

量子論電子工学 2015 年前半部（掛谷担当）演習問題

2015/06/16

提出先: kakeya@kuee.kyoto-u.ac.jp

提出期限: 学期末（あとで指定）

1. 質量 m , 固有振動数 ω の一次元調和振動子のハミルトニアン

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (1)$$

から得られる Schrödinger 方程式の固有値 $E_n^{(0)}$, 固有関数 $u_n^{(0)}$ はそれぞれ以下の通りである

$$E_n^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \quad (2)$$

$$u_n^{(0)} = N_n H_n(\alpha x) \exp(-\alpha^2 x^2/2). \quad (3)$$

ただし, $N_n = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}}$, $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$ であり, $H_n(z)$ は Hermite 多項式で, 漸化式

$$2zH_n(z) = 2nH_{n-1}(z) + H_{n+1}(z) \quad (4)$$

および直交関係

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(z) H_m(z) e^{-z^2} dz = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn} \quad (5)$$

を満足する. ここで, z は実数, δ_{nm} はクロネッカーのデルタである.

(a) 摂動として, $\mathcal{H}' = ax^2$ が加わったときを考える.

i. 1 次の摂動によるエネルギーのずれ $E_n^{(1)}$ を求めよ.

ii. 厳密解と比較せよ.

(b) 摂動として, $\mathcal{H}' = ax^4$ が加わったとき, 1 次の摂動を考慮すると隣接する準位のエネルギー間隔が等しくなることを示せ.

2. 水素原子のシュレディンガー方程式を

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right) \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (6)$$

とおく.

(a) 極座標を取り, 波動関数を変数分離して $\psi(\mathbf{r}) = \chi(r)Y_{lm}(\theta, \phi)/r$ とおくと, 動径波動関数は以下の微分方程式を満たすことを示せ.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right] \chi(r) = E\chi(r) \quad (7)$$

(b) 束縛状態の波動関数は

$$\chi(r) \sim r^{l+1} \quad (r \rightarrow 0) \quad (8)$$

$$\chi(r) \sim \exp[-\sqrt{-2mE/\hbar^2} \cdot r] \quad (r \rightarrow \infty) \quad (9)$$

であることを示せ。

(c) 新しい変数 $\rho = \kappa r$ (ただし, $\kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$) を導入し, $\chi(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} w(\rho)$ と書くと, $w(\rho)$ は次の微分方程式を満たすことを示せ。

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{d}{d\rho} + (\rho_0 - 2(l+1)) \right] w(\rho) = 0 \quad (10)$$

(d) 級数展開によりエネルギー固有値を求めよ。

3. (a) 水素原子の動径波動関数を $n = 1, 2$ の場合に求め, その概形を図示せよ。
- (b) Ze の電荷を持つ原子核と 1 個の電子からなる水素様原子において, $l = n - 1$ のとき, 動径確率密度が最大になるような r の値を求めよ。
- (c) 水素原子の基底状態に対して, 同様な r の値を求めよ。
4. (a) $[\mathbf{L}, x^2 + y^2 + z^2] = [\mathbf{L}, p_x^2 + p_y^2 + p_z^2] = 0$ を示し, $H = \mathbf{p}^2/2m + V(r)$ のとき $[\mathbf{L}, H] = 0$ となることを示せ。
- (b) $[L_{\pm}, H] = 0$ のとき, $H\psi_{nlm} = E_{nl}\psi_{nlm}$ ならば, $H(L_{\pm}\psi_{nlm}) = E_{nl}L_{\pm}\psi_{nlm}$ を示し, 固有値 E_{nl} は $2l + 1$ 重に縮退していることを示せ。

5. 弱い周期ポテンシャルを持つ一次元系のハミルトニアン

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (11)$$

を考える。ここで, $V(x)$ は周期 a を持つ, すなわち $V(x+a) = V(x)$ であるとする。このとき, よく知られているように, 並進の演算子 $U = \exp(ipa/\hbar)$ は H と可換である。 U の固有値を e^{ika} (ただし, $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$) と書き, k 空間におけるエネルギー準位を考える。

- (a) $V(x) = 0$ のときのエネルギー準位を k の関数として求め, $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$ (第一ブリュアンゾーン内) について還元ゾーン形式で図示せよ。
- (b) $V(x) \neq 0$ のとき, $k = \pi/a$ および $k = 0$ 付近のエネルギー準位はどのように変化するか, $V(x)$ を摂動として扱い議論せよ。

以上