量子論基礎B 試験問題 （担当：伊藤、森） 平成22年7月26日実施

【注意事項】 (1) 問題文中で定義されていない文字を使用する場合は、定義して使用すること。
(2) 解答は、導出過程を明らかにし、かつ、要領よく記すこと。

【1】以下の (1) ～ (5) の設問の中から、3題選択して解答せよ。

(1) 古典論ではうまく説明できないため、量子論が登場する契機となった物理現象を1つ上げ、古典論では説明できない理由を記せ。

(2) エルミート演算子とはどのような演算子か。また、運動エネルギー演算子がエルミート演算子であることを、1次元の場合について示せ。

(3) エーレンフェストの定理について、具体例をあげて説明せよ。

(4) 量子論における「不確定性原理」とは何か。具体例をあげて説明せよ。

(5) 量子論における「トンネル効果」について、適当な図を用いて定性的に論ぜよ。

【2】以下の文章を読み、各問いに答えよ。なお、x , y , z は、直角座標を表す変数である。

(1) 質量 m の粒子に対する、時間に依存しない3次元シュレーディンガー(Schrödinger)方程式は、波動関数を $\Phi(x,y,z)$、粒子のエネルギーを E とすると、

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(x,y,z)\right\}\Phi(x,y,z) = E\,\Phi(x,y,z) \qquad Ⓐ$$

となる。ただし、$\hbar = h/2\pi$ （h：プランク(Planck)定数）で、$E>0$ とする。ここで、ポテンシャルエネルギー $V(x,y,z)$ が、$V(x,y,z)=V_1(x)+V_2(y)+V_3(z)$ と表される場合を考えることにする。但し、$V_1(x)$, $V_2(y)$, $V_3(z)$ はそれぞれ、x , y , z のみの関数である。

①シュレーディンガー方程式 Ⓐ は、x 、y または z のみに関する1次元シュレーディンガー方程式の問題に帰着できることを示せ。

②上記の各ポテンシャルが、$V_1(x)=cx^2, V_2(y)=cy^2, V_3(z)=cz^2$ $(c>0)$ と表される場合、①で導出した x に関する1次元シュレーディンガー方程式を満たす規格化された波動関数を $\varphi(x)$ とすると、x と適切な量子数(非負整数) n_x との既知関数である $f(x,n_x)$ を用いて、$\varphi(x)=f(x,n_x)$ と書け、そのエネルギー固有値 E_x は適切な正定数 λ を用いて、$E_x=\lambda(n_x+\frac{1}{2})$ と表されることが知られている(証明不要)。このとき、3次元シュレーディンガー方程式 Ⓐ を満たす規格化された波動関数 $\Phi(x,y,z)$ 及び そのエネルギー固有値 E を、関数 f や定数 λ 等を用いて表せ。

(2) 3次元の波動関数 $\Psi(x,y,z)$ が、平面波で表される場合を考える。

③「平面波」とはどのような波か。

④平面波の波数ベクトルを $\mathbf{k}=\mathbf{u}_x k_x+\mathbf{u}_y k_y+\mathbf{u}_z k_z$ （$\mathbf{u}_x$, $\mathbf{u}_y$, $\mathbf{u}_z$ は、それぞれ、x , y , z 方向の単位ベクトル)、位置ベクトルを $\mathbf{r}=\mathbf{u}_x x+\mathbf{u}_y y+\mathbf{u}_z z$、として、$\Psi(x,y,z)$ を具体的な式で表せ。また、その式が、③で解答した「平面波」となっていることを示せ。

⑤x 方向の運動量演算子は、$\hat{p}_x=-i\hbar\partial/\partial x$ で与えられる。$\Psi(x,y,z)$ に、$\hat{p}_x$ 及び $\hat{p}_x{}^2$ を作用させよ。また、これらの演算子に対する固有値があれば、それらを求めよ。

⑥波動関数 $\Psi(x,y,z)$ に対して、x , y , z 方向に、それぞれ、L_x , L_y , L_z を周期とする周期的境界条件が成立するものとする。この場合の境界条件を、$\Psi(x,y,z)$ を用いて表せ。また、この周期的境界条件を満たす $\mathbf{k}$ の z 成分 k_z を求めよ。

【3】次の文章を読んで、以下の問いに答えよ。

ポテンシャルエネルギー $V(x)$ の中を運動する、質量 m 、エネルギー E の量子力学的1次元粒子の波動関数 $\psi(x)$ が満たすべき、時間に依存しないシュレーディンガー方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \qquad \text{Ⓑ}$$

と表せる。ただし、$\hbar = h/2\pi$ （h ：プランク(Planck)定数）で、$E > 0$ とする。

(1) まず、 $V(x)$ として、次のような山型ポテンシャルを考える（$a > 0$）。

$$\begin{cases} \text{領域 (I)}: & x < 0 \text{ で、} & V(x) = 0 \\ \text{領域 (II)}: & 0 \le x \le a \text{ で、} & V(x) = V_0 \quad (>0) \\ \text{領域 (III)}: & x > a \text{ で、} & V(x) = 0 \end{cases}$$

① 領域(I)の波動関数 $\psi_{\mathrm{I}}(x)$ が２つの平面波の和として表せる場合、$\psi_{\mathrm{I}}(x)$ を具体的に書け。

② ①で記した２つの平面波は、x の増大する方向に進行する平面波、及び、その逆方向に進行する平面波であることを示せ。

③ $E < V_0$ の場合について、領域(II) における（規格化されていない）波動関数 $\psi_{\mathrm{II}}(x)$ を具体的に記せ。

④ 領域(III)における波動関数 $\psi_{\mathrm{III}}(x)$ は x の増大する方向に進行する平面波のみで構成されるものとするとき、3 つの領域の境界において、波動関数 $\psi_{\mathrm{I}}(x)$, $\psi_{\mathrm{II}}(x)$ 及び $\psi_{\mathrm{III}}(x)$ の間に満たされるべき境界条件を、$\psi_{\mathrm{I}}(x)$, $\psi_{\mathrm{II}}(x)$ 及び $\psi_{\mathrm{III}}(x)$ を用いて表せ。

(2) 次に、 $V(x)$ として、次のような井戸型ポテンシャルを考える（$a > 0$）。

$$\begin{cases} \text{領域 (I)}: & x < -a \text{ で、} & V(x) \to \infty \\ \text{領域 (II)}: & -a \le x \le 0 \text{ で、} & V(x) = 0 \\ \text{領域 (III)}: & x > 0 \text{ で、} & V(x) \to \infty \end{cases}$$

⑤ 領域(I) 及び (III) における波動関数をそれぞれ $\varphi_{\mathrm{I}}(x)$ 及び $\varphi_{\mathrm{III}}(x)$ とする時、$\varphi_{\mathrm{I}}(x)$ 及び $\varphi_{\mathrm{III}}(x)$ を求めよ。

⑥ 領域(II) における波動関数を $\varphi_{\mathrm{II}}(x)$ とする。$\varphi_{\mathrm{II}}(x)$ は、微分方程式 Ⓑ の一般解として、どのような関数で表されるか。また、$\varphi_{\mathrm{II}}(x)$ に適用される境界条件を記せ。

⑦ ⑥で解答した境界条件を満たす波動関数 $\varphi_{\mathrm{II}}(x)$ を求めよ。

⑧ (2)のポテンシャルに対して、⑤及び⑦で求めた波動関数を規格化せよ。

⑨ (2)のポテンシャルに対して得られた波動関数のエネルギー固有値を求めよ。

⑩ 波動関数の直交性とは何かを説明せよ。また、(2)のポテンシャルに対して得られた波動関数を用いて、その具体例を示せ。

⑪ 量子論では、最小エネルギーの量子状態、及び、それより大きいエネルギーの量子状態をそれぞれ何状態と呼ぶか。また、(2)のポテンシャルの場合の最小エネルギーを求めよ。