［専門科目（物理学)］（全２題）

［問題 1］以下の文章を読み，問 A～E に答えよ．$\hbar$は，Planck 定数hを用いて$\hbar = h/(2\pi)$と表される．解答用紙には導出過程も記述すること．

ポテンシャル$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ のもとで一次元運動する質量mの粒子の固有状態$\phi(x)$を考える．系のハミルトニアンは

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}kx^2 \tag{1}$$

で与えられ，最もエネルギーの低い状態（基底状態）は Gauss 関数を用いて

$$\phi_0(x) = C_0 \exp[-\alpha x^2] \tag{2}$$

の形で表される．時間に依存しない Schrödinger 方程式から $\alpha = \boxed{\quad ア \quad}$ と基底状態エネルギー $E_0 = \boxed{\quad イ \quad}$ が求まる．また規格化条件から $C_0 = \left(\sqrt{mk}/(\pi\hbar)\right)^{1/4}$ である．

粒子が電荷Qをもつ場合を考える．一様電場$\mathcal{E}$のもとでのハミルトニアンは

$$H_{\mathcal{E}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}kx^2 - Q\mathcal{E}x \tag{3}$$

と表される．このときの基底状態も $\phi_{\mathcal{E},0}(x) = \boxed{\quad ウ \quad}$ のように Gauss 関数を用いて表され，そのエネルギーは$E_{\mathcal{E},0} = \boxed{\quad エ \quad}$ である．

次に，ポテンシャル$V'(x,y) = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}k'y^2 + \lambda xy$ のもとで二次元運動する質量mの粒子の固有状態を考える．ハミルトニアンH'は次式により与えられる．

$$H' = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}k'y^2 + \lambda xy \tag{4}$$

$\lambda = 0$の場合，H'は座標xまたはyのみを含む項に分けられるから，基底状態とそのエネルギーはそれぞれ，$\phi'_0(x,y) = \boxed{\quad オ \quad}$，$E'_0 = \boxed{\quad カ \quad}$ と求まる．$\lambda \neq 0$の場合については，適切な2×2の直交行列$\mathbf{U}$を用いた座標変換 $\begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \mathbf{U}^{\mathrm{T}} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$により新たな座標$X, Y$を用いて書き直すことで①<u>$V'(x,y)$は$X$または$Y$のみを含む項に分けることができる</u>．ただし二次形式$V'(x,y)$は非負の関数とし，行列$\mathbf{U}^{\mathrm{T}}$は

Uの転置行列を表す.

問 A　空欄 $\boxed{\text{ア}}$, $\boxed{\text{イ}}$ に入る適切な数式を m, kを用いて答えよ.

問 B　空欄 $\boxed{\text{ウ}}$, $\boxed{\text{エ}}$ に入る適切な数式を m, k, Q, $\mathcal{E}$を用いて答えよ.

問 C　空欄 $\boxed{\text{オ}}$, $\boxed{\text{カ}}$ に入る適切な数式を m, k, k'を用いて答えよ.

問 D　下線部①のような表式を与える適切な直交行列 **U**を求めよ．ただし，$k' = 2k$，$\lambda = \frac{\sqrt{3}}{2}k$ とする.

問 E　問 D について，その基底状態のエネルギー E_0''を m, kを用いて表せ．ただし，次式が成り立つことを用いてよい.

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2}$$

［問題２］以下の文章を読み，問 A～G に答えよ．解答用紙には導出過程も記述すること．

DNA の二重鎖の解離に関して，図に示す一次元の簡単なモデルを考察する．DNA は N 個の塩基対により二重鎖を形成する．塩基対の解離は必ず端から起きるとし，左端及び右端からの解離数をそれぞれ n_{L} $(n_{\mathrm{L}} \geq 0)$ 及び n_{R} $(n_{\mathrm{R}} \geq 0)$ とする．また解離した塩基対の総数を n $(n = n_{\mathrm{L}} + n_{\mathrm{R}})$ とする．一つの塩基対の解離に伴い，対の種類によらず塩基対形成エネルギー ε $(\varepsilon > 0)$ の分だけエネルギーが上昇するとする．また，解離した塩基対は一対当たり G 個 $(G > 1)$ の配置を取ることができるとする．

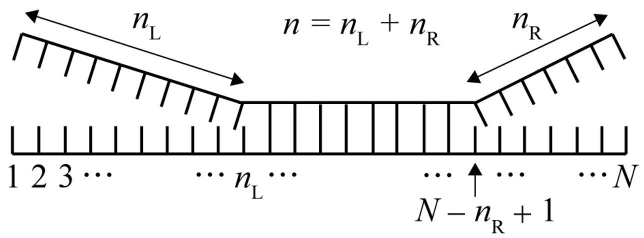

図 DNA 二重鎖の塩基対解離の一次元モデル．

まず，解離が左端のみから起きる（single-end, SE），$n_{\mathrm{R}} = 0$ の場合を考える．簡単のために，右端の塩基対は解離せず二重鎖は完全には解離しないとする $(0 \leq n_{\mathrm{L}} \leq N-1)$．解離塩基対の数が n となる確率 $P_{\mathrm{SE}}(n)$ は

$$P_{\mathrm{SE}}(n) = \frac{x^n}{Z_{\mathrm{SE}}} \tag{1}$$

となる．ここで

$$x = Ge^{-\beta\varepsilon} \tag{2}$$

であり，$\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$ で k_{B} 及び T は Boltzmann 定数及び絶対温度である．Z_{SE} は分配関数で，次式で表される．

$$Z_{\mathrm{SE}} = \sum_{n=0}^{N-1} x^n = \frac{1-x^N}{1-x} \tag{3}$$

このとき，Helmholtz エネルギー F は次式となる．

$$F = \boxed{\quad ア \quad} \tag{4}$$

G が十分大きく高温極限 $\beta\varepsilon \to 0$ のとき $N-1$ 個の塩基対はすべて解離し，また $x-1 \approx x$ 及び $x^N - 1 \approx x^N$ とすると，エントロピー S は次式となる．

$$S = \boxed{\quad イ \quad} \tag{5}$$

次に，DNA 鎖の塩基対が両端から解離する場合（double-end, DE）を考える．与えられた n に対して n_{L} 及び n_{R} が異なる複数の状態が存在するため，分配関数は以下のように表される．

$$Z_{\mathrm{DE}} = \sum_{n=0}^{N-1} \left(x^n \times \boxed{\quad ウ \quad} \right) \tag{6}$$

ここでも簡単のため，二重鎖は完全には解離しないとした $(0 \le n \le N-1)$．
式 (6) は式 (3) の Z_{SE} とその x に関する微分，及び x を用いて表せるので，

$$Z_{\mathrm{DE}} = \frac{\boxed{\quad エ \quad}}{(1-x)^2} \tag{7}$$

となる．また，解離数の平均

$$\langle n \rangle = \sum_{n=0}^{N-1} n P_{\mathrm{DE}}(n) \tag{8}$$

は N が大きいとき $x=1$ 近傍で急激に変化する．$x = 1+\eta$ とし η が小さいとすると，分配関数は次式で表される．

$$Z_{\mathrm{DE}} = \frac{1}{2}(N+1)N + \frac{1}{3}(N+1)N(N-1)\eta + O\left(\eta^2\right) \tag{9}$$

ここで $O(\eta^2)$ は η の二次以上の項を表す．式 (8) 及び (9) より $N \pm 1 \approx N$ とすると，$x=1$ での平均解離数は次式で表される．

$$\lim_{\eta \to 0} \langle n \rangle = \boxed{\quad オ \quad} \times N \tag{10}$$

式 (3) の分配関数で表される DNA 二重鎖が左端のみから解離する場合でも，N が大きいとき $x=1$ で平均解離数が急激に変化する．式 (3) に対して $x \to 1$ のときに次式を得る．

$$\lim_{x\to 1} Z_{\mathrm{SE}} = \boxed{\text{カ}} \tag{11}$$

従って，$x=1$ のとき，両端から解離できる DNA 鎖の集団の中で左端のみから解離している DNA 鎖の存在確率 R は，$N \pm 1 \approx N$ とすると次式で与えられる．

$$R = \boxed{\text{キ}} \tag{12}$$

問 A　空欄 $\boxed{\text{ア}}$ に入る適切な式を，β，x 及び N を用いて答えよ．

問 B　空欄 $\boxed{\text{イ}}$ に入る適切な式を，k_{B}，N 及び G を用いて答えよ．

問 C　空欄 $\boxed{\text{ウ}}$ に入る適切な式を，n を用いて答えよ．

問 D　空欄 $\boxed{\text{エ}}$ に入る適切な式を，x 及び N を用いて答えよ．

問 E　空欄 $\boxed{\text{オ}}$ に入る適切な整数あるいは分数を答えよ．

問 F　空欄 $\boxed{\text{カ}}$ に入る適切な式を答えよ．

問 G　空欄 $\boxed{\text{キ}}$ に入る適切な式を答えよ．