量子力学IB 試験問題 （担当：伊藤、杉野、森） 平成18年2月6日実施

【1】水素原子における電子のエネルギー状態に関するボーア量子論（前期量子論）の概要について、定量的に述べよ。

【2】以下の文章を読み、各問に答えよ。なお、$x, y, z, t$ は、直角座標及び時間を表す変数である。

時間に依存しない3次元のシュレーディンガー方程式は、

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

と表せる。但し、$\hbar = h/2\pi$ （$h$ はプランク定数）、$m$ は粒子の質量、$V(x,y,z)$ はポテンシャルエネルギー、$E$ はエネルギー固有値である。

(1) $V(x,y,z) = ax^2 + ay^2 + az^2$ と表されるとき、シュレーディンガー方程式(A) は、1 次元のシュレーディンガー方程式の問題に帰結できることを示せ。なお、 $a$ は定数である。

(2) (1) で求めた $x$ に関する1次元シュレーディンガー方程式の解である、規格化された波動関数が、量子数 $n_x$ を用いて、$\varphi(x, n_x)$ と表わせるとき、$x, y, z$ に関する3次元シュレーディンガー方程式(A)の解を、適当な量子数と関数 $\varphi$ を用いて表わせ。

(3) $\Phi(x,y,z,t)$ を 3 次元の平面波とするとき、その式を記せ。但し、平面波の波数ベクトルを $\mathbf{k} = \mathbf{i}_x k_x + \mathbf{i}_y k_y + \mathbf{i}_z k_z$ （$\mathbf{i}_x$、$\mathbf{i}_y$、$\mathbf{i}_z$ はそれぞれ $x, y, z$ 方向の単位ベクトル）、角振動数を $\omega$ とする。

(4) 平面波は、$V(x,y,z)=0$ の場合のシュレーディンガー方程式(A)の解の一つである。(3) で記した $\Phi(x,y,z,t)$ から、時間に依存しない3次元のシュレーディンガー方程式（A）を満たす波動関数 $\phi(x,y,z)$ を求めよ。このとき、エネルギー $E$ を、$\mathbf{k}$ を用いて表わせ。必要ならば、$k=|\mathbf{k}|$ を用いよ。また、$k$ と波長 $\lambda$ との関係を導け。

【3】次の文章を読んで、以下の問いに答えよ。

質量 $m$、エネルギー $E$ の量子力学的粒子が、ポテンシャルエネルギー $V(x)$ の中を運動するときに満たすべき1次元波動関数 $\varphi(x)$ に関するシュレーディンガー方程式は、

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

と表せる。ただし、$\hbar = h/2\pi$ （$h$：プランク定数）である。

(1) $V(x)$ として、次のような無限高井戸型ポテンシャルを考える。

$$\begin{cases} \text{領域 (i)} \quad x<-a,\ x>a \ \text{で、} & V \to +\infty \\ \text{領域 (ii)} \quad -a \le x \le a \ \text{で、} & V = 0 \end{cases}$$

① 領域(i)における波動関数 $\varphi_1(x)$ は、$\varphi_1(x) \equiv 0$、となることに注意し、領域(ii)における波動関数 $\varphi_2(x)$ が満たすべき境界条件を書け。また、満たすべき規格化条件を、$\varphi_2(x)$ を用いて表わせ。

② シュレーディンガー方程式(B)の解で、①に記載した両条件を満たす、領域(ii)における規格化された波動関数 $\varphi_2(x)$ を求めよ。

(2) 次に、$V(x)$ として、次のような無限高井戸型ポテンシャルを考える。

$$\begin{cases} \text{領域 (iii)} \quad x < 0, \quad x > 2a \ \text{で、} \quad V \ \rightarrow \ +\infty \\ \text{領域 (iv)} \quad 0 \leq x \leq 2a \ \text{で、} \quad V \ = \ 0 \end{cases}$$

① 領域(iii)における波動関数 $\varphi_3(x)$ は、(1) と同様にして、$\varphi_3(x) \equiv 0$、となることに注意して、シュレーディンガー方程式(B)を満たす、領域(iv)における規格化された波動関数 $\varphi_4(x)$ を求めよ。

② 波動関数 $\varphi_4(x)$ と波動関数 $\varphi_2(x)$ との関連を具体的に示せ。また、その物理的な理由も記せ。

(3) 更に、$V(x) = 0$ である場合における、シュレーディンガー方程式(B)の解のうち、運動量固有値を持つ規格化された波動関数 $\varphi_{\mathrm{p}}(x)$ を求めよ。但し、周期的境界条件 $\varphi_{\mathrm{p}}(x+L) = \varphi_{\mathrm{p}}(x)$ (周期 $L$) が成立するものとする。

(4) (1) ~ (3) で求めた波動関数 $\varphi_2(x)$、$\varphi_4(x)$ または $\varphi_{\mathrm{p}}(x)$ のいずれか一つについて、互いに異なるエネルギー固有値を持つ波動関数は直交することを示せ。

(5) 不確定性原理とは何かを簡潔に説明せよ。また、(1) ~ (3) で求めた波動関数 $\varphi_2(x)$、$\varphi_4(x)$ または $\varphi_{\mathrm{p}}(x)$ のいずれか一つを用いて、それが成立していることを示せ。

但し、必要ならば、$x$ 方向の運動量演算子を $\hat{p}_x$ とした場合、証明(導出)することなく、

$$\bar{x} = \int_{-a}^{+a} \varphi_2^*(x)\, x\, \varphi_2(x)\, dx \text{ 、} \int_{-a}^{+a} \varphi_2^*(x) \left(x - \bar{x}\right)^2 \varphi_2(x)\, dx = \left(\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2}\right) a^2 \text{、}$$

$$\overline{p_x} = \int_{-a}^{+a} \varphi_2^{\,*}(x)\, \hat{p}_x\, \varphi_2(x)\, dx \text{、} \int_{-a}^{+a} \varphi_2^{\,*}(x) \left(\hat{p}_x - \overline{p_x}\right)^2 \varphi_2(x)\, dx = \frac{n^2\pi^2}{4a^2}\hbar^2 \text{、(} n \text{ は正整数)、}$$

$\sqrt{\pi^2/3 - 2} = 1.135\ldots$、となることを用いてよい。

【4】 1次元ポテンシャル $V(x)$ の中を運動する、エネルギー固有値 $E$ を有する1次元粒子について、以下の問に答えよ。但し、粒子の質量を $m$ とする。

(1) $V(x)$ が $x$ によらず一定な場合、$x$ が増大する方向に進む粒子に対応する波動関数 $\varphi(x)$ がどのように記載されるか、理由をつけて示せ。

(2) 適当な形の ( $x$ に依存する) $V(x)$ を考慮することにより、トンネル効果について、定性的に論ぜよ。