照射した際プラス極になるのは、p型、n型のどちらに接続した電極か。理由を付けて答 えよ。
  - (ii) 温度 T [K] の光源 (黒体) の単位面積から単位時間に放出される電磁場の全輻射エネルギー I [W/m²] は、  $I=\sigma T^4$  で与えられる。ここで  $\sigma=5.7\times 10^{-8}$  [W/m²/K⁴] はシュテファンボルツマン定数である。今、太 陽を温度  $5.8 \times 10^3$  [K] の黒体とした時、単位時間に太陽から放出される総輻射量  $P_0$  [W] および地球軌道 上 (地球の大気圏外) における単位面積あたりの太陽輻射量  $I_0$  [W/m²] を概算せよ。なお、太陽の半径は  $7.0 \times 10^8$  [m]、太陽までの距離は  $1.5 \times 10^{11}$  [m] である。
  - (iii) 図 3、4 は、地球軌道上(地球の大気圏外)における単位面積あたりの太陽輻射光子数と標準的な太陽電池 の量子効率を表している。このことから、 $5 \text{ cm} \times 5 \text{ cm}$  の太陽電池を地球軌道上(地球の大気圏外)で太陽 に正対して置き、両極を短絡したときに流れる電流量を見積もれ。

(iv) よく晴れた日に(iii)の太陽電池を地表に置き太陽に正対させて測定したところ、(iii)で見積もった結果の 約65%しか電流が流れなかった。この食い違いの原因を説明せよ。

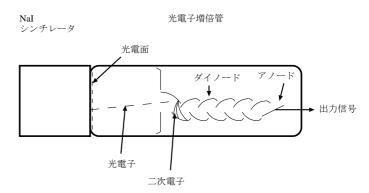






高速の荷電粒子が物質中を通過すると、物質の電離や励起が起きる。ある種の物質は、荷電粒子通過で生じた励 起状態が基底状態に戻るときに可視光領域で発光するので、それを利用して放射線検出に用いることが出来る。

代表的な物質として NaI 結晶シンチレー ターがある (Na 及び I の質量数はそれぞれ 23 及び 127、原子番号はそれぞれ 11 及び 53、密度は、3.7 g/cm<sup>3</sup> である)。NaI シンチ レーターと光電子増倍管を組み合わせて放 射線検出を行う装置を模式的に示した右図 を参考にして、以下の問いに答えよ。



- 1. 1kV の高電圧源が一台ある。これを用いて光電子増倍管を動作させるには、各電極 (光電面、ダイノード、ア ノード) にどのように電圧を供給すればよいか、概略を示せ。また、アノードの出力を、放射線のエネルギー に比例した波高スペクトルとして記録するには、どのように信号処理をすればよいか、概略を示せ。
- 2. NaI の前面から NaI の中心に向けてエネルギー 1MeV の単色電子線を入射し、波高スペクトルを記録したら、 有限の巾を持ったピークが観測され、そのピーク巾(半値全巾)とピーク中心値の比率(分解能)は約5%であっ た。分解能を決めている要因について論じよ。
- 3. 今度は NaI の前面から NaI の中心に向けてエネルギー 1MeV の単色ガンマ線を入射し、波高スペクトルを記 録した。NaI でガンマ線が測定できるのは何故か、簡潔に述べよ。また、どのような波高スペクトルが期待さ れるか、図で示し、説明を加えよ。
- 4. NaI の前面に薄い鉛板を張り、板の厚さを変えながら、板を通過して NaI に入る放射線を測定した。線源の強 さと測定時間は常に一定に保った。i)1MeV の電子が入射するとき、ii)1MeV のガンマ線入射するとき、の各々 について、波高スペクトル(ピークの位置及び高さ等)が板の厚さとともにどう変化するか、概略を図示して 説明せよ。
- 5. ある線源からのガンマ線スペクトルを測定しようとしたが線源の強度が極めて弱く、宇宙線 µ 粒子がバックグ ラウンドとして問題となることがわかった。測定系にどのような対策を施せば、このバックグラウンドを取り 除くことができるか具体的な方法を説明せよ。
- 6. 太陽からは、毎秒  $1\,\mathrm{cm}^2$  あたり  $7 \times 10^{10}$  個のニュートリノが降り注いでいる。ニュートリノが  $\mathrm{NaI}$  結晶中の電 子と相互作用をして、測定の邪魔になっていないか考えた。そのような相互作用は、1年間に何例ぐらい期待 されるか計算式を示し、計算せよ。なお、NaI 結晶の大きさは  $5\,\mathrm{cm} \times 5\,\mathrm{cm} \times 5\,\mathrm{cm}$  の立方体とし、ニュートリ ノと電子との相互作用断面積は  $1\times10^{-45}\,\mathrm{cm}^2$ 、アボガドロ数は  $6\times10^{23}$ 、一年は約  $3\times10^7$  秒とせよ。

電子が 2 次元 (xy 面) 内のみを動くとした場合に、以下のような問題を考えてみよう。各問には解答に至る道筋を 添えて答えよ。

- 1. 電子が面内では自由運動するとして Schrödinger 方程式を解き、波動関数  $\Psi(x,y)$  を求めよ。 以下では、電子の質量をmとし、電子のスピンや電子間の相互作用は無視せよ。
- 2. 一般に、状態密度 D(E) という量を、エネルギーが E と  $E+\delta E$  の間にある状態数が  $D(E)\delta E$  となるような量 として定義することができる。3次元自由空間に対して、系のx,y,z方向のサイズがそれぞれLであり周期的 境界条件をもつとして、 $D(E) \propto \sqrt{E}$  を示せ。
- 3. 2次元運動の場合に、x,y方向のサイズがそれぞれLであり周期的境界条件を持つとして、状態密度を求めよ。
- 4. *x*, *y* 面内にさらに、例えば

$$V(x, y) = V_0[\cos(2\pi x/a) + \cos(2\pi y/a)]$$

のような周期ポテンシャルが加わった場合を考えよう。一般に、このような周期ポテンシャルが加わった場合 に、波動関数 Ψ はどのような形をとるか。

5. 上記ポテンシャルの場合のように Schrödinger 方程式が変数分離できる場合は、

$$V(x) = V_0 \cos(2\pi x/a)$$

というポテンシャル下での 1 次元 Schrödinger 方程式を解けばよい。このポテンシャルの振幅  $V_0$  が小さいと して摂動で扱い、この1次元問題に対してエネルギー・スペクトルがどのようになるか求めよ。

6. 2次元での周期ポテンシャル問題に戻り、(i) エネルギー・スペクトルはどのような運動量又はそれに準ずるパ ラメータの関数として考えればよいのか、(ii) このとき、エネルギー・スペクトルは定性的にはどのような特 徴をもつか、(iii) 絶対零度で電子を詰めた場合に、どのような場合に金属になり、どのような場合に絶縁体・ 半導体になるか、を答えよ。

タンパク質の高次構造決定法として、(A) 電子顕微鏡法、(B) 円偏光二色性 (CD)、(C)X 線結晶回折、(D) 核磁気共鳴法 (NMR)、(E) 中性子散乱法などがある。

これらの方法のうちで、CD 法以外では、タンパク質を構成する各原子の座標を決定できる。

- 1. CD 法で決定できる高次構造は何か、また、それはタンパク質のどのような特徴を利用しているかを述べよ。 また、この方法の長所は何か。
- 2. 電子顕微鏡では電子を 100kV 程度の電場で加速して用いる。
  - (i) この電子の波長 ( $\lambda$ ) を非相対論的に求めよ(有効数字 1 桁で良い)。但し、電子質量( $m_e = 9.1 \times 10^{-31}$  kg)、電子電荷 ( $-e = -1.6 \times 10^{-19}$  C)、プランク定数 ( $h = 6.6 \times 10^{-34}$  J·s) を用いよ。
  - (ii) 電子顕微鏡の分解能は 0.1nm 程度であり、上で求めた電子の波長と桁が違う。光学顕微鏡で得られる分解 能は 200nm 程度であり、可視光の波長 (400 ~ 700nm) と同程度である。この理由を考察せよ。
- 3. X線結晶解析ではタンパク質分子の単結晶を作製し、その回折強度を計測する。
  - (i) X線回折強度がタンパク質分子の原子構造(原子の種類及び配置)を反映するのはなぜか、簡潔に述べよ。
  - (前) 回折強度の計測だけでは原子構造を解くことが出来ない場合が大半である。それは何故か。
  - (iii) どのような方法でこの困難を解決するか、概略を述べよ。
- 4. 核磁気共鳴法では重水中のタンパク質のスペクトルを観察し、タンパク質を構成する水素原子核のそれぞれを 区別して同定・帰属付けを行う。
  - (i) 核磁気共鳴法は、一様磁場  $\vec{B}$  中に試料を置き、磁気能率が  $\vec{B}$  のまわりで歳差運動する周波数を、マイクロ波共鳴によって測定する手法である。B=1T の磁場中での電子スピンの共鳴周波数が約  $28 \, \mathrm{GHz}$  であることを既知として、同じ磁場中での水素原子核(陽子)の共鳴周波数を概算せよ。なお、電子と陽子の g 因子は各々約 2 及び 5.6 である。
  - (ii) 重水を溶媒として用いるのは何故か。
  - (iii) タンパク質の異なる位置にある水素原子のスペクトルが異なるのは何故か。
  - (iv) この方法で決定できる分子量の上限(約20,000)を決定している要素は何かを考察せよ。
- 5. タンパク質と核酸の複合体を中性子線(波長 0.1nm 程度)を用いて構造研究すると、X線、電子線より有利な場合がある。どんな場合か、中性子の特徴と関連しつつ述べよ。

- 1. 1,1,1-トリクロロエタン分子 (CH<sub>3</sub>-CCl<sub>3</sub>) の C-C 単結合の周りの内部回転を考える。CCl<sub>3</sub> 基の慣性モーメント は大きいので止まっていると仮定して、CH3 基の回転運動を取り扱う。
  - (i) CH3 基の C-C 軸周りの慣性モーメントを求めよ。ただし、C-H の核間距離を r、C-H 結合と C-C 結合の なす角度を $\theta$ 、水素原子の質量をmとする。
  - (ii)  $CH_3$  基が C-C 軸周りに自由に回転しているとする。回転角を  $\phi$  として、回転運動のハミルトニアンを導 け。また、それをもとにシュレディンガー方程式を解いて、エネルギー準位を求めよ。ただし、CH3基の C-C 軸周りの慣性モーメントは I としてよい。
  - (iii) 実際は C-C 軸周りの回転は自由回転ではなく、水素と塩素との立体反発のために相互が接近する位置で のポテンシャルエネルギーは高くなり、遠ざかる位置でのポテンシャルエネルギーは低くなる。それを

$$V = \frac{V_3}{2}(1 - \cos 3\phi)$$

で表す。ここで、 $\phi$  はポテンシャルの一つの極小を 0 にとっており、 $V_3$  はポテンシャルの極大と極小の差 を表すパラメーターである。もし、 $V_3$  が十分大きければ、 $CH_3$  基の C-C 軸周りの運動は、 $\phi=0$  の近傍 で調和振動子になることを示し、そのエネルギー準位を求めよ。

- 2. 次に、1,2-ジクロロエタン分子 (CH<sub>2</sub>Cl-CH<sub>2</sub>Cl) を考える。この分子の場合、C-C 結合周りの回転異性体とし て、トランス型とゴーシュ型が存在する。これらは室温で相互に移り変わることができるので単離精製はでき ない。従って、室温の気体、液体は異なる構造を持つ2種類の回転異性体の混合物として理解できる。
  - (i) トランス型とゴーシュ型の立体構造を図示せよ。できれば、Newman 投影図を用いて表せ。
  - (ii) 気体の 1,2-ジクロロエタンの赤外線吸収スペクトルを測定したところ、C-CI 伸縮振動による吸収が、ト ランス型では  $709~\mathrm{cm^{-1}}$  の 1 本、ゴーシュ型では  $675~\mathrm{cm^{-1}}$  と  $653~\mathrm{cm^{-1}}$  の 2 本が測定された。なぜ、ゴー シュ型では C-Cl 伸縮による吸収が 2 本見えるのに、トランス型では C-Cl 伸縮による吸収が 1 本しか見え ないのかを、トランス型、ゴーシュ型の分子構造及び赤外線吸収のメカニズムをもとに説明せよ。
  - (iii) トランス型とゴーシュ型のエネルギー差  $\Delta E$  を求めたい。そのために様々な温度 T で赤外線吸収スペク トルを測定し、トランス型のバンドの強度  $I_{\iota}(T)$  とゴーシュ型のバンドの強度  $I_{\varrho}(T)$  を求めた。このデー タから  $\Delta E$  を求める方法を説明せよ。
  - (iv) 前問の実験の結果、気体状態ではトランス型が安定で、 $\Delta E/hc$  は  $420~{
    m cm}^{-1}$  であることがわかった。C-C 結合の回転角を $\phi$ として、内部回転のポテンシャルエネルギー曲線を $\phi$ の関数としてグラフに示せ。その 際、ポテンシャルエネルギー曲線の極大値を決定する要因についても考慮せよ。また、トランス型、ゴー シュ型がどの $\phi$ に対応するかを書き入れよ。
  - (v) 前問で示した  $\Delta E$  の時、290 K における気体状態でのトランス型、ゴーシュ型の存在比率を求めよ。ただ し、光速  $c=3\times10^8$  m/s、プランク定数  $h=6.6\times10^{-34}$  J·s、ボルツマン定数  $k=1.4\times10^{-23}$  J/K、自然対 数の底 e = 2.7 とする。

# 専攻問題1解答

- 1.  $\Psi_{+}(x) = \pm \Psi_{+}(-x)$  のような解がある。
  - (i)  $0 \le x \le d$  のとき

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m}\Psi''_{1\pm}(x) + V_{0}\Psi_{1\pm}(x) = E_{\pm}\Psi_{1\pm}(x)$$

$$\alpha_{\pm} \equiv \frac{\sqrt{2m(V_{0} - E_{\pm})}}{\hbar} \succeq \bigcup \mathcal{T}$$

$$\Psi_{1\pm}(x) = Ae^{\alpha_{\pm}x} + Be^{-\alpha_{\pm}x}$$

• parity even のとき

$$\Psi_{1+}(x) = \Psi_{1+}(-x) \sharp \mathcal{O} A = B$$
  

$$\therefore \Psi_{1+}(x) = A_+ \cosh(\alpha_+ x)$$

• parity odd のとき

$$\Psi_{1-}(x) = -\Psi_{1-}(-x) \text{ Lif } A = -B$$
  
 
$$\therefore \Psi_{1-}(x) = A_- \sinh(\alpha_- x)$$

(ii) 
$$d \le x \le d + a$$
 のとき

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_{2\pm}^{\prime\prime}(x) = E_{\pm}\Psi_{2\pm}(x)$$
 
$$\beta_{\pm} \equiv \frac{\sqrt{2mE_{\pm}}}{\hbar} として$$
 
$$\Psi_{2\pm}(d+a) = 0 の境界条件より$$
 
$$\Psi_{2\pm}(x) = B_{\pm} \sin(\beta_{\pm}(x-a-d))$$
 と書ける。

これらから E を求める。

• parity even のとき

$$\begin{cases} \Psi_{1+}(x) = A_+ \cosh \alpha_+ x \\ \Psi_{2+}(x) = B_+ \sin (\beta_+ (x - a - d)) \end{cases}$$
境界条件より
$$\begin{cases} \Psi_{1+}(d) = \Psi_{2+}(d) \\ \Psi'_{1+}(d) = \Psi'_{2+}(d) \end{cases}$$
したがって
$$\begin{cases} A_+ \cosh \alpha_+ d = -B_+ \sin \beta_+ a \\ A_+ \alpha_+ \sinh \alpha_+ d = B_+ \beta_+ \cos \beta_+ a \end{cases}$$

$$\therefore \alpha_+ \tanh \alpha_+ d = -\beta_+ \cot \beta_+ a \end{cases}$$

これにより E が求まる。

#### • parity odd のとき

$$\begin{cases} \Psi_{1-}(x) = A_{-} \sinh \alpha_{-} x \\ \Psi_{2-}(x) = B_{-} \sin (\beta_{-}(x-a-d)) \end{cases}$$

#### 境界条件より

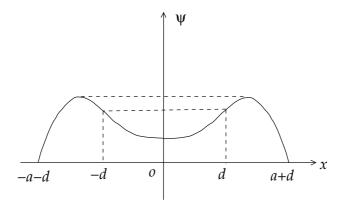
$$\begin{cases} \Psi_{1-}(d) = \Psi_{2-}(d) \\ \Psi'_{1-}(d) = \Psi'_{2-}(d) \end{cases}$$

#### したがって

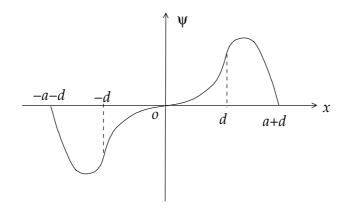
$$\begin{cases} A_{-} \sinh \alpha_{-} d = -B_{-} \sin \beta_{-} a \\ A_{-} \alpha_{-} \cosh \alpha_{-} d = B_{-} \beta_{-} \cos \beta_{-} a \end{cases}$$
$$\therefore \frac{1}{\alpha_{-}} \tanh \alpha_{-} d = -\frac{1}{\beta_{-}} \tan \beta_{-} a$$

#### これにより *E* が求まる。

#### 2. parity even のとき。



parity odd のとき。



3.  $d \to \infty$  では

$$\tan \beta_{\pm} a = -\frac{\beta_{\pm}}{\alpha_{\pm}}$$

より、エネルギー準位は縮退していて

$$\overline{E_0} = \overline{E_1}$$

エネルギーの値もこの式より求まる。

4.

$$\tanh \alpha x = \frac{e^{\alpha x} - e^{-\alpha x}}{e^{\alpha x} + e^{-\alpha x}}$$
$$= \frac{1 - e^{-2\alpha x}}{1 + e^{-2\alpha x}}$$

x が十分大きいとすると

$$\tanh \alpha x \sim \left(1 - e^{-2\alpha x}\right)^2$$
$$\sim 1 - 2e^{-2\alpha x}$$

したがって

$$an eta_{\pm} a = -rac{eta_{\pm}}{lpha_{\pm}} \mp 2rac{eta_{\pm}}{lpha_{\pm}} e^{-2lpha_{\pm} d}$$
  $lpha_0 \equiv rac{\sqrt{2m(V_0 - E_0)}}{\hbar} \; , \; eta_0 \equiv rac{\sqrt{2mE_0}}{\hbar} \;$ とすると  $eta_{\pm} a = \pi - rac{eta_0}{lpha_0} \left(1 \pm 2e^{-2lpha_0 d}
ight)$ 

 $\beta_+$  は基底状態、 $\beta_-$  は第一励起状態となるので

$$\Delta \equiv E_1 - E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \beta_-^2 - \beta_+^2 \right) \quad \cdots \quad \propto e^{-2\alpha_0 d}$$

よって、 $\Delta$  は d に指数関数的に依存している。

5.

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|R\rangle + |L\rangle)$$
$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|R\rangle - |L\rangle)$$

6.

$$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi_0\rangle + |\Psi_1\rangle)$$
$$|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi_0\rangle - |\Psi_1\rangle)$$

$$\begin{split} \langle R|H|R\rangle &= \frac{1}{2}\Big(\langle \Psi_0|+\langle \Psi_1|\Big)\Big(E_0|\Psi_0\rangle + E_1|\Psi_1\rangle\Big) = \frac{E_0+E_1}{2}\\ \langle L|H|L\rangle &= \frac{1}{2}\Big(\langle \Psi_0|-\langle \Psi_1|\Big)\Big(E_0|\Psi_0\rangle - E_1|\Psi_1\rangle\Big) = \frac{E_0+E_1}{2}\\ \langle R|H|L\rangle &= \frac{1}{2}\Big(\langle \Psi_0|+\langle \Psi_1|\Big)\Big(E_0|\Psi_0\rangle - E_1|\Psi_1\rangle\Big) = -\frac{E_1-E_0}{2} = -\frac{\Delta}{2}\\ \langle L|H|R\rangle &= \frac{1}{2}\Big(\langle \Psi_0|-\langle \Psi_1|\Big)\Big(E_0|\Psi_0\rangle + E_1|\Psi_1\rangle\Big) = -\frac{E_1-E_0}{2} = -\frac{\Delta}{2} \end{split}$$

$$\therefore H \doteq \begin{pmatrix} \frac{E_0 + E_1}{2} & -\frac{\Delta}{2} \\ -\frac{\Delta}{2} & \frac{E_0 + E_1}{2} \end{pmatrix}$$

7. Schrödinger 表示で考える。

$$H|R(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|R(t)\rangle , |R(0)\rangle = |R\rangle$$
  
  $\therefore |R(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|R\rangle$ 

$$\begin{split} e^{-iHt/\hbar} &\doteq \sum_{k} \frac{(-it/\hbar)^k}{k!} \binom{\frac{E_0 + E_1}{2}}{-\frac{\Delta}{2}} \frac{-\frac{\Delta}{2}}{\frac{E_0 + E_1}{2}} \right)^k \\ &= \sum_{k} \frac{1}{k!} \frac{(-it/\hbar)^k}{2} \binom{E_0^k + E_1^k}{E_0^k + E_1^k} \frac{E_0^k - E_1^k}{E_0^k - E_1^k} \\ &= \frac{1}{2} \binom{e^{-iE_0t/\hbar} + e^{-iE_1t/\hbar}}{e^{-iE_0t/\hbar} - e^{-iE_1t/\hbar}} \frac{e^{-iE_0t/\hbar} - e^{-iE_1t/\hbar}}{e^{-iE_0t/\hbar} + e^{-iE_1t/\hbar}} \end{split}$$

$$\begin{split} \therefore \langle L|R(t)\rangle &= \frac{1}{2}\langle L|\left\{\left(e^{-iE_0t/\hbar} + e^{-iE_1t/\hbar}\right)|R\rangle + \left(e^{-iE_0t/\hbar} - e^{-iE_1t/\hbar}\right)|L\rangle\right\} \\ &= \frac{1}{2}\left(e^{-iE_0t/\hbar} - e^{-iE_1t/\hbar}\right) \end{split}$$

$$\therefore |\langle L|R(t)\rangle|^2 = \frac{1}{4} \left( e^{-iE_0t/\hbar} - e^{-iE_1t/\hbar} \right) \left( e^{iE_0t/\hbar} - e^{iE_1t/\hbar} \right)$$

$$= \frac{1}{4} \left( 2 - e^{-i\Delta t/\hbar} - e^{i\Delta t/\hbar} \right)$$

$$= \frac{1}{2} \left( 1 - \cos\frac{\Delta}{\hbar} t \right)$$

$$= \sin^2 \frac{\Delta}{2\hbar} t$$

これより、 $\Delta$  が大きい、つまり  $V_0$  や d が小さい時ほど速く  $|R\rangle \leftrightarrow |L\rangle$  の周期的遷移をすることがわかる。

## 専攻問題2解答

以下、M.K.S. 系を利用する。

1. 電流は $j=-en\dot{x}$ であり、電場は一般に $E=E_0e^{i(k\cdot x-\omega t)}$ と書ける。さて、

$$\frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} = -en\ddot{\mathbf{x}}$$
$$m\ddot{\mathbf{x}} = -e\mathbf{E}$$

より、

$$\frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} = \frac{ne^2}{m} \mathbf{E}$$
 \tag{1}

となる。この式の左辺に、 $j = \sigma E$  の関係を代入して、

$$\sigma \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{ne^2}{m} \mathbf{E}$$

となる。最後にこの式に E の具体形を代入して、

$$\sigma = i \frac{ne^2}{m\omega}$$

を得る。

2. Maxwell 方程式の 式の両辺を t で微分すると、

$$\nabla \times \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \mu_0 \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t}$$

となる。この式の左辺に Maxwell 方程式の と、問 1 で得た (1) 式を代入すると、

$$\nabla^{2} \mathbf{E} = \mu_{0} \varepsilon_{0} \frac{\partial^{2} \mathbf{E}}{\partial t^{2}} + \mu_{0} \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} \qquad \cdots (2)$$

$$= \mu_{0} \varepsilon_{0} \frac{\partial^{2} \mathbf{E}}{\partial t^{2}} + \mu_{0} \frac{ne^{2}}{m} \mathbf{E}$$

を得る。この式にEの具体形を代入すると、

$$-k^2 = -\mu_0 \varepsilon_0 \omega^2 + \mu_0 \frac{ne^2}{m}$$

$$= -\frac{\omega^2}{c^2} \left( 1 - \left( \frac{\omega_p}{\omega} \right)^2 \right) \qquad (\omega_p \text{はプラズマ周波数})$$

となり、従って、

$$n \equiv \frac{ck}{\omega} = \sqrt{1 - \left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2}$$

を得る。

さて、 $\omega < \omega_p$  の時は屈折率は虚数となるため、電場が電離層に入射しても、電場は指数関数的に減少する。 よって、電場は電離層を伝搬できずに、全反射される。

3. 電子の運動方程式は、

$$m\dot{\boldsymbol{v}} = -e\boldsymbol{E} - e\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}_0$$

である。さて、

$$E = \frac{E_0}{\sqrt{2}} (\hat{x} \pm i\hat{y}) e^{i(kz - \omega t)}$$
 ··· (3)

$$v = \frac{v_0}{\sqrt{2}} (\hat{x} \pm i\hat{y}) e^{i(kz - \omega t)} \qquad \cdots (4)$$

$$B_0 = B_0 \hat{z}$$
 ··· (5)

と置くと、

$$v \times B_0 = \frac{v_0 B_0}{\sqrt{2}} (\hat{x} \pm i\hat{y}) \times \hat{z} e^{i(kz - \omega t)}$$
$$= \pm i \frac{v_0 B_0}{\sqrt{2}} (\hat{x} \pm i\hat{y}) e^{i(kz - \omega t)} \qquad \cdots (6)$$

となる。よって、電子の運動方程式に(3),(3)式を代入して、

$$v_0(-im\omega \pm ieB_0) = -eE_0$$

より、

$$v_0 = \frac{-ieE_0}{m(\omega \mp \omega_c)}$$
 ( $\omega_c$ はサイクロトロン周波数) ··· (7)

を得る。電流密度の大きさは、 $j_0 = -env_0$  と書けるので、

$$j_0 = -env_0 = \frac{ine^2}{m(\omega \mp \omega_c)} E_0$$

より、電気伝導度は、

$$\sigma = \frac{ine^2}{m(\omega \mp \omega_c)} \tag{8}$$

となる。

4. 問2で得た(2)式を利用して、

$$\nabla^{2} \mathbf{E} = \mu_{0} \varepsilon_{0} \frac{\partial^{2} \mathbf{E}}{\partial t^{2}} + \mu_{0} \frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t}$$

$$\iff k^{2} \mathbf{E} = \mu_{0} (\varepsilon_{0} \omega^{2} + i \omega \sigma) \mathbf{E}$$

となる。この式を屈折率の定義の形に変形すると、

$$\left(\frac{kc}{\omega}\right)^2 = 1 + \frac{i}{\varepsilon_0 \omega} \sigma \qquad (\leftarrow (8)$$
 式を代入)
$$\iff n_{\pm}^2 = 1 - \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m \omega (\omega \mp \omega_c)}$$

$$\iff n_{\pm}^2 = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega (\omega \mp \omega_c)}$$

となるので、屈折率は、

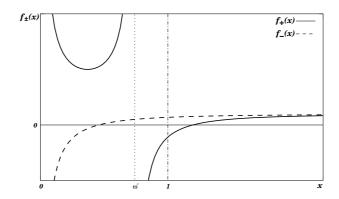
$$n_{\pm} = \sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega \mp \omega_s)}}$$

となる。

さて、 $x \equiv \omega/\omega_p$ ,  $\omega' \equiv \omega_c/\omega_p$  とおくと、

$$n_{\pm}(x) = \sqrt{1 - \frac{1}{x(x \mp \omega')}}$$

となる。また、 $f_{\pm}(x) \equiv n_{\pm}^2(x)$  とすると、 $f_{\pm}(x) \geq 0$  となる周波数領域では電磁波が伝搬できることになる。次に  $f_{\pm}(x)$  のグラフを示す。( ただし、 $\omega' < 1$  の場合 )



このグラフから分かるように、x<1 つまり  $\omega<\omega_p$  の領域でも  $f_+(x)>0$  となる領域があるため、この時  $n_+(x)$  は実数となる。従って、右回りの電磁波は  $\omega<\omega_p$  でも伝搬できる。

# 専攻問題3解答

1.

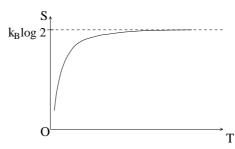
$$\begin{split} Z &= e^{\mu H/kT} + e^{-\mu H/kT} = 2\cosh\left(\frac{\mu H}{kT}\right) \\ F &= -kT\log Z \\ &= -kT\log\left(2\cosh\left(\frac{\mu H}{kT}\right)\right) \\ S &= -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_H \\ &= k\left[\log\left(2\cosh\frac{\mu H}{kT}\right) - \frac{\mu H}{kT}\tanh\left(\frac{\mu H}{kT}\right)\right] \end{split}$$

2. (i) H = 0 のとき

$$S = k \log 2$$

(ii) H が有限で小さいとき

$$\begin{split} S &\simeq k \left[ \log 2 + \log \left( 1 + \frac{x^2}{2} \right) - x^2 \left( 1 - \frac{1}{3} x^2 \right) \right] \qquad (x = \mu H/kT) \\ &\simeq k \left[ \log 2 + \frac{x^2}{2} - x^2 \right] \\ &= k \left[ \log 2 - \frac{1}{2} \left( \frac{\mu H}{kT} \right)^2 \right] \end{split}$$



(iii) H が大きいとき

$$F \simeq -\mu H$$
 より 
$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_H = 0$$

3. エントロピー S が H/T の関数であることから、 $H_i \rightarrow H_f$  の変化 (断熱的) でエントロピーの変化は 0 なので H/T の値も変化せず、

$$\frac{H_i}{T_i} = \frac{H_f}{T_f}$$

$$T_f = T_i \frac{H_f}{H_i}$$

となる。

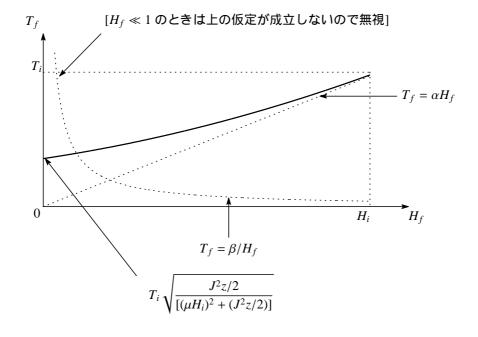
- 4. エントロピー有限のまま  $T \to 0$  となるので「T = 0 のとき S = 0 である」という熱力学第 3 法則に反する。
- 5. スピン間に働く相互作用が磁場のような働きをするため外部磁場を0にしても、個々の格子点は磁場を感じ、 温度は有限値を保つ。

6.

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{H} = -k \log 2 + \frac{1}{2kT^{2}}((\mu H)^{2} + J^{2}z/2)$$

S が断熱消磁の仮定で一定とすると、

$$\begin{split} S(H_i,T_i) &= S(H_f,T_f) \\ &\frac{1}{kT_i^2}((\mu H_i)^2 + J^2z/2) = \frac{1}{kT_f^2}((\mu H_f)^2 + J^2z/2) \end{split}$$



### 専攻問題4解答

1. (i) まず A を接地し、その時点で AB 間の距離が d であることを確かめる。次に B を A に接触しないように 支えておきながら極板 A に電圧 V を加える。B は A に引っ張られるので、おもり M を加減して AB 間 の距離が d になるように調節する。

電極 B の電荷を  $Q_{B_N}$  電極 G の電荷を  $Q_{G_N}$  面積を  $S_{G_N}$  A,B の極板間隔を x とすると

$$\frac{Q_B}{S} = \frac{\varepsilon_0 V}{r} \qquad \cdots (1)$$

$$\frac{Q_G}{S_G} = \frac{\varepsilon_0 V}{d} \tag{2}$$

である。x = d であるから電極 B にかかるクーロン力は

$$\frac{1}{2}Q_B E_{AB} = \frac{1}{2}\varepsilon_0 \frac{S}{d} V \frac{V}{d} = \frac{1}{2} \frac{\varepsilon_0 S V^2}{d^2}$$

これと Mg が等しくなるように M を選べばよくて、

$$\frac{1}{2} \frac{\varepsilon_0 S V^2}{d^2} = Mg$$

$$\therefore V = \sqrt{\frac{2Mg}{\varepsilon_0 S}} d$$

- (ii) B の周辺において生じる静電界の不均一をなくす。また、AB 間の距離を d にする目安になる。
- 2. (i) 通常のブリッジ法は検流計に電流が流れなくなる様に可変抵抗でバランスを取るのであるが、ここではコイル 1 つ抵抗 3 つを使うという設定と思われるので、これらの素子をブリッジ法の各辺に配置しても平衡は成り立たない。そこで検流計に流れる電流を信号源の周波数を変えて測定する事により、インダクタンスを測定する(図 5)。

$$Z_1I_1 = Z_2I_2$$
 ... (3)  
 $Z_4(I_1 - I_3) = Z_3(I_2 + I_3)$  ... (4)

$$Z_2I_2 + Z_3(I_2 + I_3) = V_0e^{i\omega t}$$
 ... (5)

Z4 にはコイルを配置する。すなわち、

$$Z_1 = R_1$$
  $Z_2 = R_2$   
 $Z_3 = R_3$   $Z_4 = i\omega L_x$ 

(1),(1) より

$$I_2 = \frac{Z_1(Z_3 + Z_4)}{Z_2 Z_4 - Z_1 Z_3} I_3 \qquad \cdots (6)$$

(1),(6) より

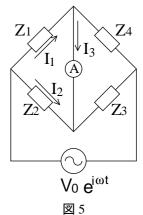
$$I_{3} = \frac{Z_{2}Z_{4} - Z_{1}Z_{3}}{Z_{1}Z_{2}Z_{3} + Z_{2}Z_{3}Z_{4} + Z_{3}Z_{4}Z_{1} + Z_{4}Z_{1}Z_{2}} V_{0}e^{i\omega t}$$

$$\equiv \frac{i\omega L_{x}R_{2} - R_{1}R_{3}}{R + i\omega L_{x}r} V_{0}e^{i\omega t}$$

(但し、
$$R \equiv R_1 R_2 R_3$$
,  $r \equiv R_1 R_2 + R_2 R_3 + R_3 R_1$ )

$$\therefore |I_3|^2 = \frac{R_1^2 R_3^2 + R_2^2 \omega^2 L_x^2}{R^2 + \omega^2 L_x^2 r^2} V_0^2$$

$$= \frac{R_2^2 + \frac{R_1^2 R_3^2}{\omega^2 L_x^2}}{r^2 + \frac{R^2}{\omega^2 L_x^2}} V_0^2 \longrightarrow \frac{R_2^2}{r^2} V_0^2 \qquad (\omega \to \infty)$$



20

 $I_3$  を、周波数  $\omega$  を変えながら測定しプロットする。その形を理論値と比較してフィッティングを行えば  $L_x$  を求めることができる ( $V_0$  の値は  $\omega \to \infty$  とすれば求めることができる)。

(ii) まず、巻線抵抗 R<sub>i</sub> を求める。

図 5 において直流電源をつなげば、検流計に電流が流れなくなった時、ブリッジ法の平衡の式より  $R_i = \frac{R_1 R_2}{R_2}$  となる。

次に図6のようにコイルと交流電源をつなぐ。現実

$$Z = R_i + \frac{1}{\frac{1}{i\omega L_i} + i\omega C_i}$$
$$= R_i + i\frac{\omega L_i}{1 - \omega^2 L_i C_i}$$

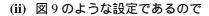
 $\omega^2 = \frac{1}{L_i C_i}$  で電流が最小になる。これによって  $L_i C_i$  の値がわかる。また、

$$|Z| = \sqrt{R_i^2 + \left(\frac{\omega L_i}{1 - \omega^2 L_i C_i}\right)^2}$$

だから、適当な $\omega$ でインピーダンスを求めれば $R_i$ ,  $L_iC_i$  は分かっているので $L_i$  が求まる。すると $C_i$  もわかる。



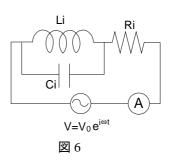
理由:接合部付近は正孔と電子が吸収しあって、キャリアが存在しない層(空乏層:depletion layer)ができる(図 7)。空乏層の p 型部分ではアクセプタの電荷、つまり負電荷があらわれる。 n 型部分ではドナーの電荷、正電荷があらわれる。電荷分布は図 8 のようになるから、接合部付近では n 型  $\rightarrow$  p 型の向きに電場が生じる。このため、光子が当たった時に生じる電子は n 型方向に、正孔は p 型方向に加速される。したがって p 型がプラス極になる。

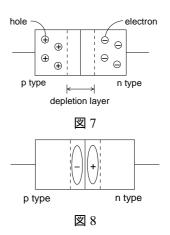


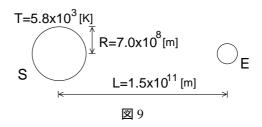
$$\begin{cases} P_0 = \sigma T^4 \cdot 4\pi R^2 \\ I_0 = \frac{P_0}{4\pi L^2} = \sigma T^4 \cdot \frac{R^2}{L^2} \end{cases}$$

に数値を代入して

$$\begin{cases} P_0 = 4.0 \times 10^{26} \text{ [W]} \\ I_0 = 1.4 \times 10^3 \text{ [W/m^2]} \end{cases}$$

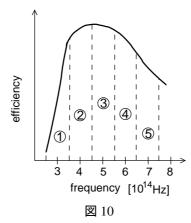






#### (iii) 図 10 のように 5 つにブロック分けをすると

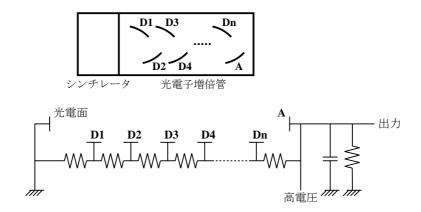
(太陽電池の出力電流) = 
$$\int d\nu$$
 (光子数) × (量子効率) × (素電荷)  
= (面積) ×  $10^8$  ×  $\left(\sum_{\mathcal{I} \square \nu \mathcal{I}}$  (単位面積の光子数) × ×(量子効率)  
=  $(0.05)^2$  ×  $10^8$  ×  $1.6$  ×  $10^{-19}$  { $(12 \times 10^{12})$  ×  $0.4$   
+  $(9 \times 10^{12})$  ×  $0.9$  +  $(6 \times 10^{12})$  ×  $0.9$   
+  $(4 \times 10^{12})$  ×  $0.8$  +  $(2 \times 10^{12})$  ×  $0.6$ }  
=  $0.908 \approx 0.9$  [A]



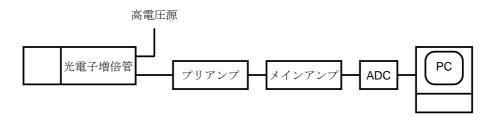
(iv) 太陽光の一部が大気に吸収、反射されたため。

# 専攻問題5解答

1. (電圧供給)

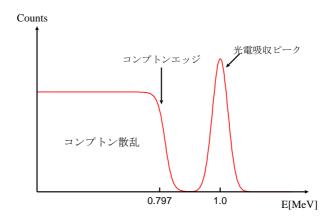


上図の様に電位が徐々に上がっていくように回路を作ればよい。 (アノード出力の信号処理)



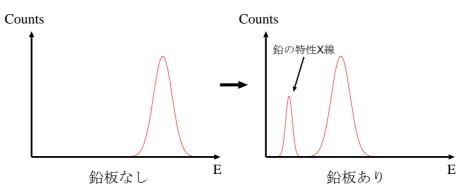
アノードの出力のパルスをアンプで整形したのち、ADC(Analog to Digital Converter) でデジタル信号に変換しコンピュータに取り込む。

- 2. 分解能を決めている要因としては、初期の発光現象における発光光子数の統計的変動と、光電面から放出される有効光電子数の統計的変動が考えられるが、NaI 結晶シンチレータは発光量が非常に多いため、発光光子数の統計的変動は小さい。また、アンプなどの周辺機器からの電気的雑音も分解能を悪くする。
- 3.  $\gamma$ 線は、物質との三種類の電磁相互作用 (光電効果、コンプトン散乱、電子対生成) により、電子を放出させる。その電子がシンチレータを励起することにより、 $\gamma$ 線を測定することができる。



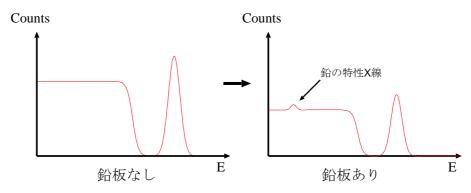
上図の様な光電吸収ピークと、コンプトン散乱のスペクトルが得られる。コンプトン散乱によるスペクトルは、散乱角  $\theta$  に依存するため、連続スペクトルとなり、 $\theta=180^\circ$  の時、最大となる。これがコンプトンエッジである。電子対生成は、 $E_\gamma>2m_ec^2$  (1.02 MeV) の場合にのみ起こるため、この場合は、電子対生成は起こらない。

4. (i) 1 MeV の電子が入射するとき、



電子は鉛板中の電子を散乱し、エネルギーを失うが、電子数は変化しない。従って、鉛板が厚くなるにつれて、ピークの位置が低エネルギー側へ移動するが、ピークの高さは変らない。

(ii) 1 MeV の γ 線が入射するとき、



鉛板が $\gamma$ 線を吸収するため、photon 数が減少する。従って、ピークの位置は変化しないが、ピークの高さが低くなる。

- 5.  $\mu$  粒子は物質との相互作用が弱いため、遮へいの効果は低い。従って、プラスチックシンチレータ等で主検出器全体を囲み、外部より入射してくる  $\mu$  粒子を検知して、主検出器の計数を除くという反同時計数を行なえばよい。
- 6. NaI 結晶中の電子の総数は、

(密度)×(体積)×(
$$1$$
/分子量)×( $N_A$ )×(NaI 一個当りの電子数)
$$3.7 \times 5^3 \times \frac{1}{150} \times (6 \times 10^{23}) \times (53 + 11) = 1.2 \times 10^{26}$$
個

従って、ニュートリノが NaI 結晶中の電子と相互作用する数は、一年間で、

$$(1.2 \times 10^{26}) \times (1 \times 10^{-45}) \times (7 \times 10^{10}) \times (3 \times 10^{7}) = 2.5 \times 10^{-1}$$
個

従って、一年間で、約 $2.5 \times 10^{-1}$ 個検出される。

# 専攻問題6解答

1. Schrödinger 方程式

$$-\frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\Psi(x,y)=E\Psi(x,y)$$

波数ベクトル k を  $|k| \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$  とすると、

$$(\nabla^2 + k^2)\Psi = 0$$

とかける。解は平面波の和で

$$\Psi(x,y) = \sum_{\mathbf{k}} C(\mathbf{k}) e^{i(k_x x + k_y y)}$$

2. 状態密度とは、Fermion を絶対零度にして「詰めて」ゆく時、エネルギー E ではどのくらいの個数が詰まっているかを表したものである。この時運動量表示により Fermi 球で考えるのが一番簡単だろう。Schrödinger 方程式の解

$$\Psi_{k}(x) = (const) \cdot e^{ik \cdot x}$$

を周期的境界条件

$$\Psi_k(x,y,z) = \Psi_k(x+L,y,z)$$
 (y,z についても同様)

に代入すると波数について

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, k_y = \frac{2\pi n_y}{L}, k_z = \frac{2\pi n_z}{L}$$

を得る。(但し、 $n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ )

エネルギーは、

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k}|^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

とかける。電子をエネルギーの低い順に詰めてゆく時、エネルギーE以下の電子の数N(E)は、

$$E \ge \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

という球内の格子点  $(n_x, n_y, n_z)$  の数である。これは球の体積に等しいから

$$N(E) = \frac{4\pi}{3} (2mE)^{3/2} \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3$$

 $E \sim E + \delta E$  にある状態数は、これを微分すればよくて、

$$D(E)\delta E = 2\pi (2m)^{3/2} \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \sqrt{E}\delta E$$

よって、 $D(E) \propto \sqrt{E}$ 

3. 3次元の場合同様にして

$$E \ge \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 (n_x^2 + n_y^2)$$

という円内の格子点  $(n_x, n_y)$  の数を数えると

$$N(E) = \pi 2mE \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^2$$

よって、

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

- 4. Bloch の定理:周期的ポテンシャルに対する Schrödinger 方程式の解は  $\Psi_k(r) = u_k(r) \exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$  という形を持つ。但し  $u_k(r)$  はポテンシャルと同じ周期性を持つ。
- 5. 格子定数 a、周期境界条件より結晶の長さ  $L=Na(N\in \mathbb{N})$ 。 摂動を受ける前、自由電子に対する Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x) = E\phi(x)$$

 $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$  とすると周期境界条件から

$$k = \frac{2\pi}{L}n \qquad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$$

となって波動関数は、

$$\phi(x) = \sum_k C_k \phi_k(x)$$

$$\phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}$$

と書ける。また、ポテンシャルについて

$$\begin{split} V_{kl} &\equiv \int_0^L \phi_k^* V(x) \phi_l \, dx \\ &= \int_0^L \frac{V_0}{L} \cos \frac{2\pi}{a} x \, e^{-i(k-l)x} \, dx \\ &= \begin{cases} \frac{V_0}{2} & |k-l| = 2\pi/a \\ 0 & \text{上記以外} \end{cases} \end{split}$$

エネルギー摂動1次は

$$E_k^{(1)} = V_{kk} = 0$$

となり、2次の摂動は

$$\begin{split} E_k^{(2)} &= \sum_l \frac{|V_{kl}|^2}{E_k^{(0)} - E_l^{(0)}} = \sum_{g = \pm 2\pi/a} \frac{(V_0/2)^2}{\frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - (k+g)^2)} \\ &= \frac{mV_0^2}{2\hbar^2} \sum_g \frac{1}{-2kg - g^2} = \frac{mV_0^2}{2\hbar^2} \frac{2}{2\pi} \left( \frac{1}{2k - 2\pi/a} - \frac{1}{2k + 2\pi/a} \right) \\ &= \frac{mV_0^2}{4\hbar^2 (k^2 - (\pi/a)^2)} \end{split}$$

よってエネルギーは

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{mV_0^2}{4\hbar^2 (k^2 - (\pi/a)^2)}$$

となる。ただし、これは  $k=\pm\pi/a$  のとき発散してしまう。波動関数は摂動 1 次まで考えて

$$\Psi_k = \phi_k + \sum_{\sigma = +2\pi/a} \frac{mV_0}{\hbar^2 (k^2 - (k+g)^2)} \phi_{kg}$$

となるから、 $k=\pm\pi/a$  付近では波動関数は  $\phi_k$  と  $\phi_{k+g}$  で表されることが予想できるので( $g=\mp2\pi/a$  )

$$\Psi_k = C_k \phi_k + C_{k+g} \phi_{k+g}$$

とおき、Schrödinger 方程式に代入する。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi_k + V\Psi_k = \varepsilon_k \Psi_k$$

26

この式に左から  $\phi_k^*$  をかけて積分すると、

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \varepsilon_k\right) C_k + \frac{V_0}{2} C_{k+g} = 0$$

左から  $\phi_{k+g}^*$  をかけて積分すると、

$$\left(\frac{\hbar^2(k+g)^2}{2m}-\varepsilon_k\right)C_{k+g}+\frac{V_0}{2}C_k=0$$

この2式を連立して、 $C_k, C_{k+g}$ が0でない解を持つには

$$\begin{vmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \varepsilon_k & \frac{V_0}{2} \\ \frac{V_0}{2} & \frac{\hbar^2 (k+g)^2}{2m} - \varepsilon_k \end{vmatrix} = 0$$

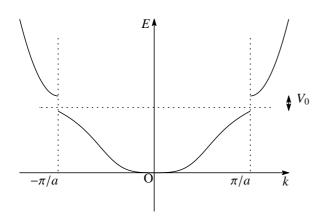
$$\varepsilon_k^2 - \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 + (k+g)^2) \right] \varepsilon_k + \frac{\hbar^4}{4m^2} k^2 (k+g)^2 - \frac{V_0^2}{4} = 0$$

$$\therefore \varepsilon_k = \frac{1}{2} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \frac{\hbar^2}{2m} (k+g)^2 \pm \sqrt{\left[ \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - (k+g)^2) \right]^2 + V_0^2} \right]$$

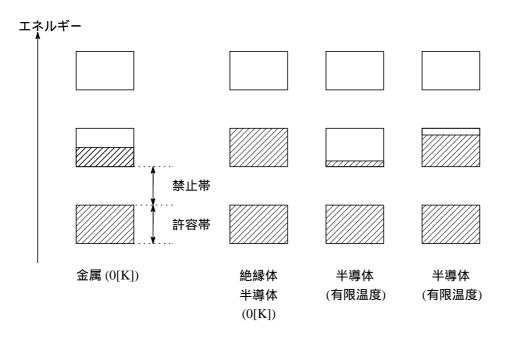
 $k = \pi/a, g = -2\pi/a \text{ Tis.}$ 

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \pm \frac{V_0}{2}$$

 $V_0$  のエネルギーギャップを生じる。



- 6. (i) エネルギースペクトルの基本的な形は周期境界条件によって量子化された波数ベクトル ( $\simeq$  運動量) の関数である。
  - (ii) ポテンシャルエネルギーの振幅がエネルギーに比べ十分小さいときは電子は自由電子の様に振舞い、エネルギースペクトルは波数ベクトルの2次関数(連続スペクトル)である。ポテンシャルの影響が大きくなってくるとブリルアン・ゾーンの境界でエネルギーギャップが生じ、帯状のエネルギースペクトルとなる。ポテンシャルがエネルギーに比べ十分大きいと、電子は調和振動を行い、スペクトルは離散的になる。
  - (iii) 0[K] において価電子がいくつかのバンドを完全に満たし、他のバンドを空にしていると絶縁体又は半導体。部分的に満たされているバンドがあると金属となる。半導体は有限温度で電子が伝導バンドへ励起される。



### 専攻問題7解答

- 1. CD 法で決定できる高次構造は 2 次構造、特に α ヘリックスである。これは左及び右円偏光が光学活性な分子では異なった相互作用をするという性質による。CD 法の利点は他の方法に比べて容易に α ヘリックスの含有量を見積もることができるということである。また、低濃度のタンパク質溶液で測定可能であり、測定時間も短くてすみ容易に実験できることなども挙げられる。
- 2. (i) 電子線のエネルギーと運動量には

$$\frac{1}{2}m_e v^2 = eV$$

$$m_e v = \frac{h}{\lambda}$$

という関係があり、これより、波長 λを求めると

$$\lambda = \frac{h}{m_e v} = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV}} = 3.86 \dots \times 10^{-12} \text{ [m]}$$

となり、電子の波長は 4[pm] 程となる。

- (ii) 光学顕微鏡では凹凸レンズの組み合わせで色収差、球面収差を除くことができる。よって開口数で決まる 回折収差のみが問題となるので波長と同程度の分解能が得られる。電子顕微鏡では、電磁レンズとして凸 レンズしか作れないために色収差、球面収差を除くことができない。それゆえ、球面収差を適当な範囲 内におさめるために開口数を小さくする必要があり、解像度が回折収差で制限されてしまうからである。また、入射粒子と原子との散乱の多くがエネルギーのやりとりがある非弾性散乱であること、電子と物質 との相互作用から化学反応を起こし、ラジカルを形成してしまうために照射する電子数が限られてしまい 雑音が多くなることなども挙げられる。
- 3. (i) X線は、殻外電子と相互作用を起こし散乱するため、得られた回折像はタンパク質原子の電子密度を変換したものになっているために原子構造を反映している。
  - (ii) 位相問題があるためである。反射  $ec{h}$  の回折強度  $I(ec{h})$  と結晶構造因子  $F(ec{h})$  との間には

$$I(\vec{h}) = |F(\vec{h})|^2$$

の関係がある。一方、結晶中の電子密度は

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\vec{h}} \frac{1}{V} \sum_{\vec{h}} F(\vec{h}) \exp(-2\pi i \vec{h} \cdot \vec{r})$$

で表される。一般に構造因子  $F(\vec{h})$  は複素量であるが、回折強度からわかるのはその振幅で、結晶の電子 状態を知るには位相を決める必要がある。

(iii) 多重同型置換法または、多波長異常散乱法を用いればよい。

多重同型置換法とはもとの結晶とは別に重原子を付加した重原子同型置換体を複数個つくり、生じる強度 変化から位相を決定する方法である。

多波長異常散乱法とは、分子内に X 線の波長に依存して原子散乱因子が変化する原子を含むときに行われ、波長を変えたときの強度変化から位相を決定する方法である。

4. (i) 共鳴周波数  $\omega_0$  と因子 g との関係は

$$\omega_0 = gH$$

であるから、陽子の共鳴周波数  $\omega_{0p}$  は、電子の共鳴周波数を  $\omega_{0e}$  とすると

$$\omega_{0p} = \omega_{0e} \frac{g_p}{g_e} = 78 \text{ [GHz]}$$

となり、約 78[GHz] 程である。( $g_p, g_e$  はそれぞれ陽子、電子の因子)

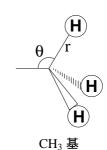
- (ii) 水分子中の水素原子 H の核スピンが、核磁気共鳴に用いられる電磁波に応答してしまうため。
- (iii) プロトンがおかれた周囲の環境により、環電流効果などの影響で高磁場側にスペクトルがシフトする化学シフトが起こることや近傍プロトンの影響による spin-spin 相互作用で spin-spin 分裂をおこすことによりスペクトルが変化する。
- (iv) 分子量が多くなるとスペクトル量も多くなり、さらに、鈍いピークの存在によりスペクトルが隠れてしま いスペクトルが分離できなくなってしまうことによる。
- 5. 中性子線は、X線のように殻外電子と相互作用するのではなく、原子核と強く相互作用するために水素分子がはっきり見え、かつ窒素分子を炭素・酸素分子と区別できる。タンパク質・核酸複合体は水分子を介して結合をつくっていることが多く、水分子がよく見える中性子線には利点がある。また、吸収断面積が小さいために物質透過力も強く、試料損傷が少ないこと、散乱が非弾性散乱であるためにエネルギー変化から散乱体の動力学的性質を知ることができるなどの利点もある。

# 専攻 問題8 解答

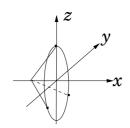
#### 1. (i) 右の図より

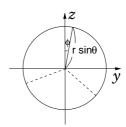
30

$$I = 3 \times m \times (r \sin \theta)^2$$
$$= 3mr^2 \sin^2 \theta$$



#### (ii) CH3 基において座標を以下のように定める。





この系の古典的なラグランジアンは、

$$L = \frac{1}{2}I\dot{\phi}^2$$

である。また、

$$p_{\phi} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = I\dot{\phi}$$

となる。これを用いると、古典的なハミルトニアンは、

$$H = p_{\phi}\dot{\phi} - L = \frac{1}{2I}p_{\phi}^2$$

となる。従って、 $p_\phi$  を演算子で置き換えて、量子論的なハミルトニアンは、

$$\hat{H} = \frac{1}{2I} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

となる。

これをもとにシュレディンガー方程式をたてると

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2 \Psi(\phi)}{\partial \phi^2} = E \Psi(\phi)$$

この一般解は

$$\Psi(\phi) = A\sin k\phi + B\cos k\phi$$

但し、 $k^2 = \frac{2IE}{\hbar^2}$  である。

また、周期境界条件として  $\Psi(\phi) = \Psi(\phi + 2\pi/3)$  が成り立たなくてはならないから

$$\frac{2}{3}\pi k = 2n\pi \qquad (n = 1, 2, \ldots)$$

より

$$k = 3n \qquad (n = 1, 2, \ldots)$$

となる。従って

$$E = \frac{9n^2\hbar^2}{2I}$$
  $(n = 1, 2, ...)$ 

である。

(iii)  $V_3$  が十分大きいとき、 $\phi$  は十分小さくなる。このとき  $\cos\phi$  をテイラー展開して、整理すると

$$V = \frac{V_3}{2} (1 - \cos 3\phi)$$

$$= \frac{V_3}{2} \left( 1 - \left( 1 - \frac{9}{2} \phi^2 + \frac{27}{8} \phi^4 - \dots \right) \right)$$

$$\approx \frac{9}{4} V_3 \phi^2$$

ここで  $\frac{9}{2}V_3=k'$  とおいてみれば  $V=\frac{1}{2}k'\phi^2$  となり、 $V_3$  が十分大きいとき、 $CH_3$  基の C-C 軸周りの運動は調和振動子になることがはっきりする。

ポテンシャルエネルギーが、 $\frac{1}{2}kx^2$  の形で与えられている調和振動子のエネルギー  $E_n$  は以下の式で与えられることが知られている。

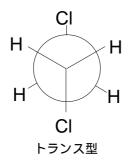
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$
  $\left(n = 0, 1, 2, \dots, \omega = \sqrt{k/m}\right)$ 

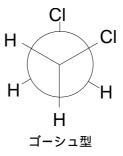
今、 $k = k' = \frac{9}{2}V_3$ 、I = m で置き換えてみれば、求めるエネルギー準位は

$$E = 3\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar \cdot \sqrt{\frac{V_3}{2I}}$$
  $(n = 0, 1, 2, ...)$ 

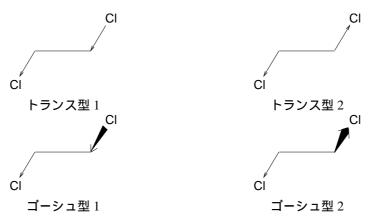
となる。

2. **(i)** 





(ii) この2つの回転異性体における C-Cl 伸縮運動を考える。 このとき、それぞれの基準振動のモードは以下のようになる。



分子が電磁場と相互作用して光子を吸収あるいは生成するためには分子は少なくとも過渡的に光子に対応する振動数で振動する双極子を持っていなければならない。従って、トランス型2のような双極子モー

メントの変化を生じないようなモードはスペクトルに寄与しない。ゆえに、トランス型 2 を除いたモード が各スペクトルに対応することになる。

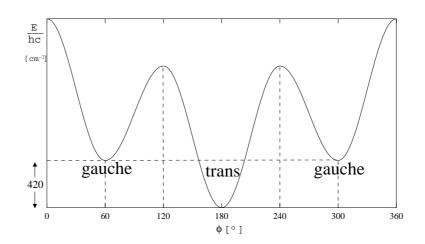
(iii) バンドの強度比は、それぞれの準位をしめる分子数の比に等しい。この比は、 2 つの準位間のエネルギー 差が  $\Delta E$  である時、

$$E_g$$
 占有数  $N_g$  ゴーシュ型  $(g_g$  重に縮退)  $I_g(T)$   $= \frac{N_g(T)}{N_t(T)} = \frac{g_g}{g_t} \frac{e^{-\beta E_g}}{e^{-\beta E_t}}$   $E_t$  上有数  $N_t$   $= \frac{g_g}{g_t} \exp\left[-\frac{\Delta E}{k_B T}\right]$ 

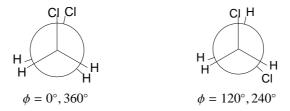
と表される。( $g_g, g_t$  はそれぞれゴーシュ型、トランス型の縮退度である。)

よって、縦軸にこのバンドの強度比の対数を、横軸に 1/T を取ってグラフ用紙にプロットすると直線になり、その傾きは  $-\Delta E/k_B$  である。これより、 $\Delta E$  が求まる。

(iv) ポテンシャルエネルギーの変化は異なった炭素原子に結合している原子同士の回転に伴う電子反発の大きさの変化に由来している。CI 原子は H 原子に較べ大きな電子雲を持っているため、CI-CI 反発や CI-H 反発は H-H 反発よりも大きなエネルギーを持つ。 $\phi=0,2\pi$  では、CI-CI 反発が最も大きくなり、また、CI-H 反発も最大になるためポテンシャルエネルギーは最大値を取る。 $\phi=2/3\pi,4/3\pi$  では、2 つの CI-H 反発が最大値となるため極大値を取っている。



ポテンシャルエネルギーの変化



(v) 
$$\frac{N_g}{N_t} = \frac{g_g}{g_t} \exp\left[-\frac{hc}{k_B T} \frac{\Delta E}{hc}\right]$$
$$= 2 \times 2.7^{-\frac{6.6 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{1.4 \times 10^{-23} \times 290} \times 420 \times 10^2}$$
$$= 0.274 \cdots$$

ゴーシュ型はトランス型の約27%存在している。