

1997 年度 入学試験 物理専門科目

専攻 問題 1

中心対称場の中の粒子の運動に対するシュレディンガー方程式は次のように与えられる。

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + [E - U(r)] \Psi = 0$$

ここで m および E はそれぞれ粒子の質量とエネルギー、また $U(r)$ は場のポテンシャルエネルギーである。ラプラス演算子 Δ は

$$\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

で、 $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ である。

中心対称場の中の運動では角運動量が保存されるので、波動関数 Ψ の動径関数 $R_l(r)$ は次の方程式を満たす。

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_l}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R_l + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] R_l = 0$$

ここで l は粒子の角運動量である。以下では角運動量 $l = 0$ の動径関数 $R_0(r)$ について考えよう。

1. 井戸型ポテンシャル

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & , r \leq r_0 \\ 0 & , r > r_0 \end{cases}$$

において、以下の問いに答えよ。ただし、 U_0 は正の定数で $-U_0 \leq E \leq 0$ とする。

- (i) $r \leq r_0$ での $R_0(r)$ の形を求めよ。
- (ii) $r > r_0$ での $R_0(r)$ の形を求めよ。
- (iii) 上記の (i) と (ii) で求めた動径関数 $R_0(r)$ を $r = r_0$ でなめらかにつなぎ、粒子のエネルギー E と r_0 との関係式を求めよ。
- (iv) U_0 が十分に大きいとして、上の答えを用いて粒子の負のエネルギー準位と動径関数 $R_0(r)$ のゼロ点の数との関係を述べよ。

2. 次に中心対称なポテンシャルが

$$U(r) = \begin{cases} \frac{-\alpha}{r_0} & , r \leq r_0 \\ \frac{-\alpha}{r^2} & , r \geq r_0 \end{cases}$$

で与えられている。ここで $\alpha > 0$ とする。またここでは、 r_0 が小さい場合を考えて $r = r_0$ の近くでの動径関数 $R_0(r)$ の振る舞いについて考察する。

- (i) $r \leq r_0$ の領域で動径関数 $R_0(r)$ を求めよ。ただし、 r_0 は充分小さく、粒子のエネルギー E はポテンシャルエネルギー $(-\alpha/r_0^2)$ に比べて無視できるものとする。
- (ii) 動径関数 $R_0(r)$ は、 $r \geq r_0$ の領域でしかも $r = r_0$ の近くでは近似的に次の方程式を満たす。

$$\frac{d^2 R_0}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_0}{dr} + \frac{\beta}{r^2} R_0 = 0$$

ただし、 $\beta = (2m/\hbar^2)\alpha$ である。この方程式の $r = r_0$ の近くの解を $R_0(r) \sim r^a$ と形を仮定して求めよ。ただし、その解は β を用いて書くこと。

- (iii) 上記の (i) と (ii) で求めた動径関数 $R_0(r)$ が $r = r_0$ でなめらかにつながるものとして、 $r \geq r_0$ の領域の解を求めよ。
- (iv) 上で求めた解は $\beta < 1/4$ の場合と $\beta > 1/4$ の場合とでは振る舞いが大きく異なる。 $\beta > 1/4$ の場合に、 $r \geq r_0$ での動径関数 $R_0(r)$ のゼロ点の数に注目して、 $r_0 \rightarrow 0$ の極限で粒子の運動に何が起きるかを理由を上げて説明せよ。

専攻 問題 2

異なる媒質の境界面において、電磁波の満たす境界条件は一般に次のように与えられる。

$$E_t(\text{I}) - E_t(\text{II}) = 0 \quad \dots (1)$$

$$D_n(\text{I}) - D_n(\text{II}) = Q \quad \dots (2)$$

$$H_t(\text{I}) - H_t(\text{II}) = J \quad \dots (3)$$

$$B_n(\text{I}) - B_n(\text{II}) = 0 \quad \dots (4)$$

ここに、 E は電場、 D は電束密度、 H は磁場、 B は磁束密度である。添字 t 、 n は境界面に平行、垂直な成分をそれぞれ表わす。また、(I)、(II) は媒質を示し、 Q は表面電荷密度、 J は表面電流密度である。

1. マックスウェルの方程式とストークスの定理を用いて、式 (1) が成り立つことを示せ。
2. マックスウェルの方程式とガウスの定理を用いて、式 (2) が成り立つことを示せ。
3. 媒質 (II) が完全導体である場合、その表面において電磁波の満たすべき境界条件を求めよ。
4. 媒質 (I) が真空、媒質 (II) が完全導体とする。真空側 ($x < 0$) から導体面 (yz 平面) に入射する平面波の電磁波を考える。この入射平面波は単色で y 方向に偏光しており、

$$E_y = E_0 \exp(-2\pi i \nu t + i k x) \quad \dots (5)$$

で与えられるとする。ここに ν は電磁波の振動数、 k は波数である。これが金属表面 ($x = 0$) で反射される時、導体面に流れる表面電流密度を求めよ。また、その方向を示せ。ただし、真空の誘電率と透磁率をそれぞれ ϵ_0, μ_0 とする。

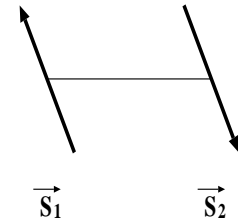
5. 次に、媒質 (I)、(II) が異なる誘電体であるとする。これが、 yz 平面を境に互いに接している。ここに、 $x < 0$ から (5) 式で与えられる平面波の電磁波が入射した。境界条件の式 (1)-(4) を適用し、 $x = 0$ の境界面における反射率 (反射波と入射波の電場の比) および、透過率 (透過波と入射波の電場の比) をそれぞれ求めよ。ただし、媒質 (I) の誘電率を ϵ_1 、媒質 (II) の誘電率を ϵ_2 とし、透磁率はいずれも μ_0 とする。
6. 平行な境界面をもつ誘電体の板が真空中に置かれている。その境界面に垂直な方向から電場の振幅が E_0 である平面波の電磁波が入射する。平面波の振動数を ν 、板の厚さを L とするとき、この板を通過する電磁波の強度 (ポインティングベクトルの大きさ) を求めよ。ただし、誘電体の誘電率を ϵ_1 、真空の誘電率を ϵ_0 とし、透磁率はいずれも μ_0 とする。
7. 前問で、振動数 ν の電磁波に対して、透過する電磁波の強度が最大になるような L を求めよ。また、その時の透過強度の入射強度に対する比を求めよ。これらの結果についての物理的意味を考察し、簡潔に述べよ。以上の結果は、眼鏡の反射防止コーティングや干渉フィルターなどに広く応用されている。

専攻 問題 3

1. 大きさ $\frac{1}{2}$ のスピン 2 個が、次のハミルトニアンで相互作用している系を考える。

$$\mathcal{H} = JS_1^x \cdot S_2^x$$

以下、 $J > 0$ とする。固有値と固有状態を求めよ。



2. このスピン系に z 方向の磁場 H がかかるとハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = JS_1^x \cdot S_2^x - g\mu_B H(S_1^z + S_2^z)$$

と書くことができる。ここで μ_B はボーア磁子、 g は電子の g -因子で $g = 2$ である。この系が温度 T の熱浴と接して熱平衡にあるとき、その分配関数を計算せよ。

3. 温度 T における磁気モーメントの平均値

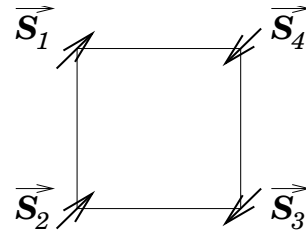
$$M = g\mu_B \langle S_1^z + S_2^z \rangle$$

を計算し、磁化率 $\chi = \lim_{H \rightarrow 0} M/H$ の温度依存性の様子を図示せよ。特に、 $k_B T \gg J$ 、 $k_B T \ll J$ での漸近形を求めよ。

4. 正方形の頂点に 4 個の大きさ $\frac{1}{2}$ のスピンがあって、隣り合ったスピンと相互作用している。このときのハミルトニアンが

$$\mathcal{H} = J(\vec{S}_1 + \vec{S}_3) \cdot (\vec{S}_2 + \vec{S}_4)$$

と書けることに注目して、すべての固有状態のスピン量子数とエネルギー固有値を求めよ。

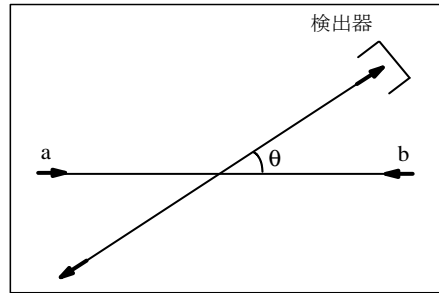


5. 上の 4 個のスピン系の低温での磁化率の漸近形、高温での磁化率の漸近形はどうか。理由をつけて答えよ。

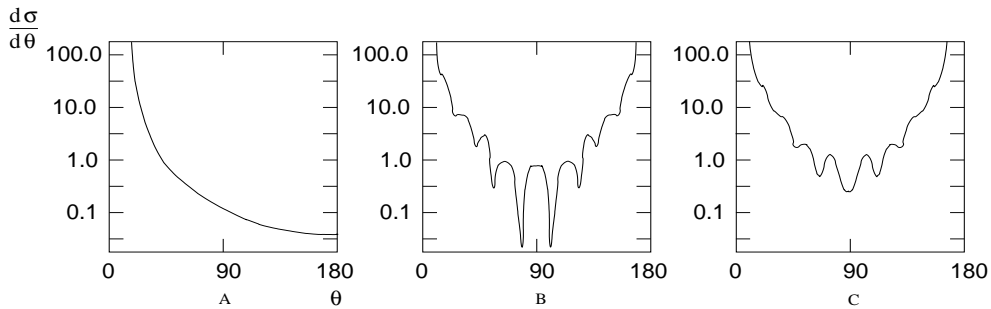
専攻 問題 4

下図は粒子 a と粒子 b が重心系で角度 θ へ散乱される様子を描いたものである。以下の問いに答えよ。運動は非相対論的取り扱いでよい。また、質量数 A の原子核の半径は、 $r = 1.2 \cdot A^{\frac{1}{3}} \times 10^{-15} \text{m}$ で与えられ、質量数 A の原子核の質量は、 $M_A c^2 = A \times 1000 \text{ MeV}$ と近似してよい。必要に応じて、次の数値を参照せよ。

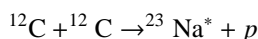
$$\hbar c = 200 \times 10^{-15} \text{ MeV} \cdot \text{m}, \quad \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137}, \quad 12^{\frac{1}{3}} = 2.3, \quad 13^{\frac{1}{3}} = 2.4$$



- a と b が異種粒子の時の散乱振幅を $f(\theta)$ として、a と b が以下の場合について、それぞれの微分散乱断面積 $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ を書き下せ。
 - a と b とが異種粒子、
 - a と b とが同種粒子でスピン 0 のボゾン、
 - a と b とが同種粒子でスピン $\frac{1}{2}$ のフェルミオン。
- $^{12}_6\text{C}$ (スピン 0) と $^{13}_6\text{C}$ (スピン $\frac{1}{2}$) をそれぞれ加速イオンビームまたは標的として、 $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$, $^{12}\text{C} + ^{13}\text{C}$, $^{13}\text{C} + ^{13}\text{C}$ の 3 つの組み合わせについて散乱実験を行った。加速器で 10 MeV にまでイオンビームを加速したときの実験結果を下図に示した。重心系での角度で表示してある。但し、下図の縦軸 $\cdot \frac{d\sigma}{d\Omega}$ は微分散乱断面積、下図の横軸 $\cdot \theta$ は散乱角 (重心系) [度] を表す。



- a と b がともに ^{12}C と ^{12}C の時のドブロイ波長と重心系での運動エネルギー T を求めよ。
 - ^{12}C 原子核の半径を R として、二つの原子核 ^{12}C と ^{12}C がちょうど接触している状態の距離 $2R$ の位置でのクーロンポテンシャルによるエネルギー V_C を求め、 $V_C > T$ を確かめよ。このことから、散乱過程がこの入射エネルギー (10 MeV) では主としてクーロン力によるものであることがわかる。
 - 実験結果 A, B, C は、それぞれ a と b が ^{12}C と ^{13}C のどの様な組み合わせであるかを推論し、その理由を簡潔に述べよ。
3. 10 MeV のビームエネルギーにおいても非常に小さな確率ではあるが、原子核反応



も起こる。ここで $^{23}\text{Na}^*$ は 440 keV の励起準位を表し、平均寿命 1.1×10^{-12} 秒で γ 線を放出して基底準位へおちる。

- (i) γ 線の波長を求めよ。
- (ii) 励起準位の自然幅を求めよ。
- (iii) なぜ非常に小さな確率でしか核反応は起きないのか。
- (iv) $^{23}\text{Na}^*$ の最大速度 v を求めよ。但し、簡単のために反応の Q 値を 0 とする。

$$[Q = 2M_{12\text{C}} - (M_{23\text{Na}^*} + M_p) = 0]$$

- (v) 放出される γ 線を、入射ビームの進行方向に置かれた γ 線検出器で観測した。測定される γ 線の最大ならびに最小エネルギーはいくらか。但し、生成された $^{23}\text{Na}^*$ イオンは、 10^{-12} 秒程度の時間で減速され標的中に止まるものとする。放出された γ 線と標的物質との相互作用も無視する。
- (vi) γ 線と物質のとの相互作用にはどのようなものがあるか。
- (vii) γ 線の検出に NaI 検出器を使い、440 keV の γ 線を測定した。期待されるスペクトルの形を定性的に示し、どのような相互作用が主に関与しているかをスペクトルの各部に記入せよ。

専攻 問題 5

物質の結晶構造や格子定数を求めたり、単結晶の方位を調べる簡便な方法として用いられる X 線回折写真法の代表的なものに、ラウエ法とデバイ・シュラー法がある。これらは、その目的、用いる X 線の種類、試料などに顕著な違いがある。

1. 上記の 2 方法のそれぞれについて、その目的、用いる X 線、試料の別を述べよ。

結晶の単位胞 (単位格子) の 3 稜を表す基本ベクトル a_1, a_2, a_3 と

$$a_i \cdot b_j = \delta_{ij}$$

の関係にあるベクトル b_1, b_2, b_3 を基本ベクトルとする格子を逆格子という。また、 g_1, g_2, g_3 を整数とすると、ベクトル

$$g = g_1 b_1 + g_2 b_2 + g_3 b_3$$

を逆格子ベクトルという。結晶の格子面 (原子面) を表すのには、ミラー指数が用いられる。ミラー指数 (g_1, g_2, g_3) で表される格子面は、逆格子ベクトル g に垂直であり、互いに素なミラー指数 (g_1, g_2, g_3) で表される格子面の面間隔は、

$$d = 1/|g|$$

で与えられる。

入射 X 線および、反射 X 線の波数ベクトルをそれぞれ、 k_0 および k とすると、結晶による強い回折が起きる条件はラウエの条件

$$k - k_0 = g$$

で与えられる。ここで、 g は任意の逆格子ベクトルである。

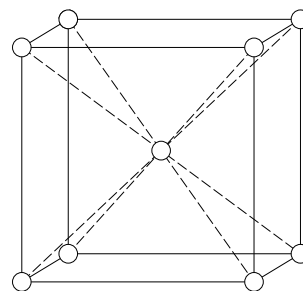
2. ラウエの条件からブラッグの条件が導かれることを示せ。

単位胞の中に n 個の原子を含む結晶からの回折線の振幅は、原子 i の原子散乱因子を $f_i(g)$ として、構造因子

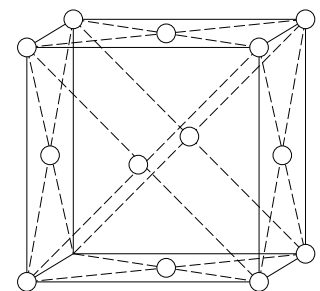
$$F(g) = \sum_{i=1}^n f_i(g) \exp(2\pi i g \cdot r_i)$$

に比例する。ここで、 r_i は、原子 i の位置ベクトルである。

3. 右図のように単位胞をとるとき、面心立方 (fcc) 構造および体心立方 (bcc) 構造のそれぞれについて、波長 λ の X 線ブラッグ反射のミラー指数をブラッグ角の小さい方から 3 つずつ挙げよ。ただし、結晶学的に同等な反射はひとつと数える。



b c c



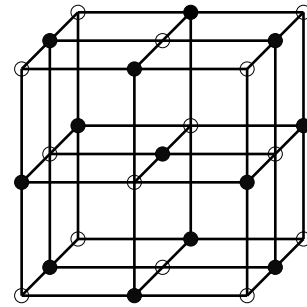
f c c

右の表は、銅 (fcc 構造) および鉄 (bcc 構造) を試料として、回折されたモリブデンの K_α 線 (波長 0.71 \AA) について、 $\sin \theta_B$ (θ_B はブラッグ角) の値を小さい方から 4 つ並べたものである。

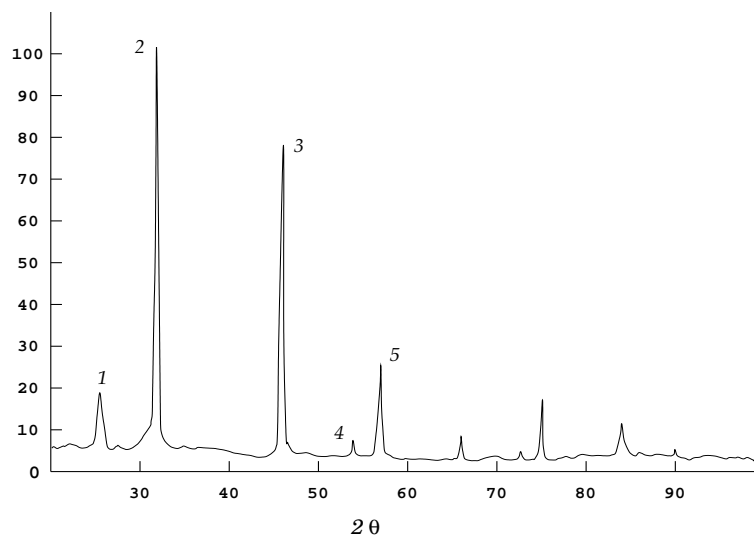
順位	試料 A	試料 B
1	0.175	0.170
2	0.248	0.196
3	0.303	0.278
4	0.350	0.326

4. 試料Aは銅・鉄のどちらか。

NaClは岩塩型(右図)の結晶構造をなし、正イオンあるいは負イオンのみがつくる副格子はともに面心立方格子である。下図は、NaClによって回折された銅の K_α 線の強度分布である。



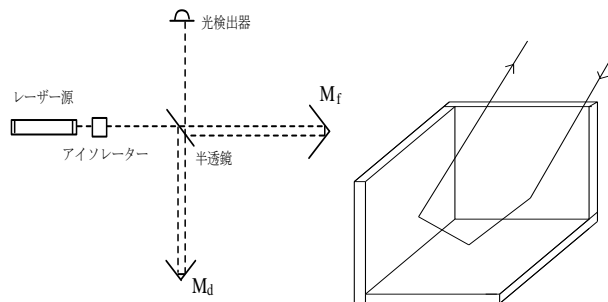
5. 下図において、ピーク1・4の強度は、2・3・5に比べて極端に小さい。このような強度分布が現れる理由を説明せよ。



専攻 問題 6

図 1 は、レーザー干渉計を用いて、重力加速度を測定するための概念図である。反射鏡 M_d 、 M_f はコーナリフレクターと呼ばれるもので、図 2 に示すように平面鏡を 3 枚互いに直交させたものである。 M_f は実験室系に固定し、 M_d をある位置から自由に落下させる。これに関する以下の設問に答えよ。

1. コーナリフレクターに図 2 のように入射する光ビームは、入射方向と平行に戻る。これを示せ。
2. 自由落下中は、光検出器からは、図 3 のように変化する信号が得られる。変化する信号が中央線を切る時間を図 3 のように t_1 、 t_2 、 t_3 とするとき、光の波長を λ として、時刻 t_2 における平均の重力加速度を求めよ。



3. 重力加速度の相対測定精度を 10^{-9} としたい。 M_d に向かうレーザービームが理想的な平面波と仮定できる場合、ビーム光と鉛直線とのずれ角は、いくら以内でなければならないか。
4. 空気抵抗は大きい誤差になるので、 M_d (質量 100g、断面積 10 cm^2) は真空中を落下させなければならない。落下速度が 3 m/s の時、残留ガスによる加速度が重力加速度より 9 桁小さくなるために必要な真空度を求めよ (必要な真空度は 1 mPa 以下であり、アボガドロ数は 6×10^{23} 、1 気圧は 10^5 Pa 、1 モルの気体は室温・1 気圧で 20 l の体積を占め、残留ガスの分子量を 30 とする)。
5. M_d はアースされた金属の管の中を落下する。 M_d が電荷を帯びていると、 M_d の落下加速度にどのような影響が生じるか。

専攻 問題 7

1. 次の方程式 (1) を満足する有界な 1 次元の関数 $\phi(x)$ を、フーリエ変換の方法によって求めたい。

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + \lambda^2\right)\phi(x) = \delta(x-a) \quad \dots (1)$$

ただし $\delta(x)$ はデルタ関数であり、 λ は正の実数である。

(i) $\phi(x)$ のフーリエ変換を $\hat{\phi}(k)$ とするとき、 $\hat{\phi}(k)$ の満たす方程式を求め、 $\hat{\phi}(k)$ を決定せよ。

(ii) $\phi(x)$ をもとめよ。

2. 振幅 $\psi(x, t)$ の満たす運動方程式が

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad \dots (2)$$

で表わせられる 1 次元の無限に長い弦の振動を、初期条件

$$(A) \dots \psi(x, t=0) = |x - 2n\pi| - \frac{\pi}{2} \quad \dots (3)$$

$$(2n-1)\pi < x < (2n+1)\pi$$

$$(n = 0 \pm 1, \pm 2 \dots)$$

$$(B) \dots \frac{\partial \psi(x, t=0)}{\partial t} = 0 \quad \dots (4)$$

を満たすように決定せよ。また、 $0 < t < \pi/2v$ の時間範囲で、 $\psi(x, t)$ がどのように変化するかを、述べよ。

3. 2 次元空間における関数 ψ は半径 a の円の外部で有界で、2 次元のラプラス方程式

$$\Delta\psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = 0 \quad \dots (5)$$

を満たし、円周上の極座標 (a, θ) で表される点では、

$$\psi(a, \theta) = \cos^2 \theta \quad \dots (6)$$

という値をとる。 ψ を決定せよ。

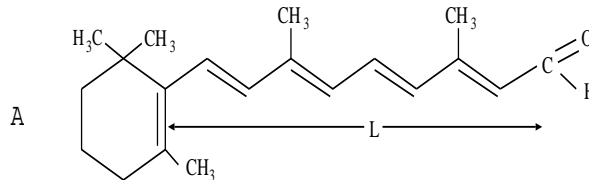
専攻 問題 8

- Linus Pauling は 2 つのアミノ酸 ($\text{H}_2\text{N}-\text{C}\alpha\text{R}_j\text{H}-\text{COOH}$, $\text{C}\alpha$ は中心的位置にある炭素原子であり、 α -炭素と呼ばれ、 R_j はアミノ酸によって異なる側鎖を表す) がペプチド結合 ($-\text{CO}-\text{NH}-$) を通じて共有結合してできたジペプチドの立体的原子構造を解析した。その結果、CONH の 4 原子が一平面上にあるという興味ある意外な事実を掴んだ。彼はタンパク質分子の中でも、この 4 原子は常に同一平面上にあると考え、 α -ヘリックスや β -シートのモデルを提唱した。
 - どのような実験法を用いて、ジペプチドの立体的原子構造を明らかにしたかを 3 行以内で述べよ。(事実を知らない場合は、推察でよいが、推察の筋道を述べよ。)
 - Pauling は、CONH の 4 原子が一平面にあるという事柄を裏付ける別に事実にも気付いていた。それは何か。その事実と 4 原子が一平面上にあるという事柄の関係を述べよ。(事実を知らない場合は、推察でよいが、推察の筋道を述べよ。)
- α -ヘリックスの構造を考えよう。 α -ヘリックスの中ではアミノ酸残基 ($-\text{HN}-\text{C}\alpha\text{R}_j\text{H}-\text{CO}-$) がラセン対称性を持って規則的に並んでいる。各 α -炭素を貫く右巻きのラセンのピッチは、0.54 nm であり、ラセン軸方向を z 軸にとると、 j 番目の α -炭素の z 座標は $0.15j$ (nm) である。このような構造は z 軸方向に並んだ周期 c の一次元結晶と見なせる。
 - 上記の数値を用いて、周期 c (True pitch と呼ばれる) を求めよ。
 - α -ヘリックスの立体構造を安定化すると考えられる非共有結合について、考えられるだけの種類を挙げ、3 行以内で述べよ。(事実を知らない場合は、推察でよいが、推察の筋道を述べよ。)
- α -ヘリックスからなるタンパク質のうち一群のファミリーがあり、それらのタンパク質ではヘプタッド・モチーフ (Heptad motif) がある。これは、アミノ酸配列が 7 個を周期的に繰り返し、.....abcdefgabcdefgabcdefg.... となっており、ここで a と d は疎水性アミノ酸である。
 - このモチーフをもつ α -ヘリックスのなかでの疎水性アミノ酸残基の三次元的配置を図示し、その特徴を述べよ。
 - このモチーフをもつ α -ヘリックスが二分子あると、水溶液中では互いに結合して、特徴ある四次構造を形成する。その特徴を述べよ。(事実を知らない場合は、推察でよいが、推察の筋道を述べよ。)

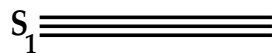
専攻 問題 9

生体物質は光吸収や蛍光発光を用いて、解析することが多い。電子の質量を m 、光速度を c 、プランク定数を h として、以下の問いに答えよ。

1. 図のような動物の目のレチナル様視物質 A の光吸収を論じる。



- (i) 電子の励起状態を求めよ。但し視物質のポリエン鎖 (長さ L) を一次元的に動く炭素原子の π 電子が光を吸収するとして考える。電子はこの L の部分の外には出られない。長さ L のポリエン鎖内の各々の炭素原子は 1 個の π 電子を供給する。
- (ii) 炭素原子の何軌道が π 電子軌道を形成するのか。
- (iii) $L=1\text{nm}$ とするとき、光吸収の波長を求めよ。但し $mc/h=412\text{nm}^{-1}$ を用いよ。
- (iv) 我々が夕闇の中でも目が見えるようにするには、視物質 A の構造をどう変化させればよいかを論じよ。
2. 蛍光性アミノ酸の光学的性質は環状化合物ベンゼンをモデルとして理解できる。ベンゼンの光吸収も前問と同様に、C-C 結合上を自由に動ける π 電子の吸収として考えて、光吸収の波長を求めよ。但しこの場合、電子は円周がベンゼンの周囲の長さに等しいとした半径 r の円周軌道上を動くと考えてよい。C-C 結合の長さは 0.14nm とせよ。
3. 環状炭化水素化合物 F は、図のように基底電子準位 S_0 と第一励起準位 S_1 を持ち、更にこれら S_0 と S_1 の上に振動準位を持つ。
- (i) F が孤立して真空中にあるとき、吸収と蛍光発光の強度スペクトルを書き込め。但し最初は電子はすべて S_0 準位に居るとする。
- (ii) F を有機溶媒にとかすと、スペクトルはどう変化するか書き込め。
- (iii) S_1 励起準位に近い励起準位を持つ重金属を溶液に混在させると、F の蛍光はどう変化するか? 理由も書け。



4. 蛍光性アミノ酸であるトリプトファンの蛍光を用いて水溶性球状タンパク質 P の存在状態を測定する。P の水溶液に塩酸グアニジンを加えていったとき、トリプトファンの蛍光が図のように低下した。
- (i) 濃度 C_0 の前後で P の構造にどのような変化が起こっているか。
- (ii) 濃度 C_0 の前後でトリプトファンの蛍光スペクトルはどのように変化するか。

専攻 問題 1 解答

1. (i) $r \leq r_0$ での動径波動方程式 ($l = 0$) は、

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_0}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} (E + U_0) R_0 = 0 \quad \dots (1)$$

$R_0 = \frac{u_0(r)}{r}$ と変換すると、

$$\frac{d^2}{dr^2} u_0(r) + \frac{2m}{\hbar^2} (E + U_0) u_0(r) = 0 \quad \dots (2)$$

これを $E + U_0 \geq 0$ のもとで解くと、 $r = 0$ で $u_0(r)/r$ が有界という条件より、 $k = \sqrt{\frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}}$ とすると $u_0(r) = A \sin kr$ (A :規格化定数) を得る。従って、

$$R_0(r) = A \frac{\sin kr}{r} \quad \dots (3)$$

(ii) $r > r_0$ での動径波動方程式も前問と同様に $u_0(r)$ の微分方程式を書き換えると

$$\frac{d^2}{dr^2} u_0(r) + \frac{2m}{\hbar^2} E u_0(r) = 0 \quad \dots (4)$$

これを $E \leq 0$ のもとで解くと、 $r \rightarrow \infty$ で $u_0(r)/r$ が有界という条件より、 $\rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$ とすると $u_0(r) = B e^{-\rho r}$ (B :規格化定数) を得る。従って、

$$R_0(r) = B \frac{e^{-\rho r}}{r} \quad \dots (5)$$

(iii) $R_0(r)$ を $r = r_0$ で滑らかに接続することは、 $u_0(r)$ の接続に置き換えることができる。(i)(ii) で得られた $u_0(r)$ の $r = r_0$ での対数微分が等しいことより、

$$k \frac{\cos kr_0}{\sin kr_0} = -\rho \quad \dots (6)$$

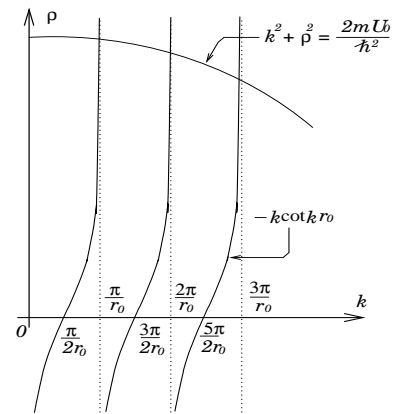
k, ρ をもとの変数に戻すと、 E と r_0 との関係式

$$\cot \left(\sqrt{\frac{2m(E + U_0)}{\hbar^2}} r_0 \right) = -\sqrt{\frac{-E}{E + U_0}} \quad \dots (7)$$

(iv) ρ と k の関係は定義より

$$k^2 + \rho^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2} \quad \dots (8)$$

となる。粒子の束縛状態の数は、(6) 式と (8) 式の $k > 0, \rho > 0$ における交点の数の一致する。ここで、十分大きな U_0 に対しては、(6) 式と (8) 式の交点の位置は $kr_0 = n\pi$ (n :整数) を満たす点に限りなく近いが少し小さい。
($k - \rho$ 平面に $k \cot kr_0 = -\rho$ と原点中心で半径が無限に大きい円の第一象限での交点をイメージすれば分かる。(右図参照))



2. (i) 粒子の運動エネルギー E を無視した $r \leq r_0$ における動径方程式 ($l = 0$) を 1.(i),(ii) と同様に $u_0(r)(= rR_0(r))$ を用いて書くと、

$$\frac{d^2}{dr^2} u_0(r) + \frac{2m\alpha}{\hbar^2 r^2} u_0(r) = 0 \quad \dots (9)$$

$r = 0$ で $R_0(r)$ が有界であるという条件のもとに解くと、

$$R_0(r) = \frac{u_0(r)}{r} = A \frac{\sin(\sqrt{\beta} \frac{r}{r_0})}{r} \quad \dots (10)$$

となる。但し、 $\beta = 2m\alpha/\hbar^2$ である。

(ii) $R_0(r) \simeq r^a$ を与えられた動径波動方程式に代入すると、 r^{a-2} の係数について以下の関係が成り立つ。

$$a(a-1) + 2a + \beta = 0 \iff a = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} - \beta} \quad \dots (11)$$

従って、 $\delta = \sqrt{\frac{1}{4} - \beta}$ とおくと、 $r \simeq r_0 (r \geq r_0)$ での近似的な動径関数は、

$$R_0(r) = Br^{-\frac{1}{2}+\delta} + Cr^{-\frac{1}{2}-\delta} \quad \dots (12)$$

(iii) 2.(ii) で得られた動径波動関数の定数 B 、 C の関係を $r = r_0$ での接続条件から求める。(10) 式と (12) 式の $u_0(r) = rR_0(r)$ についての $r = r_0$ における対数微分が等しいことより、

$$\frac{\sqrt{\beta}}{r_0} \cot \sqrt{\beta} = \frac{(\frac{1}{2} - \delta)r_0^{-\frac{1}{2}-\delta}(Br_0^{2\delta} + C) + r_0^{\frac{1}{2}-\delta}(2B\delta r_0^{2\delta-1})}{r_0^{\frac{1}{2}-\delta}(Br_0^{2\delta} + C)} \quad \dots (13)$$

$$= \frac{1}{r_0} \left(\frac{1}{2} - \delta \right) + \frac{2\delta r_0^{2\delta-1}}{r_0^{2\delta} + D} \quad \dots (14)$$

但し、 $D = C/B$ とした。 D について解くと、

$$D = -r_0^{2\delta} \frac{\sqrt{\beta} \cot \sqrt{\beta} - (\delta + \frac{1}{2})}{\sqrt{\beta} \cot \sqrt{\beta} + (\delta - \frac{1}{2})} \quad \dots (15)$$

となる。これより、定数を一つ減らすことができた。

$$R_0(r) = B \left[r^{-\frac{1}{2}+\delta} - r_0^{2\delta} \frac{\sqrt{\beta} \cot \sqrt{\beta} - (\delta + \frac{1}{2})}{\sqrt{\beta} \cot \sqrt{\beta} + (\delta - \frac{1}{2})} r^{-\frac{1}{2}-\delta} \right] \quad \dots (16)$$

(iv) $\beta \geq 1/4$ の時、 δ は虚数となる。 $\delta = i\varepsilon (\varepsilon \geq 0)$ とすると、 $r \geq r_0$ において

$$R_0(r) = B \left[r^{-\frac{1}{2}+i\varepsilon} - r_0^{2i\varepsilon} \frac{\sqrt{\beta} \cot \sqrt{\beta} - \frac{1}{2} - i\varepsilon}{\sqrt{\beta} \cot \sqrt{\beta} - \frac{1}{2} + i\varepsilon} r^{-\frac{1}{2}-i\varepsilon} \right] \quad \dots (17)$$

となり、 $R_0(r) = 0$ は以下の形に書ける。

$$\left(\frac{r}{r_0} \right)^{2i\varepsilon} = \frac{\sqrt{\beta} \cot \sqrt{\beta} - \frac{1}{2} - i\varepsilon}{\sqrt{\beta} \cot \sqrt{\beta} - \frac{1}{2} + i\varepsilon} \quad \dots (18)$$

$\alpha^x = e^{x \ln \alpha}$ などを用いて、実部と虚部に分けて両辺を比較すると、 $K = \sqrt{\beta} \cot \sqrt{\beta}$ を用いて

$$\cos \left(2\varepsilon \ln \frac{r}{r_0} \right) = \frac{(K - \frac{1}{2})^2 - \varepsilon^2}{(K - \frac{1}{2})^2 + \varepsilon^2} \quad \dots (19)$$

$$\sin \left(2\varepsilon \ln \frac{r}{r_0} \right) = -\frac{2\varepsilon(K - \frac{1}{2})^2}{(K - \frac{1}{2})^2 + \varepsilon^2} \quad \dots (20)$$

となる。 β を一意に定めると上式の右辺は定数となり、 r の満たすべき関係式は

$$2\varepsilon \ln \frac{r}{r_0} = \alpha_0 + 2n\pi \quad (n: \text{整数}, \alpha_0: \text{定数}) \quad \dots (21)$$

この関係は $r \simeq r_0$ に限って近似的に成り立つものであり、 $r_0 > 0$ の時には上式を満たす r の数は有限個であると考えられる。しかしながら、 $r_0 \rightarrow \infty$ の極限では、 $\lim_{r_0 \rightarrow \infty} \ln r_0 = -\infty$ の発散により、(21) 式を満たす $r (\simeq r_0)$ は定まらない。ここにおいて、束縛状態は無限に深い井戸の底 (基底状態というものが定義できない) から詰まって、無限個存在することになる。この原因は、 $1/r^2$ に比例するポテンシャル (問題で $r_0 \rightarrow 0$ としたものが、Heisenberg の不確定性関係に抵触して基底状態を持つことができないということにある。(詳しくは補足参照))

[補足]: Hamiltonian:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + \alpha r^s \quad \dots (22)$$

に対して、基底状態が Heisenberg の不確定性関係 $\Delta p \cdot \Delta r \geq \hbar/2$ を満たすための s の条件を調べる。基底状態では不確定性が最小限であるとして、 $p \simeq \hbar/2a$ (a :ポテンシャルの到達距離で波動関数の広がりに相当) とする。この時、基底状態のエネルギーは、

$$E_0 \simeq \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{2a} \right)^2 + \alpha a^s \quad \dots (23)$$

と書ける。 E_0 がエネルギー固有値であるためにはパラメーター a に対して安定でなければならない。このことから、

$$\frac{\partial E_0}{\partial a} = 0 \iff a = \left(\frac{\hbar^2}{16m\alpha s} \right)^{\frac{1}{s+2}} \quad \dots (24)$$

$$\frac{\partial^2 E_0}{\partial a^2} > 0 \iff s + 2 > 0 \quad \dots (25)$$

但し、(25) の計算には (24) の結果得られた a を用いた。これより、ポテンシャル α/r^2 (本問での $r_0 \rightarrow 0$ の極限に対応) はギリギリのところでは基底状態が存在できないことが分かった。

専攻 問題 2 解答

1. fig.1 の微小長方形 ABCD は、 $AD, BC \ll AB, DC \ll 1$ を満たすとす
る。マクスウェル方程式の一つ $\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$ の両辺を図の長方形で
積分し、左辺に Stokes の公式を使うと、

$$\oint \vec{E} \cdot d\vec{l} = \int \nabla \times \vec{E} \cdot d\vec{S} = -\frac{\partial}{\partial t} \int \vec{B} \cdot d\vec{S}$$

となる。 $AD \rightarrow 0, BC \rightarrow 0$ とすれば、

$$\int_{AB} \vec{E} \cdot d\vec{l} + \int_{CD} \vec{E} \cdot d\vec{l} = 0$$

を得る。 AB も CD も \vec{E} 、境界面の変化に比べて短いので、

$$E_t(\text{I}) - E_t(\text{II}) = 0$$

であることが分かる。

2. fig.2 の微小円柱 (高さ h 、底面積 S) において、 $h \ll S \ll 1$ であ
る。 D を円柱の表面で面積積分し、 Gauss の公式とマクスウェル方
程式の一つ、 $\text{div } D = \rho$ を用いて変形すると下の式を得る。

$$\int \vec{D} \cdot d\vec{S} = \int \nabla \cdot \vec{D} dV = \int \rho dV$$

ここで、 $h \rightarrow 0$ とすると、

$$(\vec{D}(\text{I}) - \vec{D}(\text{II})) \cdot \vec{S} = QS$$

となる。 \vec{S} は、大きさ S で、円柱の底面の法線方向を向いたベクト
ルである。 S は \vec{D} 、境界面の変化に比べて小さい。従って、

$$D_n(\text{I}) - D_n(\text{II}) = Q$$

と結論できる。

3. 誘電率 ϵ 、透磁率 μ 、電気伝導度 κ の物質中でのマクスウェル方程式は、

$$\text{rot } \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \quad \dots (1)$$

$$\text{rot } \vec{H} = \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \kappa \vec{E} \quad \dots (2)$$

となる。完全導体中では、 $\kappa \rightarrow \infty$ である。このため (2) 式の右辺第 2 項を見て、

$$\vec{E} = 0 \quad \dots (3)$$

(1),(3) より、

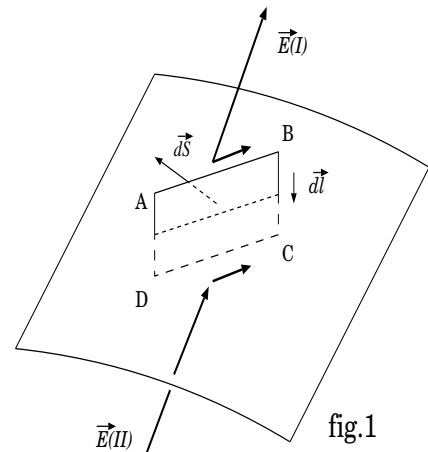
$$\vec{H} = \text{const.}$$

が分かる。 H が特になにかある値をとらなければならない理由はないので、 $\text{const.} = 0$ とする。結局導体の内部
では、

$$\vec{E} = 0 \quad , \quad \vec{H} = 0$$

となっている。問題に与えられた境界条件 (1)~(4) にこれらを代入すると、

$$E_t(\text{I}) = 0 \quad , \quad D_n(\text{I}) = Q \quad , \quad H_t(\text{I}) = J \quad , \quad B_n(\text{I}) = 0$$



が得られる。

4. 媒質 (II) は完全導体で、表面電流密度、 $J = H_t(I)$ となる。マクスウェル方程式 $\text{rot } E = -\mu_0 \frac{\partial H}{\partial t}$ に (5) を代入すると、

$$\text{rot } \vec{E} = \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \\ \partial_z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ ikE_0 \exp(-2\pi i \nu t + ikx) \end{pmatrix}$$

であるから、これより

$$\vec{H} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{kE_0}{2\pi\nu\mu_0} \exp(-2\pi i \nu t + ikx) \end{pmatrix}$$

となる。 H_x, H_y が特別の値をとらなければならない理由はないのでこれらの値は 0 とした。従って、

$$H_z = \frac{kE_0}{2\pi\nu\mu_0} \exp(-2\pi i \nu t + ikx) = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} E_0 \exp(-2\pi i \nu t + ikx)$$

ただし、 $k = 2\pi\nu \sqrt{\varepsilon_0\mu_0}$ である。反射波 E'_y, H'_z については境界条件 (1), $E_t(I) = 0$ とマクスウェル方程式より、

$$E'_y = -E_0 \exp(-2\pi i \nu t - ikx) \quad , \quad H'_z = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} E_0 \exp(-2\pi i \nu t - ikx)$$

$x = 0$ として H_z と H'_z の和をとると、表面電流密度として、

$$J = H_t(I) = H'_z + H_z = 2 \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} E_0 \exp(-2\pi i \nu t)$$

が得られる。

5. 入射波、反射波、透過波は以下のように書ける。

$$\text{入射波 : } E_y = E_0 \exp(-2\pi i \nu t + ikx) \quad , \quad H_z = \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_0}} E_y$$

$$\text{反射波 : } E'_y = \mp E'_0 \exp(-2\pi i \nu t - ik'x) \quad , \quad H'_z = -\sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_0}} E'_y$$

$$\text{透過波 : } E''_y = E''_0 \exp(-2\pi i \nu t + ik''x) \quad , \quad H''_z = \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_0}} E''_y$$

ここで、

$$k = k' = 2\pi\nu \sqrt{\varepsilon_1\mu_0} \quad , \quad k'' = 2\pi\nu \sqrt{\varepsilon_2\mu_0}$$

である。複号は各々、 $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$ と $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$ の場合に対応する。 $x = 0$ として (1),(3) を用いると、(I) も (II) も誘電体だから $J = 0$ で、

$$\begin{cases} E_0 \mp E'_0 = E''_0 & \text{from(1)} \\ \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_0}} (E_0 \pm E'_0) = \sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_0}} E''_0 & \text{from(3)} \end{cases}$$

となる。これより、

$$\frac{E'_0}{E_0} = \pm \frac{\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_0}} - \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_0}}}{\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_0}} + \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_0}}} = \pm \frac{\sqrt{\varepsilon_2} - \sqrt{\varepsilon_1}}{\sqrt{\varepsilon_2} + \sqrt{\varepsilon_1}} \quad (\text{反射率}) \quad \frac{E''_0}{E_0} = \frac{2\sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_0}}}{\sqrt{\frac{\varepsilon_2}{\mu_0}} + \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\mu_0}}} = \frac{2\sqrt{\varepsilon_1}}{\sqrt{\varepsilon_2} + \sqrt{\varepsilon_1}} \quad (\text{透過率})$$

となる。但し、複号の + は、 $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$ の場合を指し、- は、 $\varepsilon_1 > \varepsilon_2$ の場合を指している。

6. 最初誘電体の中へ透過し、 $2n$ 回 ($n = 0, 1, 2, \dots$) 反射した後で再び真空へ透過していく。最終的に出てくる光を E_t とすると、

$$\begin{aligned} E_t &= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{2\sqrt{\epsilon_0}}{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0}} \right) \left(\frac{2\sqrt{\epsilon_1}}{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0}} \right) \left(\frac{\sqrt{\epsilon_1} - \sqrt{\epsilon_0}}{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0}} \right)^{2n} E_0 \exp(2\pi i \nu \sqrt{\epsilon_1 \mu_0} 2nL) \\ &= \left(\frac{2\sqrt{\epsilon_0}}{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0}} \right) \left(\frac{2\sqrt{\epsilon_1}}{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0}} \right) \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \left(\frac{\sqrt{\epsilon_1} - \sqrt{\epsilon_0}}{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0}} \right)^2 \exp(4\pi i \nu \sqrt{\epsilon_1 \mu_0} L) \right\}^n E_0 \\ &= \left(\frac{2\sqrt{\epsilon_0}}{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0}} \right) \left(\frac{2\sqrt{\epsilon_1}}{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0}} \right) \frac{E_0}{1 - \left(\frac{\sqrt{\epsilon_1} - \sqrt{\epsilon_0}}{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0}} \right)^2 \exp(4\pi i \nu \sqrt{\epsilon_1 \mu_0} L)} \\ &= \left(\frac{4\sqrt{\epsilon_0 \epsilon_1}}{(\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0})^2} \right) E_0 \frac{1}{1 - \left(\frac{\sqrt{\epsilon_1} - \sqrt{\epsilon_0}}{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0}} \right)^2 \cos(4\pi \nu \sqrt{\epsilon_1 \mu_0} L) - i \left(\frac{\sqrt{\epsilon_1} - \sqrt{\epsilon_0}}{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0}} \right)^2 \sin(4\pi \nu \sqrt{\epsilon_1 \mu_0} L)} \\ &= \frac{\left(\frac{4\sqrt{\epsilon_0 \epsilon_1}}{(\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0})^2} \right) E_0 \left(\frac{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0}}{\sqrt{\epsilon_1} - \sqrt{\epsilon_0}} \right)^2 \left\{ \left(\frac{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0}}{\sqrt{\epsilon_1} - \sqrt{\epsilon_0}} \right)^2 - \cos(4\pi \nu \sqrt{\epsilon_1 \mu_0} L) + i \sin(4\pi \nu \sqrt{\epsilon_1 \mu_0} L) \right\}}{\left\{ \left(\frac{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0}}{\sqrt{\epsilon_1} - \sqrt{\epsilon_0}} \right)^2 - \cos(4\pi \nu \sqrt{\epsilon_1 \mu_0} L) \right\}^2 + \sin^2(4\pi \nu \sqrt{\epsilon_1 \mu_0} L)} \end{aligned}$$

従って、

$$\begin{aligned} |E_t|^2 &= \frac{\frac{16\epsilon_0 \epsilon_1}{(\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0})^4} E_0^2 \left(\frac{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0}}{\sqrt{\epsilon_1} - \sqrt{\epsilon_0}} \right)^4}{\left(\frac{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0}}{\sqrt{\epsilon_1} - \sqrt{\epsilon_0}} \right)^4 + 1 - 2 \left(\frac{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0}}{\sqrt{\epsilon_1} - \sqrt{\epsilon_0}} \right)^2 \cos(4\pi \nu \sqrt{\epsilon_1 \mu_0} L)} \\ &= \frac{16\epsilon_0 \epsilon_1 E_0^2}{(\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0})^4 + (\sqrt{\epsilon_1} - \sqrt{\epsilon_0})^4 - 2\{(\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_0})(\sqrt{\epsilon_1} - \sqrt{\epsilon_0})\}^2 \cos(4\pi \nu \sqrt{\epsilon_1 \mu_0} L)} \\ &= \frac{8\epsilon_0 \epsilon_1 E_0^2}{\epsilon_1^2 + 6\epsilon_1 \epsilon_0 + \epsilon_0^2 - (\epsilon_1 - \epsilon_0)^2 \cos(4\pi \nu \sqrt{\epsilon_1 \mu_0} L)} \end{aligned}$$

と求まる。これよりポインティングベクトルの大きさ S は、

$$\begin{aligned} S = |S| = |E \times H| &= \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} E_t^2 \\ &= \frac{8\epsilon_0 \epsilon_1 \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} E_0^2}{\epsilon_1^2 + 6\epsilon_1 \epsilon_0 + \epsilon_0^2 - (\epsilon_1 - \epsilon_0)^2 \cos(4\pi \nu \sqrt{\epsilon_1 \mu_0} L)} \end{aligned}$$

となる。

[別解] 電場 (y 成分)、磁場 (z 成分) を $E = \tilde{E} \exp(-2\pi i \nu t)$, $H = \tilde{H} \exp(-2\pi i \nu t)$ として、

$$\begin{cases} \tilde{E}_0 e^{ikx} - \tilde{E}_r e^{-ikx} & , \quad \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} (\tilde{E}_0 e^{ikx} + \tilde{E}_r e^{-ikx}) \\ \tilde{E}' e^{ik'x} + \tilde{E}'' e^{-ik'x} & , \quad \sqrt{\frac{\epsilon_1}{\mu_0}} (\tilde{E}' e^{ik'x} - \tilde{E}'' e^{-ik'x}) \\ \tilde{E}_t e^{ikx} & , \quad \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} \tilde{E}_t e^{ikx} \end{cases}$$

を境界条件を代入して計算しても、全く同じ答を得ることができる。

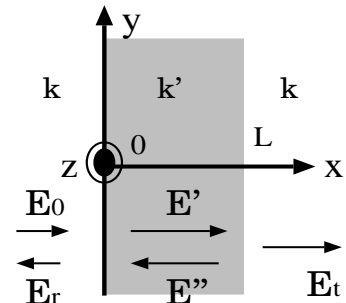


fig.3

7. 小問 6 の答えを見ると、 $\cos(4\pi \nu \sqrt{\epsilon_1 \mu_0} L) = 1$ のときに一番透過することが分かる。よって、

$$L = \frac{2\pi m}{4\pi \nu \sqrt{\epsilon_1 \mu_0}} = \frac{m \lambda}{2 n}$$

ただし、 m は非負整数で、 λ 、 n はそれぞれ、真空中の電磁波の波長、誘電体の屈折率である。 L がこの条件を満たすときの透過強度と入射強度の比をとると、

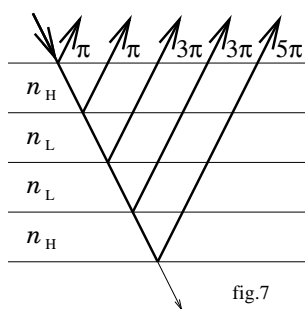
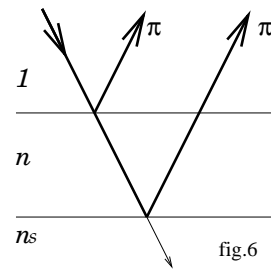
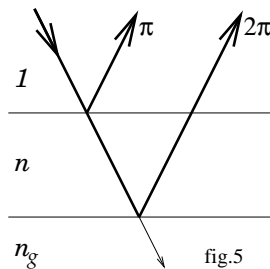
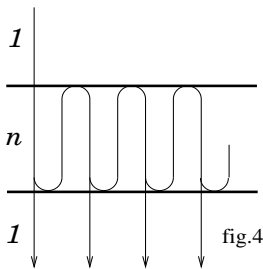
$$\frac{\text{透過強度}}{\text{入射強度}} = \frac{\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} E_t^2}{\sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}} E_0^2} = \frac{8\epsilon_0\epsilon_1}{\epsilon_1^2 + 6\epsilon_1\epsilon_0 + \epsilon_0^2 - (\epsilon_1 - \epsilon_0)^2} = 1$$

実は、小問 6 で全く反射しない光と 2 回反射して透過する光の 2 つだけで和をとって計算しても、一番透過するときの L の条件は一致する。このことは、次のように理解できる。これらの 2 つの光の位相が 2π の自然数倍だけずれるときに 2 つの光が強め合う。このとき同時に、4, 6, 8... 回反射する光も、 2π の自然数倍だけ、位相がずれるから、結局、そのまま、透過する光と 2 回反射する光が、強め合うときは、他のすべての透過光も強め合う。(fig.4)

波長 λ の光を透過するフィルターを作りたいときに必要となる光学的厚さは、 $nL = \frac{m\lambda}{2}$ (m は非負整数) となる。但し、 $n = \frac{\sqrt{\epsilon_1\mu_0}}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}}$ 、 $\lambda = \frac{1}{\nu\sqrt{\epsilon_0\mu_0}}$ で与えられる。

今、この誘電体の薄膜をガラス面 (屈折率 $n_g > n$) に蒸着させることを考える (fig.5)。薄膜の光学的厚さ $nL = \frac{\lambda}{4}$ としておく。このとき、反射光の位相のずれは π と 2π で打ち消し合う。これは、反射防止膜と呼ばれる、眼鏡の反射防止コーティングやカメラのレンズの反射防止等に利用されている。

ガラスの代わりに別の誘電体 (屈折率 $n_s < n$) を蒸着させたらどうなるだろうか (fig.6)。この場合は逆に、反射光同士は強め合って、反射増加膜となる。 n と n_g 、または、 n と n_s との境界での反射の時に位相が π ずれるかどうかによって、反射光が強め合ったり弱め合ったりする。



それで、今度は屈折率の大きいもの (n_H) を小さいもの (n_L) を交互に重ねる (fig.7)。左図のように重ねた多層膜は、反射増加膜として働く。実際、このような高反射率透明多層膜は、膜の数が十分に増えると、広い波長範囲にわたって、ほぼ様な高反射率を示すようになり、このとき、同時に性能も向上し、反射率 99% 以上のものを作ることができる。ちなみに、普通の銀膜をつかった鏡の反射率は高々 96% である。

[注] 波長 $1/4$ の光学的厚さをもつ薄膜を何層か重ねて、その内部で生じる干渉を利用して、特定の波長領域の光のみを透過、または、反射するフィルターのことを、干渉フィルターと呼ぶ。

専攻問題3 解答

1. $S_1^2 + S_2^2 = \vec{S}$ とおく。このとき、ハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}J(S^2 - S_1^2 - S_2^2)$$

と表わせられる。各運動量の一般論から、右表のように表すことができる。

固有状態	\vec{S}^2 の固有値	\mathcal{H} の固有値
$ \uparrow_1, \uparrow_2\rangle$	2	$\frac{1}{4}J$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow_1, \downarrow_2\rangle + \downarrow_1, \uparrow_2\rangle)$		
$ \downarrow_1, \downarrow_2\rangle$	0	$-\frac{3}{4}J$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow_1, \downarrow_2\rangle - \downarrow_1, \uparrow_2\rangle)$		

但し、 \uparrow, \downarrow は、 S_i^z ($i = 1, 2$) の固有値が $\frac{1}{2}$ または、 $-\frac{1}{2}$ の状態を表し、全体として直積を表すものとする。

2. それぞれの固有値を固有状態を表にしてまとめると、右表のようになる。よって、分配関数 Z は、

固有状態	\vec{S}^2	S^z	\mathcal{H} の固有値
$ \uparrow_1, \uparrow_2\rangle$	2	1	$-g\mu_B H + \frac{1}{4}J$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow_1, \downarrow_2\rangle + \downarrow_1, \uparrow_2\rangle)$	2	0	$\frac{1}{4}J$
$ \downarrow_1, \downarrow_2\rangle$	2	-1	$g\mu_B H + \frac{1}{4}J$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow_1, \downarrow_2\rangle - \downarrow_1, \uparrow_2\rangle)$	0	0	$-\frac{3}{4}J$

$$Z = \text{Tr}[\exp(-\beta\mathcal{H})]$$

$$= \exp(-\frac{1}{4}J\beta)(1 + 2\cosh(g\mu_B H\beta) + \exp(J\beta))$$

- 3.

$$M = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial H} = g\mu_B \frac{2 \sinh(g\mu_B H\beta)}{1 + 2 \cosh(g\mu_B H\beta) + \exp(J\beta)}$$

$\sinh(x) = x + O(x^3)$, $\cosh(x) = 1 + O(x^2)$ を用いて、

$$\frac{M}{H} = g\mu_B \frac{2(g\mu_B H\beta) + O(H^3)}{H(3 + \exp(-J\beta) + O(H^2))} = \frac{2(g\mu_B)^2\beta}{3 + \exp(J\beta)}(1 + O(H^2))$$

よって、

$$\lim_{H \rightarrow 0} \frac{M}{H} = \frac{2(g\mu_B)^2\beta}{3 + \exp(J\beta)}$$

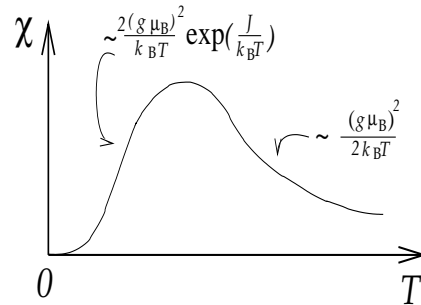
- (i) $k_B T \gg J$ ($\beta J \ll 1$) のとき

$$\chi = \frac{2(g\mu_B)^2\beta}{4 + O(J\beta)} = \frac{(g\mu_B)^2}{2}\beta(1 + O(J\beta)) \sim \frac{(g\mu_B)^2}{2}\beta$$

- (ii) $k_B T \ll J$ ($\beta J \gg 1$) のとき

$$\chi = \frac{2\beta(g\mu_B)^2}{\exp(J\beta)}(1 + \frac{1}{3}\exp(-J\beta)) \sim \frac{2(g\mu_B)^2\beta}{\exp(J\beta)}$$

この結果を図示すると右図のようになる。



4. $\vec{S} = \vec{S}_\alpha + \vec{S}_\beta$ とし、 $S_\alpha^2 = S_1^2 + S_3^2$, $S_\beta^2 = S_2^2 + S_4^2$ とすると、

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}J(S^2 - S_\alpha^2 - S_\beta^2)$$

S_α, S_β の固有値は 1 で行った通りなので、この 2 つを合成することを考えれば良い。書き漏れがないことを確かめるためにも、全体の次元が 16 存在していることを確かめることは有用である。

- (i) $S_\alpha = 1, S_\beta = 1$ のとき

S	\mathcal{H} の固有値	次元
2	J	5
1	$-J$	3
0	$-2J$	1

- (ii) $S_\alpha = 1, S_\beta = 0$ あるいは、
 $S_\alpha = 0, S_\beta = 1$ のとき

S	\mathcal{H} の固有値	次元
1	0	3

(つまり、全部で次元は 6)

- (iii) $S_\alpha = 0, S_\beta = 0$ のとき

S	\mathcal{H} の固有値	次元
0	0	1

5. 高温では、各々のスピンの振る舞いのランダム性が増加する。つまり、 $J(\vec{S}_1 + \vec{S}_3) \cdot (\vec{S}_2 + \vec{S}_4)$ による個々のスピン間の相互作用の効果が小さくなり、スピン個々がもっている性質に依存する。よって、 χ はスピンの個数に比例する。(エネルギー差による存在比 (population) に差が見られなくなる。) つまり、スピン n 個のときの磁化率を χ_n とすれば、

$$\frac{\chi_2}{2} \sim \frac{\chi_4}{4} \sim \frac{\chi_n}{n}$$

よって、

$$\chi_4 \sim 2\chi_2 = (g\mu_B)^2\beta$$

となる。

低温において、ほとんどが基底状態になる。2 スピン系との共通点として、(但し、基底状態と第一励起状態の波動関数を $|\Psi_0\rangle, |\Psi_{1(i)}\rangle$ (添字 i は、縮重を考慮している。) とし、磁気モーメントを表す演算子を $\hat{M}(= g\mu_B S_z)$ とする。)

- 基底状態において、 $\langle M_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \hat{M} | \Psi_0 \rangle = 0$ である。
- 第一励起状態において $\langle M_i \rangle = \langle \Psi_{1(i)} | \hat{M} | \Psi_{1(i)} \rangle \neq 0$, $\sum_i \langle M_i \rangle = \sum_i \langle \Psi_{1(i)} | \hat{M} | \Psi_{1(i)} \rangle = 0$ である。

3 の解答を見ると、分母が基底状態から励起状態への励起率を表し、分子が磁場を掛けたときの第一励起状態の応答を表している。同一エネルギー準位 (第一励起状態) についての応答を考えるので、そのときの M は、

$$M = \frac{\sum_i M_i \exp\{-\beta(E^{(0)} - M_i H)\}}{\sum_j \exp\{-\beta(E^{(0)} - M_j H)\}} \quad \therefore \frac{d}{dH} M|_{H=0, \beta \gg 1} \approx \sum_i M_i^2 \beta$$

となる。ただし、 $E^{(0)}$ は H に因らない摂動 (H をかける) 以前のエネルギーを示している。よって、第一励起状態と基底状態のエネルギー差を $\Delta E (= \langle \Psi_{1(i)} | \mathcal{H} | \Psi_{1(i)} \rangle - \langle \Psi_0 | \mathcal{H} | \Psi_0 \rangle)$ とし、

$$\chi \sim \frac{\sum_i M_i^2}{\exp((\Delta E)\beta)} \beta$$

となることが分かる。よって、

$$\chi_4 \sim \frac{2(g\mu_B)^2}{\exp(J\beta)} \beta$$

となる。ちなみに、地道に計算すると、

$$\chi = \frac{(g\mu_B)^2(10 \exp(-J\beta) + 2 \exp(J\beta) + 4)\beta}{5 \exp(-J\beta) + 3 \exp(J\beta) + \exp(2J\beta) + 7} \sim \begin{cases} (g\mu_B)^2\beta & \beta \rightarrow 0 \\ \frac{2(g\mu_B)^2\beta}{\exp(J\beta)} & \beta \rightarrow \infty \end{cases} \quad \dots (1)$$

となる。各自、確かめてほしい。(次元が 16 あることに注意) また、『低温のときは、基底状態と励起状態のみで計算しても低温極限では、磁化率は同じ解になり、高温極限では、 $\beta J = 0$ の仮定のもとで計算しても同じ解が得られる。』ことから、磁化率の振る舞いを論じても良い。

[補足 1] χ に対する一般解を求めてみよう。磁場を摂動的に考えて、

$$E_n = E_n^{(0)} - M_n H \quad (\text{但し、} E_n^{(0)} \text{ は } H \text{ に因らない摂動以前のエネルギーを示す。})$$

磁化 M は $M = \frac{\sum_n M_n \exp(-\beta E_n)}{\sum_m \exp(-\beta E_m)}$ で与えられる。さらに、 $M|_{H=0} = 0$ を仮定する。この仮定は、自発磁化が存在しない場合のみ、許される。(この問題に対して適切である。) 磁化率 χ は、

$$\lim_{H \rightarrow 0} \frac{M}{H} \approx \frac{d}{dH} M|_{H=0} = \frac{\sum_n M_n^2 \exp(-\beta E_n)}{\sum_m \exp(-\beta E_m)} \beta \quad \dots (2)$$

これに対し、スピンの合成の結果 ([補足 2] 参照) の値を代入すると、地道に計算した結果の $\chi(1)$ が得られる。

ここで、(2) の式で得られた χ の低温極限と高温極限について調べてみよう。低温極限については、式の形から、解答に示した物理的考察によって得られた低温極限の近似式が正しいことは明らかである。高温極限については、

$$\frac{d^2}{d\beta^2}(e^\beta + e^{-\beta})^n = n(n-1)(e^\beta + e^{-\beta})^{n-2}(e^\beta - e^{-\beta})^2 + n(e^\beta + e^{-\beta})^n$$

両辺に $\beta = 0$ を代入し、左辺を展開することにより、二項係数 ${}_nC_j$ を用いて、

$${}_nC_0 n^2 + {}_nC_1 (n-2)^2 + {}_nC_2 (n-4)^2 \cdots + {}_nC_n (-n)^2 = 2^n \times n$$

これを用いて、高温極限の近似式は、 M_n がスピンの合成より得られたことを考えると、全スピンの数 N (この問題では $N = 4$) として、

$$\frac{\sum_n M_n^2 \exp(-\beta E_n)}{\sum_m \exp(-\beta E_m)} \beta \sim \frac{\frac{(g\mu_B)^2}{4} N 2^N}{2^N} \beta = \frac{N(g\mu_B)^2}{4} \beta \propto N$$

となるから、解答に示した物理的考察によって得られた高温極限の近似式が正しいことが示せたことになる。

[補足 2] 問題 4 で、地道に計算すると、スピン 4 つの合成を行わねばならない。最初にスピン二つずつを合成し、最後にもう一度合成した方が分かりやすいだろう。スピンの合成は、単に計算していけばよいので、計算結果のみ示すこととする。(下の (i),(ii),(iii) の場合だけは、問題 4 の振り方と同じである。)

(i) $S_\alpha = 1, S_\beta = 1$ のとき

(イ) $S = 2 \left(S_z = \frac{M}{g\mu_B} \right)$

S_z	スピン波動関数
2	$ \uparrow, \uparrow, \uparrow, \uparrow\rangle$
1	$\frac{1}{2}(\downarrow, \uparrow, \uparrow, \uparrow\rangle + \uparrow, \downarrow, \uparrow, \uparrow\rangle + \uparrow, \uparrow, \downarrow, \uparrow\rangle + \uparrow, \uparrow, \uparrow, \downarrow\rangle)$
0	$\frac{1}{\sqrt{6}}(\downarrow, \downarrow, \uparrow, \uparrow\rangle + \uparrow, \downarrow, \downarrow, \uparrow\rangle + \downarrow, \uparrow, \downarrow, \uparrow\rangle + \uparrow, \downarrow, \downarrow, \uparrow\rangle + \uparrow, \uparrow, \downarrow, \downarrow\rangle + \uparrow, \uparrow, \downarrow, \downarrow\rangle)$
-1	$\frac{1}{2}(\uparrow, \downarrow, \downarrow, \downarrow\rangle + \downarrow, \uparrow, \downarrow, \downarrow\rangle + \downarrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow\rangle + \downarrow, \downarrow, \downarrow, \uparrow\rangle)$
-2	$ \downarrow, \downarrow, \downarrow, \downarrow\rangle$

(ロ) $S = 1$

S_z	スピン波動関数
1	$\frac{1}{2}(\uparrow, \uparrow, \uparrow, \downarrow\rangle + \uparrow, \uparrow, \downarrow, \uparrow\rangle - \uparrow, \downarrow, \uparrow, \uparrow\rangle - \downarrow, \uparrow, \uparrow, \uparrow\rangle)$
0	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow, \uparrow, \downarrow, \downarrow\rangle - \downarrow, \downarrow, \uparrow, \uparrow\rangle)$
-1	$\frac{1}{2}(\uparrow, \downarrow, \downarrow, \downarrow\rangle + \downarrow, \uparrow, \downarrow, \downarrow\rangle - \downarrow, \downarrow, \downarrow, \uparrow\rangle - \downarrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow\rangle)$

(ハ) $S = 0$

S_z	スピン波動関数
0	$\frac{1}{2\sqrt{2}}\{2 \uparrow, \uparrow, \downarrow, \downarrow\rangle + 2 \downarrow, \downarrow, \uparrow, \uparrow\rangle - \uparrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow\rangle - \uparrow, \downarrow, \downarrow, \uparrow\rangle - \downarrow, \uparrow, \uparrow, \downarrow\rangle - \downarrow, \uparrow, \downarrow, \uparrow\rangle\}$

(ii) (a) $S_\alpha = 1, S_\beta = 0$ のとき

S_z	スピン波動関数
1	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow, \uparrow, \uparrow, \downarrow\rangle - \uparrow, \uparrow, \downarrow, \uparrow\rangle)$
0	$\frac{1}{2}(\downarrow, \uparrow, \uparrow, \downarrow\rangle + \uparrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow\rangle - \downarrow, \uparrow, \downarrow, \uparrow\rangle - \uparrow, \downarrow, \downarrow, \uparrow\rangle)$
-1	$\frac{1}{\sqrt{2}}(\downarrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow\rangle - \downarrow, \downarrow, \downarrow, \uparrow\rangle)$

(b) $S_\alpha = 0, S_\beta = 1$ のとき

S_z	スピン波動関数
1	$\frac{1}{\sqrt{2}}\{ \uparrow, \downarrow, \uparrow, \uparrow\rangle - \downarrow, \uparrow, \uparrow, \uparrow\rangle\}$
0	$\frac{1}{2}\{ \uparrow, \downarrow, \downarrow, \uparrow\rangle + \uparrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow\rangle - \downarrow, \uparrow, \downarrow, \uparrow\rangle - \downarrow, \uparrow, \uparrow, \downarrow\rangle\}$
-1	$\frac{1}{\sqrt{2}}\{ \uparrow, \downarrow, \downarrow, \downarrow\rangle - \downarrow, \uparrow, \downarrow, \downarrow\rangle\}$

(iii) $S_\alpha = 0, S_\beta = 0$ のとき

S_z	スピン波動関数
0	$\frac{1}{2}\{ \uparrow, \downarrow, \uparrow, \downarrow\rangle + \downarrow, \uparrow, \downarrow, \uparrow\rangle - \uparrow, \downarrow, \downarrow, \uparrow\rangle - \downarrow, \uparrow, \uparrow, \downarrow\rangle\}$

専攻 問題 4 解答

1. (i) a と b が異種粒子の時は、各々の入射波が干渉しあうことはないので

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

- (ii) a と b が同種粒子でスピン 0 のボゾンの時、空間部分に対称性を持たせるために、

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2\text{Re}[f(\theta)f(\pi - \theta)^*] \end{aligned}$$

となり、 $|f(\theta)|$ と $|f(\pi - \theta)|$ が同時に観測され、かつ干渉を起こすことが分かる。

- (iii) スピン 1/2 の 2 粒子は、合成スピン 0 (1 重項) の時はスピン部分が粒子の入れ替えに対して反対称であるので空間部分が対称、合成スピン 1 (3 重項) の時はスピン部分が対称なので空間部分が反対称となることから、スピンを観測しないときの断面積は

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{4}|f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 + \frac{3}{4}|f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 \\ &= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \text{Re}[f(\theta)f(\pi - \theta)^*] \end{aligned}$$

となり、この場合も干渉を起こすことが分かる。

2. (i) 実験系で運動エネルギー E_L (速度 v_A) の粒子 a (質量 m_A) が静止している粒子 b (質量 m_B) に衝突する過程を重心系で見ると、重心速度 $V = \frac{m_A v_A}{m_A + m_B}$ (粒子 a の進行方向を正とする) に対して粒子 a は速度 $v_A - V$ 、粒子 b は速度 V で運動していることになるので、重心系での運動エネルギーは

$$E_C = \frac{1}{2}m_A(v_A - V)^2 + \frac{1}{2}m_B V^2 = \frac{m_B}{m_A + m_B} E_L$$

と表せる。今、 $m_A = m_B = m_{12C}$ 、 $E_L = 10$ [MeV] であるので、重心系での運動エネルギーは $T = E_C = \frac{1}{2}E_L = 5$ [MeV] となる。

また、入射してくる ^{12}C のドブロイ波長は非相対論的には以下の様に計算できる。

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi(\hbar c)}{\sqrt{2}(M_{12C}c^2)E_L} = \frac{2\pi \times 200 \text{ [MeV]} \cdot \text{[fm]}}{\sqrt{2} \times 12000 \times 10 \text{ [MeV]}} = 2.56 \text{ [fm]}$$

この結果は、原子核 (1 ~ 10 [fm]) の構造を調べるのに適していると言える。

- (ii) 電荷 $+6e$ の 2 つの原子核の中心が $2R$ だけ離れた位置にあるとき、クーロン相互作用によるポテンシャルは

$$V_{coulomb} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{36e^2}{2R} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \frac{18\hbar c}{R}$$

で与えられる。ここで、 $R = 1.2 \times 12^{1/3} \approx 2.8$ [fm]、 $\hbar c = 200$ [MeV]·[fm]、 $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137}$ を用いて計算すると $V_{coulomb} \approx 9.4$ [MeV] となる。従って、 $V_{coulomb} > T$ が確かめられ、Rutherford 散乱が中心の微分断面積が得られることが分かる。

- (iii) 実験結果 A:

$\theta = 90$ 度における微分断面積の対称性がないことから、干渉効果は見られず散乱後の 2 粒子は区別できるものである。従って、 ^{12}C と ^{13}C の弾性散乱の微分断面積であることが分かる。

実験結果 B:

重心系での散乱角が 90 度の時、微分断面積が極大となっている。これは、干渉項がプラスで効いているので、ボゾン同士の散乱である。従って、 ^{12}C と ^{12}C の弾性散乱。

実験結果 C:

重心系での散乱角が 90 度の時、微分断面積が極小となっている。これは、干渉項がマイナスで効いているので、フェルミオン同士の散乱である。従って、 ^{13}C と ^{13}C の弾性散乱。

[補足]

1.(ii),(iii) を用いて、散乱角が 90 度の時の微分断面積を求めると、

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Boson}(\theta = \frac{\pi}{2}) = 4 \left|f\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Fermion}(\theta = \frac{\pi}{2}) = \left|f\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2$$

と計算できる。ここで、与えられたグラフを見ると、 $\theta = 90$ 度の微分断面積の値が B では 0.8、C では 0.2 程度なので上の考察が正しいことが確認できる。

3. (i) 400 keV の励起状態から、基底状態へ落ちるときに放出される 線の波長は、

$$\lambda = \frac{hc}{E} = \frac{2\pi\hbar c}{E} = \frac{2\pi \times 200 [\text{MeV}] \cdot [\text{fm}]}{400 \times 10^{-3} [\text{MeV}]} = 2.9 \times 10^{-12} [\text{m}]$$

(ii) 自然幅 Γ 、平均寿命 τ の間には不確定性関係 $\Gamma \cdot \tau = \hbar$ が成り立っていることより、

$$\Gamma = \frac{\hbar c}{\tau c} = \frac{200 [\text{MeV}] \cdot [\text{fm}]}{1.1 \times 10^{-12} \times 3 \times 10^{23} [\text{fm}]} \simeq 6 \times 10^{-4} [\text{eV}]$$

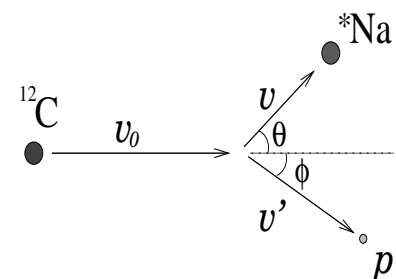
(iii) 核反応に関与する力は短距離力である強い相互作用であるため、2つの原子核が十分に近づかなければ反応は起こらない。今回の実験では、入射エネルギーが十分でないために、クーロン斥力に打ち勝って接近しにくいためであると考えられる。

(iv) 反応の Q 値が 0 であるという仮定より、古典力学の弾性衝突の問題として扱える。図のような衝突過程を考えるとエネルギー保存則、運動エネルギー保存則より、

$$m_C v_0 = m_{Na} v \cos \theta + m_p v' \cos \phi \quad \dots (1)$$

$$0 = m_{Na} v \sin \theta - m_p v' \sin \phi \quad \dots (2)$$

$$\frac{1}{2} m_C v_0^2 = \frac{1}{2} m_{Na} v^2 + \frac{1}{2} m_p v'^2 \quad \dots (3)$$



この3式より観測にかからない量 v' と ϕ を消去する。(1),(2) より ϕ を消去すると

$$(m_C v_0 - m_{Na} v \cos \theta)^2 + (m_{Na} v \sin \theta)^2 = (m_p v')^2 \quad \dots (4)$$

(3),(4) より、 v' を消去して、 v の方程式にすると、

$$m_{Na}(m_{Na} + m_p)v^2 - 2(m_C m_{Na} v_0 \cos \theta)v + m_C(m_C - m_p)v_0^2 = 0$$

上式の解は

$$v = \frac{m_C m_{Na} v_0 \cos \theta \pm \sqrt{(m_C m_{Na} v_0 \cos \theta)^2 - m_C m_{Na} (m_{Na} + m_p)(m_C - m_p)v_0^2}}{m_{Na}(m_{Na} + m_p)}$$

これより、 v の最大値は $\cos \theta = 1$ 、複号プラスの時

$$v_{max} = \frac{m_C m_{Na} + \sqrt{(m_C m_{Na})^2 - m_C m_{Na} (m_{Na} + m_p)(m_C - m_p)}}{m_{Na}(m_{Na} + m_p)} v_0$$

$$= \frac{m_C}{m_{Na} + m_p} \left[1 + \sqrt{1 - \left(1 + \frac{m_p}{m_{Na}}\right)\left(1 - \frac{m_p}{m_C}\right)} \right] v_0$$

ここで、 $v_0 = \sqrt{\frac{2 \times 10 [\text{MeV}]}{12 \times 1000 [\text{MeV}]}} c = 0.04c$ (c :光速) より、

$$v_{max} = \frac{12}{23 + 1} \left[1 + \sqrt{1 - \left(1 + \frac{1}{23}\right)\left(1 - \frac{1}{12}\right)} \right] v_0 = 0.024c$$

- (v) $^{23}\text{Na}^*$ が標の中で減速される際に失うエネルギーは、放出される γ 線のエネルギーには変化をもたらさない。従って、 γ 線のエネルギーを変化させるものは主に $^{23}\text{Na}^*$ のもつ速度による放出 γ 線のドップラー効果である。光のドップラー効果は相対論を用いる必要がある。

線のエネルギーが最大：
 入射粒子と同じ向きに運動している $^{23}\text{Na}^*$ が生成されると同時に γ 線を放射するときで、

$$E' = hv' = h \sqrt{\frac{1+\beta}{1-\beta}} \nu = \sqrt{\frac{1+\beta}{1-\beta}} E = 451 \text{ [keV]}$$

非相対論的に $\sqrt{\frac{1+\beta}{1-\beta}} = 1 + \beta + O(\beta^2)$ として、2 次以上の項を無視して計算しても同じ結果になる。

線のエネルギーが最小：
 核反応によって生じた $^{23}\text{Na}^*$ が標的の中で完全に静止した後に γ 線を放射するときで、

$$E' = E = 440 \text{ [keV]}$$

エネルギー保存則から、入射方向と反対方向に v_{max} で $^{23}\text{Na}^*$ が出ていくことは有り得ないことに注意。

- (vi) 線と物質との相互作用は主に以下に 3 つがある。

光電効果

線が原子に吸収されて、主として K 殻の電子が運動エネルギー $E = h\nu - (\text{仕事関数})$ で飛び出してくる現象。低エネルギーの線領域で支配的。

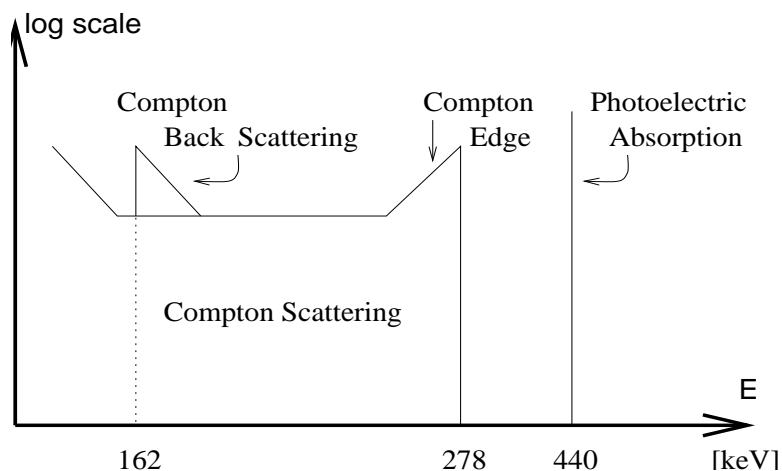
コンプトン散乱

原子中の電子の束縛エネルギーが無視できるほど入射光子のエネルギーが大きくなると、光子と自由電子の衝突という描像が成り立ち、自由電子による光子の散乱が生じる。これを、コンプトン散乱という。

電子対生成

光子のエネルギーが非常に大きくなると、物質中の電磁場と線の相互作用により、電子と陽電子の対が生成される。この時、必要な光子のエネルギーは、Dirac の海に沈んでいる電子をたたき出すエネルギーなので、 $2m_e c^2 = 1.02 \text{ [MeV]}$ となる。

- (vii) NaI シンチレーションカウンタのエネルギースペクトルは下図のようになる。光電吸収ピークのエネルギーが 440 [keV] に一致している。



専攻 問題 5 解答

1. まとめると次のようになる。

	ラウエ法	デバイ・シュラー法
目的	結晶の対称性を調べたり、既知結晶の方向を調べる。	結晶の格子定数・構造等を決定する。
用いる X 線	連続 X 線 (白色 X 線)	単色 X 線
試料	単結晶	粉末状結晶

2. $g = (ng_1, ng_2, ng_3) = ng_0$ の形に、 g_1, g_2, g_3 が互いに素になるような整数 n をとる。 $|k| = |k_0| = \frac{1}{\lambda}$ なので、

$$|k - k_0|^2 = |g|^2 \iff 4 \frac{1}{\lambda^2} \sin^2 \theta = \frac{n^2}{d^2} \iff n\lambda = 2d \sin \theta$$

よって、ブラッグの反射の公式が得られた。

3. 今、bcc (体心立方) の単位胞として図の立方体を考える。この単位胞には 2 つの同種粒子が $(0, 0, 0)$ と $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ に入っていると考えられるので、 $f_{(0,0,0)}(g) = f_{(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})}(g) \equiv f(g)$ として、

$$F(g) = f(g)\{1 + \exp(i\pi(g_1 + g_2 + g_3))\} \\ = f(g) \times \begin{cases} 0 & g_1 + g_2 + g_3 = \text{Odd} \\ 2 & g_1 + g_2 + g_3 = \text{Even} \end{cases}$$

$|g_1| < |g_2| \iff |\theta_1| < |\theta_2|$ から、 $|g|$ の小さいものから 3 つ挙げれば良い。但し、 g_1, g_2, g_3 の入れ替えの組み合わせで等しくなったり、正負が逆転しているものは、同等な反射となるので、除かなければならない。また、 $F(g)$ が 0 になり上の消滅則を満たすものは、反射しないことを意味するので除かねばならない。よって、求めるミラー指数は $(1, 1, 0), (2, 0, 0), (2, 1, 1)$ である。

fcc の場合も、同様に 3 つの同種粒子が存在していると考えて、

$$F(g) = f(g)(1 + \exp(i\pi(g_2 + g_3)) + \exp(i\pi(g_3 + g_1)) + \exp(i\pi(g_1 + g_2))) \\ = f(g)(1 + (-1)^{(g_2+g_3)} + (-1)^{(g_3+g_1)} + (-1)^{(g_1+g_2)}) \\ = f(g) \times \begin{cases} 4 & g_1, g_2, g_3 \text{ All Odd or All Even} \\ 0 & \text{Otherwise} \end{cases}$$

bcc と同様にして、求めるミラー指数は、 $(1, 1, 1), (2, 0, 0), (2, 2, 0)$ となる。

4. 2 の計算から、3 でもとめたブラッグ角 θ_B の小さいものから、 θ_{B1}, θ_{B2} とすると、 $\sin \theta_B$ の比は、

$$\frac{\sin \theta_{B1}}{\sin \theta_{B2}} = \frac{|g_1|}{|g_2|}$$

の関係があるので、与えられた表の数値について、計算すると、右表のようになる。

	$\frac{\sin \theta_{B1}}{\sin \theta_{B2}}$	$\frac{\sin \theta_{B3}}{\sin \theta_{B1}}$	$2 \frac{\sin \theta_{B1}}{\sin \theta_{B2}}$	$\frac{\sin \theta_{B3}}{\sin \theta_{B1}}$
A	1.417	1.731	1.411	1.221
B	1.152	1.635	1.734	1.418
bcc	$\sqrt{2}$	$\sqrt{3}$		
fcc			$\sqrt{3}$	$\sqrt{2}$

よって、A を bcc、B を fcc と判断すべきである。よって、A が鉄である。

5. 3 と同様にして、図の立方体を単位胞と考えると、 $\forall f_i(g)\{r_i \text{ に Cl 原子が存在している。}\} \equiv f_{\text{Cl}}, \forall f_i(g)\{r_i \text{ に Na 原}$

子が存在している。} $\equiv f_{\text{Na}}$ と書くことにすると、

$$F(\mathbf{g}) = f_{\text{Cl}}(1 + (-1)^{g_2+g_3} + (-1)^{g_3+g_1} + (-1)^{g_1+g_2}) + f_{\text{Na}}((-1)^{g_1} + (-1)^{g_2} + (-1)^{g_3} + (-1)^{g_1+g_2+g_3})$$

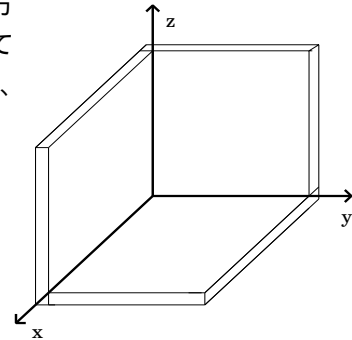
$$= \begin{cases} 4(f_{\text{Na}} + f_{\text{Cl}}) & \text{All Even} \\ 4(f_{\text{Na}} - f_{\text{Cl}}) & \text{All Odd} \\ 0 & \text{Otherwise} \end{cases}$$

Na、Cl に対して散乱因子が大きく異なる原因は考えられないから、 $|f_{\text{Na}} + f_{\text{Cl}}| > |f_{\text{Na}} - f_{\text{Cl}}|$ と考えるのが正しいと思われる。すると $|\mathbf{g}|$ の小さいものから順に、右表の通り、偶奇性とピークの大小の対応がとれており、上の推定が正しく、強度分布を説明できたことになる。

\mathbf{g}	$F(\mathbf{g})$ の条件	読み取りのピークの大きさ
(1, 1, 1)	All odd	小
(2, 0, 0)	All Even	大
(2, 2, 0)	All Even	大
(3, 1, 1)	All Odd	小
(2, 2, 2)	All Even	大

専攻 問題 6 解答

1. 右の図の 3 枚の平面鏡の法線方向を、それぞれ x, y, z 軸にとる。入射光の方向ベクトルを (a, b, c) とする。すると方向ベクトルは、 yz 平面で反射して $(-a, b, c)$ 、 xy 平面で反射して $(-a, b, -c)$ 、 zx 平面で反射して $(-a, -b, -c)$ 、の様に変わるので、入射光と平行に反射する。



2. 問題図中の t_1, t_2, t_3 は、左図のそれぞれ \times がふってあるところである。 $t_1 \sim t_2$ 間にコーナーリフレクターは、半波長分落下している。また、同様に $t_2 \sim t_3$ 間にコーナーリフレクターは、半波長分落下している。よって、 $t = 0$ におけるコーナーリフレクターの落下速度を v_0 とおくと、以下の関係式が得られる。(重力加速度を g 、入射光の波長を λ とおいた)

$$\begin{cases} (\frac{1}{2}gt_2^2 + v_0t_2) - (\frac{1}{2}gt_1^2 + v_0t_1) = \frac{\lambda}{2} \\ (\frac{1}{2}gt_3^2 + v_0t_3) - (\frac{1}{2}gt_2^2 + v_0t_2) = \frac{\lambda}{2} \end{cases}$$

両者から v_0 を消去して整理すると

$$g = \lambda \cdot \frac{2t_2 - (t_1 + t_3)}{(t_3 - t_2)(t_3 - t_1)(t_2 - t_1)}$$

3. ビームが鉛直線と角 φ をなしているとする。この時、 M_d で反射する光路の変化 $\Delta l'$ は、実際に M_d が動いた Δl と

$$\Delta l = \Delta l' \cos \varphi$$

の関係がある。ここで前問と同様に g を求めてやると

$$g(\varphi) = \lambda \cdot \frac{2t_2 - (t_1 + t_3)}{(t_3 - t_2)(t_3 - t_1)(t_2 - t_1)} \cos \varphi$$

となり、 $\cos \varphi$ の項がつく。従って、正しい ($\varphi = 0$) ものに比べ

$$\frac{g(0) - g(\varphi)}{g(0)} = 1 - \cos \varphi \approx \frac{\varphi^2}{2}$$

($\varphi \approx 0$ の時 $\cos \varphi = 1 - \frac{\varphi^2}{2}$)

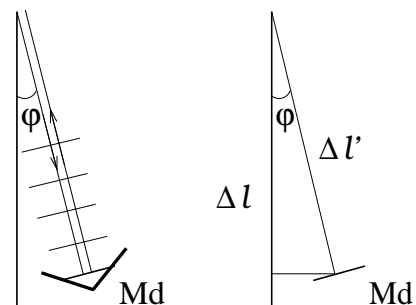
の差がある。これは相対測定精度とみなせるので、それが 10^{-9} となるためには $\frac{\varphi^2}{2} = 10^{-9}$ となればよい。よって、

$$\varphi = \sqrt{2 \times 10^{-9}} = 4,5 \times 10^{-5} \quad [\text{rad}]$$

従って、ずれ角は $4.5 \times 10^{-5} [\text{rad}]$ 以下でなくてはならないことがわかる。

4. まず、室温での残留ガスの二乗平均速度を求める。

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{3}{2}kT = \frac{3}{2} \frac{R}{N_A} T$$



$$\bar{v}^2 = \frac{3RT}{N_A m}$$

ここで $pV = nRT$ と、与えられた条件より

$$RT = 20[\text{atm} \cdot \text{l/mol}] = 2 \times 10^3[\text{Pa} \cdot \text{m}^3/\text{mol}]$$

また、 $N_A m = 3 \times 10^{-2}[\text{kg/mol}]$ より

$$\bar{v}^2 = 2 \times 10^5[\text{m}^2/\text{s}^2]$$

したがってこの時

$$\bar{v}_x^2 = \frac{2}{3} \times 10^5 \quad \therefore \sqrt{\bar{v}_x^2} = 258.2[\text{m/s}]$$

M_d に対し、下から衝突する残留ガス分子は、本来よりも $3[\text{m/s}]$ だけ速く、上から衝突するものは $3[\text{m/s}]$ だけ遅く感じることになるので、

$$v_{down}^2 = 3(\sqrt{\bar{v}_x^2} + 3)^2 = 2.0467 \times 10^5[\text{m}^2/\text{s}^2]$$

$$v_{up}^2 = 3(\sqrt{\bar{v}_x^2} - 3)^2 = 1.9538 \times 10^5[\text{m}^2/\text{s}^2]$$

M_d の運動について

$$Ma = Mg - (p_{up} - p_{down})S$$

問題の条件を満たすためには、

$$\frac{(p_{up} - p_{down})S}{Mg} < 10^{-9}$$

$$p_{up} - p_{down} < 10^{-9} \cdot \frac{0.1 \times 10}{1.0 \times 10^{-3}} = 10^{-6} \text{ Pa}$$

ここで、

$$p = \frac{N}{N_A} \frac{RT}{V} = \frac{Nm}{3V} \bar{v}^2$$

よって、必要な条件は結局

$$\frac{Nm}{3V} < 10^{-10}$$

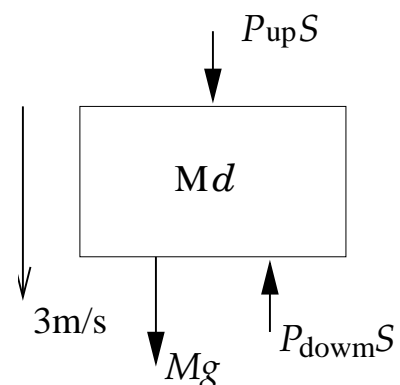
ここで、1 気圧のとき

$$10^5 = \frac{Nm}{3V} \times 2 \times 10^5 \quad \frac{Nm}{3V} = 5 \times 10^{-1}$$

したがって、必要な真空度は $2 \times 10^{-10}[\text{atom}] = 2 \times 10^{-5}[\text{Pa}]$

5. 周りはアースされた金属管であるから、 M_d に電荷があると、その内部表面に M_d と反対の電荷が誘起され、いわゆる遮蔽効果が観察される。 M_d が静止していれば、誘起される電荷はポテンシャルが最低となる分布をしておわるが、 M_d が動くときこの分布も常に変化し、新たにポテンシャルが最低となるような分布を作ろうとする。この時、移動する電子は金属内で抵抗を受け、ジュール熱を発生する。このエネルギーは M_d の持つエネルギーの減少分で補われねばならないので、結果として M_d の運動エネルギーは減り、減速される。

(誘導される電荷が、 M_d が動くのを妨げる方向に力を及ぼす、という書き方もある)



専攻 問題 7 解答

1. (i) 両辺に $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \exp(-ikx)$ なる演算子を (1) に演算して、

$$(k^2 + \lambda^2)\hat{\phi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-ika)$$

よって、

$$\hat{\phi}(k) = \frac{\exp(-ika)}{\sqrt{2\pi}(k^2 + \lambda^2)}$$

(ii)

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \hat{\phi}(k) \exp(ikx) dk = \frac{1}{2\pi} \int \frac{\exp(ik(x-a))}{k^2 + \lambda^2} dk \quad \dots (1)$$

一方、 $\alpha > 0$ として、右図のような経路 $C (= C_1 + C_2)$, C_1, C_2 についての複素積分、

$$\int_C dz \frac{\exp(iz\alpha)}{z^2 + \lambda^2} = \left(\int_{C_1} + \int_{C_2} \right) \frac{\exp(iz\alpha)}{z^2 + \lambda^2} dz \quad \dots (2)$$

を考える。まず、経路 C_1 について、

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{C_1} dz \frac{\exp(iz\alpha)}{z^2 + \lambda^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\exp(iz\alpha)}{z^2 + \lambda^2} \quad \dots (3)$$

次に、経路 C_2 について

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \left| \int_{C_2} dz \frac{\exp(iz\alpha)}{z^2 + \lambda^2} \right| \leq \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\pi d\theta \frac{R \exp(-R\alpha \sin \theta)}{R^2 - \lambda^2} = 0$$

となるから、

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{C_2} dz \frac{\exp(iz\alpha)}{z^2 + \lambda^2} = 0 \quad \dots (4)$$

となる。留数定理より、

$$\oint \frac{dz}{z - i\lambda} \frac{\exp(iz\alpha)}{z + i\lambda} = 2\pi i \frac{\exp(i(i\lambda)\alpha)}{i\lambda + i\lambda} = \frac{\pi \exp(-\lambda)}{\lambda} \quad \dots (5)$$

(2) の両辺に $\lim_{R \rightarrow \infty}$ をかけると、(3),(4),(5) より、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(iz\alpha)}{z^2 + \lambda^2} = \frac{\pi \exp(-\lambda\alpha)}{\lambda} \quad \dots (6)$$

となる。以下、(6) を (1) に用いると、

(i) $x - a > 0$ のとき、 $\alpha = x - a, z = k$ を代入して、

$$\phi(x) = \frac{\exp(-\lambda(x-a))}{2\lambda}$$

(ii) $x - a < 0$ のとき、 $\alpha = -(x-a), z = k$ を代入して、

$$\phi(x) = \frac{\exp(\lambda(x-a))}{2\lambda}$$

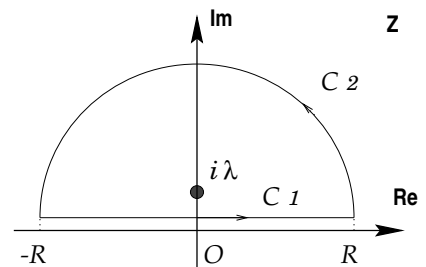
(iii) $x - a = 0$ のとき、微分方程式から $\phi(x)$ に連続性を要求されるため、

$$\phi(x) = \frac{\exp(0)}{2\lambda}$$

以上をまとめると、

$$\phi(x) = \frac{\exp(-\lambda|x-a|)}{2\lambda}$$

となる。



2. $\xi = x + vt$, $\zeta = x - vt$ とすると、

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial \zeta} \quad , \quad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \zeta}$$

となるから、

$$\left(\frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) = -4 \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \zeta}$$

なので、

$$(2) \iff \frac{\partial^2}{\partial \xi \partial \zeta} \psi = 0$$

よって、一般解は、

$$\psi = F(\xi) + G(\zeta) = F(x + vt) + G(x - vt)$$

となる。(3) より、

$$F(x) + G(x) = |x - 2n\pi| - \frac{\pi}{2}$$

(4) より、

$$vF'(x) - vG'(x) = 0$$

上の 2 式を解いて

$$F(x) = \frac{1}{2} \left(|x - 2n\pi| - \frac{\pi}{2} \right) + \text{Const} \quad , \quad G(x) = \frac{1}{2} \left(|x - 2n\pi| - \frac{\pi}{2} \right) - \text{Const}$$

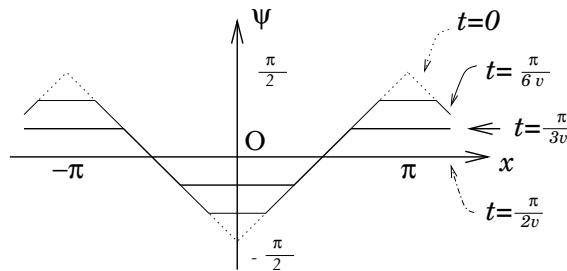
ただし、上の Const は同じ数値である。よって、

$$\psi(x, t) = \frac{1}{2} (|x + vt - 2n_+\pi| + |x - vt - 2n_-\pi| - \pi)$$

但し、 $(2n_+ - 1)\pi < x + vt < (2n_+ + 1)\pi, (2n_- - 1)\pi < x - vt < (2n_- + 1)\pi$ である。解の振る舞いは $0 < t < \frac{\pi}{2v}$ のとき、

$$\psi(x, t) = \begin{cases} -vt + \frac{\pi}{2} & (2n - 1)\pi \leq x < vt + (2n - 1)\pi \\ -(x - 2n\pi) - \frac{\pi}{2} & vt + (2n - 1)\pi \leq x < -vt + 2n\pi \\ vt - \frac{\pi}{2} & -vt + 2n\pi \leq x < vt + 2n\pi \\ (x - 2n\pi) - \frac{\pi}{2} & vt + 2n\pi \leq x < -vt + (2n + 1)\pi \\ -vt + \frac{\pi}{2} & -vt + (2n + 1)\pi \leq x < (2n + 1)\pi \end{cases}$$

図示すると、以下のようになる。



3. 2次元極座標 ($x = r \cos \theta, y = r \sin \theta$) を用いると、

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

となる。 $\psi(r, \theta) = R(r)\Theta(\theta)$ を仮定すると

$$(5) \iff \frac{1}{R} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 R(r) = -\frac{1}{\Theta(\theta)}$$

となるから、上式が恒等的に成り立つのは、両辺が定数であるときであり、それを m^2 とすると、

$$\frac{d^2}{d\theta^2} \Theta(\theta) = -m^2 \theta \quad , \quad \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 R(r) = m^2 R(r) \quad \dots (7)$$

$\Theta(\theta)$ について解く。両辺が m^2 のときの R, Θ の解をそれぞれ $R_m(r), \Theta_m(\theta)$ とすると、

$$\Theta_m(\theta) = A' \exp(im\theta) + B' \exp(-im\theta) = A \cos(m\theta + \delta_m)$$

となる。但し、 2π の周期性から、 m は実数であり (\cos で表され)、かつ、整数であり、 $m \geq 0$ としても、一般性を失わない。

$\ln r = \xi$ とおくと、 $r \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial \xi}$ なので、

$$R_m = A_m e^{-m\xi} + B_m e^{m\xi} = A_m r^{-m} + B_m r^m \quad (m \neq 0)$$

$$R_0 = A_0 + B_0 \xi = A_0 + B_0 \ln r$$

となる。 $\Theta(\theta)$ が完全系をなしているので、一般解は、

$$\psi(r, \theta) = \sum_{m=0}^{\infty} R_m(r)\Theta_m(\theta) = \sum_{m=1}^{\infty} (A_m r^{-m} + B_m r^m) \cos(m\theta + \delta_m) + A_0 + B_0 \ln r \quad \dots (8)$$

$$(6) \iff \psi(r = a, \theta) = \frac{1}{2}(1 + \cos 2\theta) \quad \dots (9)$$

(8),(9) を比較して、

$$A_0 + B_0 \ln a = \frac{1}{2} \quad , \quad A_2 a^{-2} + B_2 a^2 = \frac{1}{2} \quad , \quad A_m a^{-m} + B_m a^m = 0 \quad (m \neq 0, 2) \quad , \quad \delta_m = 0$$

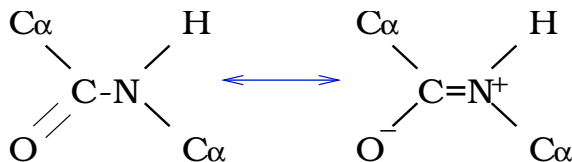
解の、 $r \rightarrow \infty$ における有界性より、 $B_m = 0$ を用いれば、

$$\psi(r, \theta) = \frac{1}{2} \left[1 + \left(\frac{a}{r} \right)^2 \cos 2\theta \right]$$

となる。

専攻 問題 8 解答

1. (i) ジペプチドの結晶に単一波長の X 線を当て、散乱される様子を写真で調べ、電子密度図を得、それから原子の立体的位置を決める。
- (ii) ペプチドは右図のような共鳴構造をとる。C-N が二重結合性をもつために、この結合を軸として回転することができず、CONH の 4 原子が一平面内にある。



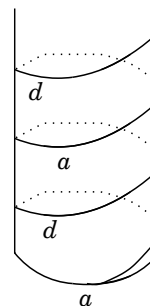
2. (i)

$$c = \frac{0.54[\text{nm}]}{0.15[\text{nm}]} = 3.6$$

- (ii) n 番目のアミノ酸のカルボニル酸素原子と $n+3$ 番目のアミノ酸残基の水素原子とで水素結合することで構造を安定化する。同じ電荷を持つ残基が少なければ（互いに異なる電荷をもつ残基が並べば）相互に反発しないので安定である。

- 3.

- (i) 疎水的アミノ酸残基が同じ側に並ぶのが特徴である。
- (ii) (i) で示した螺旋状の疎水性アミノ酸が 2 分子間で近接し、各々がねじれて巻き付くことでコイルドコイルを形成し安定化する。



専攻 問題 9 解答

1. (i) 1つの電子に注目すると、 $x < 0, L < x$ で $V = +\infty$ 、 $0 \leq x \leq L$ で $V = 0$ の井戸型ポテンシャルと考えて $0 \leq x \leq L$ のシュレディンガー方程式は

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = E\Psi(x)$$

$2mE/\hbar^2 = k^2$ とおくと、 $\Psi(0) = 0$ より $\Psi(x) = A \sin kx$ 。 $\Psi(L) = 0$ より $kL = n\pi$ ($n = 1, 2, \dots$)。よって、

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi n}{L}\right)^2 = \frac{h^2 n^2}{8mL^2} \quad (n = 1, 2, \dots)$$

$$\Psi(x) = A \sin \frac{n\pi}{L} x$$

係数 A は規格化条件より決める。

$$A^2 \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = A^2 \int_0^L \frac{1 - \cos \frac{2n\pi x}{L}}{2} dx = A^2 \frac{L}{2} = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

ポリエン鎖の中に 10 個の電子が詰まっている。 $n = 1$ 準位から順に電子を詰めていくと $n = 6$ が励起状態になる。よって励起状態の波動関数は

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{6\pi}{L} x$$

(ii) p 軌道

(iii) $E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$ より $n = 5$ から $n = 6$ への遷移のときに吸収されるエネルギーは

$$\frac{h^2}{8mL^2} (6^2 - 5^2) = h\frac{c}{\lambda} \implies \lambda = \frac{8mc}{h} L^2 \frac{1}{11} = \frac{8 \times 412 [\text{nm}^{-1}] \times (1 [\text{nm}^2])}{11} = 3.00 \times 10^2 [\text{nm}]$$

(iv) C=C の長さを a (但し、C-C も同じ程度として計算する。)、共役電子系の電子の電子数を n とすると、 $L \sim (n-1)a$ であり、HOMO は $n/2$ の準位で、LUMO は $n/2 + 1$ の準位であるから、

$$\lambda \sim \frac{8mc}{h} \frac{\{(n-1)a\}^2}{\{(n/2)+1\}^2 - (n/2)^2} = \frac{8mc}{h} a^2 \frac{(n-1)^2}{n+1} \sim 40.1 \times \frac{(n-1)^2}{n+1} [\text{nm}]$$

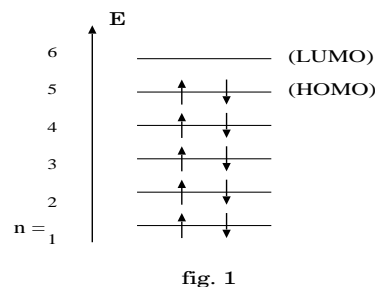
n が十分大きいならば、 $\lambda \propto n \propto L$ なので、A の鎖の部分が伸びればより長い波長の光を見られるようになるから、赤外線が見える程度まで伸びればよい。

[補足] 視物質は、色素タンパク質として、レチナールを含んでいる。レチナールは、それを取り囲むタンパク質オプシンのアミノ酸残基の一つであるリジン残基のアミノ酸と、シッフ残基で結合している。レチナールの吸収極大波長は、近紫外部の 370 [nm] 付近であるが、それがシッフ塩基結合を作り、その結合にプロトンが配位すると、吸収極大部は 400 [nm] に移る。視物質の色は、340 [nm] から、640 [nm] 付近にまでわたっている。これらの吸収極大波長は、一部に発色団の修飾によって、大部分はタンパク質オプシンの発色団近傍のアミノ酸残基の違いによって決まっていると考えられる。

2. 円周の長さは $L = 6 \times 0.14 = 0.84$ [nm]

この場合、シュレディンガー方程式は問題 1 と同じで境界条件を $\Psi(0) = \Psi(L)$ とする。すると $kL = 2\pi n$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$)

$$E = \frac{h^2 n^2}{2mL^2} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$



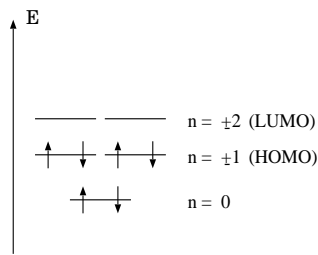


fig. 2

π 電子は 6 個あるので、 $n = 0$ のみが、一重縮退で、ほかの軌道は、2 重縮退していることに注意して、 $n = 0$ から順に電子を詰めていくと、 $n = \pm 2$ が励起状態である。

$$\frac{h^2}{2mL^2} \{(\pm 2)^2 - (\pm 1)^2\} = h \frac{c}{\lambda}$$

$$\therefore \lambda = \frac{2mc}{h} L^2 \frac{1}{3} = \frac{2 \times 412[\text{nm}^{-1}] \times 0.84[\text{nm}^2]}{3} = 1.9 \times 10^2[\text{nm}]$$

3. (i) まず fig.3,fig.4 より、無輻射遷移により振動の基底状態に遷移してから蛍光を発生することに注意する ([補足 1] 参照) と、スペクトルの数は、吸収、蛍光ともに 3 本であり、波長は図の符合を用いて、 $\omega < \nu < \omega' = \nu < \omega$ となる。

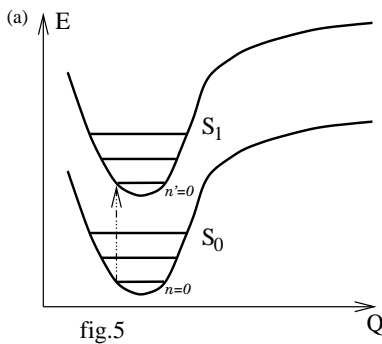


fig.5

fig.5 (Q は基準振動座標) のように励起状態のポテンシャル曲線が基底状態と似ており、平衡基準振動座標もほぼ同じである場合は、基底状態の振動準位を n 、励起状態の振動準位を n' とすれば、 $(n, n') = (0, 0)$ の波動関数の重なり積分が大きく、0-0 遷移が可能となるが、 $n' = 1, 2$ となるにつれて、波動関数の重なりが悪くなるため、強度が落ちる。

fig.6 のように励起状態の平衡基準振動座標が基底状態とずれている場合、波動関数の重なりは、 $(n, n') = (0, 1)$ が一番大きくなる。同様に、fig.7 のようなポテンシャル曲線のシフトも考えることもでき、強度についても、同じような考察ができる。

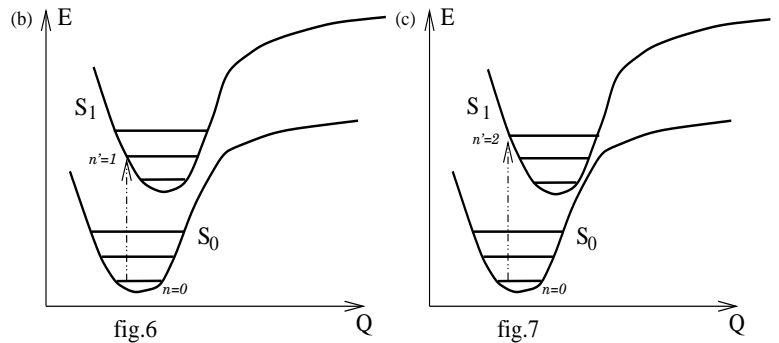


fig.6

fig.7

以上を、まとめると、下のようになる。振動数-強度の関係のグラフを書けば、吸収スペクトルが、蛍光スペクトルの鏡像関係にあることに、注意されたい。

[補足 1] 蛍光過程の時間 (アンサンブル平均としての寿命) は、今の場合、近紫外を考え、約 10^{-9} [s] である。第一励起状態の第一振動準位や第二振動励起準位から、発光しないわけではないが、振動緩和 (無輻射遷移) の時間が約 10^{-12} [s] であるため、振動緩和と発光が競争し、1000 個に 1 つの割合でしか発光しないことになる。そのため、事実上、第 0 振動準位のみ考えれば良い。

一方、『電子遷移の前後で分子は形を変えない』という Franck-Condon の原理があるが、この原理は、1 つの電子に注目し、その電子遷移が振動緩和時間に比べて速い (約 10^{-15} [s]) ということを根拠にしているので、蛍光過程の時間が振動の時間より長いことと矛盾しない。

[補足 2] 励起状態と基底状態のポテンシャル曲線が合同ならば、厳密にはシフトした調和振動子の波動関数 $(\psi_{\text{vib}}(\vec{r}))_{n'}$ $n' = 0, 1, 2$ について、 $n = 0$ との重なり積分 $(\int \{(\psi_{\text{vib}})_{n'}\}^* (\psi_{\text{vib}})_n d^3 r)$ を計算することによって、 Q のシフトに対して場合分けすべきであるが、ここでは、そこまで求められていないと考えられる。

- (ii) 有機溶媒に溶かすことで、溶質分子のと相互作用として、(1) 分散力、(2) 双極子間の静電的相互作用、(3) 水素結合、(4) 電子移動、等が考えられる。このため、すでに与えられた以外のエネルギー状態が多数生成されるため、吸収・蛍光スペクトルはともに、横に広がり、微細構造が消失して、より連続的なものになる。また、溶質-溶媒間の最安定化配置が、溶質分子が励起されることによって変化し、再配置 (R.T. で $10^{-12} \sim 10^{-10}$ [s]、蛍光寿命より小) が励起状態下で、行われることにより、ポテンシャルエネルギーの低下が生じるため、この意味では、スペクトルはその分、長波長側に寄ることになる。fig.5 の (a) を例にして図示すると、fig.11 の様になる。

(iii)

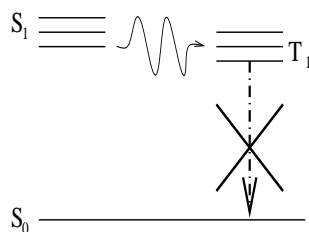


fig.12

金属の 3 重項励起状態 (fig.13) が S_1 の近くにあると、本来禁制である、1 重項 3 重項の遷移が容易に生じる。これを intersystem crossing という。(fig.12) いったん、これが起こると、基底状態は一重項状態であるから、 $T_1 \rightarrow S_0$ は禁制遷移であり、エネルギー差が十分あるので、蛍光が発生しない (無輻射遷移となるほか、稀に発光過程を行うものもある。)

したがって、この『intersystem crossing』に食われる分、蛍光強度は落ちる。

- 4. トリプトファンは蛋白質中の、アミノ酸において、最も強い蛍光を放つ。pH 11 で、最強度となり、励起波長が $287\mu\text{m}$ 、蛍光波長が $348\mu\text{m}$ である。酸性になるにつれ分解が進み、蛍光強度は落ちる。また、トリプトファンは疎水性である。

- (i) 蛋白質は溶媒の pH を減らしていくと、ある pH 周辺で急激に立体構造がくずれ、一次元のひも状となる。この現象をアンフォールディング (unfolding) という (俗に変性)。蛋白質は 3 次立体構造をとっているときは、親水部分を外に向け、疎水性であるトリプトファンは分子内部に詰め込まれる。それがため、構造内部のトリプトファンは、塩酸グアニジンの影響を受けていない。しかし、アンフォールディングにより、そういったトリプトファンが一斉に酸性にさらされる。そのため、急激にトリプトファン蛍光強度が落ちていたのである。
- (ii) 濃度 C_0 を超え、トリプトファンが溶媒中にあらわになると、それはトリプトファンが溶媒中にある状態となり 3(ii) で述べた影響を受ける。スペクトルは長波長側にシフトする。強度は酸性下のために、低下する。