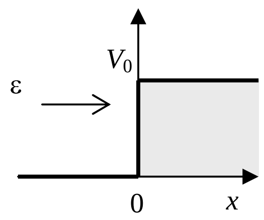
量子力学 I　期末試験問題（平成 21 年 6 月 26 日）

[一枚目の解答用紙に答えよ]

問題 I.　階段型ポテンシャル V_0 にエネルギー ε（$\varepsilon < V_0$）を持つ質量 m の粒子が単位時間当たり一定数で負の方向から次々と壁に向かってくる定常的な運動状態について量子力学的に考える。ここで、$\hbar$ はプランク定数を 2π で割った数である。



まず、ポテンシャル壁の厚さが無限のとき、すなわち $V(x)=\begin{cases}0 & (x<0)\\ V_0 & (x>0)\end{cases}$ の場合を考える（右上図参照）。

（1）　波動関数が満たすべきシュレディンガー方程式を具体的に記せ。

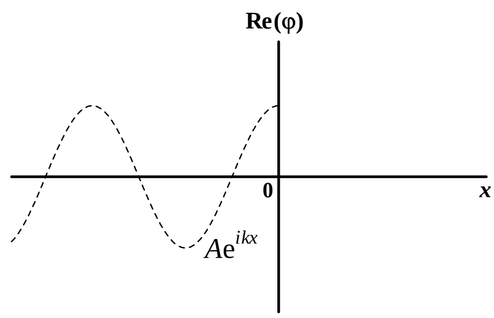
（2）　$x<0$ の領域において、数学的な一般解は $\varphi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$ の形で表される（ここで、$k=\sqrt{\dfrac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}$、また A, B は任意定数)。このとき、e^{ikx} 及び e^{-ikx} の項は物理的には何に対応しているか説明せよ。

（3）　$x>0$ の領域において、物理的に意味のある解は $\varphi(x)=Ce^{-\lambda x}$ の形とならなければいけないことを説明せよ。ここで、$\lambda=\sqrt{\dfrac{2m(V_0-\varepsilon)}{\hbar^2}}$、また C は任意定数である。

（4）　波動関数が満たすべき境界条件を具体的に示せ。

（5）　係数 B, C を A, k, λ を用いて表せ。

（6）　$\varepsilon = V_0/2$ の場合を考える。Ae^{ikx} の項の実部が右図のように表される時刻のとき、波動関数の実部の位置変化の様子を図示せよ。



次にポテンシャル壁の厚さが有限、つまり $V(x)=\begin{cases}0 & (x<0, x>a)\\ V_0 & (0<x<a)\end{cases}$ の場合を考える。$x<a$ におけるシュレディンガー方程式は無限に厚い階段型ポテンシャルの場合と同様なので、その数学的な一般解は $x<0$ においては $\varphi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$、$0<x<a$ においては $\varphi(x)=Fe^{\lambda x}+Ge^{-\lambda x}$ と表される（但し、A, B, F, G は任意定数)。一方、$x>a$ におけるシュレディンガー方程式はポテンシャル壁の厚さが有限の場合の $x<0$ の場合と同じなので、その数学的な一般解は任意定数 C, D を用いて $\varphi(x)=Ce^{ikx}+De^{-ikx}$ の形になる。

（7）　$x>a$ ではある物理的な理由で解の形が限定される。その理由を述べるとともに、解の形を答えよ。

（8）　波動関数が満たすべき境界条件を具体的に示し、各任意定数間に成り立つべき関係を答えよ。

（9）　連立方程式を解くと、$\dfrac{C}{A}=\dfrac{2ik\lambda e^{-ika}}{(k^2-\lambda^2)\sinh(\lambda a)+2ik\lambda\cosh(\lambda a)}$、$\dfrac{B}{A}=\dfrac{(\lambda^2+k^2)\sinh(\lambda a)}{(k^2-\lambda^2)\sinh(\lambda a)+2ik\lambda\cosh(\lambda a)}$ の関係が求まる（これらを計算して求めなくてよい)。粒子の透過率が $\left[1+\dfrac{(k^2+\lambda^2)^2\sinh^2(\lambda a)}{4k^2\lambda^2}\right]^{-1}$ となることを示せ。

（１０）　$\lambda a >> 1$ のとき、透過率は近似的に $\dfrac{16k^2\lambda^2}{(k^2+\lambda^2)^2}e^{-2\lambda a}$ となることを示せ。

（１１）　上記のポテンシャル壁（壁の厚さが有限でも無限の場合のどちらでもよい）の問題に関して、古典力学では説明できない事象について述べよ。

[二枚目の解答用紙に答えよ]

問題 II．整数 n, l, m を用いて、水素原子の電子（質量 m_e 、電荷 $-e$ ）に対する固有関数 φ_{nlm} は動径部分 $R_{nl}(r)$ と角度部分 $Y_l^{\,m}(\theta,\phi)$ の積として与えられる。ここで $Y_l^{\,m}(\theta,\phi) = C_{lm} \cdot P_l^{|m|}(\cos\theta) \cdot e^{im\phi}$ であり、C_{lm} は規格化定数、$P_l^{|m|}(\cos\theta)$ はルジャンドルの陪関数である。その具体的な形は $Y_0^{\,0}(\theta,\phi) = \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$ 、$Y_1^{\,0}(\theta,\phi) = \sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\cos\theta$ 、$Y_1^{\,\pm1}(\theta,\phi) = \mp\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\sin\theta \cdot e^{\pm i\phi}$ などである。また、$Y_l^{\,m}(\theta,\phi)$ は $\left(\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right) + \dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)Y_l^{\,m} + l(l+1)Y_l^{\,m} = 0$ の関係を満たす。一方、 $R_{nl}(r)$ の具体的な形は $R_{10}(r) = \left(\dfrac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2e^{-\frac{r}{a_0}}$ 、$R_{20}(r) = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\dfrac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(1 - \dfrac{1}{2}\dfrac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{1}{2}\frac{r}{a_0}}$ 、$R_{21}(r) = \dfrac{1}{2\sqrt{6}}\left(\dfrac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\dfrac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{1}{2}\frac{r}{a_0}}$ などである。また、エネルギー固有値は $E_n = -\dfrac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\dfrac{1}{n^2}$ と与えられる。ここで、ε_0 は真空の誘電率である。

（１） 整数 n, l, m は一般に何と呼ばれているか答えよ。

（２） $Y_l^{\,m}(\theta,\phi)$ は角運動量の z 方向成分を表す演算子 $l_z = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\phi}$ の固有関数であると同時に角運動量の大きさの二乗を表す演算子 $\vec{l}^{\,2} = -\hbar^2\left(\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right) + \dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$ の固有関数にもなっていることを示せ。

（３） 演算子 $l_+ = l_x + il_y = \hbar e^{i\phi}\left(\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \dfrac{i}{\tan\theta}\dfrac{\partial}{\partial\phi}\right)$ を考える。$l_+ Y_1^{\,0}(\theta,\phi)$ を実際に計算し、l_+ を演算することで l, m がどのように変化するか推察せよ。また、$l_+ Y_1^{\,1}(\theta,\phi)$ も実際に計算し、l と m の間にはどのような関係があると考えられるか述べよ。

（４） $\vec{l}^{\,2}$ 及び l_z に対する観測値に関して、古典力学では説明できない事象について述べよ。

（５） $\vec{l}^{\,2}$ を測定すると $12\hbar^2$ 、l_z を測定すると $-2\hbar$ の値が観測されたとしよう。このとき、考えられる運動状態で最低のエネルギーとなる場合の n, l, m を答えよ（値だけでなくどうしてそうなるか理由も記せ）。

（６） 基底状態において、電子の存在確率が最大となる距離 r を求めよ。

（７） φ_{200} 及び φ_{210} で表されるそれぞれの状態について、空間的にどこが節となっているか説明せよ。

[二枚目の解答用紙に答えよ]

問題 III．束縛系の定常状態ではエネルギー固有値が量子化され、その様子はポテンシャルによって異なる。3 次元空間に完全に閉じ込められた自由粒子、3 次元調和振動子、水素原子の電子のエネルギー準位を低いほうから数えて 4 番目まで、縮退に注意して図示せよ。なお、比較しやすくするために、全ての場合で最低と低いほうから数えて 4 番目のエネルギー準位までの間隔が同じになるように描き、またエネルギー原点も示すこと。