量子力学　参考問題

出題範囲キーワード：量子論の基礎，シュレーディンガー方程式，

ポテンシャル問題，水素様原子，エルミート演算子

量 子 力 学　QUANTUM MECHANICS

量子論の基礎（ド・ブロイ波長、不確定性関係、光電効果）

１．電子，陽子およびアルファ粒子が同じ運動エネルギーを持つとき，どの粒子が最も長いド・ブロイ波長を有するか示し，その理由を説明せよ.

２．一辺 a の立方体の中に電子が閉じ込められている. 電子の最も低いエネルギーを不確定性原理を用いて計算せよ.

３．水素原子に対して光電効果を起こす光子の最小振動数を求めよ. ただし，水素原子中の電子の結合エネルギーを 13 eV とする. また, プランク定数を 6.63×10^{-34} J$\cdot$s , 1 eV を 1.60×10^{-19} J とする.

４．振動数が ν である光子が金属に入射したときに出てくる光電子について考える. この金属の仕事関数を ϕ とし，プランク定数 h を用いて、光電子の運動エネルギー E を求めよ. ただし，電子の運動に関する相対論的効果は無視できるものとする.

波動関数、シュレーディンガー方程式、ポテンシャル

１．一次元空間の $0\le x\le L$ の領域に閉じ込められた質量 m の自由粒子を考える.

（１）粒子の規格化された波動関数は，$\varphi_n(x)=\sqrt{2/L}\,\sin(n\pi x/L)\quad(n=1,2,3,\cdots)$ で与えられることを示せ.

（２）異なる状態の波動関数は互いに直交することを示せ.

２．自由粒子の時間に依存しないシュレーディンガー方程式は，次のように表される．

$$\hat{H}\varphi(x,y,z)=E\varphi(x,y,z)$$

ここで， E および $\varphi(x,y,z)$ は，それぞれハミルトニアン $\hat{H}$ の固有値および固有関数である．以下の問いに答えよ．

（１）$\varphi(x,y,z)$ は $\varphi(x,y,z)=\varphi_x(x)\,\varphi_y(y)\,\varphi_z(z)$ と変数分離法で表わされるものとして，$\varphi_x(x)$，$\varphi_y(y)$，$\varphi_z(z)$ の一般解をそれぞれ求めよ．

（２）この粒子が，$0\le x\le L$，$0\le y\le L$，$0\le z\le L$ の箱の中に閉じ込められている場合の $\varphi_x(x)$，$\varphi_y(y)$，$\varphi_z(z)$ の解を求めよ．

（３）問（２）の結果を用いて固有値 E を求めよ．

３．質量 m，エネルギー $E\ (<0)$ の粒子が次の 1 次元ポテンシャル $V(x)$ に閉じ込められている．

$$V(x)=\begin{cases}\infty, & x\le 0 & (\text{領域 I})\\ -V_0\ \ (<0), & 0<x<L & (\text{領域 II})\\ 0, & L\le x & (\text{領域 III})\end{cases}$$

（１）領域 II と領域 III におけるそれぞれの波数を k および k' とし，波動関数を求めよ．

（２）問（１）の k と k' の関係を求めよ．

4．質量 m の粒子が，一次元ポテンシャル $V(x)=(1/2)kx^2$ $(k>0)$ に束縛されているとき, エネルギー固有値は，$E_n=(n+1/2)\hbar\sqrt{k/m}$ $(n=0,1,2,\cdots)$ によって与えられる．ここで，$\hbar=h/2\pi$ で，h はプランク定数である．粒子の運動における相対論的効果は無視できるものとし，以下の問いに答えよ．

（1） $x=\pm\infty$ において粒子の波動関数の値がゼロになることを説明せよ．

（2）粒子に対する時間に依存しないシュレーディンガー方程式を書け．

（3）問（2）のシュレーディンガー方程式において，偶関数と奇関数の解が存在することを示せ．

（4）関数 $\psi(x)=A\exp(-\alpha x^2)$ が，問（2）のシュレーディンガー方程式の基底状態に対する解であるとする．ここで，A および α (>0) はともに定数である．基底状態の波動関数を求めよ．

（5）問（4）の $\psi(x)$ を規格化する A の値を求めよ．必要ならば，$\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-x^2)\,dx=\sqrt{\pi}$ を用いよ．

5．以下のポテンシャル $V(x)$ に $x=-\infty$ から入射する質量 m，エネルギー E の粒子について考える．

$$V(x)=\begin{cases}0 & (x<0)\\ V_0\ \ (>E>0) & (0\le x)\end{cases}$$

この系における時間に依存しないシュレーディンガー方程式の一般解 $u(x)$ は，以下の式によって与えられるものとする．

$$u(x) = \begin{cases} A\exp(ik_1 x) + B\exp(-ik_1 x) & (x < 0) \\ C\exp(k_2 x) + D\exp(-k_2 x) & (0 \le x) \end{cases}$$

ここで，k_1およびk_2は波数である．粒子の運動学における相対論的効果は無視できるものとして，以下の問いに答えよ．

（１）k_1およびk_2をm，E，V_0，$\hbar = h/(2\pi)$（h：プランク定数）を用いて表せ．

（２）$x = 0$および$x = +\infty$における境界条件より，定数A，B，C，D間の関係を示せ．

（３）入射波の反射率を求めよ．

（４）入射波の透過率を求めよ．

（５）定常状態における確率の流れの密度は一定であることを説明せよ

水素様原子

１．水素原子中の電子に対するハミルトニアンは，

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

である．ここで，$\hbar = h/(2\pi)$（h : Planck 定数）であり，m，e，ε_0およびrは，電子の質量，電気素量，真空の誘電率および原子核からの距離をそれぞれ表す．また，球面座標(r,θ,ϕ)のラプラシアン∇^2は，

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\}$$

によって表される．水素原子中の電子の波動関数が，$\psi = \exp(-ar)$（aは正の定数）であると仮定し，以下の問いに答えよ．必要ならば，$\int_0^\infty x^z \exp(-bx)\,dx = z!/b^{z+1}$を

用いよ．

（１）$\int \psi^* \psi \, dv$および$\int \psi^* \hat{H} \psi \, dv$を求めよ．ここで，$dv$は球面座標における体積要素であり，積分は全空間に及ぶものとする．

（２）エネルギーの期待値の最小値とそれを与える a の値を求めよ．

２．水素原子のＫ殻の動径波動関数$R_{\mathrm{K}}(r)$は次式で表される．

$$R_{\mathrm{K}}(r) = 2(1/a_0)^{3/2} \exp(-r/a_0)$$

ここで，a_0はボーア半径であり，r は原子核からの距離である．このとき，r および$1/r$の期待値をそれぞれ $\langle r \rangle$ および $\langle 1/r \rangle$ とする．r_0が $r^2 R_{\mathrm{K}}^2(r)$ の極大値を与えるとき，r_0は$\langle r \rangle$とは一致せず，$1/\langle 1/r \rangle$と一致することを示し，また，その物理的意味を記述せよ．

<u>期待値、エルミート演算子</u>

１．一次元空間における質量mの粒子が$\psi(x,t) = \exp(ikx - i\omega t)$の状態にあるものとする．ここで，$k$，$\omega$，$t$ および$\hat{p}_{\mathrm{x}}$はそれぞれ波数，角振動数，時間および運動量演算子である．なお，$\hat{A}$の期待値は，$<\hat{A}> = \lim_{L\to\infty}\left(\int_{-L}^{L} \psi^* \hat{A} \psi \, dx \Big/ \int_{-L}^{L} \psi^* \psi \, dx \right)$で定義される．この系における期待値　$<x>$，$<(x-<x>)^2>$，$<\hat{p}_{\mathrm{x}}>$，および$<(\hat{p}_{\mathrm{x}} - <\hat{p}_{\mathrm{x}}>)^2>$をそれぞれ求めよ．

２．任意の２つの関数$\psi(x), \varphi(x)$に対して演算子$\hat{A}$が，

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{A} \varphi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{A}\psi(x))^* \varphi(x) dx$$

を満たすとき，$\hat{A}$はエルミートであるという．

（１）エルミートな演算子の固有値は実数であることを示せ．

（２）エルミートな演算子 $\hat{A}$ に対して $\hat{A}\psi(x) = a\psi(x)$ および

$\hat{A}\varphi(x) = b\varphi(x) \quad (a \neq b)$ であるとき，$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\varphi(x)dx = 0$ を示せ.