解答例

中間試験 1　次の文章の下線部に関して，量子力学の知見に照らして誤りがあれば修正しなさい．

(1) 粒子がある領域に閉じ込められている場合，その粒子は散乱状態にあるという．

束縛状態

(2) 複数のエネルギー固有状態が同一のエネルギー固有値を有することを波動関数の収縮という．

縮退

(3) 偶関数ポテンシャルに閉じ込められた粒子の波動関数が偶関数か奇関数に限られる対称性をピロティという．

パリティ

(4) エネルギー固有値がポテンシャル障壁よりも小さいのに障壁を貫通する現象をペネトレーション効果という．

トンネル効果

(5) 周期ポテンシャル（周期 d）中の粒子の波動関数 $\phi(x)$ は，$\phi(x+d)=\phi(x)$を満たす．

$\phi(x+d)=e^{i\theta}\phi(x)$　（θ：実数）

(6) 周期ポテンシャル中を運動する粒子では，粒子は全てのエネルギー固有値を取ることができない．この禁止されたエネルギー領域をエネルギージャンプという．

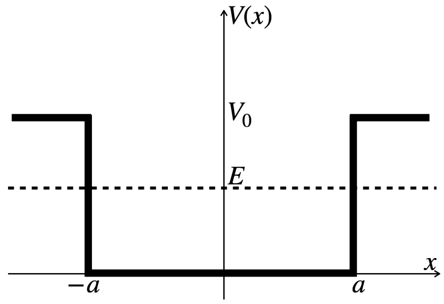
バンドギャップ

中間試験 2　図のような深さ V_0 の井戸型ポテンシャル中で，質量 m，エネルギー固有値 E（ただし，$0 < E < V_0$）の粒子が運動している．$x < -a$，$-a < x < a$，$a < x$ を順に領域 1，領域 2，領域 3 とし，それぞれの領域での波動関数の一般解を $\phi_1(x) = Ae^{\rho x} + Fe^{-\rho x}$，$\phi_2(x) = B\sin kx + C\cos kx$，$\phi_3(x) = Ge^{\rho x} + De^{-\rho x}$ $\left(\text{ただし，}\rho = \sqrt{\dfrac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}, k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}\right)$ と書くとき，次の問に答えなさい．

(1)　$x \to \pm\infty$ での波動関数の振る舞いから，F と G の値を求めなさい．

(2)　$\rho = \dfrac{B\cos ka + C\sin ka}{-B\sin ka + C\cos ka}k = \dfrac{-B\cos ka + C\sin ka}{B\sin ka + C\cos ka}k$ を示しなさい．

(3)　V_0 が有限と無限のそれぞれの場合について，領域 1 と領域 3 での粒子の存在確率を説明しなさい．



(1) $x \to -\infty$ で $\varphi_L(x) \to 0$ なので $F = 0$

$x \to \infty$ で $\varphi_R(x) \to 0$ なので $G = 0$

(2) $\varphi_L(-a) = \varphi(-a) \Leftrightarrow Ae^{-\rho a} = -B\sin ka + C\cos ka$ …①

$\varphi_L'(-a) = \varphi'(-a) \Leftrightarrow A\rho e^{-\rho a} = Bk\cos ka + Ck\sin ka$ …②

$\varphi(a) = \varphi_R(a) \Leftrightarrow B\sin ka + C\cos ka = De^{-\rho a}$ …③

$\varphi'(a) = \varphi_R'(a) \Leftrightarrow Bk\cos ka - Ck\sin ka = -D\rho e^{-\rho a}$ …④

①×ρ − ②; $\rho = \dfrac{B\cos ka + C\sin ka}{-B\sin ka + C\cos ka}k$,,

③×ρ + ④; $\rho = \dfrac{-B\cos ka + C\sin ka}{B\sin ka + C\cos ka}k$,,

(3) V_0 が有限のときには波動関数がしみ出すので $-a<x$, $x<a$ の領域も粒子は存在しうる。

一方，V_0 が無限のときは波動関数はしみ出さないので $-a<x$, $x<a$ の領域に粒子は存在しない。

中間試験 3　図のような階段ポテンシャル $V(x)$ に対して，質量 m，エネルギー固有値 E（ただし，$0 < E < V_0$）の粒子が $x \to -\infty$ から入射している．$x < 0$，$0 < x$ を順に領域 1，領域 2 とし，それぞれの領域での波動関数の一般解を $\phi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$，$\phi_2(x) = Ce^{\rho x} + De^{-\rho x}$ $\left(\text{ただし，}\rho = \sqrt{\dfrac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}, k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}\right)$ と書くとき，次の問に答えなさい．

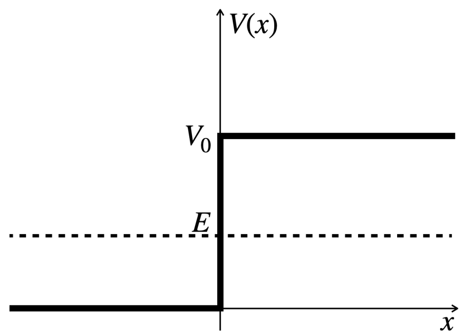
(1) $x \to \infty$ での波動関数の振る舞いから，C の値を求めなさい．

(2) $\dfrac{B}{A} = \dfrac{k - i\rho}{k + i\rho}$ と $\dfrac{D}{A} = \dfrac{2k}{k + i\rho}$ をそれぞれ示しなさい．

(3) $D \neq 0$ が意味することを説明しなさい．

(4) 領域 1 での定常状態の確率流密度 $j_1(x)$ を求めなさい．なお，定常状態の確率流密度は，定常状態の波動関数 $\phi(x)$ を用いて $j(x) = \dfrac{\hbar}{2im}\left\{\phi^*(x)\dfrac{\partial \phi(x)}{\partial x} - \dfrac{\partial \phi^*(x)}{\partial x}\phi(x)\right\}$ と書けることは既知としなさい．

(5) 領域 2 での定常状態の確率流密度 $j_2(x)$ が 0 となる．このことが意味することを説明しなさい．



(1) $x \to \infty$ で $\phi_2 \to 0$ より $C = 0$

(2) $x=0$ での連続性より

$$A + B = D, \quad ikA - ikB = -\rho D$$
$$\Leftrightarrow A - B = i\frac{\rho}{k}D$$

これら2式より $2A = D + i\frac{\rho}{k}D = \frac{k+i\rho}{k}D$

$$\therefore D/A = \frac{2k}{k+i\rho}.$$

$$B = D - A = \left(\frac{2k}{k+i\rho} - \frac{k+i\rho}{k+i\rho}\right)A = \frac{k-i\rho}{k+i\rho}A.$$

(3) $D \neq 0$ なので $|\phi_2|^2 \neq 0$. これは定常状態で領域2で粒子が存在することを表す.

(4) $\phi_1^* = A^*e^{-ikx} + B^*e^{ikx}$, $\dfrac{\partial\phi_1}{\partial x} = ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx}$,

$\dfrac{\partial\phi_1^*}{\partial x} = -ikA^*e^{-ikx} + B^*ike^{ikx}$ より,

$$j_1(x) = \frac{\hbar}{2im}\Big\{(A^*e^{-ikx} + B^*e^{ikx})(ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx})$$
$$- (-ikA^*e^{-ikx} + B^*ike^{ikx})(Ae^{ikx} + Be^{-ikx})\Big\}$$
$$= \frac{\hbar}{2im}\left(2ik|A|^2 - 2ik|B|^2\right) = \frac{\hbar k}{m}\left(|A|^2 - |B|^2\right)$$

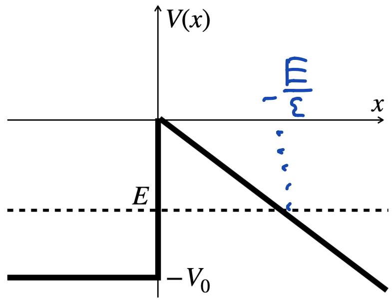
(5) 確率流密度は流れこむ量を表すので，$j_2 = 0$ は領域2へ流れこみが定常状態では0であることを示している.

中間試験 4　ポテンシャルとして，$x<0$ で $V(x)=-V_0$（ただし，$V_0>0$），$x>0$ で $V(x)=-\varepsilon x$（ただし，ε は定数）を考える（図は $\varepsilon>0$ のときの $V(x)$ を表す）．質量 m，エネルギー固有値 E（ただし，$-V_0<E<0$）の粒子が $x\to-\infty$ から入射するとき，次の問に答えなさい．

(1)　$\varepsilon>0$ のとき，xy 平面上の 2 曲線 $y=V(x)$ と $y=E$ について，交点の x 座標を求めなさい．

(2)　$\varepsilon>0$ での透過率を求めなさい．ただし，ポテンシャル $V(x)$ に対する透過率は，a と b を障壁の両端として $r_\mathrm{T}\simeq\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_a^b\sqrt{2m(V(x)-E)}dx\right]$ で近似できる．

(3)　電場のオン（$\varepsilon>0$）とオフ（$\varepsilon=0$）とを切り替えることで何を制御できるのか説明しなさい．



(1)　$y=-\varepsilon x$ と $y=E$ より

$$-\varepsilon x = E \qquad \therefore\ x=-\frac{E}{\varepsilon}$$

(2)

$$r_T \simeq \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_0^{-\frac{E}{\varepsilon}}\sqrt{2m(-\varepsilon x-E)}dx\right]$$

$$\simeq \exp\left[-\frac{2\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}\int_0^{-\frac{E}{\varepsilon}}\sqrt{-x-\frac{E}{\varepsilon}}dx\right]$$

$-x-\frac{E}{\varepsilon}=y$ とおくと

x	$0 \to -\frac{E}{\varepsilon}$
y	$-\frac{E}{\varepsilon} \to 0$

$$\simeq \exp\left[-\frac{2\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}\int_0^{-\frac{E}{\varepsilon}}y^{\frac{1}{2}}dy\right]$$

$$\simeq \exp\left\{-\frac{2\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}\left[\frac{2}{3}y^{\frac{3}{2}}\right]_0^{-\frac{E}{\varepsilon}}\right\}$$

$$\simeq \exp\left[-\frac{2\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}\cdot\frac{2}{3}\left(-\frac{E}{\varepsilon}\right)^{\frac{3}{2}}\right] = \exp\left[-\frac{4\sqrt{2}}{3}\cdot\frac{\sqrt{m}}{\varepsilon\hbar}|E|^{\frac{3}{2}}\right]$$ //

(3)　オフでは階段ポテンシャルなので透過率は0.
一方，オンではトンネル効果により透過率は0ではない．
つまり電場のオンオフをスイッチとして $x<0$ の領域から $x>0$ への粒子の流れを制御できる．