平成 22 年 2 月 3 日

平成 21 年度量子力学 A 試験問題（担当：森田教授、片山教授、阿部准教授）

以下の問に答えよ。解答用紙に、学籍番号と所属する学科目名を必ず記すこと。
問１と問２をそれぞれ解答用紙 A と B の各１部に解答すること。

【解答用紙~~B~~A】（５０％）

問１　基底状態（1s 状態）にある水素原子について以下の問に答えよ。その固有関数$\varphi_{1s}^{(0)}(r,\theta,\phi)$は次式で与えられる。

$$\varphi_{1s}^{(0)}(r,\theta,\phi)=\sqrt{\frac{1}{\pi a^3}}\exp(-r/a) \qquad (a\text{ はボーア半径})$$

(1) 基底状態における $x,\ y,\ z$ 方向の電子の位置の期待値$\langle x\rangle,\ \langle y\rangle,\ \langle z\rangle$はそれぞれ 0 であること、すなわち、次式が成り立つことを示せ。

$$\left\langle \varphi_{1s}^{(0)}\middle|x\middle|\varphi_{1s}^{(0)}\right\rangle=0,\ \left\langle \varphi_{1s}^{(0)}\middle|y\middle|\varphi_{1s}^{(0)}\right\rangle=0$$

$$\left\langle \varphi_{1s}^{(0)}\middle|z\middle|\varphi_{1s}^{(0)}\right\rangle=0 \qquad ①$$

ここで、極座標表示$(r,\ \theta,\ \phi)$では、$x=r\sin\theta\cos\phi,\ y=r\sin\theta\sin\phi,\ z=r\cos\theta$であり、$\hat{A}$の期待値は次式で表されることを用いよ。

$$\left\langle \varphi_{1s}^{(0)}\middle|\hat{A}\middle|\varphi_{1s}^{(0)}\right\rangle=\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty}\left|\varphi^{(0)}(r)\right|^2\hat{A}\ r^2\sin\theta\ dr\ d\theta\ d\phi$$

(2) この系に強さ F の一様な電場が z 方向に印加され、摂動ハミルトニアンが$H'=eFz$ である場合を考える。
ここで、第一次摂動近似での固有関数を $\Psi_{1s}=\varphi_{1s}^{(0)}+\varphi_{1s}^{(1)}$ とおくと、$\varphi_{1s}^{(1)}$は次式のように解析的に与えられる。

$$\varphi_{1s}^{(1)}=-4\pi\varepsilon_0\frac{F}{e}\sqrt{\frac{1}{\pi a^3}}\left(ar+\frac{1}{2}r^2\right)\exp\left(-\cancel{a/r}\,\frac{r}{a}\right)\cos\theta \qquad (-e\text{ は電子の電荷、}\varepsilon_0\text{ は真空の誘電率})$$

z 方向の電子の位置の期待値$\langle z\rangle$は、$\left\langle\Psi_{1s}\middle|z\middle|\Psi_{1s}\right\rangle=\left\langle\varphi_{1s}^{(0)}+\varphi_{1s}^{(1)}\middle|z\middle|\varphi_{1s}^{(0)}+\varphi_{1s}^{(1)}\right\rangle$を展開し、それぞれの積分の和から求めることができるが、θについての積分を用いると、次式で表されることを示せ。

$$\langle z\rangle=2\left\langle\varphi_{1s}^{(0)}\middle|z\middle|\varphi_{1s}^{(1)}\right\rangle \qquad ②$$

(3) $\rho=r/a$とおき、$H'=eFz$の摂動が加わった場合の$\langle z\rangle$を $4\pi\varepsilon_0,\ a,\ F,\ e$ およびρの定積分（$\int_0^{\infty}f(\rho)d\rho$の形式）を用いて表せ。

(4) 前問の解は、分極率αを用いて、次式で与えられる。

$$\langle z\rangle=-\frac{\alpha F}{e} \qquad ③$$

上の結果から、αを求めよ。必要ならば、$\int_0^{\infty}x^n\exp(-\kappa\ x)=\dfrac{n!}{\kappa^{n+1}}$ の関係を用いよ。

(5) 第二次摂動近似の範囲でのエネルギー固有値E_{1s}は、無摂動系での基底状態のエネルギー$E_{1s}^{(0)}$を用いて、次のように与えられる。

$$E_{1s}=E_{1s}^{(0)}+\left\langle\varphi_{1s}^{(0)}\middle|H'\middle|\varphi_{1s}^{(0)}\right\rangle+\left\langle\varphi_{1s}^{(0)}\middle|H'\middle|\varphi_{1s}^{(1)}\right\rangle$$

式①～③、および$H'=eFz$の関係から、$E_{1s}=E_{1s}^{(0)}-\dfrac{1}{2}\alpha F^2$ であることを示せ。

【解答用紙B】（５０％）

問２ 以下の問に答えよ。

(1)　時間に依存する摂動 $H'(t)$ が加わった時のシュレーディンガー方程式を、

$$[H_0 + H'(t)]\Psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t)$$

として、これを解くために、求めたい時間に依存する波動関数 $\Psi(\vec{r},t)$ を、

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n(t)\varphi_n(\vec{r})\exp(-i\frac{E_n^{(0)}}{\hbar}t)$$

と展開する。ここで $c_n(t)$ は時間に依存する展開係数である。終状態を $\varphi_f(\vec{r},t)$ として、

直交関係 $< f/n >= \delta_{fn}$ を用いて、$c_f(t)$ と $c_n(t)$ の関係式を求めよ。

(2)　次に、時間に依存しない場合と同様に $H'(t)$ を $\lambda H'(t)$ (λ は無次元の小さい定数)とおき、さらに、

$$c_n(t) = c_n^{(0)} + \lambda c_n^{(1)}(t) + \lambda^2 c_n^{(2)}(t) + \ldots,$$

と展開し、λ のべきが同じ両辺が等しいとして、λ^0 、λ^1 、λ^2 の項の係数から得られる関係式を求めよ。

(3)　(d_x, d_y, d_z) の直方体に閉じ込められた電子のエネルギー E と波数 (k_x, k_y, k_z) を量子数の組 (n_x, n_y, n_z)

を用いて求めよ。

(4)　(d,d,d) の立方体に閉じ込められた三次元自由電子のエネルギーは量子数の組 (n_x, n_y, n_z) で決まる。

三次元 $\vec{k}$ 空間を考えて原点からの距離 $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$ として、スピンの縮退まで考えた時の、

エネルギー 0 と E の間に含まれる状態の数を求めよ。次に、E と $E + dE$ の間の状態密度を求めよ。

(5)　$d_x, d_y \langle\langle d$ となって電子の運動が (x, y) 方向で量子化され自由な運動が z 方向のみとなった

二次元量子井戸のエネルギー 0 と E の間に含まれる状態の数と E と $E + dE$ の間の状態密度を求めよ。