2007.7.25

「量子力学大意」試験問題

1. 次のポテンシャルに閉じこめられた質量 m の粒子がある。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \le x \le a) \\ +\infty & (x < 0, x > a) \end{cases}$$

(1) シュレディンガー方程式を解いて、エネルギー固有値と固有関数が以下で与えられることを示せ。

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \qquad u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x \quad (n = 1, 2, 3, \cdots)$$

(2) 粒子の位置 x と運動量 p の期待値 $\langle x\rangle$, $\langle p\rangle$ を、それぞ計算せよ。

(3) 運動エネルギーの期待値を計算して、(1) で求めた E_n の値と比較してみよ。

2. 次の 1 次元階段状ポテンシャルに、 質量 m, エネルギー $E(< V_0)$ の粒子が領域 1 （$x < 0$）から入射する場合を考える。ただし、$V_0 > 0$ とする。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0 : \text{領域}\,1) \\ V_0 & (x > 0 : \text{領域}\,2) \end{cases}$$

(1) シュレディンガー方程式を解き、領域 1 と領域 2 の波動関数 $u_1(x)$, $u_2(x)$ の一般解を

$$\begin{cases} u_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & (x < 0) \\ u_2(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x} & (x \ge 0) \end{cases}$$

と表すとき、k, κ はそれぞれどのような式になるか。また、未定係数 A, B, C, D のうちの一つは 0 である。それはどれか。理由を付けて答えよ。

(2) 境界条件を利用して、残りの三つの未定係数の間の関係式を求めよ。

(3) $x = 0$ での反射係数 R を求めよ。

(4) 古典論的には侵入出来ない $x > 0$ の領域にも粒子は少しは入り得る。粒子を見いだす確率密度 $P(x) = |u(x)|^2$ が $x = 0$ での値 $P(0)$ の $\dfrac{1}{e}$ に減少する侵入距離 d を求めよ。

3. 水素原子の波動関数とエネルギー固有値は以下で与えられる。

$$u_{n,l,m}(r,\theta,\phi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\phi), \qquad E_n = -\frac{e^2}{2n^2a_0} \quad (a_0\ \text{はボーア半径})$$

(1) n, l, m は、それぞれ、何量子数と呼ばれどのような物理量に関係し、どのような範囲の値を取り得るかを記せ。また、量子数が n の状態の縮重度（縮退した状態の数）を計算せよ。

(2) 微小体積は極座標表示で $d\vec{r} = r^2\sin\theta dr d\theta d\phi$ と書ける。状態 $u_{n,l,m}(r,\theta,\phi)$ における、物理量 A の期待値 $\langle A\rangle$ を表す式を書け。また、原点から r の距離での電子の確率密度を $P_{n,l}(r)$ とするとき、$Y_{l,m}(\theta,\phi)$ が規格化されていれば $P_{n,l}(r) = r^2|R_{n,l}(r)|^2$ となることを示せ。

(3) 基底状態（$n = 1, l = 0, m = 0$）の波動関数は、$R_{1,0}(r) = 2\left(\dfrac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$, $Y_{0,0}(\theta,\phi) = \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$ で与えられる。クーロンポテンシャルを $V(r) = -\dfrac{e^2}{r}$ として、基底状態でのポテンシャルエネルギーの期待値 $\langle V\rangle$ を計算せよ。また、この結果を用いて運動エネルギーの期待値 $\langle T\rangle$ を求めよ。

- 次の積分公式を利用せよ。

$$\int_0^\infty r^n e^{-\alpha r}dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}} \quad (\alpha > 0,\ n \ge 0)$$