中間試験 1　次の問に答えなさい．

(1) 束縛状態と散乱状態について説明しなさい．

(2) 対称ポテンシャル中の 1 次元束縛状態で波動関数が満たす性質を説明しなさい．

(3) 位置 x，時刻 t での確率密度を $\rho(x,t)$，流束密度を $j(x,t)$ とするとき，連続の式を書きなさい．

(4) トンネル効果について説明しなさい．

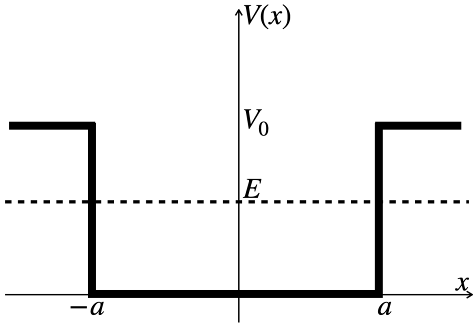
(5) エネルギーバンドとバンドギャップについて説明しなさい．

中間試験 2　図のような井戸型ポテンシャルの中で運動する粒子（質量 m，エネルギー固有値 E，ただし $0 < E < V_0$）について考える．$x < -a$，$-a < x < a$，$a < x$ のそれぞれの領域での波動関数を $\varphi_{\mathsf{L}}(x)$，$\varphi(x)$，$\varphi_{\mathsf{R}}(x)$ とする．以下では，$k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$，$\rho = \dfrac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ としなさい．

(1)　$\varphi_{\mathsf{L}}(x)$，$\varphi(x)$，$\varphi_{\mathsf{R}}(x)$ の一般解を書きなさい．ただし，用いる積分定数は全部で四つとすること．

(2)　波動関数の連続性から，ρ と k の間の関係式を二つ求めなさい．

(3)　$\varphi(x)$ が $C_1 \cos kx$ か $C_2 \sin kx$ のいずれか（ただし，C_1 と C_2 は定数）となることを示しなさい．



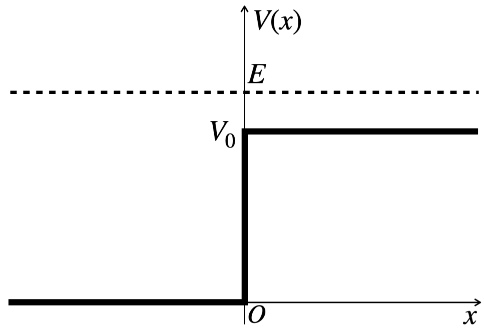
中間試験 3　図のような階段ポテンシャル $V(x)$ に対して，粒子（質量 m，エネルギー固有値 E）が $x \to -\infty$ から入射している．$V_0 < E$ のとき，領域 $x < 0$，$x > 0$ の波動関数はそれぞれ $\varphi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$，$\varphi_2(x) = Ce^{ik_2x}$ $\left(ただし,k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, k_2 = \dfrac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}\right)$ と表される．

(1) C/A，B/A を，それぞれ k_1 と k_2 を用いて表しなさい．

(2) 項 Ae^{ik_1x}，Be^{-ik_1x}，Ce^{ik_2x} に対応する確率流密度 $j_A(x)$，$j_B(x)$，$j_C(x)$ をそれぞれ求めなさい．なお，波動関数 $\varphi(x)$ に対応する確率流密度 $j(x)$ は，$j(x) = \dfrac{\hbar}{2im}\left\{\varphi^*(x)\dfrac{\partial\varphi(x)}{\partial x} - \dfrac{\partial\varphi^*(x)}{\partial x}\varphi(x)\right\}$ と表される．

(3) 反射率 r_{R} を k_1，k_2 を用いて表しなさい．

(4) $V_0 \to 0$ での透過率 r_{T} はいくらか．

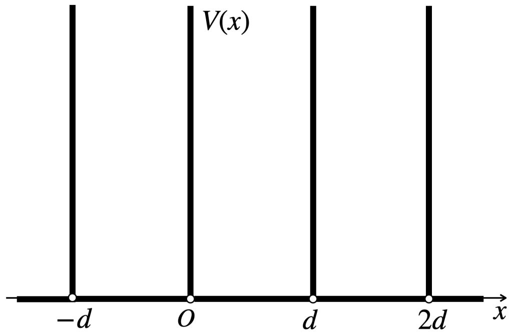


中間試験 4　整数 n を用いて表される周期ポテンシャル $V(x)=\begin{cases}\infty & (x=nd)\\ 0 & (x\neq nd)\end{cases}$ の中を運動する粒子（質量 m，エネルギー固有値 E）を考える．$-d<x<0$ での波動関数を $\varphi_-(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$ と表すとき，周期性から，$0<x<d$ での波動関数は $\varphi_+(x)=Ae^{i\theta}e^{ik(x-d)}+Be^{i\theta}e^{-ik(x-d)}$（ただし，$\theta$ は実定数）と書ける．

(1)　波動関数は，有限幅ではない不連続点 $x=0$ でも，連続である．このことから，A，B，θ，k，d の間の関係式を求めなさい．

(2)　波動関数の導関数は，有限幅ではない不連続点 $x=0$ では，$\varphi'_+(0)=\varphi'_-(0)+C\varphi_-(0)$（ただし，$C$ は定数）を満たす．このことから，A，B，C，θ，k，d の間の関係式を求めなさい．

(3)　変数 W，Z に関する連立方程式 $a_{11}W+a_{12}Z=0$，$a_{21}W+a_{22}Z=0$ について，W と Z が $W=Z=0$ 以外の解をもつための必要十分条件は，係数行列の行列式が 0（つまり，$a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}=0$）である．このことを A と B の連立方程式に当てはめることで，$\cos\theta=\cos(kd)+\dfrac{C}{2k}\sin(kd)$ を示しなさい．



解答例

2023 年度 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)　束縛状態と散乱状態について説明しなさい．
(2)　対称ポテンシャル中の 1 次元束縛状態で波動関数が満たす性質を説明しなさい．
(3)　位置 x，時刻 t での確率密度を $\rho(x,t)$，流束密度を $j(x,t)$ とするとき，連続の式を書きなさい．
(4)　トンネル効果について説明しなさい．
(5)　エネルギーバンドとバンドギャップについて説明しなさい．

(1) 束縛状態とは，粒子がある領域に閉じこめられている状態．散乱状態では束縛状態ではない状態．

(2) 波動関数が偶関数か奇関数のいずれか．

(3) $$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial j(x,t)}{\partial x}$$

(4) トンネル効果とは，エネルギー障壁より低いエネルギー固有値をもつ粒子がエネルギー障壁を透過する現象．

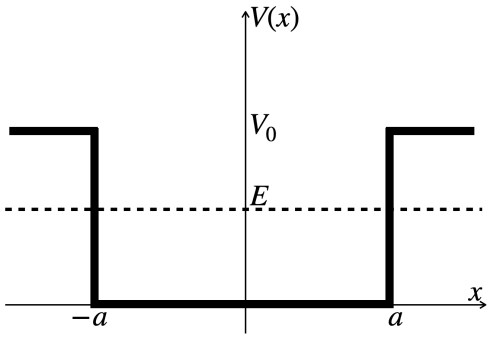
(5) エネルギー固有値のうち，許容されたエネルギーの範囲をエネルギーバンド，値をとることが禁止された範囲をバンドギャップという．

中間試験 2　図のような井戸型ポテンシャルの中で運動する粒子（質量 m，エネルギー固有値 E，ただし $0 < E < V_0$）について考える．$x < -a$，$-a < x < a$，$a < x$ のそれぞれの領域での波動関数を $\varphi_{\mathsf{L}}(x)$，$\varphi(x)$，$\varphi_{\mathsf{R}}(x)$ とする．以下では，$k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$，$\rho = \dfrac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ としなさい．

(1)　$\varphi_{\mathsf{L}}(x)$，$\varphi(x)$，$\varphi_{\mathsf{R}}(x)$ の一般解を書きなさい．ただし，用いる積分定数は全部で四つとすること．

(2)　波動関数の連続性から，ρ と k の間の関係式を二つ求めなさい．

(3)　$\varphi(x)$ が $C_1 \cos kx$ か $C_2 \sin kx$ のいずれか（ただし，C_1 と C_2 は定数）となることを示しなさい．



(1) $\varphi_L(x) = Ae^{\rho x}$　∵ $\varphi_L(x) \to 0$ $(x \to -\infty)$

$\varphi(x) = B\cos kx + C\sin kx$

$(Be^{ikx} + Ce^{-ikx}$ もok$)$

$\varphi_R(x) = De^{-\rho x}$　∵ $\varphi_R \to 0$ $(x \to \infty)$

(2) $\varphi_L(-a) = \varphi(-a)$，$\varphi(a) = \varphi_R(a)$，

$\varphi_L'(-a) = \varphi'(-a)$，$\varphi'(a) = \varphi_R'(a)$ から

$$\rho = \frac{B\sin ka + C\cos ka}{B\cos ka - C\sin ka}k, \quad \rho = \frac{B\sin ka - C\cos ka}{B\cos ka + C\sin ka}k$$

(3) (2)の2式から ρ を消去すると，

$$\frac{B\sin ka + C\cos ka}{B\cos ka - C\sin ka} = \frac{B\sin ka - C\cos ka}{B\cos ka + C\sin ka}$$

$\Leftrightarrow B^2\cos ka\sin ka + BC + C^2\cos ka\sin ka = B^2\cos ka\sin ka - BC + C^2\cos ka\sin ka$

$\Leftrightarrow$　$2BC = 0$　　∴ $BC = 0$

$B = C = 0$ は粒子が存在しないことを表すので不適.

よって　$B=0$ または $C=0$

よって $\varphi(x)$ は　$B\cos kx$ or $C\sin kx$ のいずれか ■

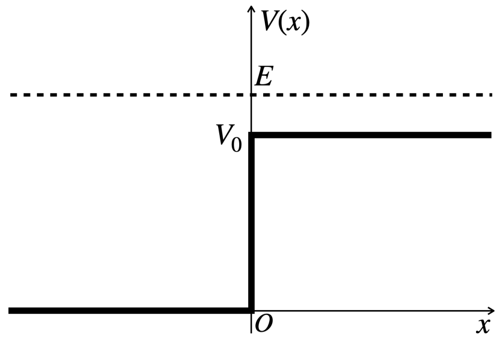
中間試験 3　図のような階段ポテンシャル $V(x)$ に対して，粒子（質量 m，エネルギー固有値 E）が $x \to -\infty$ から入射している．$V_0 < E$ のとき，領域 $x < 0$，$x > 0$ の波動関数はそれぞれ $\varphi_1(x) = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x}$，$\varphi_2(x) = Ce^{ik_2 x}$ $\left(ただし, k_1 = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, k_2 = \dfrac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}\right)$ と表される．

(1)　C/A，B/A を，それぞれ k_1 と k_2 を用いて表しなさい．

(2)　項 $Ae^{ik_1 x}$，$Be^{-ik_1 x}$，$Ce^{ik_2 x}$ に対応する確率流密度 $j_A(x)$，$j_B(x)$，$j_C(x)$ をそれぞれ求めなさい．なお，波動関数 $\varphi(x)$ に対応する確率流密度 $j(x)$ は，$j(x) = \dfrac{\hbar}{2im}\left\{\varphi^*(x)\dfrac{\partial\varphi(x)}{\partial x} - \dfrac{\partial\varphi^*(x)}{\partial x}\varphi(x)\right\}$ と表される．

(3)　反射率 r_R を k_1，k_2 を用いて表しなさい．

(4)　$V_0 \to 0$ での透過率 r_T はいくらか．



(1) $x=0$ での接続条件より

$A+B=C \cdots ①$

$k_1A - k_1B = k_2C \cdots ②$

$\therefore \dfrac{B}{A} = \dfrac{k_1-k_2}{k_1+k_2}$, $\dfrac{C}{A} = \dfrac{2k_1}{k_1+k_2}$

(2) $j_A(x) = \dfrac{\hbar}{2im}\left\{A^*e^{-ik_1x}\cdot ik_1Ae^{ik_1x} - A^*(-ik_1)e^{-ik_1x}Ae^{ik_1x}\right\} = \dfrac{\hbar k_1}{m}|A|^2$

$j_B(x) = \dfrac{\hbar}{2im}\left\{B^*e^{ik_1x}\cdot(-ik_1)Be^{-ik_1x} - B^*ik_1e^{ik_1x}\cdot Be^{-ik_1x}\right\} = -\dfrac{\hbar k_1}{m}|B|^2$

$j_C(x) = \dfrac{\hbar k_2}{m}|C|^2$ （$\because$ j_A で k_1 を k_2 に，A を C に変えたもの）

(3) $r_R = \left|\dfrac{j_B(x)}{j_A(x)}\right| = \left|\dfrac{B}{A}\right|^2 = \dfrac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2}$

(4) $r_T = \left|\dfrac{j_C(x)}{j_A(x)}\right| = \dfrac{k_2}{k_1}\left|\dfrac{C}{A}\right|^2 = \dfrac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$

$V_0 \to 0$ では $k_2 \to k_1$ より　$r_T \to 1$

（これは $V_0 \to 0$ で障壁がなくなることからも明らか）

中間試験 4　整数 n を用いて表される周期ポテンシャル $V(x) = \begin{cases} \infty & (x = nd) \\ 0 & (x \neq nd) \end{cases}$ の中を運動する粒子（質量 m，エネルギー固有値 E）を考える．$-d < x < 0$ での波動関数を $\varphi_-(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ と表すとき，周期性から，$0 < x < d$ での波動関数は $\varphi_+(x) = Ae^{i\theta}e^{ik(x-d)} + Be^{i\theta}e^{-ik(x-d)}$（ただし，$\theta$ は実定数）と書ける．

(1)　波動関数は，有限幅ではない不連続点 $x = 0$ でも，連続である．このことから，A，B，θ，k，d の間の関係式を求めなさい．

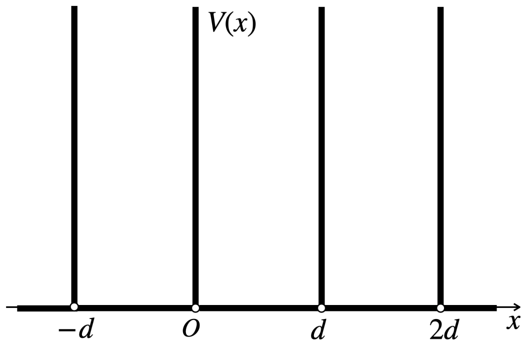
(2)　波動関数の導関数は，有限幅ではない不連続点 $x = 0$ では，$\varphi_+'(0) = \varphi_-'(0) + C\varphi_-(0)$（ただし，$C$ は定数）を満たす．このことから，A，B，C，θ，k，d の間の関係式を求めなさい．

(3)　変数 W，Z に関する連立方程式 $a_{11}W + a_{12}Z = 0$，$a_{21}W + a_{22}Z = 0$ について，W と Z が $W = Z = 0$ 以外の解をもつための必要十分条件は，係数行列の行列式が 0（つまり，$a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} = 0$）である．このことを A と B の連立方程式に当てはめることで，$\cos\theta = \cos(kd) + \dfrac{C}{2k}\sin(kd)$ を示しなさい．

(1)　$\varphi_-(0) = \varphi_+(0)$ より

$$A + B = Ae^{i(\theta - kd)} + Be^{i(\theta + kd)}$$

$$\Leftrightarrow (1 - e^{i(\theta-kd)})A + (1 - e^{i(\theta+kd)})B = 0 \cdots ①$$



(2)　$\varphi_+'(x) = ikAe^{i\theta}e^{ik(x-d)} - ikBe^{i\theta}e^{-ik(x-d)}$

$\varphi_-'(x) = ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx}$

よって　$\varphi_+'(0) = \varphi_-'(0) + C\varphi_-(0)$ は

$$ikAe^{i(\theta-kd)} - ikBe^{i(\theta+kd)} = ikA - ikB + C(A+B)$$

$$\Leftrightarrow \{C + ik - ike^{i(\theta-kd)}\}A + \{C - ik + ike^{i(\theta+kd)}\}B = 0 \cdots ②$$

(3)　①と②の AとBの連立方程式で，$A=B=0$ 以外の解をもつには

$$\{1 - e^{(-)}\}\{C - ik + ike^{(+)}\} - \{1 - e^{(+)}\}\{C + ik - ike^{(-)}\} = 0 \quad \left(\text{ここで } e^{(\pm)} = e^{i(\theta \pm kd)} \text{ とおいた}\right)$$

$$\Leftrightarrow \{C - ik + ike^{(+)} - Ce^{(-)} + ike^{(-)} - ike^{2i\theta}\} - \{C + ik - ike^{(-)} - Ce^{(+)} - ike^{(+)} + ike^{2i\theta}\} = 0$$

$$\Leftrightarrow -2ik(1 + e^{2i\theta}) + C\{e^{(+)} - e^{(-)}\} + 2ik\{e^{(+)} + e^{(-)}\} = 0$$

$\because$ 両辺に $\dfrac{e^{-i\theta}}{4ik}$ をかける

$$\Leftrightarrow \frac{e^{ikd} + e^{-ikd}}{2} + \frac{C}{2k}\,\frac{e^{ikd} - e^{-ikd}}{2i} = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}$$

$$\therefore \cos(kd) + \frac{C}{2k}\sin(kd) = \cos\theta$$