量子力学Ｉ　期末試験問題（平成 25 年 8 月 7 日）

以下において、$\hbar$ はプランク定数を 2π で割った数を表わす。

問題 Ｉ.　水素原子の電子に対する固有関数は、３つの量子数 n, l, m を用いて、動径部分と角度部分の積の形 $\varphi_{nlm} = R_{nl}(r)\cdot Y_l^m(\theta,\phi)$ で与えられる。このとき、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、$\dfrac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2} \cong 13.6$ [eV] である。ここで、ε_0 は真空の誘電率、a_0 はボーア半径 $a_0 = \dfrac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$、$m_e$ 及び e はそれぞれ電子の質量及び素電荷である。

以下の問いに答えよ。

（１）$R_{21}(r)$ について考える。

i.　具体的な関数形を示せ。

ii.　単位立体角あたりの $|R_{21}(r)|^2$ を考えるとき、その値が最大となる r を答えよ。

（２）$Y_1^0(\theta,\phi)$ の具体的な関数形を示せ。

（３）φ_{210} で表わされる運動状態に対して、電子の存在確率が最大となる位置を答えよ。

（４）角運動量の大きさの二乗 $|\vec{l}|^2$ の値を観測すると $12\hbar^2$ が得られたとしよう。

i.　この運動状態に対応する量子数 n の値として可能性があるものを答えよ。

ii.　この運動状態において角運動量の z 方向成分 l_z の値として観測される可能性があるものを答えよ。

（５）$\varphi_{2p_y} = \dfrac{i}{\sqrt{2}}(\varphi_{211} + \varphi_{21-1})$ なる一次結合で表わされる運動状態に対し、l_z の期待値を求めよ。

（６）水素原子ではエネルギー準位間のエネルギー差に対応して特定の波長の可視光の吸放出が観測される。ここで、波長 486 nm の光の放出が観測されたとしよう。この発光はどの準位間の遷移によるものと考えられるか。エネルギー準位の様子を図示（エネルギー原点を示すこと）し、その図中でどの準位からどの準位への遷移に対応するか示せ。

ヒント：波長 486 nm のフォトンエネルギーは $h\nu = hc/(486\times10^{-9}) \approx 2.55$ [eV]。但し、ν は振動数、c は光速。

参考

$$R_{nl}(r) = C_{nl}\cdot\left(\frac{r}{a_0}\right)^l\cdot e^{-\frac{1}{n}\frac{r}{a_0}}\cdot L_{n+l}{}^{2l+1}\left(2\frac{1}{n}\frac{r}{a_0}\right)$$ に関して：

$$C_{nl} = \left(\frac{2}{n}\right)^l\sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n\left((n+l)!\right)^3}}\ ,\quad L_q{}^p(\rho) = \sum_{k=0}^{q-p}(-1)^k\frac{(q!)^2}{(q-p-k)!(p+k)!k!}\rho^k\ ,\quad \int_0^\infty\left(R_{nl}(r)\right)^*\cdot R_{n'l}(r)r^2dr = \delta_{nn'}$$

$$Y_l^m(\theta,\phi) = C'_{lm}\cdot P_l^{|m|}(\cos\theta)\cdot e^{im\phi}$$ に関して：

$$C'_{lm} = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\ ,\quad P_l^{|m|}(\cos\theta) = \sin^{|m|}\theta\cdot\frac{d^{|m|}}{d(\cos\theta)^{|m|}}\left[\frac{1}{2^l l!}\left(\frac{d^l}{d(\cos\theta)^l}(\cos^2\theta-1)^l\right)\right]$$

$$\int_0^{2\pi}\int_0^\pi\left(Y_l^m(\theta,\phi)\right)^*\cdot Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

$Y_l^m(\theta,\phi)$ は演算子 $\left(\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right)+\dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$ の固有関数でその固有値は $-l(l+1)$ であり、

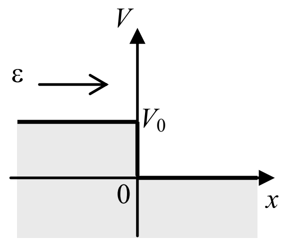
また $Y_l^m(\theta,\phi)$ には ϕ の関数として $e^{im\phi}$ が含まれるため、$\dfrac{\partial}{\partial\phi}Y_l^m(\theta,\phi) = im\cdot Y_l^m(\theta,\phi)$ となる。

角運動量の大きさの二乗 $|\vec{l}|^2$ に対する演算子：　$|\vec{l}|^2 = -\hbar^2\left(\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right)+\dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$

角運動量の z 方向成分 l_z を表す演算子：　$l_z = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\phi}$

（裏面に続く）

問題 II.　一次元において、右図に示すような階段状に変化するポテンシャル（$x < 0$ のとき $V = V_0\ (> 0)$、$x > 0$ のとき $V = 0$）に負の方向から質量 M、エネルギー $\varepsilon\ (> V_0)$ の粒子が向かってきている。



以下の問いに答えよ。

（１）波動関数を $\varphi(x)$ とする。定常状態に対するシュレディンガー方程式の具体的な形を答えよ。

（２）$x < 0$ でのシュレディンガー方程式に対する数学的な一般解の形は $\varphi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$ である。（ここで、$k_1 = \sqrt{\dfrac{2M(\varepsilon - V_0)}{\hbar^2}}$ であり、A 及び B は任意定数である。）この粒子の運動を波動として捉えた場合、Ae^{ik_1x} 及び Be^{-ik_1x} の項は各々何に対応しているか答えよ。

（３）$x > 0$ においてもシュレディンガー方程式の数学的な一般解の形は $x < 0$ と同様である。しかし、物理的に適した解の形は $\varphi(x) = Ce^{ik_2x}$ である。e^{-ik_2x} の項を省略する理由について答えよ。ここで、$k_2 = \sqrt{\dfrac{2M\varepsilon}{\hbar^2}}$ であり、C は任意定数である。

（４）波動関数に課せられる‘ある’条件から、係数 A, B, C についての連立方程式が導くことができる。

i.‘ある’条件とはどのようなものか、具体的に述べよ。

ii.　係数 A, B, C についての連立方程式の具体的な形を答えよ。

（５）係数 A に対する係数 B 及び C の比 B/A 及び C/A を k_1, k_2 を用いて表せ。

（６）$M = 9.1\times10^{-31}$ [kg]、$\varepsilon = 4.4$ [eV]、$V_0 = 4.0$ [eV] のとき、この階段型ポテンシャルを通過する粒子の透過率を求めよ（根号は残したままでも良いし、有効数字 2 桁で答えても良い。必要ならば $\hbar = 1.05\times10^{-34}$ [Js] の値を用いよ）。