

平成9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8年8月28日（水）午前9時30分～午後1時30分

8問から4問を選んで解答しなさい。問題ごとに別の答案用紙を使用し、すべての答案用紙に氏名、受験番号、問題番号を記入しなさい。

## 問題 1

水素原子の中の陽子と電子の相対運動のシュレディンガー方程式は、相対座標を  $r$ , 換算質量を  $m$  とすると、cgs ガウス系を単位系に用いた場合、通常次の形に書かれる。

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

$$V = -e^2/r. \quad (2)$$

この固有エネルギー  $E_n$  と固有関数  $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$  は次のように求まる：

$$E_n = -\frac{R_y}{n^2} \quad (n = 1, 2, \dots), \quad \text{ただし } R_y \equiv \frac{me^4}{2\hbar^2} \text{ は Rydberg 定数,} \quad (3)$$

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (\ell = 0, 1, \dots, n-1; \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm \ell). \quad (4)$$

ここで、 $(r, \theta, \phi)$  は極座標、 $Y_{lm}(\theta, \phi)$  は規格化された球面調和関数であり、たとえば、 $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$  である。波動関数の動径部分  $R_{nl}(r)$  は、1s 状態 ( $n = 1, \ell = 0$ ), 2s 状態 ( $n = 2, \ell = 0$ ) および 2p 状態 ( $n = 2, \ell = 1$ ) についてはそれぞれ、

$$R_{10}(r) = \frac{2}{\sqrt{a^3}} \exp\left(-\frac{r}{a}\right), \quad (5)$$

$$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{8a^3}} \left(2 - \frac{r}{a}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a}\right), \quad (6)$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{24a^3}} r \exp\left(-\frac{r}{2a}\right), \quad (7)$$

で与えられる。ただし  $a \equiv \hbar^2/me^2$  は Bohr 半径である。

以上の知識を手がかりにして、以下の問いに答えよ。

1. 絶縁体に弱い光を当てると、電子と正孔のペアができる。絶縁体の中では、電子は電荷  $-e$  で質量が  $m_e$  の粒子のように、正孔は電荷  $+e$  で質量が  $m_h$  の粒子のようにふるまい、両者の間にはたらくポテンシャルは、絶縁体の (比) 誘電率を  $\epsilon$  (定数とする) として、

$$V = -\frac{e^2}{\epsilon r} \quad (8)$$

で与えられると仮定する。電子と正孔の束縛状態について、以下の問いに答えよ。

(i) 最も低いエネルギーをもつ束縛状態の束縛エネルギーを求めよ。

(ii) この束縛状態の空間的広がりの目安として、 $r$  の期待値  $\langle r \rangle$  を求めよ。

(問題1のつづき)

2. 電子が実際に感じるポテンシャルは、式(2)や式(8)から少しずれていることが分かっている。たとえば水素原子の場合、陽子のごく近くでは、電子・陽電子対が仮想的に生成・消滅している「雲」の内側に入るためにポテンシャルが修正される。それが何をもたらすかを大ざっぱにみるために、式(2)のポテンシャルを次のように修正してみよう。

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{r} - \lambda\delta^3(\mathbf{r}). \quad (9)$$

ただし、 $\lambda$ はある正の定数であり、 $\delta^3(\mathbf{r})$ は3次元のデルタ関数である。

(i)  $V$ の右辺第2項を摂動とみなし、摂動を受けた1s状態、2s状態、2p状態のエネルギーを、それぞれ $\lambda$ の一乗の精度で求めよ。

(ii) 摂動を受けた1s状態の電子について、電子を見いだす確率密度の $r=0$ における値が、 $\lambda=0$ の場合の何倍になっているかを求めよ。ただし、摂動計算に用いる非摂動状態としては、1s, 2s, 2p状態だけを考慮すれば良く、また、 $\lambda$ の一乗の精度までで良い。

(iii) この確率密度が $\lambda=0$ の場合に比べて増加しているか減少しているかを述べ、式(9)の形のポテンシャルがそのような確率密度の増加(あるいは減少)をもたらした理由を直感的に説明せよ。

3. 通常のクーロンポテンシャルで記述される系、式(1)-(7)に戻って、量子力学における確率の意味を考えよう。

時刻 $t=t_0$ に、電子を、1s状態と2s状態の次のような重ね合わせ状態に置く：

$$\psi(\mathbf{r}, t=t_0) = [\psi_{100}(\mathbf{r}) + \psi_{200}(\mathbf{r})] / \sqrt{2} \quad (10)$$

(i) この状態では確率密度 $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ が $t$ の周期関数になることを示し、その周期を求めよ。

(ii) 電子のエネルギーの期待値 $\langle E \rangle$ はいくらか? また、実際に電子のエネルギー $E$ を一度だけ測定した場合に、測定値として得られる可能性がある $E$ の値をすべて挙げ、その値が得られる確率を書け。

(iii) 一度目の測定を終了してから、もういちど式(10)の状態の電子を用意し、その $E$ を測定する。さらにもう一度式(10)の状態の電子を用意し、その $E$ を測定する、...、ということを繰り返して、全部で $N$ 回の測定を行うとする。 $i$ 番目( $i=1, 2, \dots, N$ )の測定で得た $E$ の測定値を $\varepsilon_i$ と記すと、通常、その平均値

$$\bar{\varepsilon}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varepsilon_i \quad (11)$$

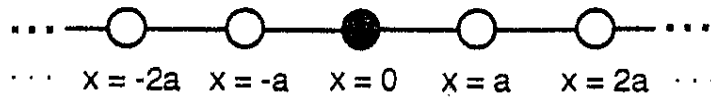
を「 $E$ の実験値」として、理論値と比較することになる。しかしながら、測定の回数 $N$ が有限である以上、 $\bar{\varepsilon}_N$ は一般には上で計算した $\langle E \rangle$ とは異なる。この、実験値 $\bar{\varepsilon}_N$ と理論値 $\langle E \rangle$ のずれを $\delta$ と記すことにする。その自乗期待値

$$\langle \delta^2 \rangle \equiv \langle (\bar{\varepsilon}_N - \langle E \rangle)^2 \rangle \quad (12)$$

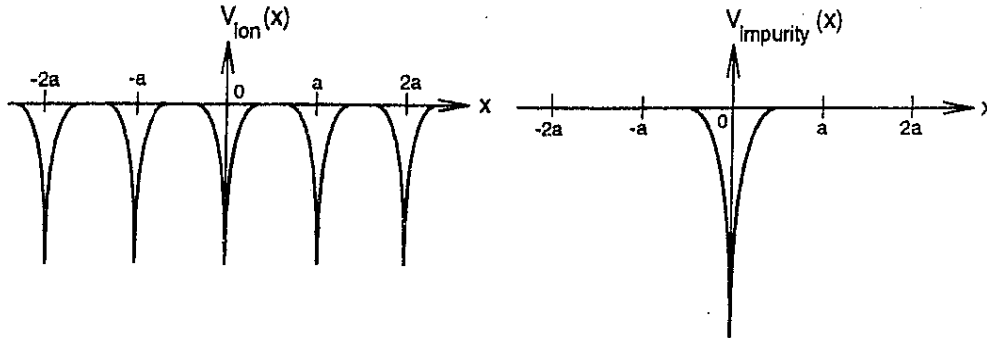
を求めよ。そして、無限回の測定を繰り返せば $\bar{\varepsilon}_N$ が $\langle E \rangle$ に一致すると期待できること、即ち、 $N \rightarrow \infty$ で $\langle \delta^2 \rangle \rightarrow 0$ となることを確かめよ。

## 問題 2

不純物による固体中の電子の束縛問題を考える。簡単のために、格子定数が  $a$  の一次元結晶とし、格子点は  $x = na$ ;  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  で、不純物は  $x = 0$  にあるとする。



完全結晶の場合に、格子点にあるイオンからのポテンシャルを  $V_{\text{ion}}(x)$  とし、 $x = 0$  にある不純物によるポテンシャル  $V_{\text{impurity}}(x)$  は  $V_{\text{ion}}(x)$  に  $\Delta V(x)$  が加わったものとする。  $V_{\text{ion}}(x)$  や  $V_{\text{impurity}}(x)$  の概略は下図のようであるが、本問では共にデルタ関数型に簡略化する。



1. まず、 $V_{\text{ion}}(x) \equiv 0$ 、すなわち、1次元の自由運動をする質量  $m$  の電子が  $\Delta V(x) = -\frac{\hbar^2}{m\lambda_0} \delta(x)$  によって束縛される問題を考える。ここで、 $\lambda_0 > 0$  とする。

(i) 束縛エネルギー  $E_0$  の電子の波動関数  $\phi_0(x)$  に対するシュレディンガー方程式を書き下せ。

(ii) この方程式にフーリエ変換

$$\phi_0(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-ikx} \phi_0(k), \quad (1)$$

を施し、 $k$ 空間でのシュレディンガー方程式が次のように書けることを示せ。

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \phi_0(k) - \frac{\hbar^2}{m\lambda_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk'}{2\pi} \phi_0(k') = E_0 \phi_0(k). \quad (2)$$

(iii)  $E_0$  を  $-\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$  と書くと、 $\phi_0(k)$  は

$$\phi_0(k) = \frac{C_0}{k^2 + \kappa^2}, \quad (3)$$

と書ける。ここで、定数  $C_0$  は

$$C_0 = \frac{2}{\lambda_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \phi_0(k), \quad (4)$$

である。式(3)と式(4)とを組み合わせると  $\kappa$  を求めよ。また、 $E_0$  を  $\lambda_0$  の関数として与えよ。

(iv)  $\phi_0(k)$  のフーリエ逆変換  $\phi_0(x)$  を  $\lambda_0$  をパラメータとして求めよ。そして、 $\phi_0(x)$  の概要を図示し、 $\lambda_0$  の物理的な意味を述べよ。なお、波動関数を規格化する必要はない。

2. 次に、 $\Delta V(x) \equiv 0$  の完全一次元結晶を考える。すなわち、 $\lambda > 0$  として、

$$V_{\text{ion}}(x) = -\frac{\hbar^2}{m\lambda} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na), \quad (5)$$

の場合に、1. に倣い、 $k$ 空間での電子の波動関数  $\phi(k)$  を使って固有値問題を解こう。

(問題 2 のつづき)

(i) エネルギー  $\epsilon$  の電子の  $\phi(k)$  を決めるシュレディンガー方程式は次のようになることを示せ.

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \phi(k) - \frac{\hbar^2}{m\lambda a} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi(k - \frac{2\pi}{a}n) = \epsilon \phi(k). \quad (6)$$

なお, 次のポアソンの和公式に注意せよ.

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{inx} = 2\pi \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - 2\pi n). \quad (7)$$

(ii)  $\epsilon = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$  と書くと,  $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$  を満たす任意の  $k$  や整数  $n$  に対して,

$$\phi(k - \frac{2\pi}{a}n) = \frac{C_k}{(k - \frac{2\pi}{a}n)^2 + \kappa^2}, \quad (8)$$

と書ける. ここで,  $k$  にはよるが,  $n$  にはよらない数  $C_k$  は

$$C_k = \frac{2}{\lambda a} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi(k - \frac{2\pi}{a}n), \quad (9)$$

である. これから,  $\kappa$  と  $k$  とは次の関係で結びつくことを示せ.

$$\cos(ak) = \cosh(a\kappa) - \frac{1}{\kappa\lambda} \sinh(a\kappa). \quad (10)$$

なお,  $u, v > 0$  として, 次の公式を使ってもよい.

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{v}{(n-u)^2 + v^2} = \pi \frac{\sinh(2\pi v)}{\cosh(2\pi v) - \cos(2\pi u)}. \quad (11)$$

(iii) 式(10) から,  $\lambda \ll a$  の場合,  $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$  の範囲の任意の  $k$  に対して,  $\kappa$  は近似的に

$$\kappa = \frac{1}{\lambda} [1 + 2e^{-a/\lambda} \cos(ak)], \quad (12)$$

のように与えられることを示せ.

(iv) 式(12) から,  $k$  の関数としてのエネルギーの固有値  $\epsilon_k$  (分散関係) が決められる.  $|k| \ll \frac{\pi}{a}$  の場合には, それは次の式に示すような自由電子の分散関係に類似した形を持つことを示せ.

$$\epsilon_k = \epsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (13)$$

このとき,  $\epsilon_0$  や電子の有効質量  $m^*$  はどのように与えられるか.

3. 最後に,  $\Delta V(x) \neq 0$  で  $V_{\text{ion}}(x) \neq 0$  の場合を考える. これまでのように,  $k$  空間でのシュレディンガー方程式から出発すると,  $x = 0$  にある不純物に捕らえられた電子の束縛エネルギー  $\bar{E}_0$  が一般的に求められる. しかし, これまでの結果をよく考察すれば, 次の2つの極限的な場合には  $\bar{E}_0$  の値は予測できる. その予想値を記し, そのように予測した理由を書け.

(i)  $\lambda \ll a$ , 且つ,  $\lambda_0 \ll a$  の場合.

(ii)  $\lambda \ll a \ll \lambda_0$  の場合.

### 問題 3

1. S 座標系と、それに対して x-軸方向に速度  $v$  で運動している S' 座標系との間のローレンツ変換は

$$\begin{aligned} ct' &= \frac{1}{\sqrt{1-(v/c)^2}} ct - \frac{v/c}{\sqrt{1-(v/c)^2}} x, \\ x' &= -\frac{v/c}{\sqrt{1-(v/c)^2}} ct + \frac{1}{\sqrt{1-(v/c)^2}} x, \\ y' &= y, \\ z' &= z \end{aligned}$$

である。ただし、二つの座標系は  $t = t' = 0$  で完全に重なっていたとする。c は光の速度である。数学的にはローレンツ変換は世界間隔

$$s_{12}^2 = -(ct_2 - ct_1)^2 + (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2$$

を不変にする座標変換である。次の3つの条件からローレンツ変換を導け。

- ・世界間隔が不変である。
- ・座標系の相対原理(等速運動している座標系は互いに同等である。)
- ・ $v/c \ll 1$  の極限で座標変換はガリレオの座標変換

$$\begin{aligned} t' &= t, \\ x' &= x - vt, \\ y' &= y, \\ z' &= z \end{aligned}$$

に一致する。

2. 光の速さに近い速度まで加速することができる電車が作られたとして以下の設問に答えよ。

(i) 速度  $v$  で走っている電車から振動数  $\nu_0$  の光がすべての方向に放射されている。電車の進行方向側の線路上に立っている観測者が観測する光の振動数  $\nu_1$  を求めよ。

また線路と直行している道路の無限遠方で観測したとき光の振動数  $\nu_2$  はいくらか?

(ii) 静止状態でこの電車の長さを測ると 500m であった。電車の進行方向に小さな山があり、そのトンネルの長さは 400m である。電車が光の速度の  $4/5$  の速さで等速運動しながらこのトンネルを通過した。

(次ページへつづく)

(問題3のつづき)

以下の問いに答えよ。

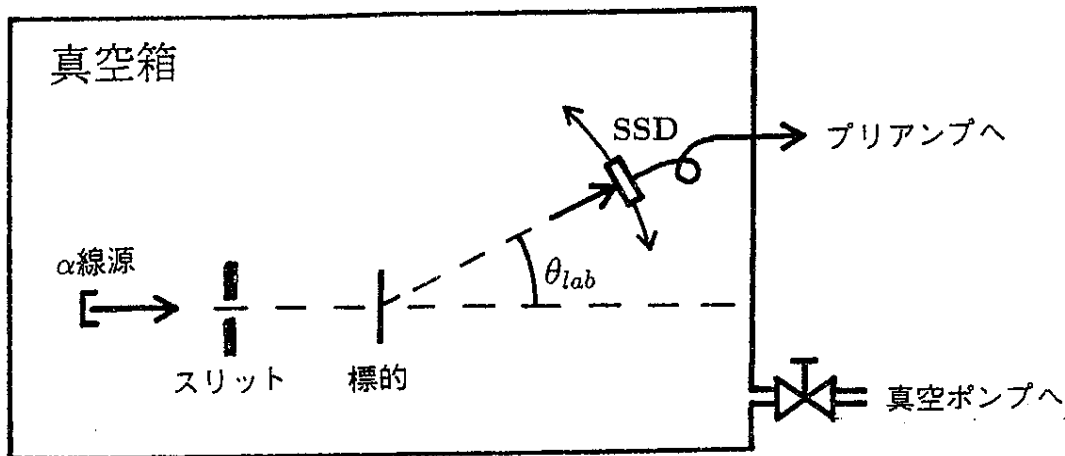
- a) 特殊相対論では自分の座標系に対して相対的に速度を持った物体の長さは短かく観測される。これはローレンツ短縮と呼ばれている。静止時の物体の長さ(固有長さ)が $l_0$ である物体が観測者の座標系でx-軸方向に速度 $v$ で等速運動している。観測者が測定する長さ $l$ を求めよ。
- b) 電車がトンネルに入り、また出て行くのを近くの丘の上でA君が観測することにした。A君は、「ローレンツ短縮の効果で、先頭から後尾まで電車のすべてが完全にトンネル内に入ってしまう、電車が見えなくなるようなことが起こるはずだ。」と考えた。地面に静止した座標系では電車の長さは何mと測定されるか?
- c) 逆に電車に乗っているB君は、「トンネルこそローレンツ短縮を受けて短くなるはずである。したがってどんな時刻においても、電車の先頭、後尾の少なくともどちらかはトンネル外にあるはずで、電車の全体がトンネル内にあるようなことは起こり得ない。」と考えた。B君から見たトンネルの長さはいくらか?
- d) 電車の後尾がトンネルに入る時刻を、A君の時計で $t_1$ 、B君の時計で $t'_1$ 、また先頭がトンネルから出てくる時刻をA君の時計で $t_2$ 、B君の時計で $t'_2$ として、A君とB君の考え方を比較検討し解説せよ。

## 問題 4

真空箱の中に、 $\alpha$ 線源のポロニウム ( $^{212}_{84}\text{Po}$ )、金 ( $^{197}_{79}\text{Au}$ ) の薄膜標的、スリット、シリコン半導体検出器 (SSD) を、模式図のように配置してラザフォード散乱の実験を行った。 $\alpha$ 粒子の運動エネルギーは、 $T_\alpha = 9 \text{ MeV}$ であった。以下の問いに答えよ。

簡単のために、標的の質量は $\alpha$ 粒子の質量にくらべて十分に大きく標的の反跳効果は無視できるものとする。なお、 $\alpha$ 粒子は、ヘリウムの原子核であり $^4_2\text{He}^{2+}$ である。また、質量数  $A$  の原子核の半径は、 $r = 1.2 \cdot A^{\frac{1}{3}} \times 10^{-15} \text{ m}$  で与えられる。必要に応じて、次の数値を参照せよ。

$$\begin{aligned} \hbar c &= 200 \times 10^{-15} \text{ MeV} \cdot \text{m}, & \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} &= \frac{1}{137} \\ 4^{\frac{1}{3}} &= 1.6, & 197^{\frac{1}{3}} &= 5.8, & 212^{\frac{1}{3}} &= 6.0 \\ N_A (\text{アボガドロ数}) &= 6 \times 10^{23} \text{ 個/モル} \end{aligned}$$



- 1 実験を真空中で行う理由を 1 行以内で述べよ。
- 2  $^{212}_{84}\text{Po}$  は、 $\alpha$ 崩壊を起こし鉛 $^{208}_{82}\text{Pb}$ に変換する。鉛の核表面における $\alpha$ 粒子に対するクーロン障壁の大きさを MeV 単位で求め、 $\alpha$ 崩壊のメカニズムを定性的に述べよ。
- 3  $\alpha$ 粒子が、前方 (例えば  $30^\circ$ ) と後方 (例えば  $150^\circ$ ) に散乱したときのそれぞれの軌道を、衝突径数  $b$  や最近接距離  $b_0$  などの大小関係が判るように、一つの図の中に描け。ただし、散乱過程は古典力学的に取り扱うことができ、古典的軌道を描くことができるとする。また、軌道と  $b$  や  $b_0$  の関係式や具体的な値を求める必要はなく、定性的なことが判るように図示されていれば十分である。
- 4 標的にスリットを通過して入射する $\alpha$ 粒子数を  $I$  [個/秒]、金の原子数を  $N$  [個/ $\text{m}^2$ ]、検出器の立体角を  $\Delta\Omega$  [sr]、微分散乱断面積を  $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R$  [ $\text{m}^2/\text{sr}$ ] とする。
  - (i) 計数率  $Y$  [個/秒] を求める式を書き下せ。
  - (ii) 金薄膜の厚さは  $1 \text{ g}/\text{m}^2$  である。金の原子数を  $\text{m}^{-2}$  の単位で求めよ。

(次ページへつづく)



(問題 4 のつづき)

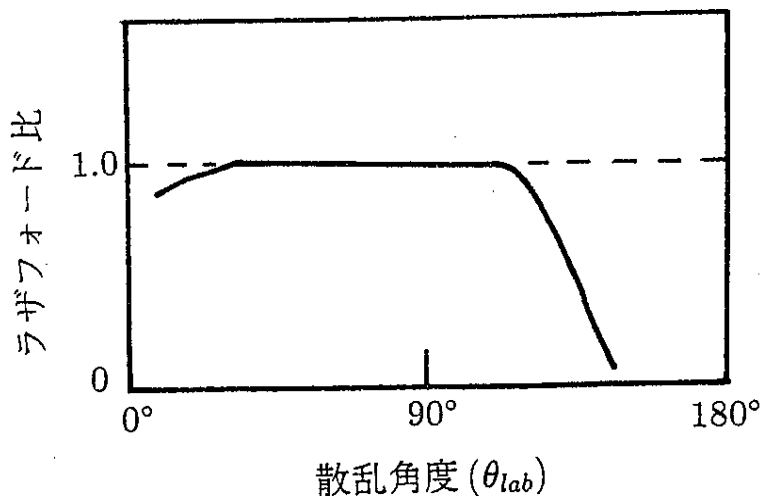
- (iii) 標的から検出器までの距離は 0.2 m, また検出器の有感面積は  $4 \times 10^{-4} \text{m}^2$  であった。立体角を求めよ。
- (iv)  $I$  が  $10^8$  個/秒のときに、散乱角度  $60^\circ$  に散乱した  $\alpha$  粒子を検出し、1% の統計精度の個数になるまで計数したい。これに必要な測定時間を求めよ。但し、 $\alpha$  粒子の検出効率を 100% とする。

ここで、点電荷 ( $Z_A$ ) によるラザフォード散乱は式

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R = \left(\frac{2Z_A e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{1}{T_\alpha^2 \cdot \sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

で与えられる。

- 5 金の原子は 79 個の電子を持っているが、この電子がラザフォード散乱の角度分布に与える影響を議論せよ。
- 6 標的をアルミニウム ( $^{27}_{13}\text{Al}$ ) の薄膜に変えて測定を行ったところ、下図の結果を得た。ここで、横軸は散乱角度 ( $\theta_{lab}$ )、縦軸はラザフォード比と呼ばれる量であり、測定で得た微分散乱断面積  $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{exp}$  をラザフォード散乱で予想される微分散乱断面積  $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R$  で規格化したものである。
- (i) 大きな散乱角度から小さな散乱角度に向かって測定を行ったところ、ラザフォード比の値がだんだんと 1 からずれて小さくなった。
- (a) この原因として考えられることを、検出器の計数効率を考慮して簡潔に推論せよ。
- (b) その様なことが起こらないようにする実験的工夫を述べよ。
- (ii) 最近接距離  $b_0$  が原子核の半径程度になると、原子核反応を引き起こす。図のなかのどこにその様なことが現われているか。簡潔に説明せよ。



## 問題 5

結晶中の各原子（単位体積あたりの個数を  $n$  とする）に 1 個ずつ電子が存在し、隣り合った原子の間で電子が弱く相互作用している系がある。ある温度  $T = T_t$  で、この系は 1 次相転移を示し、 $T \geq T_t$  の相（高温相）では、各原子に 1 個ずつ捕えられた相互作用のない電子からなる系と同じ比熱と帯磁率を示した。 $T \leq T_t$  の相（低温相）では、弱い原子間の相互作用が擾動となり電子がある小さな確率で原子間をとび移るために、比熱、帯磁率は縮んだ自由電子ガスと同じ温度依存性を示した。しかし、その比熱の絶対値は、自由電子ガスの比熱の表式において、自由電子の質量  $m_e$  をより大きな値  $m^*$ （有効質量と呼ぶ）に置き換えたもので表わされた。十分低温のため、格子比熱、各相での熱膨張は無視できるものとして、次の問に答えよ。

1. 高温相の単位体積あたりの帯磁率、磁場中での比熱を求めよ。磁場  $\vec{H}$  と電子の相互作用を表わすハミルトニアンは、

$$\mathcal{H}_Z = \sum_i 2\mu_B \vec{H} \cdot \vec{S}_i \quad (1)$$

で与えられるとする。ここで、 $\mu_B \equiv e\hbar/2m_e c$  は電子のボーア磁子、 $\vec{S}_i$  は電子  $i$  のスピン演算子を表わす。

2. 低温相の単位体積あたりの比熱は、温度  $T$  の最低次までで、

$$c_p = \frac{k_B^2 m^*}{3\hbar^2} \left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{\frac{1}{3}} T \quad (2)$$

と与えられた ( $k_B$ : ボルツマン定数)。式 (2) が温度に比例する理由を、有限温度のフェルミ分布関数を用いて定性的に説明せよ。

以下では、簡単のため 1., 2. で求めた両相の比熱の表式が転移点  $T_t$  近傍まで使えるものとし、磁場はかかっていないものとする。

3. 上記の 1 次転移が起こるには、エントロピーの考察から、有効質量  $m^*$  と相転移温度  $T_t$  がどのような条件を満たさなければならないか？

4. 今、この電子系に圧力  $P$  をかけたところ、相転移温度  $T_t$  が上昇し、低温相の比熱より求まる有効質量  $m^*$  が減少した (図参照)。有効質量および相転移温度の圧力依存性は、 $m_0^*$ 、 $T_{t0}$  を  $P = 0$  での有効質量、転移温度として、

$$m^* = m_0^*(1 + aP)^{-1} \quad (3)$$

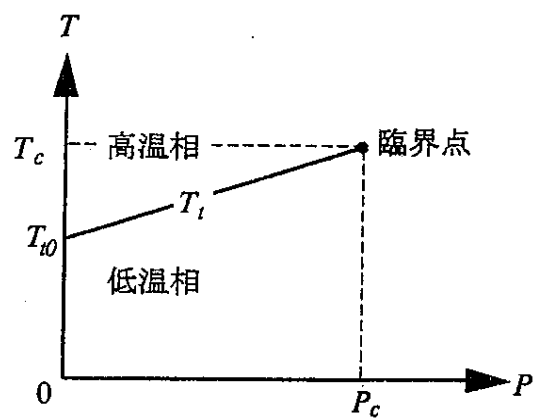
$$T_t = T_{t0}(1 + bP) \quad (4)$$

( $a > 0, b > 0$ ) の実験式で与えられた。ある圧力  $P = P_c$  (臨界圧力) 以上で 1 次転移が消失するのは、 $a, b$  がどのような条件を満たす場合か？

5.  $P_c$ 、および転移の消失する温度  $T = T_c$  (臨界温度) を、 $a, b, m_0^*, T_{t0}$  を用いて表わせ。

(次ページへつづく)

(問題5のつづき)



## 問題 6

一様密度  $\rho_0$  で非圧縮性の液滴を考えよう。液滴は、ある初期条件のもとでその内部に渦の無い流れを生じ、時間とともに形を変えていくものとする。

1. 液滴内部の速度分布を  $\vec{v}(\vec{r}, t)$  として、以下の問いの答えよ。

(i) 連続の方程式を用いて、非圧縮性の条件を  $\vec{v}(\vec{r}, t)$  に対する式として表せ。

また、流れに渦が無いときには、 $\vec{v} = -\text{grad } \chi$  となる速度ポテンシャル  $\chi(\vec{r}, t)$  が存在してラプラスの方程式

$$\Delta \chi(\vec{r}, t) = 0$$

を満たすことを示せ。

(ii) 上式の解は

$$\chi(\vec{r}, t) = \sum_{\ell m} a_{\ell m}(t) f_{\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$$

と書ける。このとき、動径関数は

$$\left\{ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right\} f_{\ell}(r) = 0$$

に従う。この方程式の液滴内部で正則な解は  $f_{\ell}(r) = r^{\ell}$  であることを示せ。

その際、他の独立解は原点 ( $r=0$ ) で正則でないことを確かめよ。

2. 液滴の重心から  $(\theta, \varphi)$  方向を見たとき、表面までの距離が

$$R(\theta, \varphi, t) = R_0 + q(t) Y_{20}(\theta, \varphi)$$

と変動する場合を考える。以下では、変動の大きさ  $|q(t)|$  が  $R_0$  に比べて十分に小さいものとする。

(i) 液滴表面までの距離は、内部から表面へ向かって液体が流れることによって変化する。そこで、

$$\frac{\partial}{\partial t} R(\theta, \varphi, t) = - \frac{\partial}{\partial r} \chi(r, \theta, \varphi, t) \Big|_{r=R}$$

の関係が成り立つとして、速度ポテンシャル  $\chi(\vec{r}, t)$  を  $\dot{q}(t)$  ( $\equiv \frac{dq}{dt}$ ) を用いて表せ。ただし、変形は微小なので、右辺で  $r=R$  を  $r=R_0$  と近似して良いものとする。

(次ページへつづく)

(問題 6 のつづき)

(ii) 液滴内部の速度分布  $(v_x, v_y, v_z)$  を、 $Y_{20}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1)$  を使って求めよ。  
次に、液滴内部の全運動エネルギーを計算せよ。ただし、積分は、変形が小さいとして、半径  $R_0$  の球内で行えば良い。

(iii) 体積を保存した上記の変形に伴い、液滴の表面積は球形のときより  $2q^2(t)$  だけ増加することが知られている。液滴の表面張力を  $\sigma$  として、変形によるポテンシャル・エネルギーの変化を求めよ。

3. ここで、量子的サイズの液滴の運動を考えよう。

(i) 上記 2 の液滴の変形に伴うハミルトニアンは、お互いに正準共役な演算子  $\hat{q}$ 、 $\hat{p}$  を用いて

$$\hat{H} = \frac{1}{2M}(\hat{p}^2 + (M\omega\hat{q})^2)$$

と表される。ここで、

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}(\hat{a}^+ + \hat{a}), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar M\omega}{2}}(\hat{a}^+ - \hat{a})$$

の関係にある演算子  $\hat{a}^+$  および  $\hat{a}$  (交換関係は  $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$ ) を導入すれば、そのハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2})$$

と書ける。 $M$  および  $\omega$  を  $\rho_0, R_0, \sigma$  を用いて表せ。

(ii) ハイゼンベルク表示の演算子  $\hat{a}_H(t) \equiv e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{a}e^{-i\hat{H}t/\hbar}$  の運動方程式を考えて、

$$\hat{a}_H(t) = e^{-i\omega t}\hat{a}$$

が成り立つことを示せ。

(iii) 演算子  $\hat{a}$  の固有状態  $|z_0\rangle$ ;

$$\hat{a}|z_0\rangle = z_0|z_0\rangle, \quad z_0 = i\sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}}A_0$$

を考える。 $A_0$  は実定数で、 $R_0$  に比べれば十分に小さい値であるとする。

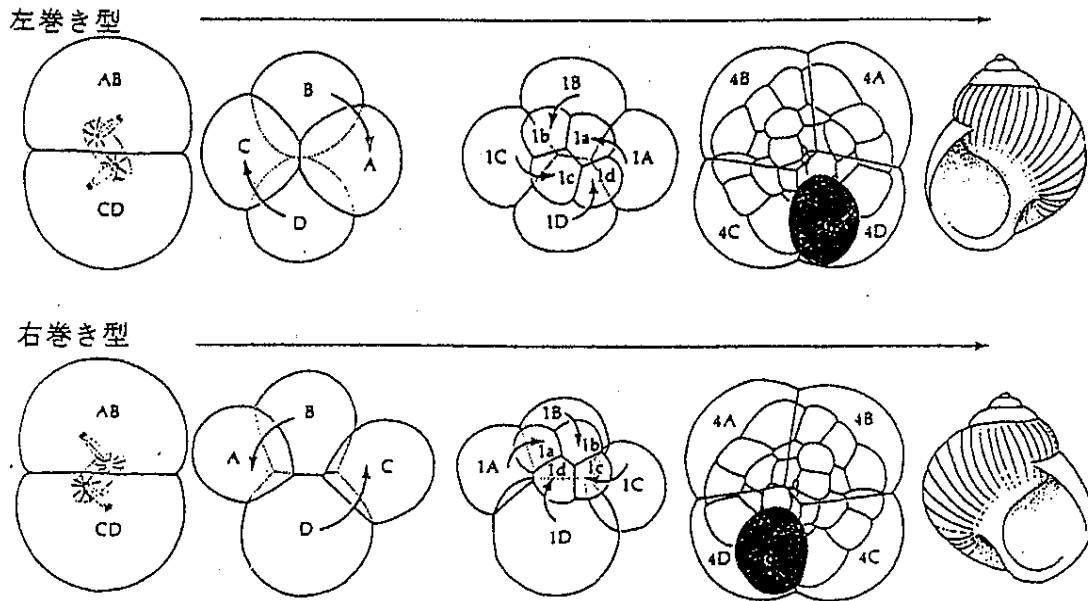
この  $|z_0\rangle$  を初期状態とする状態  $|\psi(t)\rangle (= e^{-i\hat{H}t/\hbar}|z_0\rangle)$  は、任意の時刻においてもやはり  $\hat{a}$  の固有状態であることを示せ。また、その固有値  $z(t)$  を求めよ。

(iv) 状態  $|\psi(t)\rangle$  における  $\hat{q}$  および  $\hat{p}$  の期待値を求め、 $A_0$  が何を意味するかについて述べよ。また、 $A_0 \rightarrow 0$  のとき、エネルギーの値がどうなるかを答えよ。

## 問題 7

生物の身体はしばしば左右非対称性を示す。見かけ上対称な受精卵から発生する個体が非対称となる分子機構はまだほとんど理解されていない。しかし、ある巻き貝 (*Limnaea*) が右巻き型になるか左巻き型になるかは一つの遺伝子の2種の対立遺伝子 (S:左巻き型、s:右巻き型) で決まることが知られている。下に説明する 実験(1) と実験(2) の結論をよく読んで、下記の3つの間に答えなさい。

実験(1) 右巻き型と左巻き型の発生における左右非対称性は、下図に描かれているように、第2回目の細胞分裂に始まり、それ以後の発生は鏡像対称的に進行する。第2分裂の頃にはまだ受精卵の染色体からのメッセンジャーRNA (mRNA) の合成は全く行われていない。(図中のABCなどは分裂した細胞につけられた名前である)



### 実験(2)

- 1) 純系右巻き (s/s) の雄個体と純系左巻き (S/S) 雌個体との交配をしたら、その第1世代 (F1) は全個体が左巻きであった。
- 2) その F1 雌雄を交配してできた第2世代 (F2) は全個体が左巻きであった。
- 3) その F2 雌雄を交配してできた第3世代 (F3) には右巻きと左巻きの個体が混在し、その比はおおよそ 3 : 1 であった。

1. 実験(2) の結果は、明確な遺伝現象ではあるがメンデルの法則にはあわない変則的なもののように見える。しかし実験(1) の結果を加味して考えると、メンデルの法則で完全に理解できることを説明せよ。

2. 実験(2) とは逆に、純系左巻き (S/S) 雄と純系右巻き (s/s) 雌とを交配した場合、その F1、F2、F3 個体の巻き方はどのようになるかを推論しなさい。

3. 非対称性生成の分子機構を明らかにするためには、この遺伝子の産物 (メッセンジャーRNA および蛋白質) についてどのような研究をするべきかを箇条書きにして論じ、S 遺伝子産物の働きについてどのような可能性があるかを論じなさい。

## 問題 8

- i) 蛋白質は熱や酸によりこわれた天然状態から変性状態に変る。この構造変化について蛋白質の熱力学を考えよう。

蛋白質の安定性は上記2つの状態の自由エネルギー差を用いて議論され、通常記号  $\Delta G^u$  ( $G^{**} - G^{**}$ ) で表される。 $\Delta G^u$ は熱の出入りを表すエンタルピー  $\Delta H^u$  と分子の無秩序を表すエントロピー  $\Delta S^u$  の2項を用いて次の式で表現される。

$$\Delta G^u = \Delta H^u - T\Delta S^u \quad (1)$$

ところで  $\Delta H^u$ ,  $\Delta S^u$  の温度依存性は以下のようにカロリメトリ測定より求まる。

$$\Delta H^u = \Delta H_m + \int_{T_m}^T \Delta C_p dT = \boxed{\text{a}} \quad (2)$$

$$\Delta S^u = \frac{\Delta H_m}{T_m} + \int_{T_m}^T \Delta C_p d(\ln T) = \boxed{\text{b}} \quad (3)$$

ここで  $T_m$  と  $\Delta H_m$  は変性中点の温度 (変性温度) と変性の潜熱である。また  $\Delta C_p$  は2つの状態の比熱の差で温度によらない定数とする。(1), (2), (3) 式より  $\Delta G^u$  の温度依存性は最終的に下の式で与えられる。

$$\Delta G^u = \boxed{\text{c}}$$

- ii) 蛋白質の一つであるリゾチームのカロリメトリ測定から pH7 で以下の値が得られた。

$\Delta H_m = 100 \text{ kcal/mol}$ ,  $\Delta C_p = 2.3 \text{ kcal/mol} \cdot \text{K}$ ,  $T_m = 57^\circ\text{C}$ 。この値をもとに  $\Delta G^u$ ,  $\Delta H^u$ ,  $\Delta S^u$  の温度変化を図示せよ。この図よりリゾチームの最安定状態の温度  $\boxed{\text{d}}$  を導け。またこの温度で  $\Delta S^u = 0$  となることを導け。

- iii) 物質は低温で安定だが、蛋白質は高温のみならず低温で不安定となる (低温変性)。この理由について考察しよう。

$\Delta G^u$ ,  $\Delta H^u$ ,  $\Delta S^u$  は無水状態 (真空中) の純粋に蛋白質構造の寄与 (添字を c で表す) と蛋白質と水との相互作用の項 (水和エネルギー, 添字を h で表す) の2項に分解される。

$$\Delta G^u = \Delta G_c^u + \Delta G_h^u \quad (4)$$

$$\Delta H^u = \Delta H_c^u + \Delta H_h^u \quad (5)$$

$$\Delta S^u = \Delta S_c^u + \Delta S_h^u \quad (6)$$

このうち蛋白質構造由来の項  $\Delta H_c^u$ ,  $\Delta S_c^u$  の温度依存性は小さい。この値を一定と考えると、 $\Delta G_c^u = 0$  となる温度、すなわち真空中の変性温度は一点で定まり、低温変性はいりえない。たとえば  $\Delta H_c^u = 870 \text{ kcal/mol}$ ,  $\Delta S_c^u = 1700 \text{ cal/mol} \cdot \text{K}$  のとき真空中の変性温度は  $\boxed{\text{e}}$  と見積もられる。水中では ii) の問題に見られるように  $\Delta G^u = 0$  となる点が2つある。従ってこれは  $\Delta H_c^u$ ,  $\Delta S_c^u$  ではなく  $\Delta H_h^u$ ,  $\Delta S_h^u$  の水和エネルギーにその起源があると考えなければならない。

(次ページへつづく)

(問題 8 のつづき)

iv) 水との相互作用エネルギー (水和エネルギー) は以下で与えられる。

$$\Delta H_h^u = \Delta H_h^u(T_0) + \int_{T_0}^T \Delta C_p dT \quad (7)$$

$$\Delta S_h^u = \Delta S_h^u(T_0) + \int_{T_0}^T \Delta C_p d(\ln T) \quad (8)$$

ここでは  $T_0$  は基準温度、たとえば  $25^\circ\text{C}$ 。

$$\Delta H_h^u(T_0) = h_1(A_1^D - A_1^N) + h_2(A_2^D - A_2^N) \quad (9)$$

$$\Delta S_h^u(T_0) = s_1(A_1^D - A_1^N) + s_2(A_2^D - A_2^N) \quad (10)$$

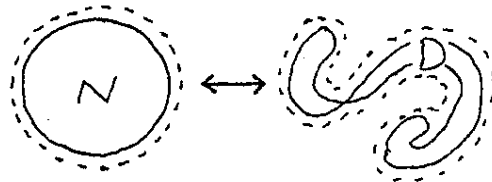
$$\Delta G_h^u(T_0) = g_1(A_1^D - A_1^N) + g_2(A_2^D - A_2^N) \quad (11)$$

ここで  $h_1, s_1, g_1$  は極性基のそして  $h_2, s_2, g_2$  は非極性基の水和の熱力学パラメーターである。 $A_1^D, A_1^N$  はそれぞれ水と接する極性基の変性状態と天然状態における総数である。非極性基も同様に定義する。

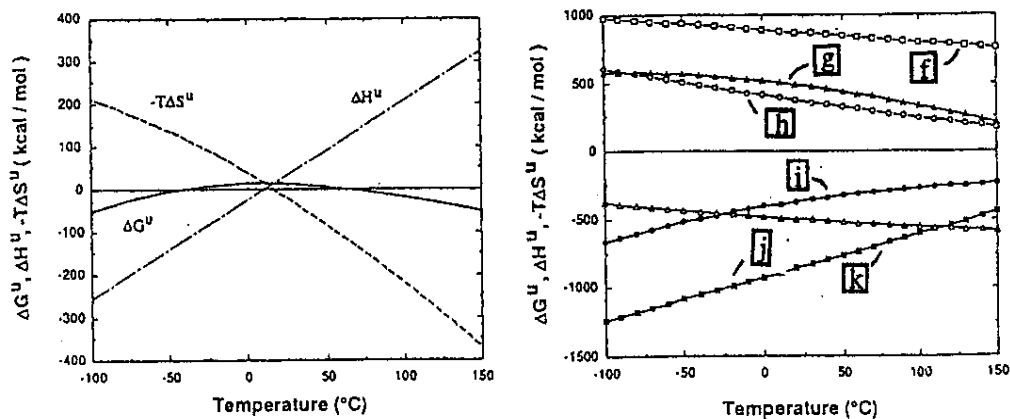
水和の熱力学パラメーターは表のように与えられる。

水和の熱力学パラメーター			
	h	s	g
基	(kcal/mol)	(cal/mol · K)	(kcal/mol)
極性基	-20	-40	-8
非極性基	-13	-40	-1

水和量変化の模式図



(9) ~ (11) 式と上表を用いると水和に伴う、各熱力学量は蛋白質の構造変化 (上図参照) が分かると自動的に求まる。まず  $\Delta H_h^u(T_0), \Delta S_h^u(T_0)$  が求まる。次に実験量  $\Delta C_p$  を用いて (7), (8) より温度変化がわかる。その結果が次の図に与えられている。



式 (4) ~ (6) の右辺に表れた 6 個の熱力学量が上の右の図の中の曲線のどれに対応するか示せ。但し上図では  $\Delta S_c^u, \Delta S_h^u$  は  $-T\Delta S_c^u, -T\Delta S_h^u$  の形で表示されている。

v) 以上の考察から低温変性の起源について論ぜよ。