［化学物理Ⅰ（基礎）］（全３題）

［問題1］以下の文章を読み，問A～Dに答えよ．

図1のように，なめらかな平面に置かれ，糸でつながれた質量 m の質点が，小さな孔のまわりを角速度ω_0，半径 l_0 で等速円運動しているとする．糸の下端は固定されている．

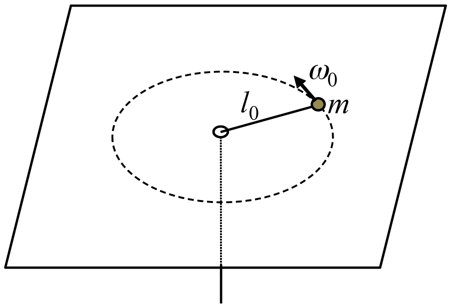

図１　平面上を円運動する質点

問A　糸にかかる張力 T を求めよ．

問B　この質点の角運動量 L を求めよ．

問C　図１の状態から，糸を静かに引いて円運動の半径を l まで小さくした．このときの質点の角速度ωを求めよ．

問D　半径 l_0 と l の時の運動エネルギーの差は糸を引くことによる仕事に等しいことを示せ.

［問題 2］以下の文章を読み，問 A～C に答えよ．

質量 m の粒子の 1 次元運動を考える．そのシュレディンガー方程式は，次式で与えられる．

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x) \tag{1}$$

ここで，$\psi(x)$ は波動関数，h はプランク定数，$V(x)$はポテンシャルエネルギー，E はエネルギー固有値である．今，$V(x)$が図 2 に示すように，$x<a$ では 0，$x>b$ では正の定数 V_0 である場合を考えよう．$a \le x \le b$ の範囲では，$V(x)$は有限で任意の形状を持つが，その形は以下の議論には影響しない．

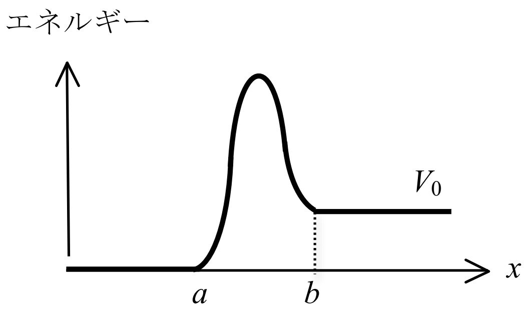

図 2　1 次元のポテンシャルエネルギー

V_0 よりも大きなエネルギーE を持つ粒子が，左から入射する場合と，右から入射する場合を考える．左から入射する場合の波動関数 $\psi_L(x)$ は，$x<a$ と $x>b$ の二つの領域について，各々の領域での波数 k_L および k_R を用いて次式で与えられる．

$$\psi_L(x)=\begin{cases}\exp(ik_L x)+r_L\exp(-ik_L x) & (x<a)\\ t_L\exp(ik_R x) & (x>b)\end{cases}\qquad (k_L>0,\quad k_R>0) \tag{2}$$

ここで，r_L および t_L はエネルギーE によって決まる定数である．この場合，左から入射した粒子の透過率 T_L は，$x>b$ での $\psi_L(x)$ を用いて

$$T_L=\frac{1}{2k_L}\left|\psi_L{}^*(x)\frac{d\psi_L(x)}{dx}-\psi_L(x)\frac{d\psi_L{}^*(x)}{dx}\right|$$

と定義される．同様に，粒子が右から入射する場合の波動関数 $\psi_R(x)$ は

$$\psi_R(x)=\begin{cases}t_R\exp(-ik_L x) & (x<a)\\ \exp(-ik_R x)+r_R\exp(ik_R x) & (x>b)\end{cases}\qquad (k_L>0,\quad k_R>0) \tag{3}$$

で与えられ（t_R および r_R は定数），その透過率 T_R は， $x < a$ での $\psi_R\left(x\right)$ を用いて

$$T_R = \frac{1}{2k_R}\left|\psi_R{}^*\left(x\right)\frac{d\psi_R\left(x\right)}{dx} - \psi_R\left(x\right)\frac{d\psi_R{}^*\left(x\right)}{dx}\right|$$

と定義される．

問 A　左から入射する場合の透過率 T_L を k_L, k_R, t_L を用いて記し，右から入射する場合の透過率 T_R を k_L, k_R, t_R を用いて記せ．

問 B　式(1)のシュレディンガー方程式を満たし，同じエネルギー固有値を持つ二つの波動関数 $\psi_A\left(x\right)$ と $\psi_B\left(x\right)$ に対して，$J(x)$を，

$$J\left(x\right) = \psi_A\left(x\right)\frac{d\psi_B\left(x\right)}{dx} - \psi_B\left(x\right)\frac{d\psi_A\left(x\right)}{dx}$$

で定義する．$J(x)$を x で微分することにより，$J(x)$が x に依存しないことを示せ．

問 C　問 B の性質を，式(2)の波動関数 $\psi_L\left(x\right)$ および式(3)の波動関数 $\psi_R\left(x\right)$ に適用することにより，T_L と T_R が等しいことを証明せよ．

［問題 3］以下の文章を読み，問 A〜C に答えよ．

1 次元で運動する粒子系を考える．座標を q，運動量を p とし，ハミルトニアンが $H(q,p)$ であるとき，任意の物理量 $A(q,p)$ の古典カノニカル平均 $\langle A\rangle$ は，

$$\langle A\rangle=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}dq\int_{-\infty}^{\infty}dp\,A(q,p)\exp\left(-\frac{H(q,p)}{k_{\mathrm{B}}T}\right)}{\int_{-\infty}^{\infty}dq\int_{-\infty}^{\infty}dp\exp\left(-\frac{H(q,p)}{k_{\mathrm{B}}T}\right)}$$

で与えられる． T は系の温度，k_{B} はボルツマン定数とする．

ここで， $q\to\pm\infty$， $p\to\pm\infty$ の条件で，

$$q\exp\left(-\frac{H(q,p)}{k_{\mathrm{B}}T}\right)\to 0,\quad p\exp\left(-\frac{H(q,p)}{k_{\mathrm{B}}T}\right)\to 0$$

であるなら

$$\left\langle q\frac{\partial H(q,p)}{\partial q}\right\rangle=k_{\mathrm{B}}T \qquad (1)$$

$$\left\langle p\frac{\partial H(q,p)}{\partial p}\right\rangle=k_{\mathrm{B}}T \qquad (2)$$

が成り立つ．

問 A　式(1)が成立することを示せ．ただし，任意の関数 $f(x)$ に関して，

$$\frac{d}{dx}\left[\exp(f(x))\right]=\exp(f(x))\frac{df(x)}{dx}$$

が成り立つことに注意せよ．

問 B　ハミルトニアン $H(q,p)$ が，運動エネルギー $K(p)$ とポテンシャルエネルギー $V(q)$ の和として，

$$H(q,p) = K(p) + V(q)$$

$$K(p) = \frac{p^2}{2m}$$

$$V(q) = Bq^{2n}$$

の形で書けるとする（ただし，m と B は正の定数，n は正の整数）．式(1)および(2)を用いて，

$$\frac{\langle V \rangle}{\langle K \rangle} = \frac{1}{n}$$

であることを示せ.

問 C　ハミルトニアン $H(q,p)$が, 運動エネルギー$K(p)$とポテンシャルエネルギー$V(q)$の和であり，$V(q)$が

$$V(q) = \alpha q^2 + \beta q^4 \qquad (\alpha > 0,\ \beta > 0)$$

で与えられるとき，$\langle V \rangle$が,

$$\langle V \rangle \le \frac{k_{\mathrm{B}}T}{2}$$

の関係を満たすことを示せ.