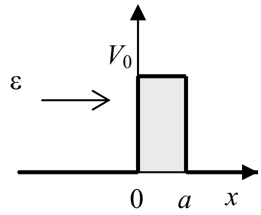
量子力学 I　期末試験問題（平成 20 年 6 月 30 日）



問題 I. *(1 枚目の解答用紙に答えよ)*壁型ポテンシャル $V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0, x > a) \\ V_0 & (0 < x < a) \end{cases}$ にエネルギー $\varepsilon (> 0)$ で質量 m の粒子が衝突する 1 次元運動を波動として考える（右図参照）。ここで、単位時間当たり一定数の粒子が負の方向から次々と壁に向かってきていて、時間に依存しない定常的な運動状態が実現されているとする。$\hbar$ はプランク定数を 2π で割った数である。

まず、$\varepsilon < V_0$ の場合について考える。ここで、$k = \sqrt{\dfrac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}$、$\lambda = \sqrt{\dfrac{2m(V_0 - \varepsilon)}{\hbar^2}}$ とする。

（1）　時間を含まないシュレディンガー方程式を答えよ。また、物理的に意味のある一般解の形を答えよ。

（2）　物理的な制約から、上で求めた一般解はある条件を満たさなければいけない。どのような条件を満たさなければいけないか具体的に答えよ。

（3）　反射率 R と透過率 T の和が 1 になることを示せ。ここで、入射波に対する反射波及び透過波の振幅の比は $\dfrac{(k^2 + \lambda^2)\sinh(\lambda a)}{(k^2 - \lambda^2)\sinh(\lambda a) + 2ik\lambda\cosh(\lambda a)}$ 及び $\dfrac{2ik\lambda e^{-ika}}{(k^2 - \lambda^2)\sinh(\lambda a) + 2ik\lambda\cosh(\lambda a)}$ となることは周知の事実として用いてよい。

（4）　$\varepsilon << V_0$ のとき、透過率 T は近似的に $\dfrac{16\varepsilon(V_0 - \varepsilon)}{{V_0}^2} e^{-2\lambda a}$ と表せることを示せ。

次に、$\varepsilon > V_0$ の場合について考える。ここで、$k = \sqrt{\dfrac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}$、$\kappa = \sqrt{\dfrac{2m(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}}$ とする。

（5）　$\varepsilon < V_0$ のときの結果を踏まえて、$\varepsilon > V_0$ のときの入射波に対する透過波の振幅の比が $\dfrac{2k\kappa e^{-ika}}{-i(k^2 + \kappa^2)\sin(\kappa a) + 2k\kappa\cos(\kappa a)}$ となることを示せ。

（6）　透過率 T を表す式を求めよ。また、$\varepsilon \to V_0 + 0$ のときの極限値を求めよ。

$\varepsilon < V_0$ 及び $\varepsilon > V_0$ の結果をまとめて考える。

（7）　透過率 T の ε 依存性の概略をグラフに示し、古典力学から考えられる結果との相違点を述べよ。

問題 II. *(1 枚目の解答用紙に答えよ)* 直交座標表示の微分演算子の極座標表示への変換を考える。

（1）　$\dfrac{\partial\theta}{\partial y} = \dfrac{\cos\theta\sin\phi}{r}$ を示せ。また、$\dfrac{\partial\phi}{\partial y} = \dfrac{\cos\phi}{r\sin\theta}$ を示せ。ヒント：$\tan^2\theta = \dfrac{x^2 + y^2}{z^2}$、$\tan\phi = \dfrac{y}{x}$

（2）　$\dfrac{\partial}{\partial y} = \sin\theta\sin\phi\dfrac{\partial}{\partial r} + \dfrac{1}{r}\cos\theta\sin\phi\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \dfrac{\cos\phi}{r\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\phi}$ を示せ。

（3）　角運動量の x 成分に対する演算子が $l_x = i\hbar\left(\sin\phi\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \dfrac{\cos\phi}{\tan\theta}\dfrac{\partial}{\partial\phi}\right)$ となることを示せ。ヒント：$\dfrac{\partial}{\partial z} = \cos\theta\dfrac{\partial}{\partial r} - \dfrac{1}{r}\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}$

ちなみに、上の結果と角運動量の y 及び z 成分に対する式 $l_y = i\hbar\left(-\cos\phi\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \dfrac{\sin\phi}{\tan\theta}\dfrac{\partial}{\partial\phi}\right)$ 及び $l_z = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\phi}$ を用いて $\vec{l}^{\,2} = {l_x}^2 + {l_y}^2 + {l_z}^2$ を計算すると、角運動量の大きさの二乗に対する演算子は $\vec{l}^{\,2} = -\hbar^2\left(\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right) + \dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$ と求まる。

（裏面に続く）

問題 III. *(2枚目の解答用紙に答えよ)* 水素原子の電子（質量m_e、電荷$-e$）に対する固有関数は$\varphi_{nlm}(r,\theta,\phi)=R_{nl}(r)\cdot Y_l^{\,m}(\theta,\phi)$と動径部分と角度部分を表す関数の積の形で表される。そのエネルギー固有値は$E_n=-\dfrac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\dfrac{1}{n^2}$で与えられ、$n$は自然数、$l$は$l<n$なる零以上の整数、$\varepsilon_0$は真空の誘電率である。また、$\dfrac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\approx$-13.6 [eV]となる。

動径部分を具体的に表すと、$R_{10}(r)=\left(\dfrac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}2e^{-\frac{r}{a_0}}$、$R_{20}(r)=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\dfrac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(1-\dfrac{1}{2}\dfrac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{1}{2}\frac{r}{a_0}}$、$R_{21}(r)=\dfrac{1}{2\sqrt{6}}\left(\dfrac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\dfrac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{1}{2}\frac{r}{a_0}}$などとなる（$a_0$はボーア半径）。

角度部分を表す$Y_l^{\,m}(\theta,\phi)$は球面調和関数であり、$|m|\le l$なる整数m、規格化定数C_{lm}、ルジャンドルの陪関数$P_l^{|m|}(\cos\theta)$を用いて$Y_l^{\,m}(\theta,\phi)=C_{lm}\cdot P_l^{|m|}(\cos\theta)\cdot e^{im\phi}$と表され、微分方程式$\left(\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right)+\dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)Y_l^{\,m}(\theta,\phi)+l(l+1)Y_l^{\,m}(\theta,\phi)=0$の解になっている。$Y_l^{\,m}(\theta,\phi)$を具体的に表すと、$Y_0^{\,0}(\theta,\phi)=\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$、$Y_1^{\,0}(\theta,\phi)=\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\cos\theta$、$Y_1^{\,\pm1}(\theta,\phi)=\mp\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\sin\theta\cdot e^{\pm i\phi}$などとなる。

まず、動径部分について考えよう。

（1） 横軸に距離rをとり、$R_{20}(r)$と$R_{21}(r)$の様子をグラフに描け。

（2） 基底状態に対して電子の存在確率が最大となる動径位置を答えよ。

次に、角度部分について考えよう。

（3） 球面調和関数$Y_l^{\,m}(\theta,\phi)$は$\vec{l}^{\,2}$に対する固有関数になっていることを示すとともに、その固有値を答えよ。

（4） 球面調和関数$Y_l^{\,m}(\theta,\phi)$はl_zの固有関数にもなっていることを示し、その固有値を答えよ。

（5） $\vec{l}^{\,2}$に対する固有値で2番目に大きいものの値を答えよ。また、そのときl_zに対する固有値はいくらになっているか答えよ。

最後に、φ_{nlm}について考えよう。

（6） n、l、mは何と呼ばれているか、それぞれの名称を答えよ。

（7） 固有関数φ_{210}の具体的な関数形を答えよ。また、節（絶対値が零となる面）がどこにあるか答えよ。

（8） 第2励起状態までのエネルギー準位の並びの様子を図に記せ。

（9） 各エネルギー準位はn^2重縮退になっていることを示せ。