“チラシの裏”

狭いスペースに走り書きした手計算で豊かな科学の世界を味わう

第17回　サイエンス研究会

於　ZOOM

2021年12月２２日

JASTEC
小湊健太郎

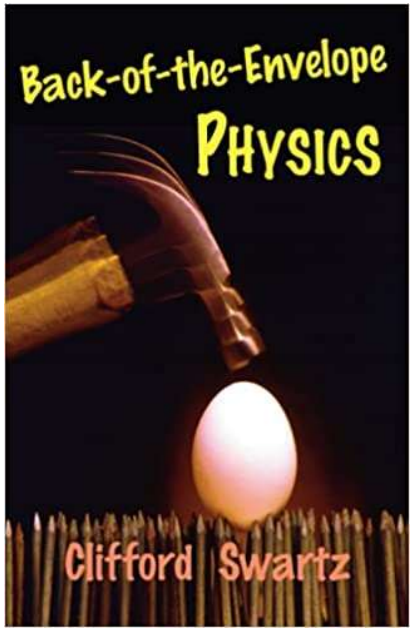
チラシの裏プロローグ

もとネタ

Clifford Swartz

“Back-of-the-Envelope Physics”

少量　かつ　本質的計算で森羅万象を見積もる



https://www.amazon.co.jp/Back-envelope-Physics-Hopkins-Paperback/dp/0801872634

話の振り方

・世界中に情報が一瞬で伝わる便利な世の中です。

・電線の中の電子はビュンビュン突っ走ってるのでは？

・その電子のスピードを見積もってみましょう

それでは、一般的と思われる状況として、太さ1mm程度の導線に
1Aの電流が流れていると想定します。

実際の見積もり

p.82-84 Electron Drift Speed

of charge in the cylinder !

$i = \frac{\Delta q}{\Delta t} = neAv_{drift}$. To fir

free electron density. Con

$$n = \left(\frac{1 \text{ charge carrier}}{\text{atom}}\right)\left(\frac{\text{atoms}}{\text{mole}}\right)\left(\frac{\text{mole}}{\text{gram}}\right)\left(\frac{\text{gram}}{\text{cm}^3}\right)$$

$$= (1)(6 \times 10^{23})\left(\frac{1}{64}\right)(9) = 8.4 \times 10^{22} \text{ charge carriers/cm}^3.$$

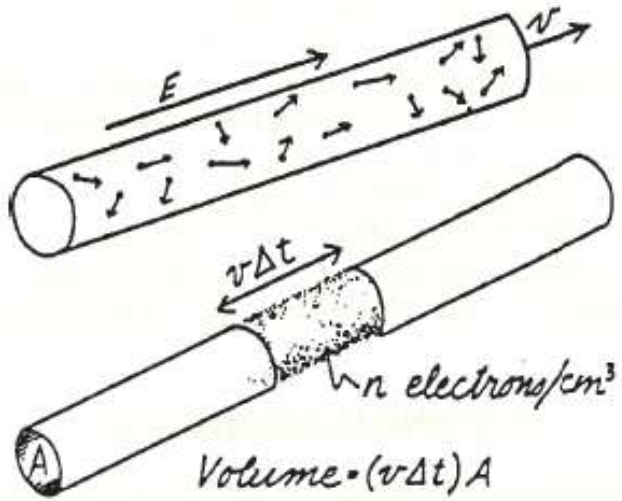


FIGURE 6.3 Geometry for derivation of drift velocity of electrons in current carrying wire.

$$v_{drift} = \frac{1 \text{ A}}{(8.4 \times 10^{22} \text{ carriers/cm}^3)(1.6 \times 10^{-19} \text{ C/carrier})(1 \times 10^{-2} \text{ cm}^2)}$$

$$= 7 \times 10^{-3} \text{ cm/s}.$$

結論： 電子のスピードはカタツムリより遅い。

ここから、話を広げていくというシナリオ(これはこの本には載っていない)

- では何が速く伝わっているのか？
- 電荷の単位が10^-19とえらく小さいのはなぜか？
- 電子をもっと沢山もっている元素は他にもあるのに銅が選ばれるのはなぜか？ etc

Contents

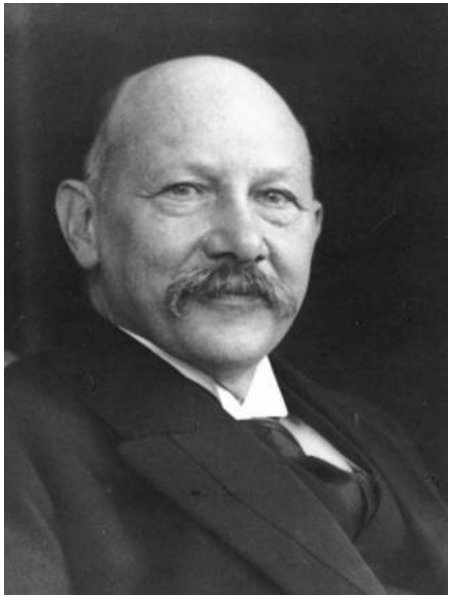
- **Introduction：　超電導とNMR**
- **チラシの裏計算でノーベル賞(人類に重要な寄与をもたらしたと評価された)**
- **チラシの裏計算を予想再現しながら、Blochの感動も再現してみる**

天下り導入(ほとんど)ナシ。スライドを見ながらそのまま計算をフォローできます。

巨匠の系譜：超電導とNMRの繋がり

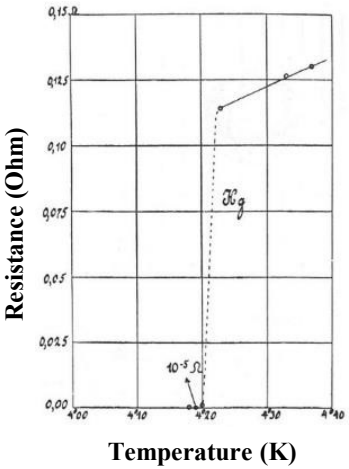
Heike Kamerlingh Onnes

21 Sep 1853 – 21 Feb 1926



H.Kamelingh Onnes, Akad. van Wetenschappen (Amsterdam) **14**, 133, 818 (1911).

Doctoral　Advisor



Pieter Zeeman

25 May 1865 – 9 Oct 1943

" Zeeman effect "

$$W = -\mu \cdot \boldsymbol{B}$$

Zeemanの
後任教授
(32歳で！)

また後にOnnes
研究所所長

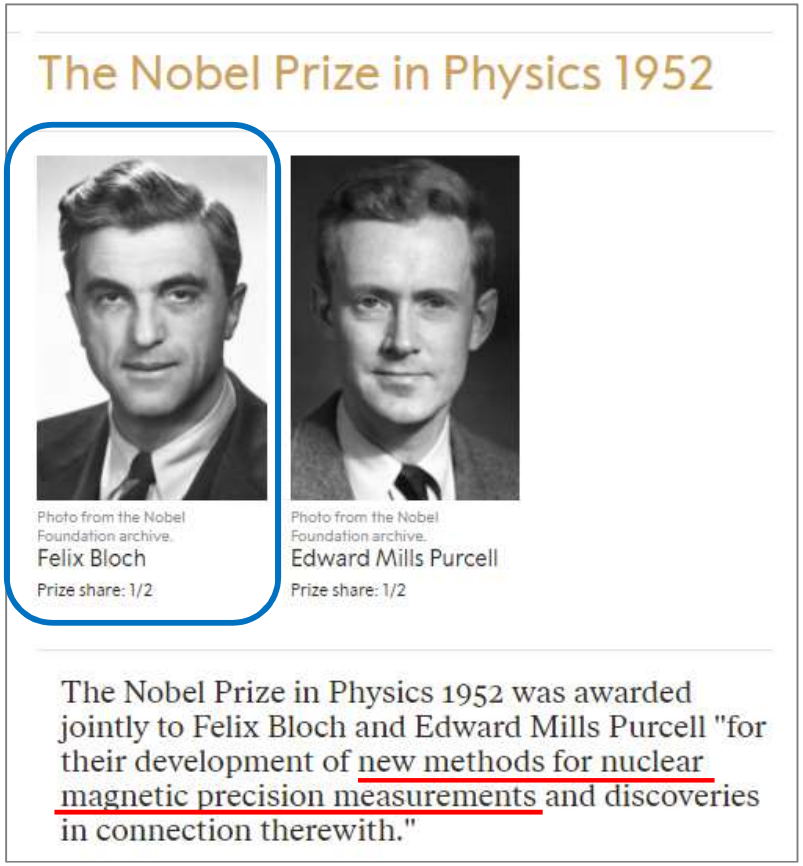
Cornelis Jacobus Gorter

14 Aug 1907– 30 Mar 1980

Gorter：　NMR(凝縮系で)発見にあと一歩。

1T弱の電磁石を使用して、核磁化の緩和を**熱として**検出しようとした(感度を上げる為**低温試料**で測定。"Negative result"として論文発表)。その後、凝縮系NMR測定成功は(Bloch,Purcell)らに譲った。第2次世界大戦中に発展したRF技術が寄与したらしい。Goterは時代を先取りし過ぎたのかも知れない。

Blochらの登場　舞台はアメリカへ



Felix Bloch 23 Oct 1905 – 10 Sept 1983

スイス生まれ
大学院でドイツ(Leipzig)に渡り(Debyeからのススメだったらしい)、
Heisenbergのもとで(たった1年で)**学位取得**
(Heisenberg最初の博士学生．ちなみにHeisenbergはBlochより4歳年上なだけ。Heisenbergは当時まだ20代)
量子力学の最前線へ！

ナチスを逃れアメリカへ。
マンハッタン計画にも参加。レーダーの研究。
RF技術も申し分ナシ！

時代に翻弄されながらも、潮流を華麗に乗りこなした感じ？あるいはもっと積極的態度で切り拓いていった感じか。
CERN初代長官も務める

凝縮系の核磁気共鳴発見のインパクトは大きかった(我々の生業も彼らのおかげ)

磁場に比例する原子核のエネルギー準位遷移を電磁波で見る

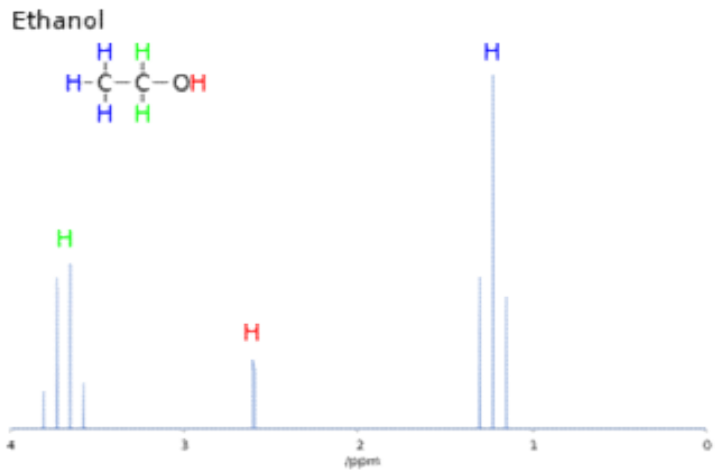
$$\omega = \gamma B_N$$

γ ： Gyromagnetic ratio → 原子の種類 (原子番号)

B_N ： **原子核が感じる磁場** → 原子の配位、数
核ー核 のキョリ
核の周りの電子分布

(注：因子γにも磁場遮蔽効果は含まれている)

豊かな構造情報！



日本電子 (JEOL) web siteより

https://www.jeol.co.jp/products/nmr/basics.html

ノーベル賞受賞をもたらしたBlochの検討は”チラシの裏”計算だった

原子核の磁気モーメントはとにかく小さい。電子より3桁くらい小さい。NMR測定はGoterでもうまくいかなかった。

Blochは汽車の中で、凝縮系でもNMR測定ができるのではないか、と着想したらしい。(GoterのNegativeな結果は知らず)

そこで必要な計算は、左のような手計算で得られるものだった。

このメモ(右の画像のみ)を見ると、
・肝心の試料の作る磁場(磁束)の見積もりの計算が見られない
・古い電磁気の単位系でフォローしきれない

自分で計算してみよう！

Bloch自身の見積もり計算

BULLETIN OF THE NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE SOCIETY OF JAPAN 2019 Vol.10

Thus $\bar{\Phi} = \frac{2\pi\mu}{R}\, 2\times.46 = \frac{2\pi\mu}{R}\times.92$

← ？ 磁束の見積もりのようだが、、、パラメータはよく分からない

The induced signal is (with N = no of turns)

$V = \frac{300\, N\, \omega\, \bar{\Phi}}{c}$

$\mu = 4.3\times10^{-7}$; $R = 4$

$N = 8$

$\omega = 2\pi\times 8.5\times10^{7}$

← 検出コイルは8回巻き

$= 10^{-8}\times 8\times 2\pi\times 8.7\times10^{6}\cdot\frac{2\pi\cdot 4.3\times10^{-7}}{4}\times.92$

← 2000G程度の磁場での共鳴を想定している
(2π x 8.7 x 10^6 Hz)

$= 2700\times10^{-8} = 2.7\times10^{-5}$

With a $Q = 100$ we should get for the signal

← Q値100のLC共振回路を想定している。

$V_S = Q\,V = 2.7\times10^{-3} = 2.7$ millivolts
$= 2.7$ millivolts

←発生電圧は2.7mVとなる

測定できる!!

Better method of calculation see p. 116!!

自分でもやってみよう　(1/6: 導入)

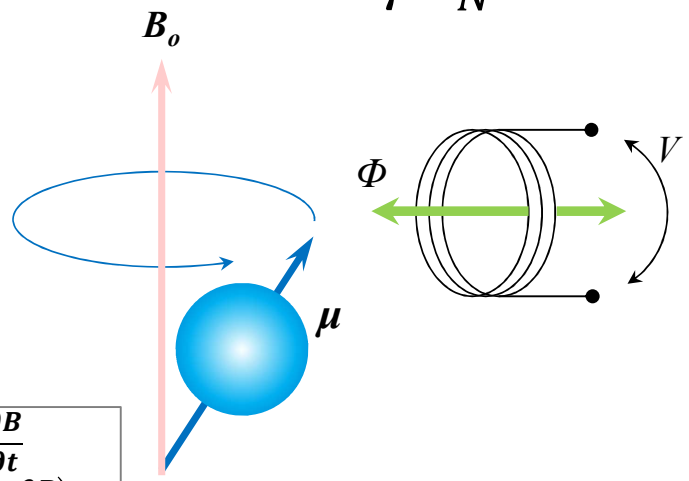
水 1cc, 1Tの磁場、検出コイルの内径面積1cm^2 で水素核のNMR信号を見られるか？

[方針]
移動中の汽車の中での計算を想定して、
・重い教科書は携帯していない(関係式はがんばって思い出す)
・スマホでの情報取集は禁止
・近似をうまく活用

[着想(ここではこれを前提として認める)]
原子核の磁気モーメントはスピンという量子力学的自由度に由来するので、上、下に量子化された準位の統計の扱いを正確にやろうとすると大変そうだが、ここで諦めてはいけない。集団として扱う場合、古典的な描像(小さい磁石となって歳差運動する)でもある程度成り立つ、とBlochは考えたようだ。
(上向きか下向きの状態しかとれないハズなのに、ナナメに回る歳差運動とはいかに．．．)

微小磁石の歳差運動の交流磁場を検出

$$\omega = \gamma B_N$$



古典的マクロな描像でOK

コイルに生じる電圧

$$V = -\frac{\partial \phi}{\partial t}$$

これはMaxwell方程式の誘導法則
(右囲み)の式のまま。

$$\nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t}$$
$$\int (\nabla \times E) ds = \int \left(-\frac{\partial B}{\partial t}\right) ds$$
$$\int E dl = -\frac{\partial}{\partial t} \int B\, ds$$
$$V = -\frac{\partial \phi}{\partial t}$$

この電圧が検出可能なレベルか否か？見積もればよい

自分でもやってみよう　(2/6: むずかしそうなのは試料の磁束密度)

$$V = -\frac{\partial \phi}{\partial t}$$

$$\phi = \phi_0 e^{i\omega t}$$

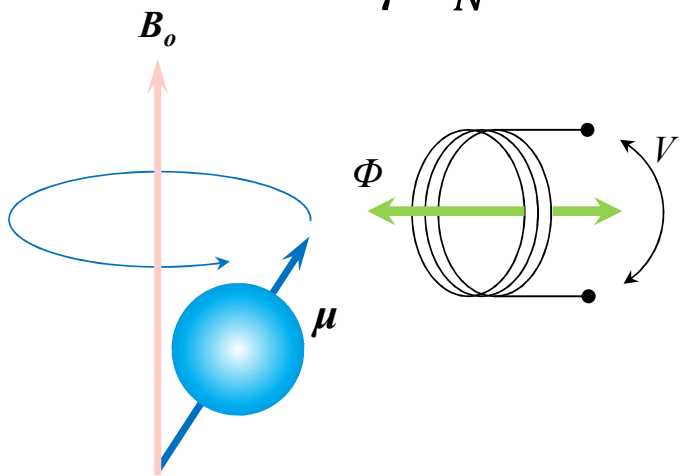
ω：　原子核磁石の歳差運動周波数

$$\omega = \gamma B_N$$

$$V = -i\omega\phi$$

歳差運動の周波数が高ければ高いほど電圧が高くなる(良い)

1Tでは：　$\omega = 2\pi \times 42.6 \times 10^6\ [\mathrm{s}^{-1}]$



$$\phi = BA$$

A: 検出コイルの総断面積

B: 試料がつくる磁束密度

$$A = 1\ [\mathrm{cm}^2] = 10^{-4}\ [\mathrm{m}^2]$$

$$B = ?$$

原子核由来試料の磁束密度の見積もりが重要そうだ

自分でもやってみよう　(3/6: 上向き下向きの分布差 その1)

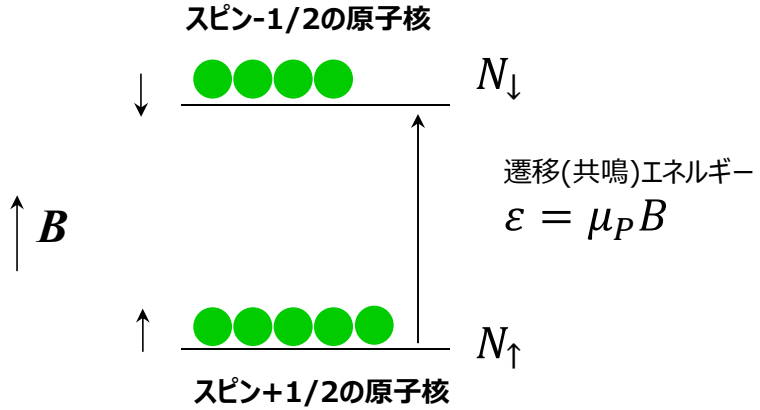
試料の磁束密度とは、体積あたりの磁気モーメントと等価

原子核の磁気モーメントは上向きと下向きに分かれており、
その差し引きの結果で残った磁気モーメントが現れるだろう。

$$\boldsymbol{B} = \sum_{\boldsymbol{N\uparrow - N\downarrow}} \quad \mu_P / \boldsymbol{v} = ?$$

v: 試料の体積=1cc

ボルツマン分布によれば浴の温度に比べエネルギー差の小さい準位では、二つの順位の区別は小さくなると考えられる。つまり**上向きと下向きの数の差はほとんどなくなる。磁気モーメントは残らないことが心配されるが、、、**



$$\mu_P = 42.6\ [\mathrm{MHz/T}]$$

これは憶えていた。しかし周波数のままでは使えない！

$$h = 6.63 \times 10^{-3}\ \ [\mathrm{Js}]$$

hvに換算しよう。しかし、プランク定数は自信なかった！ネットで確認してしまった。

T=300[K]でkTは

$$k = 1.38 \times 10^{-23}\ [\mathrm{J/K}]$$

スマホ禁止の筈でしたが、ネットで確認…

$$kT = 1.38 \times 10^{-2}\ \ [\mathrm{J/K}] \times 300\ [\mathrm{K}]$$
$$= 4.14 \times 10^{-2}\ \ [\mathrm{J}]$$

B=1[T]でεは

$$\varepsilon = 42.6\ [\mathrm{MHz/T}] \times\ 6.63 \times 10^{-34}\ [\mathrm{Js}] \times 1[\mathrm{T}]$$
$$= 2.8 \times 10^{-26}\ [\mathrm{J}]$$

$$\therefore\ \frac{\varepsilon}{kT} \lesssim 10^{-5}$$

熱に負けてしまいそうだ….

自分でもやってみよう　(4/6: 上向き下向きの分布差 その2)

諦めずに水1ccの磁気モーメント総量を具体的に見積もる

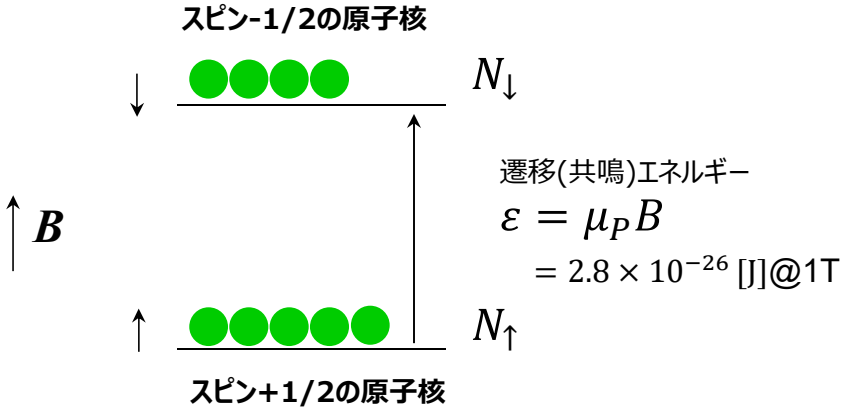
ボルツマン分布によると、エネルギーε異なる準位を占める数の比は、

$$\frac{N(E+\varepsilon)}{N(E)} = \frac{N_\downarrow}{N_\uparrow} = e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \equiv b \quad \Rightarrow \quad N_\downarrow = bN_\uparrow$$

ここは天下り的導入。スミマセン…

$$N_\downarrow + N_\uparrow \equiv N$$

N：水素原子核の総数



上向きと下向きの差は、

$$N_{dif} = N_\downarrow - N_\uparrow$$

$$N_{dif} = \frac{b-1}{b+1}N = \frac{-\varepsilon/kT}{2-\varepsilon/kT}N$$

分母はほぼ2

$$= \frac{N}{2}\cdot\frac{-\varepsilon}{kT}$$

$$\fallingdotseq -10^{-5} \times \frac{N}{2}$$

指数関数の便利な近似があった

$$e^x = \sum_{n=0}^{inf}\frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \cdots$$

正確な展開式はあやしかったが、1次までならおぼえられる

$$e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \fallingdotseq 1 - \frac{\varepsilon}{kT}$$

$$\frac{\varepsilon}{kT} \lesssim 10^{-5}$$

上↑向きの方が全数の半分x10^{-5}個だけ多い。こなるとN次第だ…

自分でもやってみよう　(5/6: 水 1ccあたりの水素原子核の数)

水1ccに水素の原子核はいくつあるだろうか？

水　H_20の分子量は、1+1+16=18

水18gに1モルの原子の数

Oの質量数について
水平リーベ僕の船．．．
Oは8番目の元素
質量数は…8個のpと同じだけnがあるので16

→水18gに水分子がアボガドロ数個＝6x10^{23}個　ある

水1ccは1g．つまり1/18モル

また18個の核子のうち2個が水素核

電子の重さは無視できる

アボガドロ数がなぜこの数字なのか、忘れてしまっているが、高校時代に聞いた6x10^23は記憶に刻まれている。

$$N = 6 \times 10^{23} \times \frac{1}{18} \times \frac{2}{18}$$

$$= \frac{1}{27} \times 10^{23} \quad [個]$$

けっこうありそうだ。これは希望が持てる

自分でもやってみよう　(6/6: 結論)

水1ccの試料の原子核が作る磁束密度は

$$\boldsymbol{B} = \sum_{N\uparrow - N\downarrow} \quad \mu_P/\mathrm{cc}$$

$$B = \underbrace{\left(\frac{1}{27}\times 10^{23}\right)}_{\text{水素核の総数}} \underbrace{\left(\frac{1}{2}\times 10^{-5}\right)}_{\uparrow\downarrow\text{の比から}} \frac{\text{個}}{\mathrm{cc}} \quad \underbrace{\times 2.8\times 10^{-2}}_{\text{水素核1個あたりの磁気モーメント}} \quad \left[\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{T}}\right]$$

$$= \frac{2.8}{54}\times 10^{-8} \quad \left[\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{T\ cc}}\right]$$

単位を変更：　ccあたり→m^{3}あたり

$$= \frac{2.8}{54}\times 10^{-2} \quad \left[\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{T}\ m^3}\right]$$

$$\phi = BA$$

$$= \frac{2.8}{54}\times 10^{-2} \quad \left[\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{T}\ m^3}\right] \times \underbrace{10^{-4}\ [\mathrm{m}^2]}_{\text{コイルの断面積}}$$

$$= 5.2\ \times 10^{-8}\ [\mathrm{Wb}]$$

いよいよ最後、交流磁場の検出電圧は

$$V = -i\omega\phi \qquad \rightarrow \qquad V = \omega\phi$$

ひとまず位相因子はおいとく

$$V = \underbrace{2\pi\times 42.6\ \times 10^{6}}_{\text{1Tでの歳差運動周波数}}\ [\mathrm{s}^{-1}]\ \times 5.2\ \times 10^{-8}\ [\mathrm{Wb}]$$

$$\therefore \quad V = 1.4\times 10^{1}\ [\mathrm{V}]$$

Blochの計算より大きいが(磁場が大きい。また他にも見落としがあるかも)、とにかく検出をトライする価値を感じる結果！

まとめ：見積もりのポイント

- **原子核の磁気モーメントは小さく(電子より3桁程度)、**
- **分極も小さく(～10^{-5})、netな磁気モーメントも小さそうだが、**
- **アボガドロ数個の集団(10^{23})では立派な小磁石となる**
- **それほど高度な計算は必要とせず、見積もりできそう**

- **量子力学の理解は難しいが、そこにあまり拘り過ぎず(恐れ過ぎず)、マクロにどう観測されるかという点の考察を深めるのは生産的だと実感**

(Blochは量子理学をよく理解していたと思うが)