[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。

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

ここで、$\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$, 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$V(r) = \dfrac{-Ze^2}{r}\exp(-r/a)$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

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

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。

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

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

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

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

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、

$$I_u(\omega) = \mid u(\omega) \mid^2, \qquad I_R(\omega) = \mid R(\omega) \mid^2$$

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 $\phi_u(t) =< u(0)u(t) >$、$\phi_R(t) =< R(0)R(t) >$ 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 $< u^2 >$ 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

$$I_R = \frac{m\gamma k_{\mathrm{B}}T}{\pi}$$

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。