

平成12年度東京大学大学院理学系研究科
物理学専攻修士課程入学試験問題

物 理 学

平成11年8月25日(水) 9時30分～13時30分

【注意事項】

1. 試験開始の合図があるまで、この問題冊子を開いてはならない。
2. 解答には、必ず黒色鉛筆(または黒色シャープペンシル)を使用すること。
3. 問題は全部で8問ある。8問から4問を選んで解答しなさい。
4. 答案用紙は各問につき1枚、合計4枚配布してあるから、確実に配布されていることを確かめること。
5. 各答案用紙の所定欄に科目名(物理学)、受験番号、氏名、問題番号を記入すること。
6. 解答は、各問ごとに所定の答案用紙を使用すること。
7. 答案用紙は点線より切り取られるから、裏面も使用する場合には、点線の上部を使用しないこと。
8. 答案用紙には解答に関係ない文字、記号、符号などを記入してはならない。
9. 解答できない場合でも、答案用紙に科目名・受験番号および氏名を記入して提出すること。
10. 答案用紙を計算用紙に絶対使用しないこと。計算用紙は別に配布する。

[問題 1]

図 1 の様な 1 次元ポテンシャル $V(x)$ すなわち

$$\begin{aligned} V(x) &= \infty && (|x| > d+a \text{ のとき}), \\ V(x) &= 0 && (d+a > |x| > d \text{ のとき}), \\ V(x) &= V_0 && (|x| < d \text{ のとき}), \end{aligned}$$

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 次元シュレー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

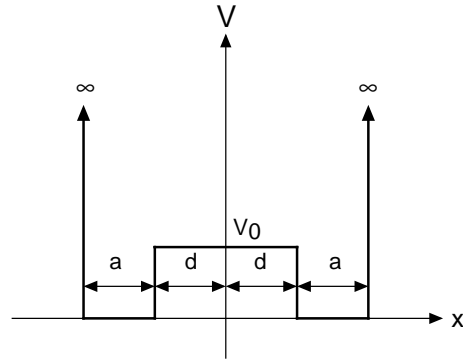


図 1

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

の固有関数 Ψ 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 \hbar 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、 $|\Psi_0\rangle$ や $|\Psi_1\rangle$ 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. $|\Psi_0\rangle$ と $|\Psi_1\rangle$ を $|R\rangle$ と $|L\rangle$ の 1 次結合であらわせ。
6. $|R\rangle$ と $|L\rangle$ を基底とする表現をとって、ハミルトニアンを 2 行 2 列の行列で表せ。
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 Δ を用いて表わし、得られた Δ 依存性の物理的意味を議論せよ。

[問題 2]

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 ω 、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

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho \qquad \nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \qquad (1)$$

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

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \qquad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \qquad (3)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \qquad \nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mu_0 \mathbf{j} \qquad (4)$$

と書かれる（左が C.G.S. 系、右が M.K.S. 系）。ここで \mathbf{E} は電場、 \mathbf{B} は磁束密度、 \mathbf{j} は電流密度、 ϵ_0 は真空の誘電率、 μ_0 は真空の透磁率をあらわす。必要ならば $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A}$ 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良い。

1. プラズマ中に誘起される電流密度 \mathbf{j} は、入射する電磁波の電場ベクトル \mathbf{E} と電気伝導度 σ を用い、 $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$ 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 σ を周波数 ω の関数として書け
2. k と ω の間の分散関係を求め電離層の屈折率 ($n \equiv ck/\omega$) を計算せよ。次に $\omega < \omega_p$ のとき電磁波は伝搬できないことを示し、その物理的意味を説明せよ。ここで ω_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 $\sqrt{ne^2/m\epsilon_0}$ で与えられる。

次に電磁波の伝搬方向に一定磁場 \mathbf{B}_0 がかったとする。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 $\mathbf{E} = E_0 e^{i(kz - \omega t)} \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} \pm i\hat{y})$ (\hat{x}, \hat{y} は各々 x 方向及び y 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 ω, ω_c の関数として書け。ここで ω_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 ω, ω_p 及び ω_c 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。

[問題 3]

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 $1/2$ のスピンの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 σ_i はスピンの向きに応じて $+1$ 又は -1 の値を取る変数で、 μ 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無いとして次の 1. から 3. の問いに答えよ

1. 1 格子点当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断ち、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 を求めよ。

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間に相互作用が働き、このため低温で強磁性や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 ($0 \leq H_f \leq H_i$)、結果を図示せよ。ただし $kT \gg \mu H \gg |J|\sqrt{z}$ と仮定する。

[問題 4]

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 ϵ_0 と同じとして、以下の問いに答えよ。

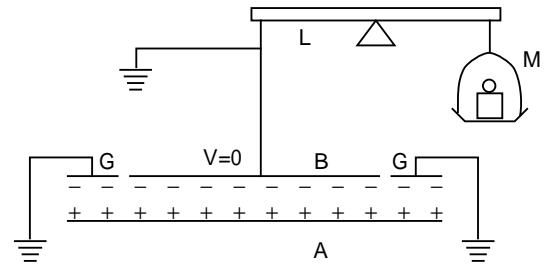


図 1

- (a) 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 ϵ_0 を測定するためにこの秤を用いた。)
- (b) 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 $Z_i (i = 1 \sim 3)$ を使い、ブリッジをバランスすることで Z_x 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。

- (a) 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。
- (b) 現実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_i には、直列に巻線抵抗 R_i 、並列に巻線間分布容量 C_i が存在する (図 2)。

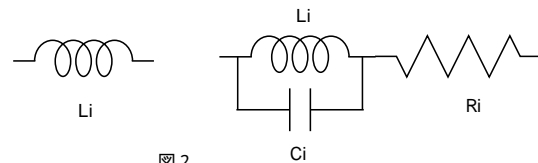


図 2

- (a) 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 $c = 3.0 \times 10^8$ [m/s]、素電荷 $e = 1.6 \times 10^{-19}$ [C]、Planck 定数 $h = 6.6 \times 10^{-34}$ [J·s]、Boltzman 定数 $k = 1.4 \times 10^{-23}$ [J/K] を使い、以下の問いに答えよ。

- (a) 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。

- (b) 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/m^2] は、 $I = \sigma T^4$ で与えられる。ここで $\sigma = 5.7 \times 10^{-8}$ [$\text{W}/\text{m}^2/\text{K}^4$] はシュテファンボルツマン定数である。今、太陽を温度 5.8×10^3 [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/m^2] を概算せよ。なお、太陽の半径は 7.0×10^8 [m]、太陽までの距離は 1.5×10^{11} [m] である。
- (c) 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。
- (d) よく晴れた日に (c) 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、(c) 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。

太陽輻射の単位面積あたりの光子数(地球の大気圏外、 $\Delta\nu=1\text{MHz}$)

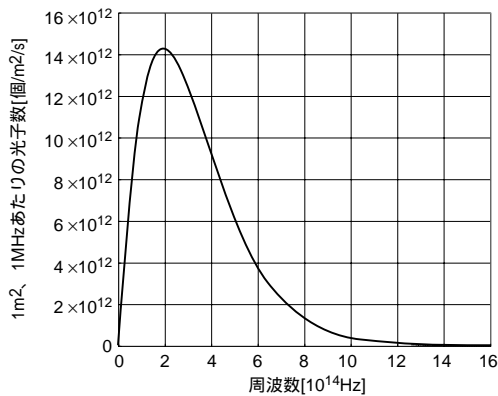


図 3

太陽電池の量子効率 (代表例)

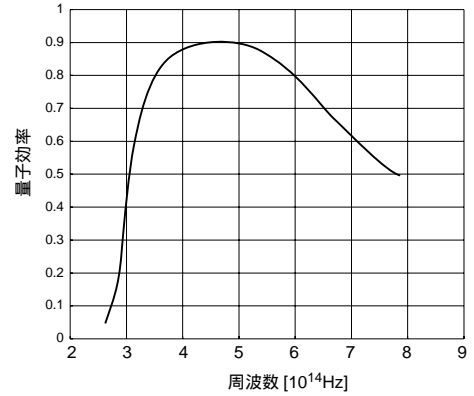
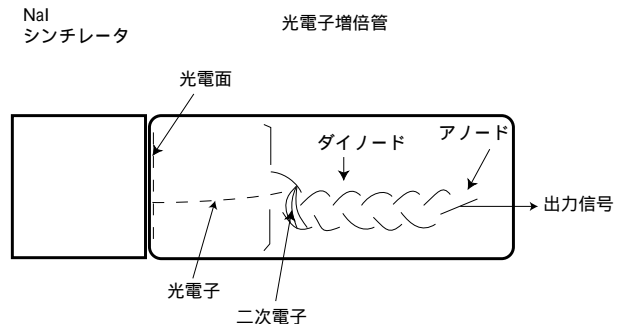


図 4

[問題 5]

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できる。

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^3 である)。NaI シンチレーターと光電子増倍管を組み合わせ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 kV の高電圧源が 1 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すればよいか、概略を示せ。
- NaI の前面から NaI の中心に向けてエネルギー 1 MeV 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。
- 今度は NaI の前面から NaI の中心に向けてエネルギー 1 MeV 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。
- NaI の前面に薄い鉛板を張り、板の厚さを変えながら、板を透過して 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) 1 MeV の電子が入射するとき、ii) 1 MeV のガンマ線が入射するとき、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。
- 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。
- 太陽からは、毎秒 1 cm^2 あたり 7×10^{10} 個のニュートリノが降り注いでいる。ニュートリノが 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 $5 \text{ cm} \times 5 \text{ cm} \times 5 \text{ cm}$ 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 $1 \times 10^{-45} \text{ cm}^2$ 、アボガドロ数は 6×10^{23} 、一年は約 3×10^7 秒とせよ。

[問題 6]

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もつとして、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なになるか求めよ。

6. 2 次元での周期ポテンシャル問題に戻り、(a) 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、(b) このとき、エネルギー・スペクトルは定性的にどのような特徴をもつか、(c) 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。

[問題 7]

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 100 kV 程度の電場で加速して用いる。
 - (a) この電子の波長 (λ) 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。
 - (b) 電子顕微鏡の分解能は 0.1 nm 程度であり、上で求めた電子の波長と桁が違ふ。光学顕微鏡で得られる分解能は 200 nm 程度であり、可視光の波長 (400 ~ 700 nm) 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。
 - (a) 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。
 - (b) 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。
 - (c) 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。
 - (a) 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。 $B = 1\text{T}$ の磁場中での電子スピンの共鳴周波数が約 28 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。
 - (b) 重水を溶媒として用いるのは何故か。
 - (c) 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。
 - (d) 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 0.1 nm 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。

[問題 8]

1. 1,1,1-トリクロロエタン分子 ($\text{CH}_3\text{-CCl}_3$) の C-C 単結合のまわりの内部回転を考える。CCl₃ 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。

- (a) 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 θ 、水素原子の質量を m とする。
- (b) CH₃ 基が C-C 軸周りに自由に回転しているとする。回転角を ϕ 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。
- (c) 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、 ϕ 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、CH₃ 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 ($\text{CH}_2\text{Cl-CH}_2\text{Cl}$) 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もつ 2 種類の回転異性体の混合物として理解できる。

- (d) 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。
- (e) 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-Cl 伸縮振動による吸収が、トランス型では 709 cm^{-1} の 1 本、ゴーシュ型では 675 cm^{-1} と 653 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および赤外線吸収のメカニズムをもとに説明せよ。
- (f) トランス型とゴーシュ型のエネルギー差 ΔE 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 $I_t(T)$ とゴーシュ型のバンドの強度 $I_g(T)$ を求めた。このデータから ΔE を求める方法を説明せよ。
- (g) (f) 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 cm^{-1} であることがわかった。C-C 結合の回転角を ϕ として、内部回転のポテンシャルエネルギー曲線を ϕ の関数としてグラフで示せ。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 ϕ に対応するかを書き入れよ。
- (h) 前問で示した ΔE 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 $c = 3 \times 10^8\text{ m/s}$ 、プランク定数 $h = 6.6 \times 10^{-34}\text{ J}\cdot\text{s}$ 、ボルツマン定数 $k = 1.4 \times 10^{-23}\text{ J/K}$ 、自然対数の底 $e = 2.7$ とする。