量子力学　　期末試験　(2015 年 7 月 21 日)

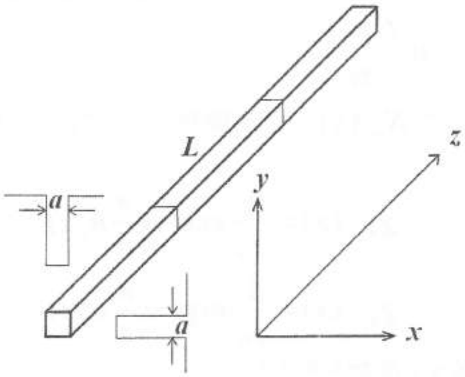
数物・電子情報系学科
荻野　俊郎

電卓、教科書、ノート、プリント、全て持ち込み不可です。
携帯電話・スマートフォンは、机に出している、または、手に持っているだけで試験放棄とします。
不正行為には厳しく対処します。

答が合っていても、導出過程のない解答は採点対象外とする。
その他、説明のない部分は、授業中の注意事項や前提に沿って解答すること。解答は、【1】【2】【3】【4】【5】【6】それぞれ指定欄に書くこと。別ページに続くときはそれを明記すること。

【1】 中間試験から　　　解答 1 ページ目　　予告通りの問題

右図のような、x 軸方向と y 軸方向に a の幅をもつ細線内に閉じ込められ、z 方向に移動する電子の状態を記述するのに適した波動関数とそのエネルギーを求める。ここで、a は数 nm で z 方向は十分長い(長さが L ということではない)とする。細線中($0 \le x \le a$、$0 \le y \le a$)では、$V(x,y,z)=0$　とし、細線外では、$V(x,y,z)=\infty$　とする。この 1 次元量子細線中の電子の状態(エネルギー準位)を次の手順で説明せよ。



三次元シュレディンガー方程式は次のように変数分離される。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2X(x)}{dx^2}=E_xX(x) \qquad \text{(15-1-1)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Y(y)}{dy^2}=E_yY(y) \qquad \text{(15-1-2)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Z(z)}{dz^2}=E_ZZ(z) \qquad \text{(15-1-3)}$$

(1) z 軸方向の波動関数　$Z(z)$　を、十分長い距離を L (大文字)として周期境界条件で表せ。

(2) $Z(z)=Ge^{ik_zz}$ として k_z を求めよ。本式を(15-1-4)とする。量子数は、$n_z=1,2,3\cdots$　とする。

(3) 規格化された $Z(z)$ を求めよ(15-1-5)とする。 n=3

(4) x 軸方向と y 軸方向では箱の中に閉じ込められた粒子として記述される。それぞれの量子数を

$$n_x=1,2,3\cdots \quad n_y=1,2,3\cdots$$

として、全エネルギーの低い方から 4 番目までのエネルギーの量子数の組みを示せ。
根拠を一言述べること。回答方法の例:「低い方から、$(n_x,n_y,n_z)=(5,5,1)$　$(5,5,3)$　**　根拠は・・」

【2】相対論的量子力学　　　解答 1 ページ目　　サービス問題

シュレディンガー方程式は非相対論的な古典力学のエネルギーを演算子で表したものになっている。相対性理論を取り込まなければ記述できない電子の性質を二つ挙げよ。

---物理定数---

真空中の誘電率: ε_0=8.85×10^{-12} Fm^{-1}、素電荷: q=1.60×10^{-19} C、ボルツマン定数: k = 1.38×10^{-23} JK^{-1}、
0℃: 273.15 K、　電子の質量: m=9.11×10^{-31} kg、　プランク定数: h=6.624×10^{-34} [Js]、
プランク定数/2π: $\hbar$=1.055×10^{-34} [Js]、光速度: c=3.00×10^{8}　[m/s]

【3】固有値と固有関数　　解答2ページ目　　過去問を勉強してきた人のため

$\boldsymbol{x}$ 軸方向の一次元の箱の中の電子は、

$$X_{n_x}(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{\pi}{a}n_x x) \tag{15-3-1}$$

というシュレディンガー方程式の固有関数で表せる。各記号は講義の中で扱ったものと同じである。

n_x で指定される状態にある電子のエネルギーを測定すると、

$$E_{n_x}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x\pi}{a}\right)^2 \tag{15-3-2}$$

という確定値が得られる。

(1)　n_x で指定される状態にある電子の運動量を測定すると確定値が得られるかどうかを

$$p=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{15-3-3}$$

に対して $X_{n_x}(x)$ が固有関数になっているかどうかにより検証せよ。

(2)
$$\chi_{n_x}{}^{+}(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\exp(+i\frac{\pi}{a}n_x x) \tag{15-3-4}$$

$$\chi_{n_x}{}^{-}(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\exp(-i\frac{\pi}{a}n_x x) \tag{15-3-5}$$

と定義する関数を考える。

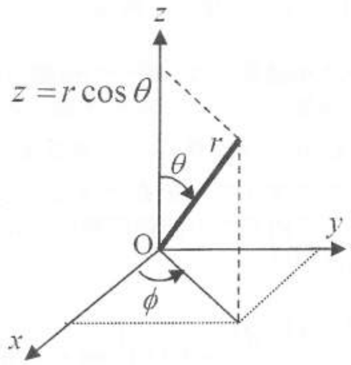
(15-3-4)と(15-3-5)が、$p=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)$ の固有関数になっていることを検証せよ。

(3)　$\chi_{n_x}{}^{+}(x)$ と $\chi_{n_x}{}^{-}(x)$ に対する $p=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)$ の固有値を求めよ。

(4)　$X_{n_x}(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{\pi}{a}n_x x)$ を $\chi_{n_x}{}^{+}(x)$ と $\chi_{n_x}{}^{-}(x)$ で表せ($\chi_{n_x}{}^{+}(x)$ と $\chi_{n_x}{}^{-}(x)$ で展開せよ、の意味)。

(5) 上記の計算を踏まえて、箱の中の粒子はどのような運動量をもっているかを論ぜよ。ここは、質と量で採点する。
数式を追加してもよい。

【4】水素原子の電子状態　　解答3ページ目



水素原子のシュレディンガー方程式を極座標で表す。各記号は講義で用いたものである。

(1) 直交座標 (x, y, z) を極座標 (r, θ, ϕ) で表せ。

極座標で表したシュレディンガー方程式の変数分離を行うと、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}-\frac{\lambda}{r^2}R(r)\right)+V(r)R(r)=E\,R(r) \qquad \text{(15-4-1)}$$

$$\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\}Y(\theta,\phi)+\lambda Y(\theta,\phi)=0 \qquad \text{(15-4-2)}$$

という方程式が得られる。水素原子中の電子の波動関数は、

$$\varphi(r,\theta,\phi)=R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi) \qquad \text{(15-4-3)}$$

と書き表せる。

(15-4-2)式の解のひとつに

$$Y_2^{-2}(\theta,\phi)=\left\{\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\right\}\times\left\{\sin^2\theta\right\}\times\left\{e^{-2i\phi}\right\} \qquad \text{(15-4-4)}$$

がある。

(2) (15-4-4)式は、z 軸方向の角運動量　$l_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$　の固有状態になっていることを示し、固有値を求めよ。

(3) (15-4-4)の波動関数は、化学で用いる軌道では、何に相当するか。

【5】摂動論　　解答3ページ目　　ここは完全規格直交系についての問題として

(1) 摂動論とは何か、弱い電界中の電子を例に説明せよ。

(2) 摂動論では、完全規格直交系の波動関数の性質を利用する。完全規格直交系の意味を説明せよ。
数式を用いてもよいし、用いなくてもよい。

(3) ある関数 $\varphi(r)$ を

$$\varphi(r)=c_1\chi_1(r)+c_2\chi_2(r)+c_3\chi_3(r)+\cdots=\sum_n c_n\chi_n(r) \qquad \text{(15-5-1)}$$

のように完全規格直交系である $\chi_j(r)$ によって展開したとする。記号は講義の中で用いたものである。

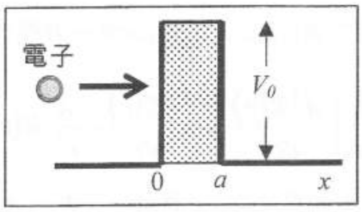
(15-5-1)式における展開係数 c_n が、

$$c_n=(\chi_n,\varphi)\equiv\iiint\chi_n{}^*(r)\varphi(r)dr \qquad \text{(15-5-2)}$$

となることを導け。

【6】トンネル効果　　解答 4 ページ目

トンネル効果とは、電子の伝搬方向にバリアが存在するとき、古典力学的には全反射が起こる場合でも量子力学的効果によって一部が透過する現象である。もう少し一般化すると、バリアが存在するときの散乱現象である。右図で $x \le 0$ および $a \le x$ 　ではポテンシャルは $V=0$ である。バリアの高さを $V_0\ (V=V_0)$ とし、入射電子のエネルギーを E とする。以下の場合の現象をシュレディンガー方程式(15-6-1)を用いて説明せよ。特に、バリア内部での波動関数の形に重点をおくこと。ただし、波動関数を求める必要はない。



$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right\}\varphi(x)=E\,\varphi(x) \qquad \text{(15-6-1)}$$

(1) $E<V_0$ のとき、 $0 \le x \le a$ 　の領域でのシュレディンガー方程式(15-6-1)を

$$\alpha=\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} \qquad \text{(15-6-2)}$$

として書き換えよ。

(2) $E<V_0$ のとき電子の透過と反射にどのような現象が現れるか。
$0 \le x \le a$ 　の領域での波動関数に注目して説明せよ。

(3) $E>V_0$ のとき、 $0 \le x \le a$ 　の領域でのシュレディンガー方程式(15-6-1)を

$$\beta=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} \qquad \text{(15-6-3)}$$

として書き換えよ。

(4) $E>V_0$ のとき電子の透過と反射にどのような現象が現れるか。
$0 \le x \le a$ 　の領域での波動関数に注目して説明せよ。