中間試験 1　次の問に答えなさい．

(1) 束縛状態について説明しなさい．

(2) 縮退について説明しなさい．

(3) 位置 x，時刻 t での確率密度を $\rho(x,t)$，流速密度を $j(x,t)$ とする．これらの間に成り立つ関係式を書きなさい．

(4) 結晶の原子振動を量子化して得られる粒子の名称を答えなさい．

(5) トンネル効果について説明しなさい．

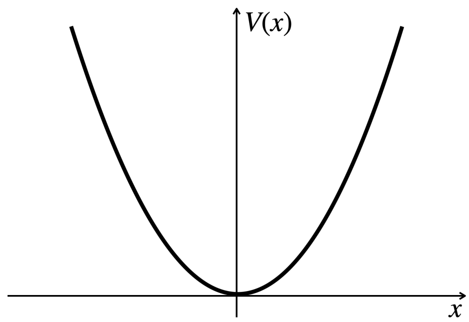
(6) バンドギャップについて説明しなさい．

中間試験 2　調和振動子 (質量 m, 角振動数 ω) について次の問いに答えなさい．ただし，$\xi = \sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}x$, $\varepsilon = \dfrac{2E}{\hbar\omega}$ としなさい．

(1)　シュレディンガー方程式が $\dfrac{d^2\varphi}{d\xi^2} + (\varepsilon - \xi^2)\varphi = 0$ と変形されることを示しなさい．

(2)　$\varphi = H(\xi)\exp\left(-\dfrac{1}{2}\xi^2\right)$ とするとき，$H''(\xi) - 2\xi H'(\xi) + (\varepsilon - 1)H(\xi) = 0$ が成り立つ．このことを踏まえ，$H(\xi) = \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$ と展開するとき，$(n+1)(n+2)a_{n+2} = (2n - \varepsilon + 1)a_n$ を示しなさい．

(3)　調和振動子のエネルギー固有値を求めなさい．



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．$x = 0$ を境として，左側（つまり $x < 0$）を領域 L，右側（つまり $x > 0$）を領域 R とし，それぞれの領域での波動関数の一般解を $\varphi_{\mathsf{L}}(x) = Ae^{\rho x} + Be^{-\rho x}$，$\varphi_{\mathsf{R}}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}$ $\left(\text{ただし，}\ \rho = \dfrac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right)$ と書くとき，次の問に答えなさい．

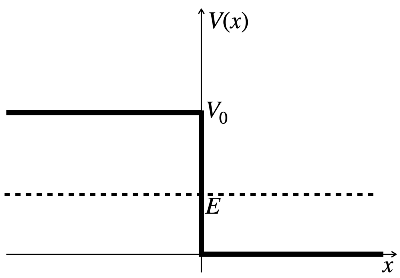
(1)　$x \to -\infty$ での波動関数の振る舞いから，$B = 0$ となる．この理由を説明しなさい．

(2)　A，C，D の間に成り立つ関係式（二つ）を求めなさい．

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

(4)　領域 R での確率流密度 $j_{\mathsf{R}}(x)$ を求めなさい．詳しい途中計算を記載すること．なお，確率流密度 $j(x)$ が波動関数 $\varphi(x)$ に対して $j(x) = \dfrac{\hbar}{2im}\left\{\varphi^*(x)\dfrac{\partial\varphi(x)}{\partial x} - \dfrac{\partial\varphi^*(x)}{\partial x}\varphi(x)\right\}$ と書けることは既知としなさい．

(5)　反射率 r を求めなさい．



中間試験 4　左側の障壁高さが無限大である井戸型ポテンシャル（図）について，次の問に答えなさい．ただし，粒子の質量を m，エネルギーを E（ただし，$0 < E < V_0$），$\rho = \dfrac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$，$k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ としなさい．

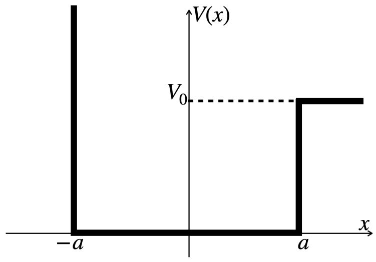
(1) $-a < x < a$ と $a < x$ を領域 1，領域 2 とする．それぞれの領域の波動関数の一般解 $\varphi_1(x)$，$\varphi_2(x)$ を書きなさい．その際，$x \to \infty$ での条件を踏まえて，用いる積分定数は全部で三つとすること．

(2) $x = a$ での接続条件から，前問の三つの積分定数の間の関係式を二つ求めなさい．

(3) 前問の結果と $x = -a$ で波動関数が連続という条件[a]から，ρ，a，k の間に成り立つ関係式を求めなさい．

(4) $V_0 \leq V_{\mathrm{th}}$ のとき束縛状態が出現しない．$\rho^2 + k^2 = \dfrac{2mV_0}{\hbar^2}$ を踏まえて V_{th} を求めなさい．

[a] $x = -a$ ではポテンシャルが有限の飛びではないので，φ は連続だが $d\varphi/dx$ は連続ではないことに注意．



解答例

量子力学 II (鳴海担当分)　　番号:　　名前:

中間試験 1　次の問に答えなさい．

(1) 束縛状態について説明しなさい．

粒子がある領域に閉じこめられている状態

(2) 縮退について説明しなさい．

2つ以上の異なったエネルギー固有状態が同じエネルギー固有値をとること。

(3) 位置 x，時刻 t での確率密度を $\rho(x,t)$，流速密度を $j(x,t)$ とする．これらの間に成り立つ関係式を書きなさい．

連続の式：$\dfrac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = -\dfrac{\partial j(x,t)}{\partial x}$

(4) 結晶の原子振動を量子化して得られる粒子の名称を答えなさい．

フォノン（音響子）

(5) トンネル効果について説明しなさい．

ポテンシャルよりも低いエネルギー固有値でありながらポテンシャルを透過すること.

(6) バンドギャップについて説明しなさい．

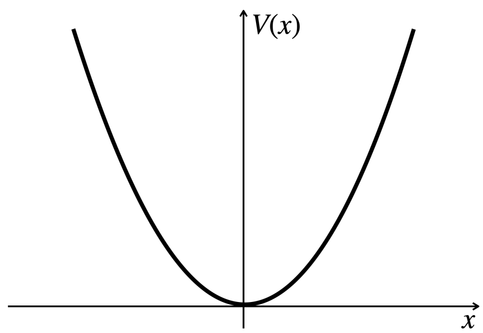
値をとることが禁止されたエネルギー領域のこと.

中間試験 2　調和振動子（質量 m，角振動数 ω）について次の問いに答えなさい．ただし，$\xi = \sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}x$，$\varepsilon = \dfrac{2E}{\hbar\omega}$ としなさい．

(1)　シュレディンガー方程式が $\dfrac{d^2\varphi}{d\xi^2} + (\varepsilon - \xi^2)\varphi = 0$ と変形されることを示しなさい．

(2)　$\varphi = H(\xi)\exp\left(-\dfrac{1}{2}\xi^2\right)$ とするとき，$H''(\xi) - 2\xi H'(\xi) + (\varepsilon - 1)H(\xi) = 0$ が成り立つ．このことを踏まえ，$H(\xi) = \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$ と展開するとき，$(n+1)(n+2)a_{n+2} = (2n - \varepsilon + 1)a_n$ を示しなさい．

(3)　調和振動子のエネルギー固有値を求めなさい．



(1) シュレディンガー方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\varphi = E\varphi$$

$x = \sqrt{\dfrac{\hbar}{m\omega}}\xi$ と $E = \dfrac{\hbar\omega}{2}\varepsilon$ を代入すると

$$\left(-\frac{\hbar\omega}{2}\frac{d^2\varphi}{d\xi^2} + \frac{\hbar\omega}{2}\xi^2\right)\varphi = \frac{\hbar\omega}{2}\varepsilon\varphi$$

$$\Leftrightarrow \frac{d^2\varphi}{d\xi^2} + (\varepsilon - \xi^2)\varphi = 0 \quad \blacksquare$$

(2) $H' = \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} n a_n \xi^{n-1}$，$H'' = \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} n(n-1)a_n\xi^{n-2} = \sum_{n=0} (n+2)(n+1)a_{n+2}\xi^n$ より

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left\{(n+2)(n+1)a_{n+2} - 2na_n + (\varepsilon - 1)a_n\right\}\xi^n = 0$$

任意の ξ で成り立つには $\{\ \}$ 内が0なので，$(n+2)(n+1)a_{n+2} = (2n - \varepsilon + 1)a_n$ $\blacksquare$

(3) 波動関数が発散しないので $a_N \neq 0$，$a_{N+2} = a_{N+4} = \cdots = 0$ となる N が存在する。また，ポテンシャルが偶関数なので波動関数は偶関数か奇関数。よって $a_N \neq 0$ ならば $a_{N+1} = a_{N+3} = \cdots = 0$．

このことより (2) の式で $n = N$ とすると $0 = (2N - \varepsilon + 1)a_N$

$a_N \neq 0$ より $2N - \varepsilon + 1 = 0 \Leftrightarrow \varepsilon = 2N + 1$

$\varepsilon = \dfrac{2E}{\hbar\omega}$ より　$E = \dfrac{\hbar\omega}{2}(2N+1) = \hbar\omega\left(N + \dfrac{1}{2}\right)$

$(N = 0, 1, 2, \ldots)$ 〃

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．$x = 0$ を境として，左側（つまり $x < 0$）を領域 L，右側（つまり $x > 0$）を領域 R とし，それぞれの領域での波動関数の一般解を $\varphi_{\mathrm{L}}(x) = Ae^{\rho x} + Be^{-\rho x}$，$\varphi_{\mathrm{R}}(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}$ $\left(\text{ただし，} \rho = \dfrac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right)$ と書くとき，次の問に答えなさい．

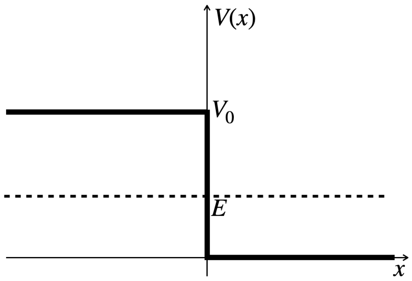
(1) $x \to -\infty$ での波動関数の振る舞いから，$B = 0$ となる．この理由を説明しなさい．

(2) A，C，D の間に成り立つ関係式（二つ）を求めなさい．

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

(4) 領域 R での確率流密度 $j_{\mathrm{R}}(x)$ を求めなさい．詳しい途中計算を記載すること．なお，確率流密度 $j(x)$ が波動関数 $\varphi(x)$ に対して $j(x) = \dfrac{\hbar}{2im}\left\{\varphi^*(x)\dfrac{\partial \varphi(x)}{\partial x} - \dfrac{\partial \varphi^*(x)}{\partial x}\varphi(x)\right\}$ と書けることは既知としなさい．

(5) 反射率 r を求めなさい．



(1) $x \to -\infty$ で $\varphi \to 0$ であるが，$\lim_{x\to-\infty} e^{-\rho x} = \infty$

なので係数 B が 0 でなければならない。

(2) $\varphi_L(0) = \varphi_R(0)$ より　$A = C + D \cdots ①$

$\varphi_L'(0) = \varphi_R'(0)$ より　$\rho A = ikC - ikD \cdots ②$

(3) $ik \times ① - ② \Rightarrow (ik - \rho)A = 2ikD$　$\therefore \dfrac{A}{D} = \dfrac{2ik}{ik - \rho}$

$\rho \times ① - ② \Rightarrow$　$0 = (\rho - ik)C + (\rho + ik)D$　$\therefore \dfrac{C}{D} = \dfrac{ik + \rho}{ik - \rho}$

(4)
$$j_R(x) = \frac{\hbar}{2im}\Big\{(C^* e^{-ikx} + D^* e^{ikx})(ikCe^{ikx} - ikDe^{-ikx})$$
$$- (-ikC^* e^{-ikx} + ikD^* e^{ikx})(Ce^{ikx} + De^{-ikx})\Big\}$$
$$= \frac{\hbar k}{2m}\left(|C|^2 - C^* D e^{-2ikx} + CD^* e^{2ikx} - |D|^2 + |C|^2 + C^* D e^{-2ikx} + CD^* e^{2ikx} - |D|^2\right)$$
$$= \frac{\hbar k}{2m}\left(|C|^2 - |D|^2\right) \;//$$

(5) φ_R のうち 入射が De^{-ikx}，反射が Ce^{ikx}．よって反射率は

$$r = \frac{\frac{\hbar k}{2m}|C|^2}{\frac{\hbar k}{2m}|D|^2} = \left|\frac{C}{D}\right|^2 = \left|\frac{ik + \rho}{ik - \rho}\right| = \frac{\rho^2 + k^2}{\rho^2 + k^2} = 1 \;//$$

(別) $j_L = 0 \Leftrightarrow$ 透過率 $= 0$ から示してもOK.

中間試験 4　左側の障壁高さが無限大である井戸型ポテンシャル（図）について，次の問に答えなさい．ただし，粒子の質量を m，エネルギーを E（ただし，$0 < E < V_0$），$\rho = \dfrac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$，$k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ としなさい．

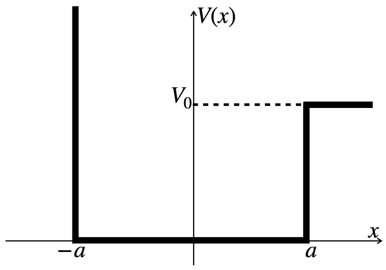
(1) $-a < x < a$ と $a < x$ を領域 1，領域 2 とする．それぞれの領域の波動関数の一般解 $\varphi_1(x)$，$\varphi_2(x)$ を書きなさい．その際，$x \to \infty$ での条件を踏まえて，用いる積分定数は全部で三つとすること．

(2) $x = a$ での接続条件から，前問の三つの積分定数の間の関係式を二つ求めなさい．

(3) 前問の結果と $x = -a$ で波動関数が連続という条件[a]から，ρ，a，k の間に成り立つ関係式を求めなさい．

(4) $V_0 \leq V_{\mathrm{th}}$ のとき束縛状態が出現しない．$\rho^2 + k^2 = \dfrac{2mV_0}{\hbar^2}$ を踏まえて V_{th} を求めなさい．

[a] $x = -a$ ではポテンシャルが有限の飛びではないので，φ は連続だが $d\varphi/dx$ は連続ではないことに注意．



(1) $\varphi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$，$\varphi_2(x) = Ce^{-\rho x}$

(2) $\varphi_1(a) = \varphi_2(a) \Rightarrow Ae^{ika} + Be^{-ika} = Ce^{-\rho a} \cdots ①$

$\varphi_1'(a) = \varphi_2'(a) \Rightarrow ik(Ae^{ika} - Be^{-ika}) = -\rho Ce^{-\rho a} \cdots ②$

(3) $ik \times ① + ②$；$A = \dfrac{ik-\rho}{2ik} e^{-\rho a - ika} C \cdots ③$

$ik \times ① - ②$；$B = \dfrac{ik+\rho}{2ik} e^{-\rho a + ika} C \cdots ④$

左の領域外では $\varphi = 0$ なので $\varphi_1(-a) = 0 \Rightarrow Ae^{-ika} + Be^{ika} = 0 \cdots ⑤$

③と④を⑤に代入すると，$\dfrac{e^{-\rho a}C}{2ik}\left\{(ik-\rho)e^{-2ika} + (ik+\rho)e^{2ika}\right\} = 0$

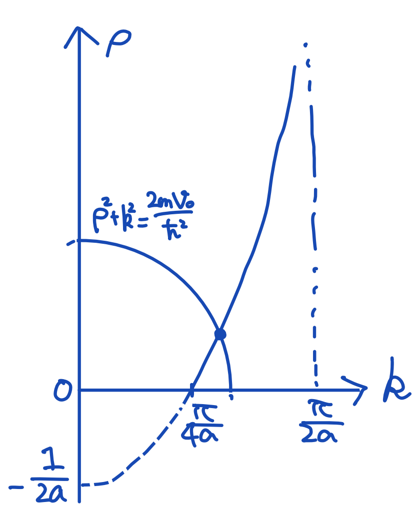
$\Leftrightarrow \dfrac{e^{-\rho a}C}{k}\left(k\dfrac{e^{2ika}+e^{-2ika}}{2} + \rho\dfrac{e^{2ika}-e^{-2ika}}{2i}\right) = 0$ $\therefore$ $k\cos(2ka) + \rho\sin(2ka) = 0$

(4) (3)より $\rho = -\dfrac{k}{\tan(2ka)}$.

$2ka = \dfrac{\pi}{2}$ のとき $\tan(2ka) \to 0$ より $\rho = 0$.

tan の単調性より，k-ρ グラフは右のようになる．

一方，$\rho^2 + k^2 = \dfrac{2mV_0}{\hbar^2}$ は半径 $\dfrac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}$ の円．



曲線と円が交点をもたないとき状態が存在しないこと，$\rho > 0$，$k > 0$ より，V_{th} は

$$\frac{\sqrt{2mV_{\mathrm{th}}}}{\hbar} = \frac{\pi}{4a} \Rightarrow V_{\mathrm{th}} = \frac{\pi^2\hbar^2}{32a^2m}$$