量子論電子工学2016年前半部（掛谷担当）演習問題

2016/06/07

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

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

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

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

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

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

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

および直交関係

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

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らないことを示せ．

2. 水素原子のシュレディンガー方程式を

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

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．

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

(b) 束縛状態の波動関数は

$$\chi(r) \sim \quad r^{l+1} \quad (r \to 0) \tag{8}$$
$$\chi(r) \sim \quad \exp[-\sqrt{-2mE/\hbar^2} \cdot r] \quad (r \to \infty) \tag{9}$$

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，$\chi(\rho) = \rho^{l+1} \mathrm{e}^{-\rho} w(\rho)$ と書くと，$w(\rho)$ は次の微分方程式を満たすことを示せ．

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

(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) $[\boldsymbol{L}, x^2 + y^2 + z^2] = [\boldsymbol{L}, p_x^2 + p_y^2 + p_z^2] = 0$ を示し，$H = \boldsymbol{p}^2/2m + V(r)$ のとき $[\boldsymbol{L}, H] = 0$ 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

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

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