

[化学物理Ⅱ (専門)] (全2題)

〔問題 1〕

重心系での2粒子散乱の過程は、換算質量 μ の粒子が固定された散乱ポテンシャル $V(\mathbf{r})$ によって散乱される1粒子の問題として考えることができる。入射粒子および散乱粒子の波動ベクトルをそれぞれ \mathbf{k} 、 \mathbf{k}' とすると、第1ボルン近似による散乱振幅は次式で表される。

$$f_B(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int V(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (1)$$

ここで、 $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ 、 h はプランク定数である。また、 $\hbar\mathbf{q}$ は散乱の運動量移送で、 $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ の関係がある。以下の問いに答えよ。

問A 散乱ポテンシャルが球対称 $V(\mathbf{r}) = V(r)$ であるとき、散乱振幅は次式で表されることを示せ。

$$f_B(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q} \int_0^\infty r \sin qr \cdot V(r) dr$$

問B 球対称の実ポテンシャルの例として、遮蔽されたクーロンポテンシャル $V(r) = \frac{-Ze^2}{r} \exp(-r/a)$ を考える。これは中性原子による電子の弾性散乱を表しており、 a は原子内電子による原子核の遮蔽半径である。このポテンシャルによる散乱振幅を求めよ。

問C 問Bで導出した散乱振幅がラザフォード散乱の散乱振幅

$$f(\theta) = \frac{\mu Ze^2}{2k^2 \hbar^2 \sin^2(\theta/2)}$$

に一致するための条件を求め、その場合の散乱の特長を述べよ。ここで、 θ は波動ベクトル \mathbf{k} 、 \mathbf{k}' のなす角で、散乱角を表している。

(化学物理Ⅱ・3枚中の2枚目)

問D 次に、同一原子がつくる結晶格子による散乱を考えよう。結晶格子の基本ベクトルを \mathbf{a}_i ($i=1, 2, 3$) とすると、結晶によるポテンシャルは周期性

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{a}_i) = V(\mathbf{r}) \quad (2)$$

を有する。(2)の関係を(1)に代入することにより、散乱振幅がゼロでない値を持つ条件を求めよ。

また、そのときの運動量移送の分布は何を表すか、 $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = \delta_{ij}$ の関係を満たす逆格子ベクトル \mathbf{b}_j ($j=1, 2, 3$) を用いて述べよ。ここで、 δ_{ij} はクロネッカーのデルタで、 $i=j$ のとき $\delta_{ij} = 1$ 、 $i \neq j$ のとき $\delta_{ij} = 0$ を表す。

[問題 2]

液体の中を 1 次元方向に拡散する質量 m の粒子の運動は、方程式

$$m \frac{du(t)}{dt} + m\gamma u(t) = R(t)$$

で記述することができる。ここで、 u は粒子の速度、 γ は溶媒の粘性による摩擦係数、 $R(t)$ は溶媒分子の熱運動に起因する力で乱雑力と呼ばれる。この粒子の運動についての以下の問に答えよ。

問 A. 上の微分方程式を解き、 $u(t)$ を求めよ。

問 B. 速度 u と乱雑力 R をフーリエ変換

$$u(t) = \int_{-\infty}^{\infty} u(\omega) e^{i\omega t} d\omega, \quad R(t) = \int_{-\infty}^{\infty} R(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

で表したとする。 $u(\omega)$ と $R(\omega)$ の関係を求めよ。

問 C. フーリエ成分 $u(\omega)$ 、 $R(\omega)$ の平均的な強度は、パワー・スペクトルと呼ばれ、

$$I_u(\omega) = |u(\omega)|^2, \quad I_R(\omega) = |R(\omega)|^2$$

で与えられる。また、パワー・スペクトル $I_u(\omega)$ 、 $I_R(\omega)$ は、相関関数 $\phi_u(t) = \langle u(0)u(t) \rangle$ 、 $\phi_R(t) = \langle R(0)R(t) \rangle$ と

$$\phi(t) = \int_{-\infty}^{\infty} I(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

の関係を持つ (Wiener-Khinchin の定理)。今、乱雑力 $R(t)$ のパワー・スペクトルが ω に因らず一定値 I_R を持つとき、

$$\phi_u(t) = \frac{\pi I_R}{m^2 \gamma} e^{-\gamma t}$$

となることを示せ。

問 D. 速度の 2 乗平均 $\langle u^2 \rangle$ は、 $\phi_u(0)$ で与えられる。このことを用いて I_R と γ の間に

$$I_R = \frac{m\gamma k_B T}{\pi}$$

の関係が成り立つことを示せ。ここで、 k_B と T はボルツマン定数および温度である。