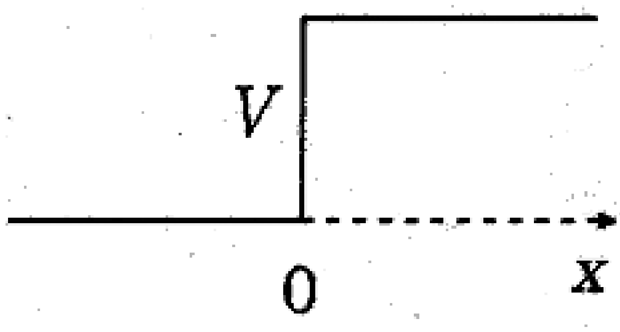
［化学物理Ｉ（基礎）］（全２題）

[問題１]

右図のように $x=0$ で $V(>0)$ の飛びを持つ１次元ポテンシャルに左側（$x<0$）から運動エネルギー ε をもつ質量 m の粒子が入射するときの透過と反射を量子力学で扱おう．（但しプランク定数は h，また $\dfrac{h}{2\pi}$ を $\hbar$ と書く.）



以下の文は $\varepsilon>V$ の場合についての記述である．$\boxed{（ア）}$～$\boxed{（ケ）}$に適当な式をいれよ．

波動関数は

$$\varphi(x)=\begin{cases} e^{ik_1x}+Ae^{-ik_1x} & (x<0) \\ Be^{ik_2x} & (x\geq 0) \end{cases}$$

とおける．ここで，k_1 及び k_2 は ε を用いて $k_1=\boxed{（ア）}$，$k_2=\boxed{（イ）}$と表される．$x=0$ での境界条件を考えると，A と B の間には $\boxed{（ウ）}$ 及び $\boxed{（エ）}$の関係式が成り立ち，これ解いて，A，B は ε を用いて $A=\boxed{（オ）}$，$B=\boxed{（カ）}$と表される．特に $\varepsilon \gg V$ の場合、$|A|^2$ を V/ε の２次までで表すと $\boxed{（キ）}$となる．

一般に、位置 x での粒子の存在確率密度 $p(x)$ は，波動関数 $\varphi(x)$ を用いて

$$p(x)=C|\varphi(x)|^2 \qquad C\text{は定数}$$

と表される．位置 x での右向きの流れの密度 $j(x)$ は，流れの連続条件とシュレーディンガー方程式から，C と $\varphi(x)$ を用いて

$$j(x)=\boxed{（ク）}$$

となる．この式から，上の問題で粒子が $x=0$ を右側に透過する確率は ε を用いて $\boxed{（ケ）}$ と書ける．

[問題 2]

$\boxed{（ア）}$ ～ $\boxed{（コ）}$ に適当な数式を入れよ．

孤立した3次元の箱中にあるN個の粒子からなる系の時間発展を位相空間 $\mathbf{X}^N=(\mathbf{q}^N,\mathbf{p}^N)=(\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2,\cdots,\mathbf{q}_N,\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2,\cdots\mathbf{p}_N)$ （ただし$\mathbf{q}^N$は位置、$\mathbf{p}^N$は運動量をあらわす）上の確率密度$\rho(\mathbf{X}^N;t)$によって記述しよう．確率密度は位相空間内で流体のようにふるまうので，流体力学の議論を使って確率密度の運動方程式を求めることができる．位相空間内の微小体積vが実現される確率P_vは時間tにおいて，

$$P_\mathrm{v}=\int_\mathrm{v}\rho(\mathbf{X}^N;t)d\mathbf{X}^N \tag{1}$$

と表わされることから，P_vの時間変化はvの表面Sを出入りする位相点の収支になり，面積分を用いて

$$\frac{\partial P_\mathrm{v}}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial t}\int_\mathrm{v}\rho(\mathbf{X}^N;t)d\mathbf{X}^N=-\oint_\mathrm{S}\rho(\mathbf{X}^N;t)\dot{\mathbf{X}}^N\cdot d\mathbf{S}^N \tag{2}$$

とあらわされる．ここで、$\dot{\mathbf{X}}^N=(\dot{\mathbf{q}}^N,\dot{\mathbf{p}}^N)$は状態点の速度，$d\mathbf{S}^N$は表面S上の微分面積要素である．右辺を体積積分に変換すると，

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_\mathrm{v}\rho(\mathbf{X}^N;t)d\mathbf{X}^N=\int_\mathrm{v}\boxed{（ア）}\,d\mathbf{X}^N \tag{3}$$

(3)式の被積分関数が等しいとおいて，

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{X}^N;t)=\boxed{（ア）} \tag{4}$$

を得る．(5)式右辺の微分を実行すると

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{X}^N;t)=\boxed{（イ）}+\boxed{（ウ）} \tag{5}$$

(5)式右辺第2項 $\boxed{（ウ）}$ は，Hamiltonの運動方程式，

$$\boxed{（エ）} \tag{6}$$

$$\boxed{（オ）} \tag{7}$$

を用いると（ここでHamiltonianはHと書く），

$$\boxed{\text{（ウ）}}=0 \tag{8}$$

となり，最終的に(5)式は，

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho=\boxed{\text{（イ）}} \tag{9}$$

となる。これをLiouvilleの式と呼ぶ．$\rho(\mathbf{X}^N;t)$の時間の全微分は定義から，

$$\frac{d}{dt}\rho=\boxed{\text{（カ）}} \tag{10}$$

とあらわされるから，(9)式より

$$\frac{d}{dt}\rho=0 \tag{11}$$

を得る．また，時間変化（$t \rightarrow t\text{+}\Delta t$）による位相空間の体積変化は，$6N \times 6N$次元のヤコビアン $J(t+\Delta t,t)(=d\mathbf{X}^N(t+\Delta t)/d\mathbf{X}^N(t))$ で表される．ヤコビアンは$\mathbf{q}^N(t)$, $\mathbf{q}^N(t+\Delta t)$, $\mathbf{p}^N(t)$, $\mathbf{p}^N(t+\Delta t)$ を用いて行列式の形に書くと，

$$J(t+\Delta t,t)=\boxed{\text{（キ）}} \tag{12}$$

となる．ここで，Δtを十分小さくとってΔtの1次まで(12)式の右辺を展開すると

$$J(t+\Delta t,t)=\boxed{\text{（ク）}}+\boxed{\text{（ケ）}}\Delta t \tag{13}$$

$\boxed{\text{（ケ）}}$に再びHamiltonの運動方程式に基づいた(8)式の関係を使うと以下の関係を得る．

$$J(t+\Delta t,t)=\boxed{\text{（コ）}} \tag{14}$$

これは，Liouvilleの定理と呼ばれる．