量子力学　中間試験　(2015 年 6 月 2 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授業での前提に沿って解答すること。
記号の意味は、授業の中で定義されたものである。
解答は、【1】、【2】、【3】、【4】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】 変数分離　　　解答欄: 1 ページ目

$\boldsymbol{x}$ 方向に勾配 $\boldsymbol{a}$ 、$\boldsymbol{y}$ 方向に勾配 $\boldsymbol{b}$ 、$\boldsymbol{z}$ 方向に勾配 $\boldsymbol{c}$ で直線的に変化するポテンシャル中の電子のシュレディンガー方程式は、次式で表される。

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(x,y,z)\right\}\varphi(x,y,z)=E\,\varphi(x,y,z) \tag{8-1-1}$$

$$V(x,y,z)=ax+by+cz \tag{8-1-2}$$

この解を

$$\varphi(x,y,z)=X(x)Y(y)Z(z) \tag{8-1-3}$$

として、$\boldsymbol{x}$ 、$\boldsymbol{y}$ 、$\boldsymbol{z}$ 各座標変数のみをもつ変数分離されたシュレディンガー方程式を導出せよ。
この問題は、最後の式ではなく、式の導出過程とその根拠(分離できる理由の説明)について採点する。

【2】 短い問題　　　解答欄: 2 ページ目、上半分

(1) 金属チタン(Ti)から電子を取り出すには、4.14eV のエネルギーが必要である。このエネルギーをジュール[J]で求めよ。

(2) 金属中の電子に光を当てるとある波長以下で電子が飛び出してくる。(1)の場合の波長の上限を求めよ。答えはナノメータ(nm)で表す。

(3) 光も電子も粒子であり、波でもある。量子力学で両者の異なる点を述べよ。

------------------------------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]

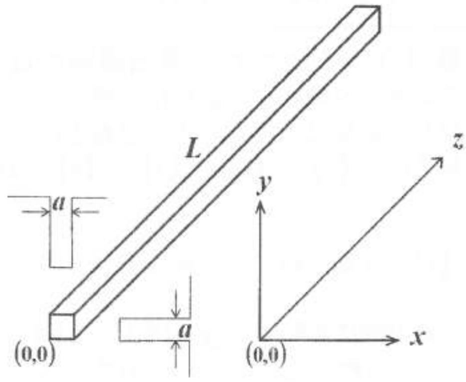
【3】基本問題　　解答欄: 2 ページ目下半分　～　3 ページ目

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 方向は十分長いとする。細線中($0 \leq x \leq a$ 、$0 \leq y \leq a$)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。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2X(x)}{dx^2}=E_xX(x) \qquad (8\text{-}3\text{-}1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Y(y)}{dy^2}=E_yY(y) \qquad (8\text{-}3\text{-}2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2Z(z)}{dz^2}=E_ZZ(z) \qquad (8\text{-}3\text{-}3)$$



(1) x, z の各軸方向の波動関数 $X(x)$、$Z(z)$ の境界条件を、題意に合わせて示せ。十分長い距離を表す時は、L (大文字)を用いる。

(2) $X(x) = Ae^{ik_xx} + Be^{-ik_xx}$ (8-3-4) を仮定して、x 軸方向の波動関数を以下の手順で求めよ。

(2-1) $x=0$ における境界条件から、B を消去せよ。消去した後は、$A'=i2A$ という定数を用いて整理する。

(2-2) $x=a$ における境界条件から、k_x を求めよ(8-3-5)。ただし、量子数を n_x とせよ。

(2-3) 波動関数を規格化せよ。ただし、$\sin^2\theta=\dfrac{(1-\cos 2\theta)}{2}$ を用いてよい。

(3) $Z(z)=Ge^{ik_zz}$ として k_z を求め(8-3-6)、規格化された $Z(z)$ を求めよ(8-3-7)。

(4) 電子のエネルギー、$E_n=E_{n_x}+E_{n_y}+E_{n_z}$ を、k_x、k_y、k_z の入らない式で示せ(8-3-8)。k_x 等の入らない式とは、量子数 $n_x=1,2,3\cdots$　$n_y=1,2,3\cdots$　$n_z=1,2,3\cdots$ を用いた式という意味である。y 方向は新たに計算する必要はなく、x 方向と同じ解を用いてよい。

(5) この細線が金属結晶(原子が規則正しく配列している)の場合、結晶ポテンシャルを考慮した z 方向に運動する電子の波動関数は、

$$\phi(x,y,z)=C(x,y)e^{ik_zz}u_{k_z}(z) \qquad (8\text{-}3\text{-}8)$$

$u_{k_z}(z+l)=u_{k_z}(z)$　ここで l (小文字)は、格子間隔　(8-3-9)

と表せる。その意味を説明せよ。本問題は、質と量の両者で採点する。減点はしないので、量も書くこと。また、a は数 nm で z 方向は十分長いことを意識した解答には加点する。

【4】一次元調和振動子　　解答欄: 4 ページ目

一次元調和振動子のシュレディンガー方程式 $\left(-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}+\dfrac{k}{2}x^2\right)X(x)=\varepsilon X(x)$ の解は、次式となる。(8-4-1)

$$X_n(x)=(n\text{を含む定数項})\times(x\text{の多項式})\times\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \qquad n=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ \cdots \quad (8\text{-}4\text{-}2)$$

(1) (8-4-2)式 $X_n(x)$ の 3 つの項の意味を述べよ。　$\omega=\sqrt{k/m}$ は古典的な調和振動子の角振動数である。

(2) $X_n(x)$ で $n=1$ のとき、(8-4-2)式第 2 項は $(x\text{の多項式})=2\sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}x$ (8-4-3)である。このときの(8-4-2)の概形を描け。

(3) 波動関数に対応するエネルギーは、$\varepsilon_n=(n+\dfrac{1}{2})\hbar\omega$ (8-4-4)である。このエネルギーの意味を論ぜよ。特に、$n=0$ のときのエネルギーの意味についても述べよ。