「量子物理学」(培風館) 演習問題詳解

(2003 年 1 月 25 日更新)

問題 1-1. 1 eV の光の波長は何 μm か? 何Å か?

答: Einstein によると光はエネルギー E を持っている光子からなっている。この光子の エネルギー E はある定数かける振動数 ν と等しい。

$$E = h\nu \tag{1-1-1}$$

ここで h はプランク定数と呼ぶ。 $h = 6.6260755 \times 10^{-34}$ Js。また

$$1.602177 \times 10^{-19} \ \ \mathrm{J} = 1 \ \ \mathrm{eV} \tag{1-1-2}$$

より、プランクの定数は電子ボルトで表現すると、

$$6.6260755 \times 10^{-34} \ \ J \cdot s = 1 \times \frac{6.6260755 \times 10^{-34}}{1.602177 \times 10^{-19}} = 4.136 \times 10^{-15} \ \ eV \cdot s \tag{1-1-3}$$

を得る。また, 光の波長 λ と振動数 ν の関係は

$$\lambda = \frac{c}{\nu} \Longrightarrow \nu = \frac{c}{\lambda} \tag{1-1-4}$$

であるから、これを (1-1-1) に代入すると

$$E = h\frac{c}{\lambda} \Longrightarrow \lambda = \frac{hc}{E}; \ (\text{ 光の速度 } c = 2.99792458 \times 10^{8} \ \ \mathrm{ms}^{-1}) \tag{1-1-5}$$

したがって (1-1-4) より 1 eV の光の波長

$$\lambda = \frac{(4.136 \times 10^{-15})(2.99792458 \times 10^{8})}{1} = 1.2398 \times 10^{-6} \ \ \mathrm{m} = 1.24 \ \ \mu\mathrm{m} \tag{1-1-6}$$

を得る。また, $1\text{Å} = 10^{-10}\mathrm{m}$ より

$$1.2398 \times 10^{-6} \ \ m = \frac{1.2398 \times 10^{-6}}{10^{-10}} = 12398 \ \ \text{Å} \tag{1-1-7}$$

したがって 1 eV の光の波長は、

$$\lambda = 1.24 \ \boldsymbol{\mu m} = 12398 \ \text{Å} \tag{1-1-8}$$

になる。

y9410205 Yuzri Mohd (y9410205@edu.uec.ac.jp) 作成 (95/10/31)

問題 1-2. 可視光 (0.38 〜 0.77 μm) の光のエネルギーは、何 eV から何 eV か?

答: (1.3) 式と (1.4) 式より

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \tag{1-2-1}$$

であるので、プランク定数 $h = 6.626076 \times 10^{-34}$Js、光の速度 $c = 2.997925 \times 10^{8}$m/s と波長を代入して求めたエネルギーをそれぞれ 1 電子ボルト $1\mathrm{eV} = 1.602177 \times 10^{-19}$J で割ると答を得る。
波長が 0.38μm のときは

$$\frac{E}{1\mathrm{eV}} = \frac{6.626076 \times 10^{-34} \times 2.997925 \times 10^{8}}{0.38 \times 10^{-6}} \frac{1}{1.602177 \times 10^{-19}} = 1.61\mathrm{eV} \tag{1-2-2}$$

波長が 0.77μm のときは

$$\frac{E}{1\text{eV}} = \frac{6.626076 \times 10^{-34} \times 2.997925 \times 10^{8}}{0.77 \times 10^{-6}} \frac{1}{1.602177 \times 10^{-19}} = 3.26\text{eV} \quad (1\text{-}2\text{-}3)$$

よって求める範囲は (1.61eV $\sim$ 3.26eV) である。

t9410107 高橋 一晃 (t9410107@edu.uec.ac.jp) 作成 (95/12/05)

6@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp y9410205 Yuzri Mohd Yusoff /95/12/7 y9410205@edu.uec.ac.jp

1-3 分光学 (化学) の分野では, 光の波長 λ の代りにその逆数である波数 (はすう) k,

$$k = \frac{1}{\lambda}$$

を用いる。k を cm^{-1} (cm^{-1} でカイザーと読む。) の単位で表したとき, 1 eV の光は何 cm^{-1} か?　Einstein によると光はエネルギー E を持っている光子からなっている. この光子の エネルギー E はある定数かける振動数 ν に等しい。

$$E = h\nu \tag{1-2-4}$$

ここで $h = 6.6260755 \times 10^{-34}$ Jḍots $= 4.136 \times 10^{-15}$ eV $\cdot$ s はプランク定数。また, 光の波長 λ と振動数 ν の関係は

$$\lambda = \frac{c}{\nu} \Longrightarrow \nu = \frac{c}{\lambda};\ (\text{ 光の速度 } c = 2.99792458 \times 10^{8}\ \text{ ms}^{-1}) \tag{1-2-5}$$

これを (1-2-4) に代入すると

$$E = h\frac{c}{\lambda} \Longrightarrow \lambda = \frac{hc}{E} \tag{1-2-6}$$

したがって (1-2-6) より 1 eV の光の波長は、

$$\lambda = \frac{4.136 \times 10^{-15} \times 2.99792 \times 10^{8}}{1} = 1.2399 \times 10^{-6}\ \text{m} = 1.2399 \times 10^{-4}\ \text{cm}$$

よって, 1 eV の光の波数は、

$$k = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{1.2399 \times 10^{-4}} = 8064.89\ \ \text{cm}^{-1} = 8065 \quad \mathbf{cm^1} \quad .$$

問題 1-4. 60 W の白熱電球からでる毎秒出る光子の数はいくらか? ただし, 電力は全て 0.6 μm の可視光になるとせよ。(注: 実際の白熱電球では, 赤外線 (熱) になる場合が多い。)

答: 電力の定義より, 白熱電球の単位時間に発生するエネルギーは 60 W = 60 J $\cdot$ s^{-1} である。また, 光はエネルギー E を持っている光子からなり、この光子のエネルギー E はプランク定数 ($h = 6.6260755 \times 10^{-34}$ J $\cdot$ s) かける振動数 ν に等しい。

$$E = h\nu = h\frac{c}{\lambda} \tag{1-4-1}$$

ここで光の波長 λ と振動数 ν の関係

$$\lambda = \frac{c}{\nu} \Longrightarrow \nu = \frac{c}{\lambda};\ (\text{ 光の速度 } c = 2.99792458 \times 10^{8}\ \text{ms}^{-1}) \tag{1-4-2}$$

を用いた。したがって, 0.6 μm の可視光の光子 1 個のエネルギーは

$$E = \frac{6.6260755 \times 10^{-34} \times 2.99792458 \times 10^{8}}{0.6 \times 10^{-6}} = 3.3107 \times 10^{-19}\ \text{J}$$

より、毎秒

$$1 \times \frac{60}{3.3107 \times 10^{-19}} = 1.8123 \times 10^{20} \approx 1.8 \times 10^{20} \text{個。}$$

の光子がでている。

y9410205 Yuzri Mohd Yusoff (y9410205@edu.uec.ac.jp) 作成 (/95/12/20)

問題 1-5. タングステンの仕事関数は 4.55 eV である。タングステンの表面から光電効果で電子を飛び出させるのには, 振動数がいくつ以上の電磁波が必要か? この電磁波の種類は何か?

答: 光電効果より金属の表面から電子を飛び出させるために当てる光のエネルギー (hν; ν は光の振動数) は金属の仕事関数 (W) より大きくなければならない。つまり

$$h\nu \geq W \tag{1-5-1}$$

(h はプランク定数, $h = 6.6260755 \times 10^{-34}$ J $\cdot$ s $= 4.136 \times 10^{-15}$ eV $\cdot$ s) タングステンの場合 W = 4.55 eV であるので (1-5-1) より

$$(4.136 \times 10^{-15})\nu \geq 4.55$$

$$\nu \geq \frac{4.55}{4.136 \times 10^{-15}} = 1.10 \times 10^{15} \mathrm{s}^{-1}$$

したがって, 振動数は 1.10 $\times 10^{15}$ s^{-1} より大きくなければならない。 また, 光の波長 λ と振動数 ν の関係は

$$\lambda = \frac{c}{\nu} \Longrightarrow \nu = \frac{c}{\lambda};\ (\text{光の速度 } c = 2.99792458 \times 10^{8}\ \mathrm{ms}^{-1}) \tag{1-5-2}$$

したがって, $\nu = 1.10 \times 10^{15}$ s^{-1} の時

$$\lambda = \frac{2.99792458 \times 10^{8}}{1.10 \times 10^{15}} = 2.7253 \times 10^{-7}\ \mathrm{m} = 0.27\mu\mathrm{m}$$

これが紫外線の波長の範囲 (1 nm $\sim$ 0.38 μm) にあるので 0.27 μm の波長の電磁波は**紫外線** である。

y9410205 Yuzri Mohd Yusoff (y9410205@edu.uec.ac.jp) 作成 (/95/12/7)

問題 1-6. 赤外線を検知する素子を光電効果で作りたい。仕事関数の値が何 eV であればよいか。

答: 教科書 p.5 の表 1.3 によれば、赤外線の波長の最小値は $\lambda_{\min} = 0.75\mu$m である。したがって、赤外線のもつエネルギーの最大値 $E_{\max}$ は

$$E_{\max} = \frac{ch}{\lambda_{\min}} = \frac{2.998 \times 10^{8}\mathrm{m/s} \times 6.626 \times 10^{-34}\mathrm{J} \cdot \mathrm{s}}{0.75 \times 10^{-6}\mathrm{m}} = 2.65 \times 10^{-19}\mathrm{J} = 1.65\mathrm{eV} \tag{1-6-1}$$

を得る。したがって、赤外線を検知するためには仕事関数の値が 1.65 eV 以下でなければならない。

h9410159 平野 喜英 (h9410159@edu.cc.uec.ac.jp) 作成 (95/12/25)

問題 1-7. コンプトン効果で、 $\Delta\lambda$ の最大値が、入射する電磁波の波長 λ の 1% であるようにするとき、入射する電磁波の種類とエネルギーを求めよ。

答: 教科書 p.11 の式 (1.13) より、

$$\Delta\lambda = \frac{2h}{mc}\sin^2\frac{\theta}{2} \tag{1-7-1}$$

であるが、この最大値 $\Delta\lambda_{\max}$ は式から $\theta = \pi$ のときである。この $\Delta\lambda_{\max}$ が λ の 1 %のとき、

$$\Delta\lambda_{\max} = \frac{\lambda}{100}$$

よって λ は、

$$\lambda = 100 \times \frac{2h}{mc} = 100 \times \frac{2 \times 6.626 \times 10^{-34}}{9.109 \times 10^{-31} \times 2.998 \times 10^{8}} = 4.85 \times 10^{-10}\mathrm{m}$$

であり、この波長の電磁波は、教科書 p.5 の表 1.3 から X 線であり、このエネルギーは

$$E = \frac{ch}{\lambda} = \frac{3.00 \times 10^{8} \times 6.63 \times 10^{-34}}{4.85 \times 10^{-10}} = 4.10 \times 10^{-16}\mathrm{J} = 2.56 \times 10^{3}\mathrm{eV} \tag{1-7-2}$$

h9410159 平野 喜英 (h9410159@edu.cc.uec.ac.jp) 作成 (95/12/25)

問題 1-8. 太陽から地球まで光が届くのに約 500 秒かかる。太陽までの距離は何 km か? この長さを 1 **天文単位**という。

答: 光の速度は $c = 2.997925 \times 10^{8}\mathrm{m/s}$ であるので太陽までの距離は、

$$500 \times 2.9979 \times 10^{8} = 1.50 \times 10^{11}\mathrm{m} = 1.50 \times 10^{8}\mathrm{km} \tag{1-8-1}$$

より 1 **天文単位**は 1 億 5 千万 km

t9410107 高橋 一晃 (t9410107@edu.uec.ac.jp) 作成 (95/12/05)

問題 1-9. 太陽から地球の表面 $1\mathrm{cm}^2$ に毎分 2cal の熱が放射される。これが、 $0.5\mu\mathrm{m}$ の光であるとして、地球の表面 $1\mathrm{cm}^2$ に毎秒何個の光子を受けていることになるか？また太陽からすべての光子が空気中で減衰することなくふりそそいだとすると、太陽は毎秒どれくらいの光子をだしているか？太陽は何 W の電熱器に等しいか評価せよ。

答: 波長 $\lambda = 0.5\mu\mathrm{m}$ の光の光子 1 個のエネルギー E は

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \tag{1-9-1}$$

h: プランク定数　c: 真空中での光の速さ　より

$$E = \frac{6.63 \times 10^{-34} \times 3.00 \times 10^{8}}{0.5 \times 10^{-6}} \quad \mathrm{J} \tag{1-9-2}$$

と求められる。地球の表面 $1\mathrm{cm}^2$ には毎分 2cal の熱が放射されているから、 1 秒間に放射する熱は、ジュールの定数 (=4.19) を用いて

$$2 \times 4.19 \times \frac{1}{60} \quad \mathrm{J} \tag{1-9-3}$$

となる。したがって地球の表面 $1\mathrm{cm}^2$ には (1-9-2) と (1-9-3) より毎秒

$$2 \times 4.19 \times \frac{1}{60} \times \frac{0.5 \times 10^{-6}}{6.63 \times 10^{-34} \times 3.00 \times 10^{8}} = 3.510 \times 10^{17} \quad 個 \tag{1-9-4}$$

の光子を受けている。太陽の中心から地球の表面までの距離が半径 $r\mathrm{cm}$ の球を考えて、その球面の $1\mathrm{cm}^2$ に放出される光子の量が (1-9-4) で求められているので、それを球面全体に広げると、太陽が 1 秒間に出している光子の量は $3.510\times10^{17}\times4\pi r^2$ 個となる。理科年表（平成 6 年版）より r は $1.496\times10^{13}\mathrm{cm}$。これから太陽が 1 秒間に出している光子の量は

$$3.510\times10^{17}\times4\pi\times(1.496\times10^{13})^2=9.871\times10^{44}\sim1.0\times10^{45}\ \text{個} \quad (1\text{-}9\text{-}5)$$

となる。さらに 1 秒間に太陽は

$$9.871\times10^{44}\times\frac{6.63\times10^{-34}\times3.00\times10^{8}}{0.5\times10^{-6}}=3.926\times10^{26}\sim3.9\times10^{26}\ \mathrm{J} \quad (1\text{-}9\text{-}6)$$

の熱を発生していることになる。従って太陽は $3.9\times10^{26}\mathrm{W}$ の電熱器に等しい。

t9410126 坪井 秀和 (t9410126@edu.cc.uec.ac.jp) 作成 (95/12/20)

問題 2-1. 図 1(教科書 p.21 参照) のように、幅 a の 1 個のスリットに、波数 $k=2\pi/\lambda$ の平面波が侵入した。これを L だけ離れたスクリーン上で x だけ離れた点での振幅 $f(x)$ は

$$f(x)=C\int_0^a e^{ikyx/L}dy \quad (2\text{-}1\text{-}1)$$

と近似的に書けることを示せ (C は定数)。また、この $f(x)$ と強度 $I(x)=|F(x)|^2$ を求めよ。ただし $L\gg x$ とする。

答: スクリーンの中心から x 離れた位置は、スリットから $\sin\theta\sim\tan\theta=x/L$ だけ傾いた方向である。また、スリットの下端 $(y=0)$ の点の波と、下端から y 離れた点の波では、スクリーン上の点 x までの道のりの差 $\Delta\ell$ が

$$\Delta\ell=y\sin\theta=\frac{yx}{L}, \quad (2\text{-}1\text{-}2)$$

である。よって、この 2 つの波の位相のずれ $\Delta\varphi$ は

$$\Delta\varphi=\frac{\Delta\ell}{\lambda}\times2\pi=\frac{kxy}{L}, \quad (2\text{-}1\text{-}3)$$

したがって、点 y を出発した波の形は、振幅を C とすると

$$Ce^{i\Delta\varphi}=Ce^{ikyx/L}, \quad (2\text{-}1\text{-}4)$$

と表される。スクリーン上の点 x で観測される波は、$y=0$ から $y=a$ までの波の重ね合わせであるから、$f(x)$ は (2-1-4) 式を用いて

$$f(x)=C\int_0^a e^{ikyx/L}dy, \quad (2\text{-}1\text{-}5)$$

と表される。式 (2-1-5) を計算すると

$$f(x)=C\frac{L}{ikx}\left[e^{ikyx/L}\right]_{y=0}^{y=a}=\frac{CL}{ikx}\left(e^{ikax/L}-1\right), \quad (2\text{-}1\text{-}6)$$

よって強度 $I(x)$ は

$$I(x)=|f(x)|^2=\frac{|C|^2L^2}{k^2x^2}\left|e^{ikax/L}-1\right|^2=\frac{4|C|^2L^2}{k^2x^2}\sin^2\frac{kax}{2L}, \quad (2\text{-}1\text{-}7)$$

を得る。

h9410159 平野 喜英 (h9410159@edu.cc.uec.ac.jp) 作成 (95/12/25)

問題 2-2. 図 2 (教科書 p.21 参照) のように、幅 a の 2 個のスリットが d だけ離れている。ここに波数 $k = 2\pi/\lambda$ の平面波が進入した。これを L だけ離れたスクリーン上での x だけ離れた点での振幅 $F(x)$ は、2.1 で求めた $f(x)$ を用いて、

$$F(x) = f(x)\sum_{n=0}^{1} e^{indkx/L} \tag{2-2-1}$$

と近似的に書けることを示せ。また、この $F(x)$ と強度 $I_2(x) = |F(x)|^2$ を求めよ。

答: 教科書の図から明らかなように、問題 2-1 では $y = 0$ から $y = a$ まで行っていた積分を、本問では $y = 0$ から $y = a$ までの積分と $y = d$ から $y = a + d$ までの積分の和の形に変えればよい。すなわち、問題 2-1 の解を利用すると振幅 $F(x)$ は

$$F(x) = C\int_0^a e^{ikyx/L}dy + C\int_d^{a+d} e^{ikyx/L}dy = C\int_0^a e^{ikyx/L}dy + C\int_0^a e^{ikx(u+d)/L}du$$

$$= f(x) + e^{idkx/L}f(x) = f(x)\sum_{n=0}^{1} e^{indkx/L} \tag{2-2-2}$$

と表される。これを計算すると

$$F(x) = f(x)\left(e^{idkx/L} + 1\right)$$

$$= \frac{CL}{kx}\left(2\sin\frac{kax}{2L}e^{ikax/2L}\right)\left(2\cos\frac{kdx}{2L}e^{ikdx/2L}\right) \tag{2-2-3}$$

を得る。したがって、強度 $I_2(x)$ は

$$I_2(x) = |F(x)|^2 = \frac{|C|^2L^2}{k^2x^2} \times 4\sin^2\frac{kax}{2L} \times \left(4\cos^2\frac{kdx}{2L}\right)$$

$$= \frac{16|C|^2L^2}{k^2x^2}\sin^2\frac{kax}{2L}\left(\cos^2\frac{kdx}{2L}\right) \tag{2-2-4}$$

h9410159 平野 喜英 (h9410159@edu.cc.uec.ac.jp) 作成 (95/12/25)

問題 2-3. 電子は真空中で 100V の電子で加速した場合の速度は何 m/s か? またこの速度は光速の何 % になるか?

答: 1eV は電子 1 個を 1V で加速したエネルギーなのでこの電子の持つエネルギー E は

$$E = 1\mathrm{eV} \times 100 \ (1 \text{ 電子ボルト } 1\mathrm{eV} = 1.60219 \times 10^{-19}\mathrm{J}) \tag{2-3-1}$$

また、E のすべてが運動エネルギーに変わるので

$$E = \frac{1}{2}mv^2 \tag{2-3-2}$$

を変形すると、

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m}} \ (\text{電子の質量 } m = 9.109390 \times 10^{-31}\mathrm{kg}) \tag{2-3-3}$$

である。ここから求める電子の速度 $v = 5.93 \times 10^6$m/s を得る。また光速を c とすれば

$$\frac{v}{c} \times 100\% \ (\text{光速 c} = 2.99792458 \times 10^8\mathrm{m/s}) \tag{2-3-4}$$

なのでこの電子の速度は光速の 1.98 % である。

t9410107 高橋 一晃 (t9410107@edu.uec.ac.jp) 作成 (95/12/04)

問題 2-4. 中性子が 100m/s の速度で飛んでいる。この中性子のド・ブロイ波長は、何Å か? ただし中性子の質量は、 1.6749×10^{-27}kg である。同じ速度で電子の場合と比較せよ。

答: この中性子のド・ブロイ波長を λ_n、質量を m_n とする。

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \tag{2-4-1}$$

(ただし h はプランク定数で $h = 6.626076 \times 10^{-34}$Js である) より、

$$\lambda_n = \frac{h}{m_n v} = \frac{6.626076 \times 10^{-34}}{1.6749 \times 10^{-27} \times 100} = 3.9561 \times 10^{-9}\mathrm{m} \tag{2-4-2}$$

よって求める中性子のド・ブロイ波長 $\lambda_n = 3.96 \times 10^{-9}\mathrm{m} = 39.6$Å を得る。
ここで、電子の質量を $m_e = 9.109390 \times 10^{-31}$kg、ド・ブロイ波長を λ_e とすると

$$\frac{\lambda_e}{\lambda_n} = \frac{\frac{h}{m_e v}}{\frac{h}{m_n v}} = \frac{m_n}{m_e} = 1838.7 \tag{2-4-3}$$

なので電子のド・ブロイ波長は中性子の 1838.7 倍である。

t9410107 高橋 一晃 (t9410107@edu.uec.ac.jp) 作成 (95/12/11)

問題 2-5. 電子波の共鳴の式 (2.9) で、 $L = 10$Å の場合の $n = 1$ のエネルギーは何 eV か?

答: (2.9) 式

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{h^2}{8mL^2}n^2、 \tag{2-5-1}$$

に $n = 1$ を代入する。また、電子の質量 $m = 9.109390 \times 10^{-31}$kg、プランク定数 $h = 6.626076 \times 10^{-34}$Js、 $L = 10$Å $= 1.0 \times 10^{-9}$m をそれぞれ代入すると

$$E_1 = \frac{(6.626076 \times 10^{-34})^2}{8 \times 9.109390 \times 10^{-31} \times (1.0 \times 10^{-9})^2} \times 1^2 = 0.602467 \times 10^{-19}\mathrm{J} \tag{2-5-2}$$

$1\mathrm{eV} = 1.602177 \times 10^{-19}$J より、エネルギーを電子ボルトに変換して、

$$\frac{E_1}{1.602177 \times 10^{-19}} = 0.38\mathrm{eV}、 \tag{2-5-3}$$

である。

t9410107 高橋 一晃 (t9410107@edu.uec.ac.jp) 作成 (95/12/05)

問題 2-6. 電子波の共鳴で得られた準位で、 $n = 2$ から $n = 1$ の発光が可能な場合、発光する光が青色 ($\lambda = 0.45\mu$m) になるためには、 L の値を何Å にすれば良いか?

答: (2.9) 式より

$$E = \frac{h^2}{8mL^2}n^2(n = 1, 2, \cdots) \tag{2-6-1}$$

(ただし h はプランク定数で $h = 6.626076\times10^{-34}$Js、 m は電子の質量で $m = 9.109390\times 10^{-31}$kg) なので、 $n = 2$ と $n = 1$ の準位で得られるエネルギー差は

$$E = \frac{h^2}{8mL^2}(2^2 - 1^2) = \frac{3h^2}{8mL^2} \tag{2-6-2}$$

また (1.3)、 (1.4) 式より

$$E = h\nu = h\frac{c}{\lambda} = \frac{3h^2}{8mL^2} \tag{2-6-3}$$

(ただし c は光の速度で $c = 2.997925 \times 10^8 \mathrm{m/s}$) よって

$$L = \sqrt{\frac{3h\lambda}{8cm}} = \sqrt{\frac{3 \times 6.626076 \times 10^{-34} \times 0.45 \times 10^{-6}}{8 \times 2.997925 \times 10^{8} \times 9.109390 \times 10^{-31}}} = 6.40\text{Å} \qquad (2\text{-}6\text{-}4)$$

が得られる。

t9410107 高橋 一晃 (t9410107@edu.uec.ac.jp) 作成 (95/12/11)

問題 2-7. 負のミュー粒子 (μ^-) は、電子の 207 倍の重さをもち、電荷が $-e$ である粒子である。陽子と負のミュー粒子でつくる 「水素原子」 の場合、リュードベリ定数 R の値は何 eV になるか。また、電子と同じ重さで電荷が $+e$ の粒子 (陽電子) と電子で 「水素原子」 を作った場合、 R は何 eV になるか。

答: 電子の質量を m 、陽子の質量を M とすると、負のミュー粒子の質量は $207m$ である。ここで、陽子と負のミュー粒子の換算質量 μ_1 は、

$$\mu_1 = \left(\frac{1}{M} + \frac{1}{207m}\right)^{-1} = \left(\frac{1}{1.6726 \times 10^{-27}} + \frac{1}{207 \times 9.1093 \times 10^{-31}}\right)^{-1}$$
$$= 1.6945 \times 10^{-28} \quad \mathrm{kg}$$

である。また、 リュードベリ定数 R は、教科書 p.19 の (2.17) 式から

$$R = \left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \quad \mathrm{J} = \left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{\mu e^3}{2\hbar^2} \quad \mathrm{eV} \qquad (2\text{-}7\text{-}1)$$

である。これに値を代入すると

$$R_1 = \left(\frac{1}{4 \times 3.1416 \times 8.8542 \times 10^{-12}}\right)^2 \times \frac{1.6945 \times 10^{-28}\left(1.6022 \times 10^{-19}\right)^3}{2 \times \left(1.0546 \times 10^{-34}\right)^2}$$
$$= 2530 \quad \mathrm{eV}$$

同様にして陽電子の場合も換算質量 μ_2 を求めて、 R の式 (2-7-1) に代入すればよい。

$$\mu_2 = \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{m}\right)^{-1} = \frac{m}{2} = \frac{9.1093 \times 10^{-31}}{2} = 4.5547 \times 10^{-31} \quad \mathrm{kg}$$

である。よってこれを代入すれば

$$R_2 = \left(\frac{1}{4 \times 3.1416 \times 8.8542 \times 10^{-12}}\right)^2 \times \frac{\left(4.5547 \times 10^{-31}\right)\left(1.6022 \times 10^{-19}\right)^3}{2 \times \left(1.0546 \times 10^{-34}\right)^2}$$
$$= 6.80 \quad \mathrm{eV}$$

を得る。

y9410189 山口 貴宏 (y9410189@edu.cc.uec.ac.jp) 作成 (95/12/15)

問題 2-8. 水素原子のライマン系列 (終状態、 $m = 1$) のスペクトルの幅 (光の観測されるエネルギーの幅) とバルマー系列 ($m = 2$) のスペクトルの幅の比を求めよ。 (注: 比は、エネルギーの幅の比で求めよ。)

答: 電子が、n 番目のエネルギー準位から m 番目のエネルギー準位に遷移するときに、水素原子は

$$E_{nm} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad (2\text{-}8\text{-}1)$$

のエネルギーを持った光を放出する。ここで、 R はリュードベリ定数である。
まず、ライマン系列について、ライマン系列は、終状態が $m = 1$ であるから、始状

態は$n=2,\quad 3,\quad 4\cdots\cdots$と変化することができる。
よって、光のエネルギーは、

$$E_{21}=R(\frac{1}{1^2}-\frac{1}{2^2})=R(1-\frac{1}{4})=\frac{3}{4}R \tag{2-8-2}$$

$$E_{31}=R(\frac{1}{1^2}-\frac{1}{3^2})=R(1-\frac{1}{9})=\frac{8}{9}R \tag{2-8-3}$$

の値をとることから、エネルギーのとりうる範囲は、

$$\frac{3}{4}R \quad (n=2\text{のとき})\leq E<R \quad (n\to\infty\text{のとき}) \tag{2-8-4}$$

であることが分かる。よって、ライマン系列のスペクトルの幅は、

$$R-\frac{3}{4}R=\frac{1}{4}R \tag{2-8-5}$$

である。また、バルマー系列 (終状態、 $m=2$ 始状態、 $n=3,\quad 4,\quad 5\cdots\cdots$) についても同様に、

$$E_{32}=R(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{3^2})=R(\frac{1}{4}-\frac{1}{9})=\frac{5}{36}R \tag{2-8-6}$$

$$E_{42}=R(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{4^2})=R(\frac{1}{4}-\frac{1}{16})=\frac{3}{16}R \tag{2-8-7}$$

となるから、エネルギーのとりうる範囲は、

$$\frac{5}{36}R \quad (n=2\text{のとき})\leq E<\frac{1}{4}R \quad (n\to\infty\text{のとき}) \tag{2-8-8}$$

であり、バルマー系列のスペクトルの幅は、

$$\frac{1}{4}R-\frac{5}{36}R=\frac{1}{9}R \tag{2-8-9}$$

となる。よって、ライマン系列のスペクトルの幅とバルマー系列のスペクトルの幅の比として、

$$\frac{1}{4}R:\frac{1}{9}R=9:4 \tag{2-8-10}$$

を得る。

941000B 後藤 博志 (g941000@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (99/11/15)

問題 2-9. 水素原子のバルマー系列のスペクトル (終状態, $m=2$) の始状態で $n=3,4,5$ の状態からの光の波長を求めよ。 また表 1.2 を用いてその光の色を決定せよ。

答: 水素原子のバルマー系列のスペクトルの公式は

$$\frac{1}{\lambda}=R\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{n^2}\right) \tag{2-9-1}$$

で与えられる。 ここで $R=1.09737\times10^7\ \ \mathrm{m}^{-1}$ はリュードベリ定数である。 したがって光の波長,

$$\lambda=\left[R\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{n^2}\right)\right]^{-1} \tag{2-9-2}$$

よって, (2-9-2) より $n=3$ の始状態からの光の波長は,

$$\lambda=\left[1.09737\times10^7\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{3^2}\right)\right]^{-1}=6.561\times10^{-7}\ \ \mathrm{m}=0.6561\ \ \mu\mathrm{m}$$

表 1.2 よりこの光の色は赤である。同様に $n = 4$ の始状態からの光の波長は,

$$\lambda = \left[1.09737 \times 10^7 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{4^2}\right)\right]^{-1} = 4.860 \times 10^{-7} \ \ \mathrm{m} = 0.4860 \ \ \mu\mathrm{m}$$

表 1.2 よりこの光の色は青である。同様に $n = 5$ の始状態からの光の波長は,

$$\lambda = \left[1.09737 \times 10^7 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{5^2}\right)\right]^{-1} = 4.339 \times 10^{-7} \ \ \mathrm{m} = 0.4341 \ \ \mu\mathrm{m}$$

表 1.2 よりこの光の色は青紫である。

y9410205 Yuzri Mohd Yusoff (y9410205@edu.uec.ac.jp) 作成 (/95/12/15)

問題 3-1. 次のエルミート行列の固有値、固有ベクトルを求めよ。

$$(a) \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (b) \quad \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$$

答: (a)

$$\begin{vmatrix} \lambda & -1 \\ -1 & \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 1 = (\lambda + 1)(\lambda - 1) = 0 \tag{3-1-1}$$

よって固有値は $\lambda = \pm 1$ であり、各々に対する固有ベクトルは

$$\mathbf{u}_1 = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \ \ , \ \mathbf{u}_2 = \beta \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{3-1-2}$$

となる。単位ベクトルに直せば以下の通り。

$$\mathbf{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \ \ , \ \mathbf{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{3-1-3}$$

(b)

$$\begin{vmatrix} \lambda - 1 & -i \\ i & \lambda - 1 \end{vmatrix} = (\lambda - 1)^2 - (-i)i = \lambda(\lambda - 2) = 0 \tag{3-1-4}$$

故に固有値は $\lambda = 0, 2$ であり、各々に対する固有ベクトルは

$$\mathbf{u}_1 = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \ \ , \ \mathbf{u}_2 = \beta \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3-1-5}$$

となる。単位ベクトルに直せば以下の通り。

$$\mathbf{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \ \ , \ \mathbf{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3-1-6}$$

g040496 沼田 和幸 (g040496@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (01/01/30)

問題 3-2. 次の演算子の固有値、固有ベクトルを求めよ。

(a) $\mathcal{O} = \dfrac{d}{dx} + x$ 　(ヒント: $\varphi(x) = e^{z(x)}$ とおいてみよ)

(b) $\mathcal{O} = \dfrac{d^2}{dx^2} + \dfrac{d}{dx}$ 　(ヒント: $\varphi(x) = e^{Dx}$ とおいてみよ)

答: (a) 固有値を λ 、固有ベクトルを $\varphi(x)$ とすると、

$$\mathcal{O}\varphi(x) = \lambda\varphi(x), \tag{3-2-1}$$

$\mathcal{O}$ を (3-2-1) に代入すると、

$$\frac{d\varphi(x)}{dx} + (x - \lambda)\varphi(x) = 0. \tag{3-2-2}$$

ヒントから $\varphi(x) = e^{z(x)}$ とおき、これを (3-2-2) に代入すると、

$$z'(x)e^{z(x)} + (x - \lambda)e^{z(x)} = 0,$$
$$z'(x) = -x + \lambda,$$
$$z(x) = -\frac{x^2}{2} + \lambda x + C', \quad (C' \text{ は任意定数})$$

したがって

$$\varphi(x) = Ce^{-x^2/2+\lambda x} \tag{3-2-3}$$

を得る (C は任意定数)。 λ は任意の数であるから、固有値、固有関数の組が無数にある。

(b) (a) と同様にして $\mathcal{O}$ を (3-2-1) に代入すると、

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d}{dx} - \lambda\right)\varphi(x) = 0. \tag{3-2-4}$$

ヒントから $\varphi(x) = e^{Dx}$ とおき、これを (3-2-4) に代入して、

$$D^2 + D - \lambda = 0$$
$$D = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 4\lambda}}{2}$$

したがって、

$$\varphi = C_1 e^{(-1-\sqrt{1+4\lambda})x/2} + C_2 e^{(-1+\sqrt{1+4\lambda})x/2}. \tag{3-2-5}$$

を得る (C_1, C_2 は任意定数)。

y9410189 山口 貴宏 (y9410189@edu.cc.uec.ac.jp) 作成 (95/12/25)

問題 3-3. 井戸型ポテンシャル (3.15) の値が 0 になる x の範囲を $|x| < a/2$ から、$0 < x < a$ にしたときの固有値、固有関数を求めよ。

答: まず $x > a$ または $x < 0$ の部分では、ポテンシャルが無限大なので電子は存在しないと考えて良い。次に $0 \leq x \leq a$ の部分について、$U(x) = 0$ よりハミルトニアンは、

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \tag{3-3-1}$$

であるから、シュレーディンガー方程式は、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}-E\right)\varphi(x)=0 \tag{3-3-2}$$

となり、ここで、

$$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{3-3-3}$$

とおくと、(3-3-2) は、

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)\varphi(x)=0 \tag{3-3-4}$$

となる。この式の一般解は、

$$\varphi(x)=C_1e^{ikx}+C_2e^{-ikx},\ (C_1,C_2\text{は任意定数}) \tag{3-3-5}$$

である。ここで境界条件、

$$\varphi(0)=0,\ \varphi(a)=0 \tag{3-3-6}$$

より、

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ e^{ika} & e^{-ika} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3-3-7}$$

という連立方程式が得られる。この連立方程式が $C_1=C_2=0$ 以外の解を持つためには、

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ e^{ika} & e^{-ika} \end{vmatrix}=e^{-ika}-e^{ika}=-2i\sin(ka)=0 \tag{3-3-8}$$

でなければいけない。したがって、波数 k は、

$$k_na=n\pi,\ (n=1,2,\cdots) \tag{3-3-9}$$

となる。この k_n の値を (3-3-3に代入すると、エネルギー固有値 E_n として、

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}n^2,\ (n=1,2,\cdots) \tag{3-3-10}$$

を得る。次に、(3-3-9) を (3-3-7) に代入すると、

$$C_1+C_2=0,\ \text{すなわち}C_1:C_2=1:-1 \tag{3-3-11}$$

である事がわかる。この関係を (3-3-5) に適用すると、

$$\varphi_n(x)=C'\{e^{ik_nx}-e^{-ik_nx}\}=C\sin(k_nx) \tag{3-3-12}$$

という固有関数が求まる。ここで規格化条件、

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi_n(x)|^2dx=1 \tag{3-3-13}$$

を考慮に入れて規格化を行うと、

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi_n(x)|^2dx=C^2\int_0^a\sin^2(k_nx)dx=\frac{C^2a}{2}=1 \tag{3-3-14}$$

であるから、$C=\sqrt{2/a}$ である。よって、規格化された波動関数は、

$$\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_nx) \tag{3-3-15}$$

となる。

g940455 浜地慎一郎 (g940455@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (99/11/30)

問題 3-4. 井戸型ポテンシャルの固有関数 $\phi_n(x)$(3.30) で内積 $< \phi_n|\phi_m >$ が以下の関係式を満たすことを示せ。

$$< \varphi_n|\varphi_m >= \int_{-a/2}^{a/2} \varphi_n^*(x)\varphi_m(x)dx = \delta_{mn}$$

ここで δ_{mn} は、 n と m が同じ場合１で、異なる場合０を与える関数

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & (n = m) \\ 0 & (n \neq m) \end{cases}$$

でクロネッカーのデルタと呼ぶ。

答: (3.30) より、

$$\varphi_n = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin k_n x & (n = 2, 4, 6, \cdots\cdots) \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \cos k_n x & (n = 1, 3, 5, \cdots\cdots) \end{cases} \tag{3-4-1}$$

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \tag{3-4-2}$$

である。ここで (i)(a)$n = m$ で n が偶数のとき、

$$\begin{aligned} (\text{左辺}) &= \frac{2}{a}\int_{-a/2}^{a/2} \sin^2 k_n x dx \\ &= \frac{2}{a}\int_{-a/2}^{a/2} \frac{1 - \cos 2k_n x}{2} dx \\ &= \frac{1}{a}\left[x - \frac{\sin 2k_n x}{2k_n}\right]_{-a/2}^{a/2} \\ &= \frac{1}{2} - \frac{\sin ak_n}{2ak_n} + \frac{1}{2} + \frac{\sin(-ak_n)}{2ak_n} \\ &= 1 - \frac{\sin n\pi}{n\pi} \\ &= 1 \end{aligned} \tag{3-4-3}$$

(b)$n = m$ で n が奇数のとき、

$$\begin{aligned} (\text{左辺}) &= \frac{2}{a}\int_{-a/2}^{a/2} \cos^2 k_n x dx \\ &= \frac{2}{a}\int_{-a/2}^{a/2} \frac{1 + \cos 2k_n x}{2} dx \\ &= \frac{1}{a}\left[x + \frac{\sin 2k_n x}{2k_n}\right]_{-a/2}^{a/2} \\ &= \frac{1}{2} + \frac{\sin ak_n}{2ak_n} + \frac{1}{2} - \frac{\sin(-ak_n)}{2ak_n} \\ &= 1 \end{aligned} \tag{3-4-4}$$

また、 (ii)(a)$n \neq m$ で n、m ともに偶数のとき、

$$\begin{aligned} (\text{左辺}) &= \frac{2}{a}\int_{-a/2}^{a/2} \sin k_n x \sin k_m x dx \\ &= -\frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2} \{\cos(k_n + k_m)x - \cos(k_n - k_m)x\} dx \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= -\frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2}\{\cos\frac{(n+m)\pi}{a}x - \cos\frac{(n-m)\pi}{a}x\}dx \\
&= -\frac{1}{a}\left[\frac{a}{(n+m)\pi}\sin\frac{(n+m)\pi}{a}x - \frac{a}{(n-m)\pi}\sin\frac{(n-m)\pi}{a}x\right]_{-a/2}^{a/2} \\
&= -\frac{2}{a}\{\frac{a}{(n+m)\pi}\sin\frac{(n+m)\pi}{2} - \frac{a}{(n-m)\pi}\sin\frac{(n-m)\pi}{2}\} \qquad (3\text{-}4\text{-}5)
\end{aligned}
$$

ここで、n、m が偶数より、$n+m$、$n-m$ も偶数であるから $\frac{(n+m)\pi}{2}$、$\frac{(n-m)\pi}{2}$ は π の整数倍となり、$\sin\frac{(n+m)\pi}{2} = \sin\frac{(n-m)\pi}{2} = 0$ より左辺は 0 である。
(b)$n \neq m$ で n、m ともに奇数のとき、

$$
\begin{aligned}
(\text{左辺}) &= \frac{2}{a}\int_{-a/2}^{a/2}\cos k_n x\cos k_m x dx \\
&= \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2}\{\cos(k_n+k_m)x + \cos(k_n-k_m)x\}dx \\
&= \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2}\{\cos\frac{(n+m)\pi}{a}x + \cos\frac{(n-m)\pi}{a}x\}dx \\
&= \frac{1}{a}\left[\frac{a}{(n+m)\pi}\sin\frac{(n+m)\pi}{a}x + \frac{a}{(n-m)\pi}\sin\frac{(n-m)\pi}{a}x\right]_{-a/2}^{a/2} \\
&= \frac{2}{a}\{\frac{a}{(n+m)\pi}\sin\frac{(n+m)\pi}{2} + \frac{a}{(n-m)\pi}\sin\frac{(n-m)\pi}{2}\} \qquad (3\text{-}4\text{-}6)
\end{aligned}
$$

ここで、n、m が奇数より、$n+m$、$n-m$ は偶数であるから $\frac{(n+m)\pi}{2}$、$\frac{(n-m)\pi}{2}$ は π の整数倍となり、$\sin\frac{(n+m)\pi}{2} = \sin\frac{(n-m)\pi}{2} = 0$ より左辺は 0 である。
(c)$n \neq m$ で n、m の偶奇が一致しないとき、左辺は cos と sin の積の積分となる。偶関数と奇関数の積より、左辺は奇関数の積分となる。積分区間が原点について対称であるから、左辺の積分を実行すると 0 を得る。
よって (i)(ii) より題意は示された。

941000B 後藤 博志 (g941000@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (99/11/8)

問題 3-5. 一般に演算子 $\mathcal{O}$ の異なる固有値 E_n, E_m に対応する固有関数 $\varphi_n(x), \varphi_m(x)$ は内積が直交することを示せ。

答: E_n, E_m は $\mathcal{O}$ の固有値である事より

$$
\begin{aligned}
\mathcal{O}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x) \\
\mathcal{O}\varphi_m(x) = E_m\varphi_n(x)
\end{aligned}
$$

これを、物理量 $\mathcal{O}$, $\mathcal{O}^*$ の期待値を求める式：

$$
\begin{aligned}
\mathcal{O}_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi_m(x)^*\mathcal{O}\varphi_n(x)dx \\
\mathcal{O}_{nm}^* = \int_{-\infty}^{\infty}\left(\varphi_n(x)^*\mathcal{O}\varphi_m(x)\right)^* dx
\end{aligned}
$$

に代入して 2 式の差をとり、

$$
\begin{aligned}
\mathcal{O}_{mn} - \mathcal{O}_{nm}^* &= \int_{-\infty}^{\infty}\left\{(\varphi_m(x)^* E_n\varphi_n(x)) - (\varphi_n(x)^* E_m\varphi_m(x))^*\right\}dx \\
&= (E_n - E_m)\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_m(x)^*\varphi_n(x)dx \\
&= (E_n - E_m) < \varphi_m|\varphi_n > \qquad (3\text{-}5\text{-}1)
\end{aligned}
$$

ここで、一般に物理量は観測可能な実数なので $\mathcal{O}$ はエルミート演算子である。故に

$$\mathcal{O}_{mn} = \mathcal{O}^*_{nm} \tag{3-5-2}$$

が成り立つ。従って $E_m \neq E_n$ より $m \neq n$ のとき

$$< \varphi_m | \varphi_n >= 0 \tag{3-5-3}$$

が成立する。又、 $m = n$ のときは波動関数の規格化なので内積は 1 となる。

g040496 沼田 和幸 (g040496@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (00/12/06)

問題 3-6. 以下の演算子の井戸型ポテンシャルの固有関数 $\varphi_n(x)$(3.30) での期待値を求めよ。

$$\text{(a)} \quad x^2 \quad \text{(b)} \quad p^2 \quad \text{(c)} \quad y \quad (x \text{と直角方向})$$

答: (3.30) は以下の通り。

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}} \cos(k_n x), & (\mathrm{n} = 1,3,5,\cdots) \\ \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin(k_n x), & (\mathrm{n} = 2,4,6,\cdots) \end{cases} \tag{3-6-1}$$

k_n は (3.23) より $\quad k_n a = n\pi$.

$$\therefore \quad \sin(k_n a) = 0, \qquad \cos(k_n a) = (-1)^n \tag{3-6-2}$$

(a) x^2 の期待値 $\mathcal{O} = x^2$ は、n が奇数のとき

$$\begin{aligned}
\mathcal{O} &= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \varphi_n(x)^* x^2 \varphi_n(x) dx \\
&= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos(k_n x)^* x^2 \sqrt{\frac{2}{a}} \cos(k_n x) dx \\
&= \frac{2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} x^2 \cos^2(k_n x) dx \\
&= \frac{1}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} x^2 \left\{1 + \cos(2k_n x)\right\} dx \\
&= \frac{1}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} x^2 dx + \underline{\frac{1}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} x^2 \cos(2k_n x) dx} \\
&= \frac{1}{a} \left[\frac{1}{3} x^3\right]_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} + \underline{\frac{1}{a} \left\{ \left[\frac{1}{2k_n} x^2 \sin(2k_n x)\right]_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} - \frac{1}{2k_n} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} 2x \sin(2k_n x) dx \right\}} \\
&= \frac{a^2}{12} \underline{- \frac{1}{k_n a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} x \sin(2k_n x) dx} \\
&= \frac{a^2}{12} \underline{- \frac{1}{k_n a} \left\{ \left[-\frac{1}{2k_n} x \cos(2k_n x)\right]_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} + \frac{1}{2k_n} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \cos(2k_n x) dx \right\}} \\
&= \frac{a^2}{12} + \frac{1}{k_n^2 a} \left(-\frac{a}{2}\right) - \frac{1}{2k_n^2 a} \left[\frac{1}{2k_n} \sin(2k_n x)\right]_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \\
&= a^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2k_n^2 a^2}\right) \\
&= a^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2 \pi^2}\right)
\end{aligned}$$

となる。偶数のときは下線部の計算が奇数のときと全く同じで、

$$\begin{aligned}
\mathcal{O} &= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \varphi_n(x)^* x^2 \varphi_n(x) dx \\
&= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x)^* x^2 \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x) dx \\
&= \frac{2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} x^2 \sin^2(k_n x) dx \\
&= \frac{1}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} x^2 \left\{1 - \cos(2k_n x)\right\} dx \\
&= \cdots \\
&= \frac{a^2}{12} - \frac{1}{k_n^2 a} \left(\frac{a}{2}\right) - \frac{1}{2k_n^2 a} \left[\frac{1}{2k_n} \sin(2k_n x)\right]_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \\
&= a^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2k_n^2 a^2}\right) \\
&= a^2 \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}\right)
\end{aligned}$$

よって、 n の奇偶に依らず x^2 の期待値は $a^2 \left(\dfrac{1}{12} - \dfrac{1}{2n^2\pi^2}\right)$ となる。

(b) p^2 の演算子 $\mathcal{O}$ は $\mathcal{O} = \left(-i\hbar \dfrac{d}{dx}\right)^2$ と書けて、 n が奇数のとき

$$\begin{aligned}
\mathcal{O} &= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \varphi_n(x)^* \mathcal{O} \varphi_n(x) dx \\
&= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos(k_n x)^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)^2 \sqrt{\frac{2}{a}} \cos(k_n x) dx \\
&= \frac{2\hbar^2 k_n^2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \cos^2(k_n x) dx \\
&= \frac{\hbar^2 k_n^2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \left\{1 + \cos(2k_n x)\right\} dx \\
&= \frac{\hbar^2 k_n^2}{a} \left[x + \frac{1}{2k_n} \sin(2k_n x)\right]_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \\
&= \hbar^2 k_n^2 \\
&= \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{a^2}
\end{aligned}$$

偶数のときも同様に、

$$\begin{aligned}
\mathcal{O} &= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x)^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)^2 \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x) dx \\
&= \frac{2\hbar^2 k_n^2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \sin^2(k_n x) dx \\
&= \frac{\hbar^2 k_n^2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \left\{1 - \cos(2k_n x)\right\} dx \\
&= \frac{\hbar^2 k_n^2}{a} \left[x - \frac{1}{2k_n} \sin(2k_n x)\right]_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}
\end{aligned}$$

$$= \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{a^2}$$

よって、 n の奇偶に依らず p^2 の期待値は $\dfrac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{a^2}$ となる。

(c) y は x と直交しているので、 x で積分する場合には定数と見なせる。
$\varphi_n(x)$ は既に規格化されているので、 y の期待値を $\mathcal{O}$ として

$$\begin{aligned}
\mathcal{O} &= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \varphi_n(x)^* y \varphi_n(x) dx \\
&= y \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \varphi_n(x)^* \varphi_n(x) dx \\
&= y * 1 \\
&= y
\end{aligned}$$

である。よって y の期待値は y。

g040496 沼田 和幸 (g040496@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (01/01/29)

問題 3-7. (3.30) に示した井戸型ポテンシャルの固有関数 $\varphi_n(x)$ に対し、 $\mathcal{O}$ の行列 $< \varphi_n|\mathcal{O}|\varphi_{n+1} >$ を計算せよ。

$$\text{(a)} \quad x \quad \text{(b)} \quad x^2 \quad \text{(c)} \quad \tfrac{d}{dx}$$

答:

(a) $\mathcal{O} = x$のとき

$$< \varphi_n|\mathcal{O}|\varphi_{n+1} >= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \varphi_n(x) x \varphi_{n+1}(x) dx$$

1. n が偶数のとき

$$\begin{aligned}
< \varphi_n|\mathcal{O}|\varphi_{n+1} > &= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(k_n x) x \sqrt{\frac{2}{a}} \cos(k_{n+1} x) dx \\
&= \frac{2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \sin(k_n x) x \cos(k_{n+1} x) dx \\
&= \frac{1}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} x \left(\sin(k_n + k_{n+1}) x + \sin(k_n - k_{n+1}) x \right) dx \\
&= \frac{1}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} x \left(\sin \frac{(2n+1)\pi}{a} x + \sin(-\frac{\pi}{a}) x \right) dx \qquad \text{(3-7-1)} \\
& (\quad k_n = \frac{n\pi}{a} \text{を代入した})
\end{aligned}$$

ここで

$$\begin{aligned}
\int x \sin qx dx &= x(-\frac{1}{q} \cos qx) + \frac{1}{q} \int \cos qx dx + C \\
&= -\frac{x}{q} \cos qx + \frac{1}{q^2} \sin qx + C'
\end{aligned}$$

であるから

$$
\begin{aligned}
<\varphi_n|\mathcal{O}|\varphi_{n+1}> &= \frac{2a}{\pi^2}\{\frac{1}{(2n+1)^2}\sin{(n+\frac{1}{2})\pi}-1\} \\
&= \frac{2a}{\pi^2}\{\frac{1}{(2n+1)^2}-1\} \\
&= -\frac{8n(n+1)}{(2n+1)^2\pi^2}a \qquad \text{(3-7-2)}
\end{aligned}
$$

2. n が奇数のとき

$$
\begin{aligned}
<\varphi_n|\mathcal{O}|\varphi_{n+1}> &= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\sqrt{\frac{2}{a}}\cos{(k_n x)}x\sqrt{\frac{2}{a}}\sin{(k_{n+1}x)}dx \\
&= \frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}x\left(\sin\frac{(2n+1)\pi}{a}x+\sin{(\frac{\pi}{a})x}\right)dx \qquad \text{(3-7-3)} \\
&= \frac{2a}{\pi^2}\{-\frac{1}{(2n+1)^2}\sin{(n+\frac{1}{2})\pi}+1\} \\
&= \frac{8n(n+1)}{(2n+1)^2\pi^2}a \qquad \text{(3-7-4)}
\end{aligned}
$$

以上 (2)(4) をひとつの式にして

$$
<\varphi_n|\mathcal{O}|\varphi_{n+1}>=\frac{(-1)^{n+1}8n(n+1)}{(2n+1)^2\pi^2}a
$$

(b) $\mathcal{O}=x^2$のとき

$$
<\varphi_n|\mathcal{O}|\varphi_{n+1}>=\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\varphi_n(x)x^2\varphi_{n+1}(x)dx
$$

(a)(1)(3) までの同様の計算により

1. n が偶数のとき

$$
<\varphi_n|\mathcal{O}|\varphi_{n+1}>=\frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}x^2\{\sin\frac{(2n+1)\pi}{a}x+\sin{(-\frac{\pi}{a})x}\}dx
$$

2. n が奇数のとき

$$
<\varphi_n|\mathcal{O}|\varphi_{n+1}>=\frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}x^2\{\sin\frac{(2n+1)\pi}{a}x+\sin\frac{\pi}{a}x\}dx
$$

$1,2$ともに奇関数の積分であるため

$$
<\varphi_n|\mathcal{O}|\varphi_{n+1}>=0
$$

(c) $\mathcal{O}=\dfrac{d}{dx}$ のとき

1. n が偶数のとき

$$
\begin{aligned}
<\varphi_n|\mathcal{O}|\varphi_{n+1}> &= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_n x)\frac{d}{dx}\sqrt{\frac{2}{a}}\cos(k_{n+1}x)dx \\
&= \frac{2}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \sin(k_n x)(-k_{n+1}\sin(k_{n+1}x))dx \\
&= -\frac{1}{a}k_{n+1}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \cos(k_n-k_{n+1})x-\cos(k_n+k_{n+1})xdx \\
&= -\frac{2}{a}k_{n+1}\left(\frac{1}{k_n-k_{n+1}}\sin(k_n-k_{n+1})\frac{a}{2}-\frac{1}{k_n+k_{n+1}}\sin(k_n+k_{n+1})\frac{a}{2}\right)
\end{aligned}
$$

よって $k_n=\dfrac{n\pi}{a}$ を代入して

$$
<\varphi_n|\mathcal{O}|\varphi_{n+1}>=-\frac{4n(n+1)}{(2n+1)a} \tag{3-7-5}
$$

2. n が奇数のとき

$$
\begin{aligned}
<\varphi_n|\mathcal{O}|\varphi_{n+1}> &= \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \sqrt{\frac{2}{a}}\cos(k_n x)\frac{d}{dx}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(k_{n+1}x)dx \\
&= \frac{2}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \cos(k_n x)(k_{n+1}\cos(k_{n+1}x))dx \\
&= \frac{1}{a}k_{n+1}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \cos(k_n+k_{n+1})x+\cos(k_n-k_{n+1})xdx \\
&= \frac{2}{a}k_{n+1}\left(\frac{1}{k_n+k_{n+1}}\sin(k_n+k_{n+1})\frac{a}{2}+\frac{1}{k_n-k_{n+1}}\sin(k_n-k_{n+1})\frac{a}{2}\right)
\end{aligned}
$$

よって $k_n=\dfrac{n\pi}{a}$ を代入して

$$
<\varphi_n|\mathcal{O}|\varphi_{n+1}>=\frac{4n(n+1)}{(2n+1)a} \tag{3-7-6}
$$

以上 (5)(6) をひとつの式にして

$$
<\varphi_n|\mathcal{O}|\varphi_{n+1}>=\frac{(-1)^{n+1}4n(n+1)}{(2n+1)a}
$$

g240916 高城重宏 (g240916@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (/02/10/10)

問題 3-8. 光が吸収したり放出したりする場合，始状態 $\varphi_n(x)$ と 終状態 $\varphi_m(x)$ の間で，行列 $<\varphi_n|x|\varphi_m>$ が 0 にならないことが条件である (これを**双極子遷移**という)。全ての固有関数が奇関数か偶関数のどちらかである時，始状態と終状態の間にはどのような関係がなければならないか?

答: 行列ではさむ x が奇関数であるから、全ての固有関数が奇関数か偶関数のどちらかである場合には

$$
<\varphi_n|x|\varphi_m>=\int \varphi_n(x)x\varphi_m(x)dx
$$

の被積分関数 $\varphi_n(x)x\varphi_m(x)$ も奇関数か偶関数である。この積分が 0 にならないためには、被積分関数が偶関数でなければならない。(もし奇関数であれば、$x > 0$ の積分と $x < 0$ の積分が打ち消されるからである。) 従って、全体が偶関数あるためには、

始状態が奇関数なら 終状態は偶関数
始状態が偶関数なら 終状態は奇関数

であることが必要である。($\varphi_n(x)x\varphi_m(x)$ で、奇 x 奇 x 偶 = 偶, 偶 x 奇 x 奇 = 偶 の関係を用いた。)

rsaito 齋藤 理一郎 (rsaito@ee.uec.ac.jp) 作成 (97/06/11)

問題 4-1. 次のポテンシャルエネルギー $U(x)$ (図１参照)

$$U(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0) \\ -V_0 & (0 < x < a) \\ 0 & (a < x) \end{cases}$$

の束縛されたエネルギー $(E < 0)$ を求めよ。

答: シュレディンガー方程式は、

$$H\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{4-1-1}$$

である。ここで、

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + U(x) \tag{4-1-2}$$

$$p_x = -i\hbar\frac{d}{dx} \tag{4-1-3}$$

であるから、$(4-1-1)$ 式は、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} - (E - U(x))\right]\varphi(x) = 0 \tag{4-1-4}$$

となる。これより井戸に束縛されたエネルギー $(E < 0)$ を求める。

$0 < x < a$ のときのシュレディンガー方程式は、

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right)\varphi(x) = 0 \tag{4-1-5}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}} \tag{4-1-6}$$

$(4-1-5)$ 式を解くと、

$$\varphi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} \tag{4-1-7}$$

となる (C_1 , C_2 は任意定数)。
ここで境界条件 $\varphi(0) = 0$ より、$C_1 = -C_2$ 。これより、

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= C_1 e^{ikx} - C_1 e^{-ikx} \\ &= 2iC_1 \sin(kx) \\ &= A\sin(kx) \end{aligned} \tag{4-1-8}$$

となる ($A = 2iC_1$) 。

次に $a < x$ のときのシュレディンガー方程式は、

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \kappa^2 \right) \varphi(x) = 0 \tag{4-1-9}$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}} \tag{4-1-10}$$

$(4-1-9)$ 式を解くと、

$$\varphi(x) = C_3 e^{\kappa x} + C_4 e^{-\kappa x} \tag{4-1-11}$$

となる (C_3 , C_4 は任意定数)。
ここで境界条件 $\varphi(\infty) = 0$ より、 $C_3 = 0$ 。 これより、

$$\varphi(x) = Be^{-\kappa x} \tag{4-1-12}$$

となる ($B = C_4$)。
また、 $x = a$ のとき $\varphi(a)$ および $\varphi'(a)$ は連続であるから、

$$\frac{\varphi(x)}{\varphi'(x)} = k^{-1} \tan(ka) \qquad (0 < x < a) \tag{4-1-13}$$

$$\frac{\varphi(x)}{\varphi'(x)} = -\kappa^{-1} \qquad (x > a) \tag{4-1-14}$$

これより、 $\tan(ka) = -\frac{k}{\kappa}$ が得られる。

f9311196 水戸 和幸 (f11196@ced.cas.uec.ac.jp) 作成 (96/02/19)

問題 4-2. 図 1 のポテンシャルで $E > 0$ の固有関数の形を求めよ。ただし、規格化はしなくてよい。

答: シュレディンガー方程式は、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - (E - U(x)) \right] \varphi(x) = 0 \tag{4-2-1}$$

であるから、固有関数は次のようになる。
$x < 0$ のときは電子は存在しないと考える。 $0 < x < a$ のときのシュレディンガー方程式は、

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right) \varphi(x) = 0 \tag{4-2-2}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}} \tag{4-2-3}$$

これを解き、

$$\varphi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} \tag{4-2-4}$$

となる（C_1, C_2 は任意定数）。ここで境界条件 $\varphi(0) = 0$ より、 $C_1 = -C_2$。これより、

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= C_1 e^{ikx} - C_1 e^{-ikx} \\ &= 2iC_1 \sin(kx) \\ &= A \sin(kx) \end{aligned} \tag{4-2-5}$$

となる（$A = 2iC_1$）。
$a < x$ のときのシュレディンガー方程式は、

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + q^2\right)\varphi(x) = 0 \tag{4-2-6}$$

$$q = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{4-2-7}$$

これを解き、

$$\varphi(x) = C_3 e^{iqx} + C_4 e^{-iqx} \tag{4-2-8}$$

となる（C_3, C_4 は任意定数）。また、$x = a$ のとき $\varphi(x)$ および $\varphi'(x)$ は連続であるから、

$$A\sin(ka) = C_3 e^{iqa} + C_4 e^{-iqa} \tag{4-2-9}$$

$$kA\cos(ka) = iqC_3 e^{iqa} - iqC_4 e^{-iqa} \tag{4-2-10}$$

この２式より、

$$C_3 = \frac{\{iq\sin(ka) + k\cos(ka)\}\, e^{-iqa}}{2iq}A \tag{4-2-11}$$

$$C_4 = \frac{\{iq\sin(ka) - k\cos(ka)\}\, e^{iqa}}{2iq}A \tag{4-2-12}$$

が得られる。これより固有関数は $0 < x < a$ のとき、

$$\varphi(x) = A\sin(kx) \tag{4-2-13}$$

$a < x$ のとき、

$$\begin{aligned}\varphi(x) = {} & \frac{\{iq\sin(ka) + k\cos(ka)\}\, e^{-iqa}}{2iq}Ae^{iqx} \\ & + \frac{\{iq\sin(ka) - k\cos(ka)\}\, e^{iqa}}{2iq}Ae^{-iqx}\end{aligned} \tag{4-2-14}$$

となる。

g140828 武川　純 (g140828@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (01/12/25)

問題 4-3. １と２の問題の結果は有限の井戸の深さの量子井戸のポテンシャル（4.1）と簡単な関係がある。この関係を説明せよ。

答: 問題 4.1 と 4.2 はともにポテンシャルが（4.1）のポテンシャルの $x < 0$ の部分が ∞ となったものである。ここで問題 4.1 と 4.2 の波動関数は $\varphi(0) = 0$ という境界条件を持つ。このことから（4.1）のポテンシャルのもとで求めた波動関数 $\varphi(x)$ のうち $\varphi(0) = 0$ をみたすものが、問題 4.1 と 4.2 の波動関数となる。

g140828 武川　純 (g140828@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (01/12/25)

問題 4-4. $x = a$ において波動関数の値 $\varphi(x)$ とその微分係数 $\varphi'(x)$ が連続であるとして問題を解いたが、波動関数の対数の微分 $(\log\varphi(x))' = \varphi'(x)/\varphi(x)$ が連続であるとして問題を解いても同じ結果を得る。この方法だと、条件の式が少なくなるようであるが、同じ答えを得ることを有限の井戸の深さの量子井戸のポテンシャル (4.1) で示せ (答えを最後まで求める必要はない)。

答: (4.5),(4,6),(4,8),(4,9) 式から、

$$\varphi_1(x) = C_1 e^(\kappa x) \tag{4-4-1}$$

$$\varphi_2(x) = C_5 e^(ikx) + C_6 e^(- ikx) \tag{4-4-2}$$

$$\varphi_3(x) = C_4 e^{-\kappa x} \tag{4-4-3}$$

よって、

$$\begin{aligned}\varphi_1'(x) &= \kappa C^1 e^{\kappa x} && (4\text{-}4\text{-}4)\\ \varphi_2'(x) &= ik(C_5 e^{ikx} - C_6 e^{-ikx}) && (4\text{-}4\text{-}5)\\ \varphi_3'(x) &= -\kappa C_4 e^{-\kappa x} && (4\text{-}4\text{-}6)\end{aligned}$$

ここで $(\log\varphi(x))' = \varphi'(x)/\varphi(x)$ が連続であるから、

$$\frac{\varphi_1'(-a)}{\varphi_1(-a)} = \frac{\varphi_2'(-a)}{\varphi_2(-a)}, \qquad \frac{\varphi_3'(a)}{\varphi_3(a)} = \frac{\varphi_2'(a)}{\varphi_2(a)} \tag{4-4-7}$$

すなわち、

$$\kappa = \frac{ik(C_5 e^{-ika} - C_6 e^{ika})}{C_5 e^{-ika} + C_6 e^{ika}}, \qquad -\kappa = \frac{ik(C_5 e^{ika} - C_6 e^{-ika})}{C_5 e^{ika} + C_6 e^{-ika}}$$

$$\begin{cases}\kappa(C_5 e^{-ika} + C_6 e^{ika}) = ik(C_5 e^{-ika} - C_6 e^{ika})\\ -\kappa(C_5 e^{ika} + C_6 e^{-ika}) = ik(C_5 e^{ika} - C_6 e^{-ika})\end{cases} \tag{4-4-8}$$

ここで $\dfrac{C_6}{C_5} = A$ とおくと、(4-4-8) は、

$$\begin{cases}\kappa(e^{-ika} + Ae^{ika}) = ik(e^{-ika} - Ae^{ika})\\ -\kappa(e^{ika} + Ae^{-ika}) = ik(e^{ika} - Ae^{-ika})\end{cases}$$

$$\begin{cases}\kappa(e^{-2ika} + A) = ik(e^{-2ika} - A)\\ -\kappa(e^{2ika} + A) = ik(e^{2ika} - A)\end{cases}$$

$$\begin{cases}(\kappa + ik)A = -\kappa e^{-2ika} + ike^{-2ika}\\ (-\kappa + ik)A = \kappa e^{2ika} + ike^{2ika}\end{cases} \tag{4-4-9}$$

(4-4-9) の上の式の左辺と下の式の右辺、上の式の右辺と下の式の左辺をかけ合わせることによって、

$$(\kappa + ik)(\kappa e^{2ika} + ike^{-2ika}) = (-\kappa + ik)(-\kappa e^{(-2ika)} + ike^{-2ika}) \tag{4-4-10}$$

これを展開・整理すると、

$$\kappa^2(e^{2ika} - e^{-2ika}) + 2ik\kappa(e^{2ika} + e^{-2ika}) - k^2(e^{2ika} - e^{-2ika}) = 0 \tag{4-4-11}$$

$$\begin{aligned}\kappa^2 i\sin(ka) + 4ik\kappa\cos(ka) - k^2\sin(ka) &= 0\\ (\kappa^2 - k^2)\tan(2ka) + 2k\kappa &= 0 && (4\text{-}4\text{-}12)\end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned}\tan 2\theta &= \frac{\sin 2\theta}{\cos 2\theta}\\ &= \frac{2\sin\theta\cos\theta}{\cos\theta^2 - \sin\theta^2}\\ &= \frac{2}{(\tan\theta)^{-1} - \tan\theta}\\ &= \frac{2\tan\theta}{1 - \tan\theta^2} && (4\text{-}4\text{-}13)\end{aligned}$$

であるから (4-4-12) は、

$$\begin{aligned}(\kappa^2-k^2)\frac{2\tan(ka)}{1-\tan(ka)^2}+2k\kappa &= 0\\ \tan(ka)^2-\frac{\kappa^2-k^2}{k\kappa}-1 &= 0\\ (\tan ka+\frac{\kappa}{k})(\tan ka-\frac{k}{\kappa}) &= 0\end{aligned} \tag{4-4-14}$$

したがって、

$$\tan(ka)=-\frac{k}{\kappa}\quad \text{または}\quad +\frac{\kappa}{k} \tag{4-4-15}$$

g240423 佐藤信裕 (g240423@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (02/11/20)

問題 4-5. 次のポテンシャルエネルギー $U(x)$ (図 2 参照)

$$U(x)=\begin{cases}V_1 & (x<0)\\ -V_0 & (0<x<a)\\ 0 & (a<x)\end{cases}$$

の離散的固有値を求める式の形を示せ。

答: シュレディンガー方程式は、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}-(E-U(x))\right]\varphi(x)=0 \tag{4-5-1}$$

であるから、波動関数 $\varphi(x)$ は次のようになる。

$x<0$ のときのシュレディンガー方程式は、

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}-\kappa_1^2\right)\varphi(x)=0 \tag{4-5-2}$$

$$\kappa_1=\sqrt{\frac{2m(V_1-E)}{\hbar^2}} \tag{4-5-3}$$

$(4-5-2)$ 式を解くと、

$$\varphi(x)=B_1e^{\kappa_1x}+B_2e^{-\kappa_1x} \tag{4-5-4}$$

となる (B_1 , B_2 は任意定数)。
ここで境界条件 $\varphi(-\infty)=0$ より、 $B_2=0$ 。 これより、

$$\varphi(x)=C_1e^{\kappa_1x} \tag{4-5-5}$$

となる $(C_1=B_1)$。

$0<x<a$ のときのシュレディンガー方程式は、

$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)\varphi(x)=0 \tag{4-5-6}$$

$$k=\sqrt{\frac{2m(V_0+E)}{\hbar^2}} \tag{4-5-7}$$

$(4-5-6)$ 式を解くと、

$$\varphi(x) = C_2 e^{ikx} + C_3 e^{-ikx} \tag{4-5-8}$$

となる (C_2 , C_3 は任意定数)。

最後に $a < x$ のときのシュレディンガー方程式は、

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \kappa^2\right)\varphi(x) = 0 \tag{4-5-9}$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}} \tag{4-5-10}$$

$(4-5-9)$ 式を解くと、

$$\varphi(x) = B_3 e^{\kappa x} + B_4 e^{-\kappa x} \tag{4-5-11}$$

となる (C_3 , C_4 は任意定数)。
ここで境界条件 $\varphi(\infty) = 0$ より、 $B_3 = 0$ 。 これより、

$$\varphi(x) = C_4 e^{-\kappa x} \tag{4-5-12}$$

となる ($B_4 = C_4$)。

また、 $x = 0$ のとき $\varphi(0)$ および $\varphi'(0)$ は連続であるから、

$$\left.\frac{\varphi(x)}{\varphi'(x)}\right|_{x=0} = \kappa_1^{-1} \qquad (x < 0) \tag{4-5-13}$$

$$\left.\frac{\varphi(x)}{\varphi'(x)}\right|_{x=0} = \frac{1+A}{ik(1-A)} \qquad (0 < x < a) \tag{4-5-14}$$

となり ($C_3/C_2 = A$)、

$$\kappa_1 = ik\frac{1-A}{1+A} \tag{4-5-15}$$

が得られる。
同じく、 $x = a$ のとき $\varphi(a)$ および $\varphi'(a)$ は連続であるから、

$$\left.\frac{\varphi(x)}{\varphi'(x)}\right|_{x=a} = \frac{e^{ika} + Ae^{-ika}}{ik(e^{ika} - Ae^{-ika})} \qquad (0 < x < a) \tag{4-5-16}$$

$$\left.\frac{\varphi(x)}{\varphi'(x)}\right|_{x=a} = -\kappa^{-1} \qquad (x > a) \tag{4-5-17}$$

となり ($C_3/C_2 = A$)、

$$-\kappa = ik\frac{e^{ika} - Ae^{-ika}}{e^{ika} + Ae^{-ika}} \tag{4-5-18}$$

が得られる。これより、

$$\frac{\kappa}{k} = -\frac{\kappa_1 - k\tan(ka)}{k + \kappa_1 \tan(ka)} \tag{4-5-19}$$

が得られる。

f9311196 水戸 和幸 (f11196@ced.cas.uec.ac.jp) 作成 (96/02/23)

問題 4-6. 次のポテンシャルエネルギー $U(x)$ (図３参照)

$$U(x)=\begin{cases}\infty & (x<-b)\\ -V_0 & (-b<x<-a)\\ 0 & (-a<x<a)\\ -V_0 & (a<x<b)\\ \infty & (b<x)\end{cases}$$

の固有値を求める式の形を示せ。

答:

1. $-b<x<-a$ のとき図３のグラフを x 方向に b 平行移動させると（$x\to x-b$）、$U(x)=-V_0$となるxの範囲は$0<x<b-a$ となる。このときシュレディンガー方程式は
$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}-(E+V_0)\right\}\varphi(x)=0 \tag{4-6-1}$$
よって
$$\left(\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right)\varphi(x)=0 \tag{4-6-2}$$
$$k=\sqrt{\frac{2m(V_0+E)}{\hbar^2}} \tag{4-6-3}$$
これを解くと、
$$\varphi(x)=C_1'e^{ikx}+C_2'e^{-ikx} \tag{4-6-4}$$
となる。
ここで $x=0$ での境界条件より
$$\varphi(0)=C_1'+C_2'=0 \tag{4-6-5}$$
したがって
$$\varphi(x)=C_1'(e^{ikx}-e^{-ikx})=2C_1'i\sin kx=C_1\sin kx \tag{4-6-6}$$
ここで平行移動したグラフを元に戻して（$x\to x+b$）
$$\varphi(x)=C_1\sin k(x+b) \tag{4-6-7}$$

2. $-a<x<a$ のときシュレディンガー方程式は
$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}-E\right\}\varphi(x)=0 \tag{4-6-8}$$
よって
$$\left(\frac{d^2}{dx^2}-\kappa_1^2\right)\varphi(x)=0 \tag{4-6-9}$$
$$\kappa=\sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}} \tag{4-6-10}$$
これより
$$\varphi(x)=C_2e^{\kappa x}+C_3e^{-\kappa x} \tag{4-6-11}$$

3. $a < x < b$ のとき

図3のグラフを x 方向に -b 平行移動させると（$x \to x+b$）、$U(x) = -V_0$となるxの範囲は$a-b < x < 0$ となる。$-b < x < -a$ のときと同様にシュレディンガー方程式より

$$\varphi(x) = C_4 \sin kx \tag{4-6-12}$$

ここで平行移動したグラフを元に戻して（$x \to x - b$）

$$\varphi(x) = C_4 \sin k(x - b) \tag{4-6-13}$$

以上から

$$\varphi(x) = \begin{cases} C_1 \sin k(x+b) & (-b < x < -a) \\ C_2 e^{\kappa x} + C_3 e^{-\kappa x} & (-a < x < a) \\ C_4 \sin k(x-b) & (a < x < b) \end{cases}$$

$(-b < x < -a)$ において

$$\frac{\varphi(x)}{\varphi'(x)} = \frac{\sin k(x+b)}{k \cos k(x+b)} \tag{4-6-14}$$

$(-a < x < a)$ において

$$\frac{\varphi(x)}{\varphi'(x)} = \frac{C_2 e^{\kappa x} + C_3 e^{-\kappa x}}{\kappa (C_2 e^{\kappa x} - C_3 e^{-\kappa x})} \tag{4-6-15}$$

$(a < x < b)$ において

$$\frac{\varphi(x)}{\varphi'(x)} = \frac{\sin k(x-b)}{k \cos k(x-b)} \tag{4-6-16}$$

ここで $x = -a, x = a$のとき$\varphi(x)$および$\varphi'(x)$ は連続であるから

$$\left.\frac{\varphi(x)}{\varphi'(x)}\right|_{x=-a} = \frac{\sin k(b-a)}{k \cos k(b-a)} = \frac{C_2 e^{-\kappa a} + C_3 e^{\kappa a}}{\kappa (C_2 e^{-\kappa a} - C_3 e^{\kappa a})} \tag{4-6-17}$$

$$\left.\frac{\varphi(x)}{\varphi'(x)}\right|_{x=a} = \frac{\sin k(a-b)}{k \cos k(a-b)} = \frac{C_2 e^{\kappa a} + C_3 e^{-\kappa a}}{\kappa (C_2 e^{\kappa a} - C_3 e^{-\kappa a})} \tag{4-6-18}$$

この二式の関係より

$$\frac{C_2 e^{-\kappa a} + C_3 e^{\kappa a}}{\kappa (C_2 e^{-\kappa a} - C_3 e^{\kappa a})} = -\frac{C_2 e^{\kappa a} + C_3 e^{-\kappa a}}{\kappa (C_2 e^{\kappa a} - C_3 e^{-\kappa a})} \tag{4-6-19}$$

よって

$$(C_2 - C_3)(C_2 + C_3) = 0 \tag{4-6-20}$$

A $C_2 = C_3$ のとき (4-6-17) より

$$\frac{\sin k(b-a)}{k \cos k(b-a)} = -\frac{\cos \kappa a}{\kappa \sin \kappa a} \tag{4-6-21}$$

$$\frac{\kappa}{k} = -\frac{1}{\tan k(b-a) \tan \kappa a} \tag{4-6-22}$$

これを固有値を与える式とする。

B $C_2 + C_3 = 0$ のとき (4-6-18) より

$$\frac{\sin k(b-a)}{k\cos k(b-a)} = -\frac{\sin \kappa a}{\kappa \cos \kappa a} \tag{4-6-23}$$

$$\frac{\kappa}{k} = -\frac{\tan \kappa a}{\tan k(b-a)} \tag{4-6-24}$$

これを固有値を与える式とする。

240916J 高城 重宏 (g240916@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (/02/10/10,/02/12/02 modified)

問題 5-1. フーリエ変換 $a(k)$ を求めよ。また逆フーリエ変換をして、もとの $f(x)$ になっていることを確認せよ。

$$\text{(a)}\ \ f(x) = e^{-b|x|}, \quad \text{(b)}\ \ f(x) = e^{-bx^2}, \quad \text{(c)}\ \ f(x) = \begin{cases} 1 & (|x| < a/2) \\ 0 & (|x| \geq a/2) \end{cases}$$

答: (a) フーリエ変換 $a(k)$ は、

$$\begin{aligned} a(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-b|\xi|} e^{-ik\xi} d\xi \\ &= \int_{-\infty}^{0} e^{(b-ik)\xi} d\xi + \int_{0}^{\infty} e^{-(b+ik)\xi} d\xi \\ &= \left[\frac{1}{b-ik} e^{(b-ik)\xi}\right]_{-\infty}^{0} + \left[-\frac{1}{b+ik} e^{-(b+ik)\xi}\right]_{0}^{\infty} \\ &= \frac{1}{b-ik} + \frac{1}{b+ik} \\ &= \frac{2b}{b^2+k^2} \end{aligned} \tag{5-1-1}$$

次に逆フーリエ変換 $f(x)$ を、留数の定理を用いて行なう。

$$a(k) = \frac{2b}{b^2+k^2} \tag{5-1-2}$$

の極は $z = ib$ と $-ib$ にある。
$x > 0$ のとき、

$$f(x) = 2\pi i \frac{1}{2\pi} \left[\frac{2b(z-ib)}{(z-ib)(z+ib)} e^{ixz}\right]_{z=ib} = e^{-bx} \tag{5-1-3}$$

$x < 0$ のとき、

$$f(x) = -2\pi i \frac{1}{2\pi} \left[\frac{2b(z+ib)}{(z-ib)(z+ib)} e^{ixz}\right]_{z=-ib} = e^{bx} \tag{5-1-4}$$

となる。よって、

$$f(x) = e^{-b|x|} \tag{5-1-5}$$

となる。

(b) フーリエ変換 $a(k)$ を微分すると、

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dk}a(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi)(-i\xi)e^{-ik\xi}d\xi \\
&= \frac{i}{2b}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{d}{d\xi}e^{-b\xi^2}\right)e^{-ik\xi}d\xi \\
&= \frac{i}{2b}\left(\left[e^{-b\xi^2}e^{-ik\xi}\right]_{-\infty}^{\infty} + ik\int_{-\infty}^{\infty} e^{-b\xi^2}e^{-ik\xi}d\xi\right) \\
&= -\frac{k}{2b}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-k\xi^2}e^{-ik\xi}d\xi \\
&= -\frac{k}{2b}a(k)
\end{aligned} \tag{5-1-6}$$

となる。これより、

$$\frac{d}{dk}a(k) + \frac{k}{2b}a(k) = 0 \tag{5-1-7}$$

となる。この微分方程式を解と、

$$a(k) = Ce^{-k^2/4b} \tag{5-1-8}$$

となる (C は任意定数)。ここで、

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-b\xi^2}d\xi = \sqrt{\frac{\pi}{b}} \tag{5-1-9}$$

より、 $k=0$ のとき、 $C=\sqrt{\frac{\pi}{b}}$ を得る。ゆえに、

$$a(k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-b\xi^2}e^{-ik\xi}d\xi = \sqrt{\frac{\pi}{b}}e^{-k^2/4b} \tag{5-1-10}$$

となる。

次に、フーリエ逆変換 $f(x)$ を行なう。 $f(x)$ を微分すると、

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dx}f(x) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} a(k)(ik)e^{ikx}dk \\
&= -i\sqrt{\frac{b}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{d}{dk}e^{-k^2/4b}\right)e^{ikx}dk \\
&= -i\sqrt{\frac{b}{\pi}}\left\{\left[e^{-k^2/4b}e^{ikx}\right]_{-\infty}^{\infty} - ix\int_{-\infty}^{\infty} e^{-k^2/4b}e^{ikx}dk\right\} \\
&= -2bx\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{\pi}{b}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-k^2/4b}e^{ikx}dk \\
&= -2bxf(x)
\end{aligned} \tag{5-1-11}$$

となり、この微分方程式を解くと、

$$f(x) = Ae^{-bx^2} \tag{5-1-12}$$

を得る (A は任意定数)。ここで、

$$\begin{aligned}
f(0) &= \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{\pi}{b}}e^{-k^2/4b}dk \\
&= \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{\pi}{b}}\sqrt{4\pi b} \\
&= 1
\end{aligned} \tag{5-1-13}$$

であるから、 $x=0$ のとき、 $A=1$ を得る。ゆえに、

$$f(x) = e^{-bx^2} \tag{5-1-14}$$

となる。

(c) フーリエ変換 $a(k)$ は、

$$\begin{aligned}
a(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) e^{-ik\xi} d\xi \\
&= \int_{-a/2}^{a/2} e^{-ik\xi} d\xi \\
&= \left[-\frac{1}{ik} e^{-ik\xi} \right]_{-a/2}^{a/2} \\
&= \frac{2}{k} \left(\frac{e^{ika/2} - e^{-ika/2}}{2i} \right) \\
&= \frac{2}{k} \sin\left(\frac{ka}{2}\right)
\end{aligned} \tag{5-1-15}$$

となる。次に、逆フーリエ変換 $f(x)$ は、

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{k} \sin\left(\frac{ka}{2}\right) (\cos kx + i \sin kx) dk \tag{5-1-16}$$

で表される。ここで、 $a(k)$ は偶関数であるから、 $(5-1-16)$ 式の $\sin kx$ の項における積分は、 0 になる。ゆえに、

$$\begin{aligned}
f(x) &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{k} \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \cos kx dk \\
&= \frac{2}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{k} \left\{ \sin\left(\frac{a}{2}+x\right)k + \sin\left(\frac{a}{2}-x\right)k \right\} dk \\
&= \begin{cases} 1 & (|x| < a/2) \\ 0 & (|x| \geq a/2) \end{cases}
\end{aligned} \tag{5-1-17}$$

となる。

f9311196 水戸 和幸 (f11196@ced.cas.uec.ac.jp) 作成 (96/02/20,/02/12/02 modified)

問題 5-2. デルタ関数に関して次の式を示せ

答: (a) $\quad \delta(ax-b) = \frac{1}{a}\delta\left(x - \frac{b}{a}\right)$

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(ax-b)dx &= \tfrac{1}{a}\int_{-\infty}^{\infty} f(x/a)\delta(x-b)dx \\
&= \tfrac{1}{a}\int_{-\infty}^{\infty} f(b/a)\delta(x)dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\tfrac{1}{a}\delta\left(x-\tfrac{b}{a}\right)
\end{aligned}$$

(b) $\quad \delta(x^2-a^2) = \frac{1}{2a}\{\delta(x-a)+\delta(x+a)\}$

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x^2-a^2)dx &= \int_{-\infty}^{0} f(x)\delta(x^2-a^2)dx + \int_{0}^{\infty} f(x)\delta(x^2-a^2)dx \\
&= \tfrac{1}{2a}\left\{\int_{-\infty}^{0} f(x)\delta(x+a)dx + \int_{0}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx\right\} \\
&= \tfrac{1}{2a}\left\{\int_{-\infty}^{0} f(-a)\delta(x)dx + \int_{0}^{\infty} f(a)\delta(x)dx\right\} \\
&= \tfrac{1}{2a}\{f(-a)+f(a)\} \\
&= \tfrac{1}{2a}\left\{\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x+a)dx + \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx\right\}
\end{aligned}$$

$(c) \qquad \int_{-\infty}^{\infty} x\delta(x)dx = 0$

$f(x) = x$ と考えると、

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)dx = 0$$

$(d) \qquad \delta(-x) = \delta(x)$

$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x - x_0) = f(x_0)$ を用いて考えると、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(-x)dx &= \int_{-\infty}^{\infty} f(0)\delta(-x)dx \\ &= f(0) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)dx \end{aligned}$$

$(e) \qquad \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\frac{d}{dx}\delta(x)dx = -f'(x)$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\frac{d}{dx}\delta(x)dx &= [f(x)\delta(x)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f'(x)\delta(x)dx \\ &= f(x)\{\delta(\infty) - \delta(-\infty)\} - \int_{-\infty}^{\infty} f'(x)\delta(x)dx \\ &= 0 - \int_{-\infty}^{\infty} f'(x)\delta(x)dx \\ &= -f'(0) \end{aligned}$$

f9311196 水戸 和幸 (f11196@ced.cas.uec.ac.jp) 作成 (97/01/18)

問題 5-3. $\varphi(x) = \pi^{-1/4}e^{-x^2/2}$ に対し、教科書 (5.19), (5.20) の $\Delta x, \Delta p$ を計算せよ。

答:

問題を解くために、次の積分公式を証明しておく。

$$I(a) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \tag{5-3-1}$$

(証明) 偶関数であることなどを用いて,

$$I(a) = 2\int_0^{\infty} e^{-ax^2}dx \leq 2\int_0^{\infty} x\,e^{-ax^2}dx \tag{5-3-2}$$

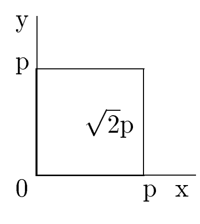
最右辺の積分は収束するので、 $I(a)$ も収束する。そこでまず、

$$I'(p) = \int_0^p e^{-ax^2}dx \tag{5-3-3}$$

とおく。右下図の正方形の領域を D_1 とすれば、

$$\{I'(p)\}^2 = \left\{\int_0^p e^{-ax^2}dx\right\}\left\{\int_0^p e^{-ay^2}dy\right\} = \iint_{D_1} e^{-a(x^2+y^2)}dxdy = \iint_{D_1} r\,e^{-ar^2}drd\theta$$

積分領域の大小関係から次の不等式が成り立つ。



$$\int_0^{\frac{\pi}{2}}\int_0^p re^{-ar^2}drd\theta \le \{I(p)\}^2 \le \int_0^{\frac{\pi}{2}}\int_0^{\sqrt{2}p} re^{-ar^2}drd\theta$$

最左辺の積分は、

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}}\int_0^p re^{-ar^2}drd\theta = \int_0^{\frac{\pi}{2}}\left[-\frac{1}{2a}e^{-ar^2}\right]_0^p d\theta = \frac{\pi}{4a}(1-e^{-ap^2}) \tag{5-3-4}$$

この式の p を $\sqrt{2}p$ に置き換えると、最右辺の積分は

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}}\int_0^{\sqrt{2}p} re^{-ar^2}drd\theta = \frac{\pi}{4a}(1-e^{-2ap^2}) \tag{5-3-5}$$

(5-3-4),(5-3-5) はどちらも $p \to \infty$ とすると

$$\frac{\pi}{4a}$$

に収束するので、

$$\lim_{p\to\infty} I'(p) = \sqrt{\frac{\pi}{4a}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}} \tag{5-3-6}$$

(5-3-2),(5-3-3),(5-3-6) より、

$$I(a) = 2\lim_{p\to\infty} I'(p) = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

これを用いてこの問題を解く。

$$\varphi(x) = \pi^{-1/4}e^{-x^2/2}$$

より、位置の期待値は、

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi^* x\varphi dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-x^2}dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left[-\frac{1}{2}e^{-x^2}\right]_{-\infty}^{\infty} = 0$$

よって位置の不確定さは

$$\Delta x = \left\{\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^*(x-\bar{x})^2\varphi dx\right\}^{\frac{1}{2}} = \left\{\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^* x^2\varphi dx\right\}^{\frac{1}{2}} = \left\{\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2}dx\right\}^{\frac{1}{2}} \tag{5-3-7}$$

(5-3-1) 式と部分積分により、最右辺の積分は

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2}dx = \left[-\frac{x}{2}e^{-x^2}\right]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty}\left(-\frac{1}{2}e^{-x^2}dx\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \tag{5-3-8}$$

(5-3-7) に代入して、

$$\Delta x = \left\{\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\right\}^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{5-3-9}$$

を得る。全く同様にして、運動量の期待値は

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi^*\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)\varphi dx = \frac{i\hbar}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-x^2}dx = 0$$

よって運動量の不確定さ

$$\Delta p = \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^* \left(\tfrac{\hbar}{i} \tfrac{d}{dx} \right)^2 \varphi dx \right\}^{\frac{1}{2}} \tag{5-3-10}$$

$$= \left\{ -\tfrac{\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} \tfrac{d}{dx} \left(-x e^{-x^2/2} \right) dx \right\}^{\frac{1}{2}} \tag{5-3-11}$$

$$= \left\{ -\tfrac{\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (x^2-1) e^{-x^2} dx \right\}^{\frac{1}{2}} \tag{5-3-12}$$

最右辺の積分は (5-3-1),(5-3-8) 式より、

$$\int_{-\infty}^{\infty} (x^2-1)e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} - \sqrt{\pi} = -\frac{\sqrt{\pi}}{2} \tag{5-3-13}$$

これを (5-3-12) 式に代入して、

$$\Delta p = \left\{ -\frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \left(-\frac{\sqrt{\pi}}{2} \right) \right\}^{\frac{1}{2}} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \tag{5-3-14}$$

が求まる。 (5-3-9),(5-3-14) 式は不確定性原理の不等式

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

を満足している。（解答終わり）

g140760 小松満仁 (g140760@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (2002/1/13)

問題 5-4. （調和振動子）調和振動子のハミルトニアン (5.37) において、 $\alpha = m\, omega_0/\hbar$ とおくと、ハミルトニアンは

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - \alpha^2 x^2 \right) \varphi = -\frac{2mE}{\hbar^2} \varphi \tag{5.42}$$

になる。このとき、 $\varphi_n(\xi) = H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, (\xi = \sqrt{\alpha} x)$は、(5.42)の固有関数であることを示せ。ここでエルミ

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \tag{5.43}$$

に対応する固有値が $\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$ で与えられることを示せ。 $H_n(\xi)$ の関数の振る舞いを知るために、 $H_n(\xi)$ の関数形を $n = 0,1,2$ で求めてみよ。

答: $\xi = \sqrt{\alpha} x$より(5.42)をxからξ に変数変換すると、微分方程式は

$$\left(\alpha \frac{d^2}{d\xi^2} - \alpha \xi^2 \right) \varphi(\xi) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(\xi) \Longleftrightarrow \left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 \right) \varphi(\xi) = -\frac{2E}{\hbar\omega_0} \varphi(\xi)$$

になる。

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \varphi_n(\xi) = H_n'' e^{-\xi^2/2} - 2\xi H_n' e^{-\xi^2/2} + \xi^2 H_n e^{-\xi^2/2} - H_n e^{-\xi^2/2}$$

より,

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \varphi_n(\xi) - \xi^2 \varphi_n(\xi) = \left(H_n'' - 2\xi H_n' - H_n \right) e^{-\xi^2/2} \tag{5-4-1}$$

となる。ここでエルミート多項式の定義式 (5.43) より、

$$H_n'(\xi) = (-1)^n \left[2\xi e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} + e^{\xi^2} \frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} e^{-\xi^2} \right],$$

$$H_n''(\xi) = (-1)^n \left\{ 2e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} + (2\xi)^2 e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} + 4\xi e^{\xi^2} \frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} e^{-\xi^2} + e^{\xi^2} \frac{d^{n+2}}{d\xi^{n+2}} e^{-\xi^2} \right\},$$

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \left(2\frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} + 2\xi \frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} e^{-\xi^2} + \frac{d^{n+2}}{d\xi^{n+2}} e^{-\xi^2} \right)$$

によって、

$$\frac{H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi)}{H_n(\xi)} = 2 + \left\{ \left(2\xi \frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} e^{-\xi^2} + \frac{d^{n+2}}{d\xi^{n+2}} e^{-\xi^2} \right) \Big/ \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \right\} \tag{5-4-2}$$

ここで

$$(fg)^{(n)} = \sum_{i=0}^{n} {}_nC_i f^{(i)} g^{(n-i)}$$

が n 回微分可能な一般の関数 f, g について成立し

$$\frac{d^{n+2}}{d\xi^{n+2}} e^{-\xi^2} = \frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} \left(-2\xi e^{-\xi^2} \right)$$

であるから、 $f = -2\xi, g = e^{-\xi^2}$ とおけば $f' = -2, f^{(j)} = 0, (2 \le j)$ より

$$\frac{d^{n+2}}{d\xi^{n+2}} e^{-\xi^2} = -2\xi \frac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}} e^{-\xi^2} + (n+1) \left(-2\frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \right)$$

(5-4-1), (5-4-2) とあわせて

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \varphi_n(\xi) - \xi^2 \varphi_n(\xi) = (-2n-1) \varphi_n(\xi)$$

固有エネルギーは $-2(n+\frac{1}{2}) = -2E_n/\hbar\omega_0 \Longrightarrow E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega_0$ となった。

H_n の具体的な形は $H_0(\xi) = 1, H_1(\xi) = 2\xi, H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$ などとなる。簡単な帰納法によって ξ^n の係数が 2^n で、その他の項の係数がすべて整数であることがわかる。

241025B 山下　真 (g241025@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (/02/11/18)

問題 5-5. 不確定性原理を用いて、次のポテンシャル $U(x)$ の場合の電子の基底状態のエネルギーを評価せよ。また $(a)-(c)$ においてビリアル定理は成立するか。

(a) $U(x) = -\dfrac{1}{|x|}C$

(b) $U(x) = |x|C$

(c) $U(x) = x^4 C$

(b) $U(x) = -e^{-ax^2}C$（注：$\dfrac{a\hbar^2}{8mC} \ll 1$とせよ。）

答:

不確定性原理より、基底状態のエネルギー E は

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x) \sim \frac{\hbar^2}{8mx^2} + U(x) \tag{5-5-1}$$

と書ける。

(a)

$$E = \frac{\hbar^2}{8mx^2} - \frac{1}{|x|}C \tag{5-5-2}$$

となる。
これは x 軸対称だから $0 < x$ の場合で考えれば良い。

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{1}{4mx^3}(\hbar^2 - 4mCx) \tag{5-5-3}$$

となる。
従って以下の増減表を得る。

x	0		$\frac{\hbar^2}{4mC}$		∞
$\frac{dE}{dx}$		$-$	0	$+$	0
E		$\searrow$		$\nearrow$	0

E が最小となるのは、増減表より
$x = \dfrac{\hbar^2}{4mC}$ のときで、このとき

$$E = T + U = \frac{2mC^2}{\hbar^2} - \frac{4mC^2}{\hbar^2} = -\frac{2mC^2}{\hbar^2} \tag{5-5-4}$$

また、$T : U = -1 : 2$ であり、これはビリアル定理を満たす。

(b)

$$E = \frac{\hbar^2}{8mx^2} + |x|C \tag{5-5-5}$$

となる。
これも x 軸対称だから $0 < x$ の場合で考えれば良い。

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{1}{4mx^3}(\hbar^2 - 4mCx^3) \tag{5-5-6}$$

となる。
従って以下の増減表を得る。

x	0		$\sqrt[3]{\frac{\hbar^2}{4mC}}$		∞
$\frac{dE}{dx}$		$-$	0	$+$	0
E		$\searrow$		$\nearrow$	$+\infty$

E が最小となるのは、増減表より
$x = \sqrt[3]{\dfrac{\hbar^2}{4mC}}$ のときで、このとき

$$E = T + U = \frac{1}{2}C^{2/3}\sqrt[3]{\frac{\hbar^2}{4m}} + C^{2/3}\sqrt[3]{\frac{\hbar^2}{4m}} = \frac{3}{2}C^{2/3}\sqrt[3]{\frac{\hbar^2}{4m}} \tag{5-5-7}$$

また、$T : U = 1 : 2$ であり、これはビリアル定理を満たす。

(c)

$$E = \frac{\hbar^2}{8mx^2} + x^4C \tag{5-5-8}$$

となる。
これも x 軸対称だから $0 < x$ の場合で考えれば良い。

$$\frac{dE}{dx} = -\frac{1}{4mx^3}(\hbar^2 - 16mCx^6) \tag{5-5-9}$$

となる。
従って以下の増減表を得る。

x	0		$\sqrt[6]{\frac{\hbar^2}{16mC}}$		∞
$\frac{dE}{dx}$		$-$	0	$+$	0
E		$\searrow$		$\nearrow$	$+\infty$

E が最小となるのは、増減表より
$x = \sqrt[6]{\dfrac{\hbar^2}{16mC}}$ のときで、このとき

$$E = T + U = 2C^{1/3}\left(\frac{\hbar^2}{16m}\right)^{2/3} + C^{1/3}\left(\frac{\hbar^2}{16m}\right)^{2/3} = 3C^{1/3}\left(\frac{\hbar^2}{16m}\right)^{2/3} \tag{5-5-10}$$

また、$T : U = 2 : 1 = 4 : 2$ であり、これはビリアル定理を満たす。

(d) $a \leq 0$ や $C \leq 0$ では基底状態の評価ができないので $0 < a$ かつ $0 < C$ とする。
問題文より

$$E = \frac{\hbar^2}{8mx^2} - e^{-ax^2}C \tag{5-5-11}$$

これも x 軸対称だから $0 < x$ の場合で考えればよい。

$$\begin{aligned} E' &= -\frac{\hbar^2}{4mx^3} + 2aCxe^{-ax^2} \\ &= 2aCx\left(e^{-ax^2} - \frac{\hbar^2}{8maCx^4}\right) \end{aligned}$$

$f(x)$ で次の関数を表すことにする。

$$e^{-ax^2} - \frac{\hbar^2}{8maCx^4}$$

これは $0 < x$ において E' と符号が同じで連続な関数である。

$$f(x) \to \infty \ (x \to +0)$$

$$f\left(\sqrt{\frac{1}{a}}\right) = \frac{1}{e} - \frac{a\hbar^2}{8mC} > 0 \qquad \left(\frac{a\hbar^2}{8mC} \ll 1\text{による}\right)$$

によって、ある $0 < x_0 < \sqrt{1/a}$ が存在して $0 = f(x_0)$ となる。

$$f' = -2axe^{-ax^2} + \frac{\hbar^2}{2maCx^5}$$

から、

$$0 = f(x_0) = e^{-a{x_0}^2} - \frac{\hbar^2}{8maC{x_0}^4} \Rightarrow f'(x_0) = \frac{\hbar^2}{4mCx_0^3}\left(\frac{2}{ax_0^2} - 1\right) > 0$$

となるので（$x_0 < \sqrt{1/a} \Rightarrow ax_0^2 < 1$ を用いた。）、x_0 が一意に定まり、その近傍で f' が単調増加していることもわかる。よって $E'(x_0) = 0$ であり、x_0 の近傍においては、

$$x < x_0 \Rightarrow E'(x) < 0,\ x_0 < x \Rightarrow 0 < E'(x)$$

となる。よって E は x_0 において極小となり、$x = x_0$ のときが基底状態であることがわかった。$a{x_0}^2 < 1 \Rightarrow e^{-a{x_0}^2} \sim 1$ と、

$$1 \sim e^{-a{x_0}^2} = \frac{\hbar^2}{8maC{x_0}^4} \Rightarrow {x_0}^2 \sim \sqrt{\frac{\hbar^2}{8maC}}$$

をつかって式 (5-5-11) から基底状態のエネルギー $E(x_0)$ の値は次のように評価できる。

$$E(x_0) \sim \sqrt{\frac{\hbar^2 aC}{8m}} - C$$

g241025 山下 真 (g241025@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (02/12/4)

問題 6-1. 次の交換関係を求めよ。

$$(a)\ \ [x, p^3], \qquad (b)\ \ [x^2, p^3], \qquad (c)\ \ , [e^{-x}, p]$$

答:

(a) $[x, p^n] = i\hbar n p^{n-1} \qquad \Rightarrow \qquad [x, p^3] = 3i\hbar p^2$

(b)

$$\begin{aligned}
[x^2, p^3] &= -[p^3, x^2] \\
&= -[p^3, x]x - x[p^3, x] \\
&= x[x, p^3] + [x, p^3]x \\
&= x(3i\hbar p^2) + (3i\hbar p^2)x \\
&= 3i\hbar(xp^2 + p^2 x)
\end{aligned}$$

(c)

$$[g(x), p] = i\hbar\frac{d}{dx}g(x) \qquad \Rightarrow \qquad [e^{-x}, p] = i\hbar\frac{d}{dx}e^{-x} = -i\hbar e^{-x}$$

y9410205 Yuzri Mohd Yusoff (y9410205@edu.uec.ac.jp) 作成 (/96/1/15)

問題 6-2. 次の波の分散関係の群速度, 位相速度を k の関数として表せ。

$$(a)\ \ \omega(k) = \omega_o ka, \quad (b)\ \ \omega(k) = \omega_o (ka)^n, \quad (c)\ \ \omega(k) = \omega_o \sin(ka)$$

答: (a) 群速度

$$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \omega_o a$$

位相速度

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{\omega_o ka}{k} = \omega_o a$$

(b) 群速度

$$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{\partial}{\partial k}\omega_o k^n a^n = n\omega_o k^{n-1} a^n$$

位相速度

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{\omega_o k^n a^n}{k} = \omega_o k^{n-1} a^n$$

(c) 群速度

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\partial}{\partial k}\omega_o \sin(ka) = \omega_o \cos(ka)a = \omega_o a \cos(ka)$$

位相速度

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{\omega_o \sin(ka)}{k}$$

y9410205 Yuzri Mohd Yusoff (y9410205@edu.uec.ac.jp) 作成 (96/1/15)

問題 6-3. 例題 6.1 で A の固有値が縮重している場合にも、 φ が B の固有関数であることを示せ。

答: A の固有値が n 重に縮重していれば、 A の独立な固有関数が n 個ある。これを φ_k $(k = 1, 2, \ldots, n)$ とおく。 φ_k を正規直交化したもの $< \varphi_k|\varphi_{k'} >= \delta_{kk'}$ としても、一般性を失わない。このとき、 φ を固有関数 φ_k の一次結合、

$$\varphi \quad = \quad \sum_{k=1}^{n} c_k \varphi_k, \tag{6-3-1}$$

とおける。ここで、 c_k を新しい関数 φ が演算子 B の固有値 b に対する固有関数

$$B\varphi \quad = \quad b\varphi, \tag{6-3-2}$$

であるように選べばよい。式 (6-3-2) に式 (6-3-1) を代入する。

$$B\sum_{k=1}^{n} c_k \varphi_k \quad = \quad b\sum_{k=1}^{n} c_k \varphi_k. \tag{6-3-3}$$

ここで、両辺に左から $\varphi^*_{k'}$ を掛け r について積分する。等式の左辺の積分

$$\int \varphi^*_{k'} B\varphi_k dr, \tag{6-3-4}$$

は、対応する行列要素 $b_{k'k}$ に等しい。右辺では $k \neq k'$ のとき、積分

$$\int \varphi^*_{k'} \varphi_k dr, \tag{6-3-5}$$

は直交関係によってすべて消え、また規格化条件によって $k = k'$ のとき、

$$\int \varphi^*_k \varphi_k dr \quad = \quad 1, \tag{6-3-6}$$

となる。したがって、

$$\sum_{k=1}^{n} b_{k'k} c_k \quad = \quad bc_{k'} \left(k' = 1, 2, \ldots, n\right), \tag{6-3-7}$$

を得る。変形すると

$$\sum_{k=1}^{n} (b_{k'k} - b\delta_{k'k}) c_k \quad = \quad 0, \tag{6-3-8}$$

これが係数 c_k を決定する同次連立代数方程式である。この方程式が 0 以外の解を持つのは、方程式の係数で作った行列式が 0 の場合、すなわち、

$$\det \begin{vmatrix} b_{11}-b & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22}-b & \dots & b_{2n} \\ \dots & & & \\ b_{n1} & b_{n2} & \dots & b_{nn}-b \end{vmatrix} = 0, \tag{6-3-9}$$

の場合に限られる。この式は b の n 次方程式なので、根 $b_1, b_2, \dots, b_n$ が求められる。おのおのの根 b_α に対応して、式 (6-3-7) の解、 $c_{\alpha 1}, c_{\alpha 2}, \dots, c_{\alpha n}$ が得られ、したがって、式 (6-3-1) から、関数

$$\varphi_\alpha = \sum_{k=1}^{n} c_{\alpha k}\varphi_k, \tag{6-3-10}$$

が定められる。新しい関数 $\varphi_\alpha(\alpha = 1, 2, \dots, n)$ は、 φ_k の一次結合であるから、演算子 B の固有値 b に対する固有関数であり、同時に演算子 A の固有値 $a = a_1, a_2, \dots, a_n$ にそれぞれ対する固有関数でもある。よって、 A の固有値が縮重する場合でも、 $[A, B] = 0$ なら、 A と B は同時固有値を持つことが示された。

g240947 井上道雄 (micchan@bf7.so.net.ne.jp) 作成 (02/12/19)

問題 6-4. 式 (6.23) を 用いて、次のハミルトニアンの運動方程式を求めよ。

$$\text{(a)}\ \ H = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2, \quad \text{(b)}\ \ H = \frac{p^2}{2m}, \quad \text{(c)}\ \ H = \frac{p^2}{2m} + V_0\cos\left(\frac{x}{a}\right)$$

答:

$$\begin{aligned} \dot{p} &= -\frac{i}{\hbar}[p, H] \\ &= -\frac{i}{\hbar}(pH - Hp) \\ &= -\frac{i}{\hbar}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}H + Hp - Hp\right) \\ &= -\frac{i}{\hbar}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}H\right) \\ &= -\frac{d}{dx}H \end{aligned}$$

を用いて解く。

(a)

$$\begin{aligned} \dot{p} &= -\frac{d}{dx}\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}x^2\right) \\ &= -\left(0 + \frac{2k}{2}x\right) \\ &= -kx \end{aligned}$$

(b)

$$\begin{aligned} \dot{p} &= -\frac{d}{dx}\left(\frac{p^2}{2m}\right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

(c)

$$\begin{aligned} \dot{p} &= -\frac{d}{dx}\left(\frac{p^2}{2m} + V_0\cos(\frac{x}{a})\right) \\ &= 0 + \frac{V_0}{a}\sin\left(\frac{x}{a}\right) \\ &= \frac{V_0}{a}\sin(\frac{x}{a}) \end{aligned}$$

f9311196 水戸 和幸 (f11196@ced.cas.uec.ac.jp) 作成 (96/02/20)

問題 6-5. (波束の時間発展) 波動関数 φ が固有関数でない場合には、波動関数は時間に依存するシュレディンガー方程式 (6.33) に従って運動する。自由粒子 ($\mathcal{H} = \dfrac{p^2}{2m}$) の場合、波動関数の時間発展 (6.33) は、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi \tag{6.39}$$

になる。 (6.39) を以下の方法を用いて解く。各問に答えよ。

(a) $\varphi(x)$のx に関するフーリエ変換を

$$f(k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\varphi(x)dx$$

とおくと (6.39) は、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}f(k) \tag{6.40}$$

となることを示せ。

(b) (6.40) の解は、

$$f(k) = f(k)|_{t=0}e^{-i\hbar k^2 t/2m} \tag{6.41}$$

であることを示せ。 $f(k)|_{t=0}$は$t = 0$での$f(k)$の値である。

(c) よって求める時間に依存する波動関数は、 (6.41) をフーリエ逆変換

$$\varphi(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(k)e^{-ikx}dk \tag{6.42}$$

することで得られる。 $t = 0$ のとき、波動関数が

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}a}e^{-x^2/a^2}$$

のとき時間 t での $\varphi(x,t)$ を求めよ。

答:

(a)

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(k) &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\varphi(x)dx \\
&= i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\frac{\partial}{\partial t}\varphi(x)dx \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x)dx \qquad \text{((6.39)より)} \\
&= -\frac{i\hbar^2 k}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\frac{\partial}{\partial x}\varphi(x)dx \\
&= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\varphi(x)dx \qquad \text{(2回部分積分を行った)} \\
&= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}f(k)
\end{aligned}$$

よって (6.40) が示せた。

(b) (6.40) より

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial f(k)}{\partial t}\frac{1}{f(k)} &= -\frac{i\hbar k^2}{2m} \\
\log|f(k)| &= -\frac{i\hbar k^2 t}{2m} + C(\text{積分定数}) \\
f(k) &= e^{-i\hbar k^2 t/2m + C}
\end{aligned}
$$

$t = 0$のとき

$$
f(k)|_{t=0} = e^{C}
$$

であるから、

$$
f(k) = f(k)|_{t=0} e^{-i\hbar k^2 t/2m}
$$

となる。

(c) まず、 $f(k)|_{t=0}$ を求める。

$$
\begin{aligned}
f(k)|_{t=0} &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\varphi(x,0)dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}a}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/a^2 + ikx}dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}a}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x - ika^2/2)^2/a^2 - k^2a^2/4}dx
\end{aligned}
$$

ここで、 $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}dx = \sqrt{\pi}$ より

$$
\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x - ika^2/2)^2/a^2}dx = \sqrt{\pi}a
$$

であるから、

$$
\frac{1}{\sqrt{\pi}a}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x - ika^2/2)^2/a^2 - k^2a^2/4}dx = e^{-k^2a^2/4}
$$

従って、

$$
f(k)|_{t=0} = e^{-k^2a^2/4}
$$

である。すると (6.42) は

$$
\begin{aligned}
\varphi(x) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(a^2/4 + i\hbar t/2m)k^2 - ikx}dk \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-bk^2 - ikx}dk \qquad \left(b = \frac{a^2}{4} + \frac{i\hbar t}{2m}\text{とおいた}\right) \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-b(k + ix/2b)^2 - x^2/4b^2}dk \\
&= \frac{1}{2\sqrt{\pi b}}e^{-x^2/4b^2} \qquad \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-b(k + ix/2b)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{b}}\text{より}\right)
\end{aligned}
$$

となる。

240897H 及川一誠 (g240897@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (2002/10/31)

問題 7-1. (7.13)、(7.10) の式のそれぞれの透過確率 T の表式を変形して、$\alpha = 2ma^2V_0/\hbar^2$ を用いて示せ。

答: (7.13) 式について考える。$E < V_0$ のとき、(7.2) 式と、(7.3) 式より、次の関係式が得られる。

$$\frac{k^2}{\kappa^2} = \frac{E}{V_0 - E} \tag{7-1-1}$$

ここで、$\dfrac{E}{V_0} = x$ と置くと、$(7-1-1)$ 式は、

$$\frac{k^2}{\kappa^2} = \frac{x}{1-x} \qquad (x < 1) \tag{7-1-2}$$

となる。これより、

$$\kappa a = \sqrt{\alpha(1-x)} \tag{7-1-3}$$

が得られる。ゆえに、反射係数 T は、

$$\begin{aligned} |Q|^2 &= 4\left(1 + \frac{x}{1-x}\right)^2 \sinh^2\sqrt{\alpha(1-x)} + \frac{16x}{1-x} \\ &= \frac{4}{(1-x)^2}\left\{\sinh^2\sqrt{\alpha(1-x)} + 4x(1-x)\right\} \end{aligned} \tag{7-1-4}$$

より、

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{|Q|^2}\frac{16x}{1-x} \\ &= \frac{4x(1-x)}{\sinh^2\sqrt{\alpha(1-x)} + 4x(1-x)} \end{aligned} \tag{7-1-5}$$

となる。同じく、(7.19) 式について考える。$E > V_0$ のとき、(7.2) 式と、(7.16) 式より、次の関係式が得られる。

$$\frac{k^2}{q^2} = \frac{E}{V_0 - E} \tag{7-1-6}$$

ここで、$\dfrac{E}{V_0} = x$ と置くと、$(7-1-6)$ 式は、

$$\frac{k^2}{q^2} = \frac{x}{x-1} \qquad (x > 1) \tag{7-1-7}$$

となる。これより、

$$qa = \sqrt{\alpha(x-1)} \tag{7-1-8}$$

が得られる。ゆえに、反射係数 T は、

$$\begin{aligned} |Q|^2 &= 4\left(1 + \frac{x}{x-1}\right)^2 \sin^2\sqrt{\alpha(x-1)} + \frac{16x}{x-1} \\ &= \frac{4}{(x-1)^2}\left\{\sin^2\sqrt{\alpha(x-1)} + 4x(x-1)\right\} \end{aligned} \tag{7-1-9}$$

より、

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{|Q|^2}\frac{16x}{x-1} \\ &= \frac{4x(x-1)}{\sin^2\sqrt{\alpha(x-1)} + 4x(x-1)} \end{aligned} \tag{7-1-10}$$

となる。

f9311196 水戸 和幸 (f11196@ced.cas.uec.ac.jp) 作成 (96/02/20)

問題 7-2. 7.1 の結果で $x \to 1$ の極限をとると、(7.13)、(7.19) の式のそれぞれの透過確率 T の値が同じになる。この極限値を $\alpha = 2ma^2V_0/\hbar^2$ を用いて表せ。

答: (7.13) 式について考える。$E < V_0$ のときの透過確率 T は、

$$T = \frac{4x(1-x)}{\sinh^2\sqrt{\alpha(1-x)} + 4x(1-x)} \tag{7-2-1}$$

この式を変形すると、

$$T = \frac{4}{A+4} \tag{7-2-2}$$

$$A = \frac{\sinh^2\sqrt{\alpha(1-x)}}{x(1-x)} \tag{7-2-3}$$

となる。$1 - x = u$ と置くと、$(7-2-3)$ 式は次のようになる。

$$A = \frac{\sinh^2\sqrt{\alpha u}}{u(1-u)} \tag{7-2-4}$$

ここで、$u \to 0$ の極限をとると、$\lim_{u\to 0}\sinh^2\sqrt{\alpha u} = \alpha u$ より、

$$\begin{aligned}\lim_{u\to 0} A &= \lim_{u\to 0}\frac{\alpha u}{u(1-u)} \\ &= \alpha\end{aligned} \tag{7-2-5}$$

となり、透過確率 T は、

$$T = \frac{4}{\alpha+4} \tag{7-2-6}$$

となる。同様に、(7.19) 式について考える。$E > V_0$ のときの透過確率 T は、

$$T = \frac{4x(x-1)}{\sin^2\sqrt{\alpha(x-1)} + 4x(x-1)} \tag{7-2-7}$$

この式を変形すると、

$$T = \frac{4}{B+4} \tag{7-2-8}$$

$$B = \frac{\sin^2\sqrt{\alpha(x-1)}}{x(x-1)} \tag{7-2-9}$$

となる。$x - 1 = u$ と置くと、$(7-2-9)$ 式は次のようになる。

$$B = \frac{\sin^2\sqrt{\alpha u}}{u(u+1)} \tag{7-2-10}$$

ここで、$u \to 0$ の極限をとると、$\lim_{u\to 0}\sin^2\sqrt{\alpha u} = \alpha u$ より、

$$\begin{aligned}\lim_{u\to 0} B &= \lim_{u\to 0}\frac{\alpha u}{u(u+1)} \\ &= \alpha\end{aligned} \tag{7-2-11}$$

となり、透過確率 T は、

$$T = \frac{4}{\alpha + 4} \tag{7-2-12}$$

となる。

f9311196 水戸 和幸 (f11196@ced.cas.uec.ac.jp) 作成 (96/02/20)

問題 7-3. 1 次元障壁 (7.1) で、 $a = 1$ Å 、 $V_0 = 1\text{eV}$ の場合、入射電子のエネルギーが $E = 0.5$ eV のときの透過確率 T の値を求めよ。

答:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2} \\ &= \frac{2 \times 9.11 \times 10^{-31} \times (10^{-10})^2 \times 1.60 \times 10^{-19}}{(6.63 \times 10^{-34}/2 \times 3.14)^2} \\ &= 0.262 \end{aligned} \tag{7-3-1}$$

$$x = \frac{E}{V_0} = \frac{0.5}{1} = 0.5 \tag{7-3-2}$$

であるから、 $E < V_0$ のときの透過確率 T は、

$$\begin{aligned} T &= \frac{4x(1-x)}{\sinh^2\sqrt{\alpha(1-x)} + 4x(1-x)} \\ &= \frac{4 \times 0.5 \times (1-0.5)}{\sinh^2\sqrt{0.262 \times (1-0.5)} + 4 \times 0.5 \times (1-0.5)} \\ &= 0.88 \end{aligned} \tag{7-3-3}$$

となる。

f9311196 水戸 和幸 (f11196@ced.cas.uec.ac.jp) 作成 (96/02/21)

問題 7-4. 1 次元障壁 (7.1) で、入射電子のエネルギー E と V_0 が等しく $a = 10$ Å のとき、 V_0 が何 eV だと透過確率 T が 0.1 になるか。

答: E と V_0 が等しいということは、 $x = 1$ であるから、 7.1 の結果で $x \to 1$ の極限をとったものと一致する。よって、透過確率 T は、

$$T = \frac{4}{\alpha + 4} = 0.1 \tag{7-4-1}$$

となる。これより、 $\alpha = 36$ となり求める入射電子エネルギー V_0 は、

$$\begin{aligned} V_0 &= \frac{\alpha\hbar^2}{2ma^2} \\ &= \frac{36 \times (6.63 \times 10^{-34}/2 \times 3.14)^2}{2 \times 9.11 \times 10^{-31} \times (10 \times 10^{-10})^2} \\ &= 2.20 \times 10^{-19} \quad [\text{J}] \\ &= 1.37 \quad [\text{eV}] \end{aligned} \tag{7-4-2}$$

となる。

f9311196 水戸 和幸 (f11196@ced.cas.uec.ac.jp) 作成 (96/02/21)

問題 7-5. (7.24) 式で定義された、 2 行 2 列の行列 $Q(x)$ を用いて、 1 次元障壁が 1 個の問題 (7.1) を解け。 (7.27) を用いた結果は、 (7.13) に等しくなることを確認せよ。

答: (7.24) 式より $Q(x)$、$K(x)$ は以下で定義される。

$$Q(x)=\begin{pmatrix} e^{ikx} & e^{-ikx} \\ ye^{ikx} & -ye^{-ikx} \end{pmatrix},\quad K(x)=\begin{pmatrix} e^{\kappa x} & e^{-\kappa x} \\ e^{\kappa x} & -e^{-\kappa x} \end{pmatrix} \tag{7-5-1}$$

但し $y=ik/\kappa$, $k=\sqrt{2mE}/\hbar$, $\kappa=\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar$ とおいた。
ポテンシャルで分割された各領域の波動関数をそれぞれ φ_1 , φ_2 , φ_3 とすれば、

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= e^{ikx}+Ae^{-ikx} \quad (x\le -a/2)\ , \\ \varphi_2 &= Be^{\kappa x}+Ce^{-\kappa x} \quad (-a/2\le x\le a/2)\ , \\ \varphi_3 &= De^{ikx} \quad (a/2\le x) \end{aligned}$$

これより境界条件は

$$\begin{aligned} e^{-ika/2}+Ae^{ika/2} &= Be^{-\kappa a/2}+Ce^{\kappa a/2} \\ ik\left(e^{-ika/2}-Ae^{ika/2}\right) &= \kappa\left(Be^{-\kappa a/2}-\mathrm{C}e^{\kappa a/2}\right) \\ Be^{\kappa a/2}+Ce^{-\kappa a/2} &= De^{ika/2} \\ \kappa\left(Be^{\kappa a/2}-Ce^{-\kappa a/2}\right) &= ikDe^{ika/2} \end{aligned}$$

これを行列の形に書き直せば、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} e^{-ika/2} & e^{ika/2} \\ (ik/\kappa)e^{-ika/2} & -(ik/\kappa)e^{ika/2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ A \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} e^{-\kappa a/2} & e^{\kappa a/2} \\ e^{-\kappa a/2} & -e^{\kappa a/2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} e^{\kappa a/2} & e^{-\kappa a/2} \\ e^{\kappa a/2} & -e^{-\kappa a/2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} e^{ika/2} & e^{-ika/2} \\ (ik/\kappa)e^{ika/2} & -(ik/\kappa)e^{-ika/2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} D \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

ここで $Q(x)$、$K(x)$ 及び $y=ik/\kappa$ を導入すると

$$\begin{aligned} Q(-a/2)\begin{pmatrix} 1 \\ A \end{pmatrix} &= K(-a/2)\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} \\ K(a/2)\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} &= Q(a/2)\begin{pmatrix} D \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

更に $J(x)=Q(x)^{-1}K(x)$ とおくと

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 \\ A \end{pmatrix} &= Q(-a/2)^{-1}K(-a/2)\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} \\ &= Q(-a/2)^{-1}K(-a/2)Q(a/2)^{-1}K(a/2)\begin{pmatrix} D \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= J(-a/2)J(a/2)^{-1}\begin{pmatrix} D \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

従って転送行列を $M=(M_{ij})=J(-a/2)J(a/2)^{-1}$ とすれば

$$\begin{pmatrix} 1 \\ A \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} D \\ 0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} M_{11}D \\ M_{21}D \end{pmatrix} \tag{7-5-2}$$

であるから　$T = |D|^2 = \left|M_{11}^{-1}\right|^2$　を求めることは　$J(-a/2)J(a/2)^{-1}$ の (1,1) 成分を求める事に帰着される。まず $J(x)$ を求める。

$$\begin{aligned}
|Q(x)| &= \begin{vmatrix} e^{ikx} & e^{-ikx} \\ ye^{ikx} & -ye^{-ikx} \end{vmatrix} \\
&= e^{ikx}(-ye^{-ikx}) - e^{-ikx}ye^{ikx} \\
&= -2y
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\therefore\ Q(x)^{-1} &= \frac{1}{2y}\begin{pmatrix} ye^{-ikx} & e^{-ikx} \\ ye^{ikx} & -e^{ikx} \end{pmatrix} \\
\therefore\ J(x) = Q(x)^{-1}K(x) &= \frac{1}{2y}\begin{pmatrix} ye^{-ikx} & e^{-ikx} \\ ye^{ikx} & -e^{ikx} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{\kappa x} & e^{-\kappa x} \\ e^{\kappa x} & -e^{-\kappa x} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2y}\begin{pmatrix} (y+1)e^{(-ik+\kappa)x} & (y-1)e^{(-ik-\kappa)x} \\ (y-1)e^{(ik+\kappa)x} & (y+1)e^{(ik-\kappa)x} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

続いて $J(x)^{-1}$ を求め、最後に $J(-a/2)J(a/2)^{-1}$ を計算する。

$$\begin{aligned}
|J(x)| &= \frac{1}{(2y)^2}\left\{(y+1)e^{(-ik+\kappa)x}(y+1)e^{(ik-\kappa)x} - (y-1)e^{(-ik-\kappa)x}(y-1)e^{(ik+\kappa)x}\right\} \\
&= \frac{1}{4y^2}\left\{(y+1)^2 - (y-1)^2\right\} \\
&= \frac{1}{y} \\
\therefore\ J(x)^{-1} &= -\frac{1}{2}\begin{pmatrix} (-y-1)e^{(ik-\kappa)x} & (y-1)e^{(-ik-\kappa)x} \\ (y-1)e^{(ik+\kappa)x} & (-y-1)e^{(-ik+\kappa)x} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

以上より $M_{11} = J(-a/2)J(a/2)^{-1}$ は

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{4y}\left\{(y+1)e^{(-ik+\kappa)(-a/2)}(-y-1)e^{(ik-\kappa)(a/2)} - (y-1)e^{(-ik-\kappa)(-a/2)}(y-1)e^{(ik+\kappa)(a/2)}\right\} \\
=\ & \frac{e^{ika}}{4y}\left\{(y+1)^2e^{-\kappa a} - (y-1)^2e^{\kappa a}\right\} \\
=\ & \frac{e^{ika}}{2y}\left\{-(y^2+1)\frac{(e^{\kappa a}-e^{-\kappa a})}{2} + 2y\frac{(e^{\kappa a}+e^{-\kappa a})}{2}\right\} \\
=\ & \frac{e^{ika}}{2y}\left\{-(y^2+1)\sinh(\kappa a) + 2y\cosh(\kappa a)\right\} \qquad (7\text{-}5\text{-}3)
\end{aligned}$$

となり、この絶対値の逆数の２乗が T となる。

$$y^* = -y \quad \left(\because\ y = i\frac{k}{\kappa}\right)$$
$$\cosh^2(x) - \sinh^2(x) = 1$$

を用いて $\left|-(y^2+1)\sinh(\kappa a) + 2y\cosh(\kappa a)\right|^2 = |Q|^2/4$ を確かめる。

$$\begin{aligned}
& \left|-(y^2+1)\sinh(\kappa a) + 2y\cosh(\kappa a)\right|^2 \\
=\ & \left\{-(y^2+1)\sinh(\kappa a) + 2y\cosh(\kappa a)\right\}\left\{-(y^2+1)\sinh(\kappa a) + 2y\cosh(\kappa a)\right\} \\
=\ & (y^2+1)^2\sinh^2(\kappa a) - 4y^2\cosh^2(\kappa a) \\
=\ & |Q|^2/4
\end{aligned}$$

よって

$$T=\frac{-4y^2}{|Q|^2/4}=\frac{1}{|Q|^2}\frac{16k^2}{\kappa^2} \tag{7-5-4}$$

であり、結果は (7.13) と等しい。

g040496 沼田 和幸 (g040496@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (01/01/30)

問題 7-6. 図のポテンシャルの場合について、(7.26) で定義した転送行列 M の表式を求めよ。(必要に応じて、(7.24) で定義した行列 $Q(x)$,$K(x)$ を定義せよ。行列を展開する必要はない）。

答: まず、以下のそれぞれの状況での波動関数を求めておく。(A ~ E は定数)
(1) 左端と障壁に挟まれた範囲
右に進行する波とポテンシャル障壁での反射波が存在するので、

$$\varphi_1=Ae^{ikx}+Be^{-ikx} \tag{7-6-1}$$

(2) 障壁中

$$\varphi_2=Ce^{\kappa x}+De^{-\kappa x} \tag{7-6-2}$$

(3) 右端
反射波が存在しないので、

$$\varphi_3=Ee^{ikx} \tag{7-6-3}$$

ここで、

$$Q(x) = \begin{pmatrix} e^{ikx} & e^{-ikx} \\ ye^{ikx} & -ye^{-ikx} \end{pmatrix} \tag{7-6-4}$$

$$K(x) = \begin{pmatrix} e^{\kappa x} & e^{-\kappa x} \\ e^{\kappa x} & -e^{-\kappa x} \end{pmatrix} \tag{7-6-5}$$

$$K'(x) = \begin{pmatrix} e^{\kappa' x} & e^{-\kappa' x} \\ e^{\kappa' x} & -e^{-\kappa' x} \end{pmatrix} \tag{7-6-6}$$

$$J(x) = Q(x)^{-1}K(x) \tag{7-6-7}$$

$$J'(x) = Q(x)^{-1}K'(x) \tag{7-6-8}$$

と定義し、それぞれ、

$$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar}},\kappa=\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar},\kappa'=\frac{\sqrt{2m(V_0/3-E)}}{\hbar},y=\frac{ik}{\kappa}$$

であり、E は電子の持つエネルギー , m は電子の質量 をあらわす。

また、それぞれの範囲の境界を含む二つの波動関数の値と、微分は等しいはずであるので、次の二つの場合において、それぞれ方程式が成り立つ。
(1) 障壁に入る場合（このときの x 座標を $x=s$ とする）

$$Ae^{iks}+Be^{-iks} = Ce^{\kappa s}+De^{-\kappa s} \tag{7-6-9}$$

$$ik\left(Ae^{iks}-Be^{-iks}\right) = \kappa\left(Ce^{\kappa s}+De^{-\kappa s}\right) \tag{7-6-10}$$

これを行列で表すと、

$$\begin{pmatrix} e^{iks} & e^{-iks} \\ ye^{iks} & -ye^{-iks} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\kappa s} & e^{-\kappa s} \\ e^{\kappa s} & -e^{-\kappa s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \tag{7-6-11}$$

これを変形すると、式 (7-6-4)、式 (7-6-5) より

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} &= Q\left(s\right)^{-1} K\left(s\right) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} && \text{(7-6-12)} \\ &= J\left(s\right) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} && \text{(7-6-13)} \end{aligned}$$

となり、障壁に入る場合は、 $J\left(x\right)$ を作用させればいいことがわかる。
(2) 障壁から出る場合（このときの x 座標を $x = t$ とする)

$$\begin{aligned} Ce^{\kappa t} + De^{-\kappa t} &= A^{'}e^{ikt} + B^{'}e^{-ikt} && \text{(7-6-14)} \\ \kappa\left(Ce^{\kappa t} + De^{-\kappa t}\right) &= ik\left(A^{'}e^{ikt} - B^{'}e^{-ikt}\right) && \text{(7-6-15)} \end{aligned}$$

同様にして行列で表すと、

$$\begin{pmatrix} e^{\kappa t} & e^{-\kappa t} \\ e^{\kappa t} & -e^{-\kappa t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ikt} & e^{-ikt} \\ ye^{ikt} & -ye^{-ikt} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^{'} \\ B^{'} \end{pmatrix} \tag{7-6-16}$$

これを変形すると、式 (7-6-4)、 (式 7-6-5) より

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} &= K\left(t\right)^{-1} Q\left(t\right) \begin{pmatrix} A^{'} \\ B^{'} \end{pmatrix} && \text{(7-6-17)} \\ &= J\left(t\right)^{-1} \begin{pmatrix} A^{'} \\ B^{'} \end{pmatrix} && \text{(7-6-18)} \end{aligned}$$

となり、障壁から出る場合は、 $J\left(x\right)^{-1}$ を作用させればよく、また $A^{'}$ を E、 $B^{'}$ を 0 にそれぞれ置き換えると、障壁から右端へと出る場合にも同様にすればいいとわかる。以上はポテンシャルが V_0 の場合であり、ポテンシャルが $V_0/3$ の場合も同様に考えると、障壁に入るときは $J^{'}\left(x\right)$ を作用させ、障壁を出るときは $J^{'-1}\left(x\right)$ を作用させればよいことがわかる。ここで最後にできた行列の積を M と定義した。したがって答えは、

(a)

$$M = J\left(0\right)J^{-1}\left(a\right)J\left(3a\right)J^{-1}\left(4a\right) \tag{7-6-19}$$

(b)

$$M = J\left(0\right)J^{-1}\left(a\right)J\left(2a\right)J^{-1}\left(4a\right) \tag{7-6-20}$$

(c)

$M = J\left(0\right)J^{-1}\left(a\right)J\left(2a\right)J^{-1}\left(3a\right)J\left(4a\right)J^{-1}\left(5a\right)$ //ここで間違った改行が起こっています。 (7-6-21)

(d)

$$M = J\left(0\right)J^{'-1}\left(a\right)J^{'}\left(3a\right)J^{-1}\left(4a\right) \tag{7-6-22}$$

となる。

g240947 井上道雄 (micchan@bf7.so.net.ne.jp) 作成 (02/12/10)

問題 7-7. ポテンシャル $V(x)$ が対称で偶関数の場合 $(V(-x) = V(x))$、束縛状態の任意の波動関数は偶関数なるある波動関数と奇関数なるある波動関数との和である。この場合転送行列は、$x > 0$（または$x < 0$）の部分だけ考えれば良いことを説明せよ。

答: どんな波動関数も偶波動関数と奇波動関数の和に分解されることが $V(-x) = V(x)$ からわかる。もしその偶波動関数と奇波動関数が定数倍をのぞいて一意に定まるならば、任意の波動関数を与える表式 $\varphi = a\varphi_1 + b\varphi_2$($\varphi_1$ は偶関数で φ_2 は奇関数、a, b は規格化条件を満たすように選ばれた定数) を得ることになる。偶関数にしても奇関数にしても、$0 < x$ における挙動が与えられればじゅうぶんである。よって、波動関数を偶関数または奇関数であると仮定し、それらが $0 \leq x$ において定数倍をのぞき一意に定まることを示す。

領域 $0 < x$ におけるポテンシャルを階段状に近似して、$-x_0 < x < x_0$ においては $V(x) = V_0$、$x_{n-1} < x < x_n$ $n = 1, 2, \cdots$ においては $V(x) = V_n$ で一定とする。波動関数は $k_n = \sqrt{2m(E - V_n)}\Big/\hbar$ を用いて、

$$\varphi_0(x) = A_0 e^{ik_0 x} + B_0 e^{-ik_0 x}\ (-x_0 < x < x_0)$$

$$\varphi_n(x) = A_n e^{ik_n x} + B_n e^{-ik_n x}\ (x_{n-1} < x < x_n)$$

となる。波動関数が偶関数ならば、原点の周りの $-x_0 < x < x_0$ ですでに偶関数でなければならないので $A_0 = B_0$ となり、奇関数ならば同様にして $A_0 = -B_0$ となる。$x = x_n$ における境界条件は

$$M_n(x) = \begin{pmatrix} e^{ik_n x} & e^{-ik_n x} \\ ik_n e^{ik_n x} & -ik_n e^{-ik_n x} \end{pmatrix}$$

として、

$$M_n(x_n) \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = M_{n+1}(x_n) \begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix}$$

と書かれる。$J_n(x) = M_{n+1}(x)^{-1} M_n(x)$ として、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} &= J_{n-1}(x_{n-1}) \begin{pmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{pmatrix} \\ &= J_{n-1}(x_{n-1}) J_{n-2}(x_{n-2}) \cdots J_0(x_0) \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

はじめに $B_0 = A_0$ または $B_0 = -A_0$ を仮定していたから、これはすべての A_n, B_n が A_0 の定数倍として定まることを示している。つまり、偶関数または奇関数であるような波動関数は定数倍をのぞいて一意に定まる。今考えているポテンシャルにおける、任意の波動関数はこれらから定数倍と和によって生成される。

241025B 山下　真 (g241025@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (/02/12/19)

問題 8-1. 2 次元の無限に高い井戸の問題の固有値 (8.14) で、$b = 2a$ のときのエネルギー固有値を低い方から 5 つ求め、その量子数を (n, ℓ) の形で示せ。ただし、縮重しているものも 1 つと数え、縮重度も示せ。

答: (8.14) 式

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{\ell^2}{b^2} \right) \tag{8-1-1}$$

に $b=2a$ を代入すると、

$$E_{n\ell} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n^2}{a^2}+\frac{\ell^2}{(2a)^2}\right) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{4n^2+\ell^2}{4a^2}\right) \tag{8-1-2}$$

となるので、 $4n^2+\ell^2$ の値の大小で、エネルギー固有値を評価することができる。n,ℓ はそれぞれ自然数であることに注意しつつ、 $4n^2+\ell^2$ の値を調べていくと、

n	ℓ	$4n^2+\ell^2$
1	1	5
1	2	8
1	3	13
1	4	20
1	5	29
2	1	17
2	2	20
2	3	25
3	1	37

以上より、エネルギー固有値が低い方から、その量子数 (n,ℓ) は、

$$(1,1),(1,2),(1,3),(2,1),(1,4)=(2,2) \tag{8-1-3}$$

となる。ここで、縮重度は (1,4) = (2,2) のみ 2 であり、その他は 1 である。

g140826 水野 洋輔 (g140826@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (01/12/25)

問題 8-2. 2 次元の無限に高い井戸の問題の固有値 (8.14) で、 $a=b$ のときのエネルギー固有値の縮重度が 3 重や 4 重になる場合があるか。あるなら 1 つ例を示せ。

答: (8.14) 式

$$E_{n\ell} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n^2}{a^2}+\frac{\ell^2}{b^2}\right) \tag{8-2-1}$$

に $a=b$ を代入すると、

$$E_{n\ell} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n^2}{a^2}+\frac{\ell^2}{a^2}\right) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n^2+\ell^2}{a^2}\right) \tag{8-2-2}$$

となるので、 $n^2+\ell^2$ の値の大小で、エネルギー固有値を評価することができる。ただし、 n,ℓ はそれぞれ自然数である。

ここで、縮重度が 3 であるとは、ある値 M が異なる (n,ℓ) によって $M=n^2+\ell^2$ の形で 3 通りに表されるということなので、例えば、 $M=50$ のときの

$$(n,\ell)=(1,7),(7,1),(5,5) \tag{8-2-3}$$

が挙げられる。同様に縮重度が 4 となるのは、 $M=625$ のときの

$$(n,\ell)=(20,15),(15,20),(7,24),(24,7) \tag{8-2-4}$$

が挙げられる。

g140826 水野 洋輔 (g140826@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (01/12/25)

問題 8-3. 3 次元のラプラシアンの極座標表示 (8.42) を導け

答: 微分演算子ラプラシアンを 3 次元極座標で表すとどうなるかを考える。3 次元直交座標系ではラプラシアン ∇^2 は

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{8-3-1}$$

と表せる。ここで (x, y, z) と (r, θ, φ) の間の変数変換の式は、$(0 < r < \infty, 0 < \theta < \pi, 0 < \varphi < 2\pi)$ とおいて

$$\begin{aligned} x &= r \sin\theta \cos\varphi & (8\text{-}3\text{-}2) \\ y &= r \sin\theta \sin\varphi & (8\text{-}3\text{-}3) \\ z &= r \cos\theta & (8\text{-}3\text{-}4) \end{aligned}$$

であり、これを逆に解くと、

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} & (8\text{-}3\text{-}5) \\ \cos\theta &= \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} & (8\text{-}3\text{-}6) \\ \tan\varphi &= \frac{y}{x} & (8\text{-}3\text{-}7) \end{aligned}$$

となる。(x, y, z) による偏微分を (r, θ, φ) による偏微分で表すと次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \varphi} & (8\text{-}3\text{-}8) \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial \varphi} & (8\text{-}3\text{-}9) \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \varphi} & (8\text{-}3\text{-}10) \end{aligned}$$

つまり、$\partial r/\partial x$, $\partial\theta/\partial x$, $\partial\varphi/\partial x$, $\partial r/\partial y$, $\partial\theta/\partial y$, $\partial\varphi/\partial y$, $\partial r/\partial z$, $\partial\theta/\partial z$, $\partial\varphi/\partial z$ が求まればよいとわかる。ここで、式 (8-3-5) を x で偏微分すると、次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} r^2 &= \frac{\partial}{\partial x}\left(x^2 + y^2 + z^2\right) \\ 2r\frac{\partial r}{\partial x} &= 2x \\ \frac{\partial r}{\partial x} &= \frac{x}{r} \\ &= \sin\theta\cos\varphi & (8\text{-}3\text{-}11) \end{aligned}$$

y, z でも同様にして、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y} r^2 &= \frac{\partial}{\partial y}\left(x^2 + y^2 + z^2\right) \\ 2r\frac{\partial r}{\partial y} &= 2y \\ \frac{\partial r}{\partial y} &= \frac{y}{r} \\ &= \sin\theta\sin\varphi & (8\text{-}3\text{-}12) \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial z}r^2 &= \frac{\partial}{\partial z}\left(x^2+y^2+z^2\right) \\
2r\frac{\partial r}{\partial z} &= 2z \\
\frac{\partial r}{\partial z} &= \frac{z}{r} \\
&= \cos\theta
\end{aligned}
\tag{8-3-13}
$$

が得られる。また、式 (8-3-6) を x で偏微分すると、次のようになる。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x}\cos\theta &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\right) \\
-\sin\theta\frac{\partial\theta}{\partial x} &= -\frac{1}{2}\frac{2xz}{\sqrt{\left(x^2+y^2+z^2\right)^3}} \\
\sin\theta\frac{\partial\theta}{\partial x} &= \frac{xz}{r^3} \\
&= \frac{r^2\sin\theta\cos\varphi\cos\theta}{r^3} \\
\frac{\partial\theta}{\partial x} &= \frac{\cos\varphi\cos\theta}{r}
\end{aligned}
\tag{8-3-14}
$$

y, z でも同様にして、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial y}\cos\theta &= \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\right) \\
-\sin\theta\frac{\partial\theta}{\partial y} &= -\frac{1}{2}\frac{2yz}{\sqrt{\left(x^2+y^2+z^2\right)^3}} \\
\sin\theta\frac{\partial\theta}{\partial y} &= \frac{yz}{r^3} \\
&= \frac{r^2\sin\theta\sin\varphi\cos\theta}{r^3} \\
\frac{\partial\theta}{\partial y} &= \frac{\sin\varphi\cos\theta}{r}
\end{aligned}
\tag{8-3-15}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial z}\cos\theta &= \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{z}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}\right) \\
-\sin\theta\frac{\partial\theta}{\partial z} &= \frac{1}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}-\frac{1}{2}\frac{2z^2}{\sqrt{\left(x^2+y^2+z^2\right)^3}} \\
\sin\theta\frac{\partial\theta}{\partial z} &= -\frac{1}{r}+\frac{z^2}{r^3} \\
&= -\frac{1}{r}+\frac{r^2\cos^2\theta}{r^3} \\
&= \frac{\cos^2\theta-1}{r} \\
&= -\frac{\sin^2\theta}{r} \\
\frac{\partial\theta}{\partial z} &= -\frac{\sin\theta}{r}
\end{aligned}
\tag{8-3-16}
$$

が得られる。次に、式 (8-3-7) も同様に x, y, z それぞれで偏微分する。

x での偏微分。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x}\tan\varphi &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{y}{x}\right) \\
\frac{1}{\cos^2\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial x} &= -\frac{y}{x^2} \\
\frac{\partial\varphi}{\partial x} &= -\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}
\end{aligned}
\tag{8-3-17}
$$

y での偏微分。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial y}\tan\varphi &= \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{y}{x}\right) \\
\frac{1}{\cos^2\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial y} &= \frac{1}{x} \\
&= \frac{1}{r\sin\theta\cos\varphi} \\
\frac{\partial\varphi}{\partial y} &= \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}
\end{aligned}
\tag{8-3-18}
$$

z での偏微分。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial z}\tan\varphi &= \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{y}{x}\right) \\
\frac{1}{\cos^2\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial y} &= 0 \\
\frac{\partial\varphi}{\partial y} &= 0
\end{aligned}
\tag{8-3-19}
$$

これで必要なものは求まった。次に、$\partial/\partial x$, $\partial/\partial y$, $\partial/\partial x$ を計算する。

式 (8-3-8), 式 (8-3-11), 式 (8-3-14), 式 (8-3-17) より、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
&= \sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}
\end{aligned}
\tag{8-3-20}
$$

が得られる。次に式 (8-3-9), 式 (8-3-12), 式 (8-3-15), 式 (8-3-18) より、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial y} &= \frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\varphi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
&= \sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}
\end{aligned}
\tag{8-3-21}
$$

が得られる。次に式 (8-3-10), 式 (8-3-13), 式 (8-3-16), 式 (8-3-19) より、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial z} &= \frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial\theta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial\varphi}{\partial z}\frac{\partial}{\partial\varphi} \\
&= \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}
\end{aligned}
\tag{8-3-22}
$$

が得られる。式 (8-3-1) に式 (8-3-20), 式 (8-3-21), 式 (8-3-22) を代入すれば、3 次元のラプラシアンの極座標表示 (8.42) を導ける。その前に $\partial^2/\partial x^2$, $\partial^2/\partial y^2$, $\partial^2/\partial z^2$ を計算しておく。

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial^2}{\partial x^2} \\
= \quad & \left(\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
= \quad & \sin^2\theta\cos^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\sin\theta\cos\theta\cos^2\varphi\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)-\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
+ \quad & \frac{\cos\theta\cos^2\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\cos\theta\cos^2\varphi}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)-\frac{\cos\theta\sin\varphi\cos\varphi}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
- \quad & \frac{\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{\cos\theta\sin\varphi}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{\sin\varphi}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad \text{(8-3-23)}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial^2}{\partial y^2} \\
= \quad & \left(\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\left(\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
= \quad & \sin^2\theta\sin^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\sin\theta\cos\theta\sin^2\varphi\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
+ \quad & \frac{\cos\theta\sin^2\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\cos\theta\sin^2\varphi}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{\cos\theta\sin\varphi\cos\varphi}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
+ \quad & \frac{\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\cos\theta\cos\varphi}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{\cos\varphi}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad \text{(8-3-24)}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial^2}{\partial z^2} \\
= \quad & \left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \\
= \quad & \cos^2\theta\frac{\partial^2}{\partial r^2}-\sin\theta\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \\
- \quad & \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\sin\theta}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \qquad \text{(8-3-25)}
\end{aligned}
$$

よって、式 (8-3-1) に式 (8-3-23), 式 (8-3-24), 式 (8-3-25) を代入すると、

$$
\begin{aligned}
\nabla^2 \quad = \quad & \frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2} \\
= \quad & \sin^2\theta\cos^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\sin\theta\cos\theta\cos^2\varphi\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)-\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
+ \quad & \frac{\cos\theta\cos^2\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\cos\theta\cos^2\varphi}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)-\frac{\cos\theta\sin\varphi\cos\varphi}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
- \quad & \frac{\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{\cos\theta\sin\varphi}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{\sin\varphi}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
+ \quad & \sin^2\theta\sin^2\varphi\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\sin\theta\cos\theta\sin^2\varphi\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
+ \quad & \frac{\cos\theta\sin^2\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\cos\theta\sin^2\varphi}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{\cos\theta\sin\varphi\cos\varphi}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&+ \quad \frac{\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\cos\varphi}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
&+ \quad \cos^2\theta\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \sin\theta\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \\
&- \quad \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\sin\theta}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)
\end{aligned}
$$

ここで、第 1 項、第 10 項、第 19 項 (共通項： $\frac{\partial^2}{\partial r^2}$) 第 4 項、第 13 項 (共通項： $\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right)$) 第 5 項、第 14 項 (共通項： $\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right)$) をそれぞれまとめる。また第 2 項と第 11 項と第 20 項、第 3 項と第 12 項、第 6 項と第 15 項で消える。 $\cos^2\varphi + \sin^2\varphi = 1$ を利用する。

$$
\begin{aligned}
= &\quad \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\cos\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}\right) \\
- &\quad \frac{\sin\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r}\right) \\
+ &\quad \frac{\cos\theta}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\sin\theta}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \\
- &\quad \frac{\cos\theta\sin\varphi}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{\cos\theta\cos\varphi}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right) \\
+ &\quad \frac{\sin\varphi}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) + \frac{\cos\theta}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)
\end{aligned}
$$

ここで、

$$
\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\right) = \cos\theta + \sin\theta\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial r}
$$

以下次の

$$
\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}\right),\ \frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}\right),\ \frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r}\right),\ \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right),\ \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)
$$

$$
\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right),\ \frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right),\ \frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}\right),\ \frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),\ \frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)
$$

でも同様に変形し、共通項を見つけまとめると、

$$
\begin{aligned}
= &\quad \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\cos^2\theta + \sin^2\theta}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos^2\varphi + \sin^2\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial r} \\
+ &\quad \frac{\cos^2\theta + \sin^2\theta}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta\left(\sin^2\varphi + \cos^2\varphi\right)}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} \\
+ &\quad \frac{\sin^2\varphi + \cos^2\varphi}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}
\end{aligned}
$$

また $\cos^2\theta + \sin^2\theta = 1,\ \cos^2\varphi + \sin^2\varphi = 1$ より、

$$
\begin{aligned}
= &\quad \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \\
= &\quad \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \qquad \text{(8-3-26)}
\end{aligned}
$$

となり、３次元のラプラシアンの極座標表示が導くことができた。

g240947 井上道雄 (micchan@bf7.so.net.ne.jp) 作成 (02/10/15)

問題 8-4. ２次元の円形の井戸で、井戸の外側の高さが無限大の場合には、波動関数は井戸の外にしみださない。この場合固有関数はベッセル関数の零点（関数値が 0 になる点）と関係することを説明せよ。ベッセル関数の図 8.5 を見ながら説明せよ。

答: 固有関数中の k がベッセル関数の零点と関係することを示す。
井戸の外にしみだしはないので、井戸の内側（$0 < r < a$）の波動関数のみを考えれば良い。$\varphi = R(r)\Theta(\theta)$であり、シュレディンガー方程式を解くと

$$R_l(r) = C_{al}J_l(kr) + C_{bl}N_l(kr) \tag{8-4-1}$$

を得る。$r = 0$で、$N_l(kr)$は原点で発散するため（図8.5、$N_l(r)$）係数C_{bl}は0になる。
よって

$$R_l(r) = C_{al}J_l(kr) \tag{8-4-2}$$

$R_l(a) = 0$より、$C_{al}J_l(ka) = 0$よって、$J_l(ka) = 0$ ここで図 8.5 で、縦軸を $J_l(kr)$ 横軸を kr とすれば $J_l(kr) = 0$ のときの $kr(= ka)$ の値がわかる。これより、ベッセル関数の零点が $r = a$ （定数）となるように k が定められる。

240916J 高城 重宏 (g240916@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (/02/10/21)

問題 8-5. ルジャンドル多項式 $P_l(z)$(8.50) は、ルジャンドルの微分方程式 (8.49) を満たすことを示せ。また、ルジャンドル多項式 $P_l(z)$の$l = 0, 1, 2$の関数形を(8.50) より求めよ。

答: $P_l(z)$ をルジャンドルの微分方程式に代入して、その解になっていることを示せば良い。つまり

$$\frac{d}{dz}\left((1-z^2)\frac{d}{dz}\left\{\frac{1}{2^l l!}\frac{d^{(l)}}{dz^{(l)}}(z^2-1)^l\right\}\right) + l(l+1)\left\{\frac{1}{2^l l!}\frac{d^{(l)}}{dz^{(l)}}(z^2-1)^l\right\} = 0 \tag{8-5-1}$$

を示す。

$$(1-z^2)\frac{d}{dz}\left\{\frac{1}{2^l l!}\frac{d^{(l)}}{dz^{(l)}}(z^2-1)^l\right\} = \frac{1}{2^l l!}(1-z^2)\frac{d^{(l+1)}}{dz^{(l+1)}}(z^2-1)^l \tag{8-5-2}$$

ここで

$$(fg)^{(n)} = \sum_{i=o}^{n} {}_nC_i f^{(i)} g^{(n-i)} \tag{8-5-3}$$

であるから、$f = (z^2-1)^l, g = (z^2-1)$ として

$$\begin{aligned}\frac{d^{(l+1)}}{dz^{(l+1)}}(z^2-1)^{l+1} &= (z^2-1)\frac{d^{(l+1)}}{dz^{(l+1)}}(z^2-1)^l + 2z(l+1)\frac{d^{(l)}}{dz^{(l)}}(z^2-1)^l \\ &+ 2\frac{1}{2}l(l+1)\frac{d^{(l-1)}}{dz^{(l-1)}}(z^2-1)^l \end{aligned} \tag{8-5-4}$$

これより

$$F = (z^2-1)\frac{d^{(l+1)}}{dz^{(l+1)}}(z^2-1)^l \tag{8-5-5}$$

$$= \frac{d^{(l+1)}}{dz^{(l+1)}}(z^2-1)^{l+1} - 2z(l+1)\frac{d^{(l)}}{dz^{(l)}}(z^2-1)^l - l(l+1)\frac{d^{(l-1)}}{dz^{(l-1)}}(z^2-1)^l \tag{8-5-6}$$

このように F をおけば

$$\begin{aligned}\frac{dF}{dz} &= \frac{d^{(l+2)}}{dz^{(l+2)}}(z^2-1)^{l+1} - 2(l+1)\frac{d^{(l)}}{dz^{(l)}}(z^2-1)^l \qquad (8\text{-}5\text{-}7)\\ &- 2z(l+1)\frac{d^{(l+1)}}{dz^{(l+1)}}(z^2-1)^l - l(l+1)\frac{d^{(l)}}{dz^{(l)}}(z^2-1)^l\\ &= 2(l+1)\frac{d^{(l+1)}}{dz^{(l+1)}}z(z^2-1)^l - 2(l+1)\frac{d^{(l)}}{dz^{(l)}}(z^2-1)^l \qquad (8\text{-}5\text{-}8)\\ &- 2z(l+1)\frac{d^{(l+1)}}{dz^{(l+1)}}(z^2-1)^l - l(l+1)\frac{d^{(l)}}{dz^{(l)}}(z^2-1)^l\end{aligned}$$

ここでまた (8-5-3) より、 $g=z, f=(z^2-1)^l$ とおけば

$$\frac{d^{(l+1)}}{dz^{(l+1)}}z(z^2-1)^l = z\frac{d^{(l+1)}}{dz^{(l+1)}}(z^2-1)^l + (l+1)\frac{d^{(l)}}{dz^{(l)}}(z^2-1)^l \qquad (8\text{-}5\text{-}9)$$

よって

$$\frac{dF}{dz} = l(l+1)\frac{d^{(l)}}{dz^{(l)}}(z^2-1)^l \qquad (8\text{-}5\text{-}10)$$

示すのは $(8-5-2), (8-5-5)$を$(8-5-1)$ に代入して

$$\frac{d}{dz}\left\{\frac{1}{2^l l!}(-F)\right\} + l(l+1)\left\{\frac{1}{2^l l!}\frac{d^{(l)}}{dz^{(l)}}(z^2-1)^l\right\} = 0 \qquad (8\text{-}5\text{-}11)$$

これは $(8-5-10)$ より満たされる。
以上よりルジャンドル多項式 $P_l(z)$ は、ルジャンドルの微分方程式 (8.49) を満たす。
また、
$P_0(z) = \frac{1}{2}$
$P_1(z) = \frac{1}{2}\frac{d}{dz}(z^2-1) = z$
$P_3(z) = \frac{1}{8}\frac{d^2}{dz^2}(z^2-1)^2 = \frac{1}{8}\left\{\frac{d}{dz}4z(z^2-1)\right\} = \frac{1}{2}(z^2-1+2z^2) = \frac{1}{2}(3z^2-1)$

240916J 高城 重宏 (g240916@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (/02/10/16)

問題 8-6. 球ベッセル関数 $j_\ell(x), n_\ell(x)$ の $\ell = 0,1,2$ の関数形を (8.57) より求めよ。

答: (8.57) より、

$$j_\ell(x) = (-x)^\ell\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^\ell\frac{\sin x}{x} \qquad (8\text{-}6\text{-}1)$$

$$n_\ell(x) = -(-x)^\ell\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^\ell\frac{\cos x}{x} \qquad (8\text{-}6\text{-}2)$$

であるから、これらに $\ell = 0,1,2$ を代入すればよい。

$$j_0(x) = 1\cdot 1\cdot\frac{\sin x}{x} = \frac{\sin x}{x} \qquad (8\text{-}6\text{-}3)$$

$$\begin{aligned}j_1(x) &= (-x)^1\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^1\frac{\sin x}{x}\\ &= (-x)\cdot\frac{1}{x}\cdot\frac{x\cos x-\sin x}{x^2}\\ &= \frac{\sin x - x\cos x}{x^2} \qquad (8\text{-}6\text{-}4)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
j_2(x) &= (-x)^2\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^2\frac{\sin x}{x} \\
&= x^2\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)\frac{x\cos x-\sin x}{x^3} \\
&= -x^2\cdot\frac{1}{x}\cdot\frac{x^3(\cos x - x\sin x-\cos x)-3x^2(x\cos x-\sin x)}{x^6} \\
&= \frac{-x^4\sin x-3x^3\cos x+3x^2\sin x}{x^5} \\
&= -\frac{\left(x^2-3\right)\sin x+3x\cos x}{x^3} \qquad (8\text{-}6\text{-}5)
\end{aligned}$$

$$n_0(x) = -1\cdot 1\cdot\frac{\cos x}{x} = -\frac{\cos x}{x} \qquad (8\text{-}6\text{-}6)$$

$$\begin{aligned}
n_1(x) &= -(-x)^1\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^1\frac{\cos x}{x} \\
&= x\cdot\frac{1}{x}\frac{-x\sin x-\cos x}{x^2} \\
&= -\frac{\cos x+x\sin x}{x^2} \qquad (8\text{-}6\text{-}7)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
n_2(x) &= -(-x)^2\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^2\frac{\cos x}{x} \\
&= -x^2\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)\frac{-(x\sin x+\cos x)}{x^3} \\
&= x^2\cdot\frac{1}{x}\cdot\frac{x^3(-\sin x+\sin x+x\cos x)-3x^2(\cos x+x\sin x)}{x^6} \\
&= \frac{x^4\cos x-3x^2\cos x-3x^3\sin x}{x^5} \\
&= \frac{\left(x^2-3\right)\cos x-3x\sin x}{x^3} \qquad (8\text{-}6\text{-}8)
\end{aligned}$$

g140826 水野 洋輔 (g140826@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (01/12/25)

問題 8-7. 3 次元で球殻のポテンシャル $V(r)$, $V(r) = \begin{cases} -V_0(a<r<b) \\ \infty(\text{その他の場合}) \end{cases}$ の場合の固有値を求める式を導出せよ (実際に固有値を求める必要はない）。

答: (8.42) 式 $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$ を用いる。問題文の条件から $a<r<b$ の場合のみを考えればよい。この区間で、波動関数を変数分離形 $\Psi = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$(8.43) とおき、シュレディンガー方程式を立て両辺を $R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ で割ると、

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\Bigg[\frac{R''(r)}{R(r)}+\frac{2}{r}\frac{R'(r)}{R(r)}&+\frac{1}{r^2\sin\theta\Theta(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\Theta(\theta) \\
&+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\Phi''(\varphi)}{\Phi(\varphi)}\Bigg]-V_0-E=0 \qquad (8\text{-}7\text{-}1)
\end{aligned}$$

が得られる。r,θ を固定し、独立に φ を変化させた時、等号が成り立つには $\frac{\Phi''(\varphi)}{\Phi(\varphi)}$ が定数でなければならず、これを

$$\frac{\Phi''(\varphi)}{\Phi(\varphi)} = -m^2 \qquad (8\text{-}7\text{-}2)$$

と表す (m は定数)。(8-7-2) の解は、$\Phi(\varphi) = C_1 e^{im\varphi} + C_2 e^{-im\varphi}$($C_1$,$C_2$ は任意定数) と表されるので、波動関数の一価性により m は整数となる。次に r を固定し θ を独立に変化させると、等号が成り立つには θ に依存する部分が定数でなければならず、これを

$$\frac{1}{\sin\theta\Theta(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\Theta(\theta) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} = -l(l+1) \tag{8-7-3}$$

と表す (l は定数)。(8-7-3) を用いると、(8-7-1) は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{R''(r)}{R(r)} + \frac{2}{r}\frac{R'(r)}{R(r)} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) - V_0 = E \tag{8-7-4}$$

と表される。ここで整数 m につき (8-7-3) で $z = \cos\theta$ とおくと、この式はルジャンドルの陪微分方程式

$$\frac{d}{dz}\left[(1-z^2)\frac{d\Theta}{dz}\right] + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-z^2}\right]\Theta = 0 \tag{8-7-5}$$

となる。

$$\begin{aligned} Q_l(z) &= \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dz^l}\left[(z^2-1)^l \log\frac{z+1}{z-1}\right] - \frac{1}{2}P_l(z)\log\frac{z+1}{z-1} \\ P_l(z) &= \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l \end{aligned} \tag{8-7-6}$$

として、上の微分方程式は独立解

$$\begin{aligned} P_{lm}(z) &= (1-z^2)^{m/2}\frac{d^m}{dz^m}P_l(z) \\ Q_{lm}(z) &= (1-z^2)^{m/2}\frac{d^m}{dz^m}Q_l(z) \end{aligned} \tag{8-7-7}$$

を持つ。$|z| = |\cos\theta| \leq 1$ の範囲で発散する $Q_{lm}(z)$ の係数は 0 になるので、$P_{lm}(z)$ が $\Theta(\theta)$ の一般解になり、整数 l に対して $l(l+1)$ が (8-7-5) の固有値になる。この固有値に対して (8-7-4) を解く。

$$k = \sqrt{\frac{2m(V_0+E)}{\hbar^2}} \tag{8-7-8}$$

とおくと、(8-7-4) は

$$R''(r) + \frac{2}{r}R'(r) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R(r) = 0 \tag{8-7-9}$$

と表され、球ベッセル関数

$$\begin{aligned} j_l(x) &= (-x)^l\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l\frac{\sin x}{x} \\ n_l(x) &= -(-x)^l\left(\frac{1}{x}\frac{d}{dx}\right)^l\frac{\cos x}{x} \end{aligned} \tag{8-7-10}$$

を解に持つ。従って、解は $R(r) = C_3 j_l(kr) + C_4 n_l(kr)$ の形で表される (C_3,C_4 は任意定数)。今、境界条件 $R(a) = R(b) = 0$ より C_3,C_4 に対する連立方程式

$$\begin{pmatrix} j_l(ka) & n_l(ka) \\ j_l(kb) & n_l(kb) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_3 \\ C_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{8-7-11}$$

が得られる。

ここで C_3,C_4 が共に 0 になる以外の解が存在するので、

$$\begin{vmatrix} j_l(ka) & n_l(ka) \\ j_l(kb) & n_l(kb) \end{vmatrix} = 0 \tag{8-7-12}$$

となり、これを満たす k を (8-7-8) 式より得られる式 $E = \dfrac{k^2\hbar^2}{2m} - V_0$ に代入することで許される E の値が求まる。

250237G　平野雅規 (g250237@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (2002/12/5)

問題 9-1. ℓ=0,1,2 の $Y_{\ell m}$ を求めよ。

答: m の範囲は $m = 0,\pm1,\cdot\cdot\cdot,\pm\,\ell$ であるので、 ℓ=0,1,2 のときの (ℓ, m) の組み合わせは (0,0),(1,-1),(1,0),(1,1),(2,-2),(2,-1),(2,0),(2,1),(2,2) である。（９．２）の式より

$$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-|m|)!}{4\pi(\ell+|m|)!}} P_{\ell|m|}(\cos\theta)e^{im\varphi} \tag{9-1-1}$$

であり、（８．４８）の式より

$$P_{\ell m}(z) = (1-z^2)^{m/2}\frac{d^m}{dz^m}P_\ell(z) \tag{9-1-2}$$

であり、（８．５０）の式より

$$P_\ell(z) = \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{dz^\ell}(z^2-1)^\ell \tag{9-1-3}$$

である。よって

$$\begin{aligned} Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = &\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}}(1-\cos^2\theta)^{|m|/2} \\ &\times\frac{d^{|m|}}{d(\cos\theta)^{|m|}}\frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{d^\ell}{d(\cos\theta)^\ell}(\cos\theta-1)^\ell \end{aligned} \tag{9-1-4}$$

となる。これに上記の (ℓ, m) を代入すると、

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \sqrt{\frac{1}{4\pi}},\ Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi} \\ Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\ Y_{11} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi} \\ Y_{2-2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{-2i\varphi},\ Y_{2-1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{-i\varphi} \\ Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1),\ Y_{21} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{-i\varphi} \\ Y_{22} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{2i\varphi} \end{aligned} \tag{9-1-5}$$

となる。

g140828 武川　純 (g140828@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (01/12/25)

問題 9-2. 1 で求めた Y_{lm} は複素数である。ここで $Y_{lm} \pm Y_{l-m}$ 型の関数を考えれば実数の関数になることを示せ。規格直交化するように係数も定めよ。

答: (9.3) 式より、

$$\int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi Y^*_{lm} Y_{l'm'} = \delta_{l'l}\delta_{m'm} \tag{9-2-1}$$

だから、 $Y_{lm} \pm Y_{l-m}$ を規格直交化する為に場合に応じて、 $\frac{1}{\sqrt{2}}$(or $\frac{1}{\sqrt{2}i}$) 倍する。また、 (8.40) 式の極座標表示

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ z = r\cos\theta \end{cases}$$

を用いる。$m \neq 0$ の時、問題 (9.1) から

$$Y_{11} + Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi} + \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi} = 2\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\cos\varphi = \sqrt{\frac{3}{2\pi}}\frac{x}{r}, \tag{9-2-2}$$

これを規格化して $\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x}{r}$。

$$Y_{11} - Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi} - \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi} = i\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta\sin\varphi = i\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\frac{y}{r}, \tag{9-2-3}$$

これを規格化して $\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{y}{r}$。

$$\begin{aligned} Y_{21} + Y_{2-1} &= \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{i\varphi} + \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{-i\varphi} \\ &= 2\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\cos\varphi \\ &= \sqrt{\frac{15}{2\pi}}\frac{xz}{r^2}, \end{aligned} \tag{9-2-4}$$

これを規格化して $\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\frac{xz}{r^2}$。

$$\begin{aligned} Y_{21} - Y_{2-1} &= \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{i\varphi} - \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{-i\varphi} \\ &= 2i\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\sin\varphi \\ &= i\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\frac{yz}{r^2}, \end{aligned} \tag{9-2-5}$$

これを規格化して $\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\frac{yz}{r^2}$。

$$\begin{aligned} Y_{22} + Y_{2-2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\left(\sin^2\theta e^{2i\varphi} + \sin^2\theta e^{-2i\varphi}\right) \\ &= \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin^2\theta(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi) \\ &= \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\left(\left(\frac{x}{r}\right)^2 - \left(\frac{y}{r}\right)^2\right), \end{aligned} \tag{9-2-6}$$

これを規格化して $\sqrt{\dfrac{15}{16\pi}}\dfrac{x^2-y^2}{r^2}$。

$$Y_{22}-Y_{2-2}=2i\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\sin 2\varphi=2i\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin^2\theta\sin\varphi\cos\varphi=i\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\frac{xy}{r^2}, \tag{9-2-7}$$

これを規格化して $\sqrt{\dfrac{15}{4\pi}}\dfrac{xy}{r^2}$ 。また、

$$Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}, Y_{20}=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1)=\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\frac{3z^2-r^2}{2r^2} \tag{9-2-8}$$

より、 $Y_{lm}\pm Y_{l-m}$ 型の関数を考えれば、実数の関数になることが示された。

250237G 平野雅規 (g250237@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (2002/11/26)

問題 9-3. ベータ関数 $B(n,m)$, ガンマ関数 $\Gamma(z)$ は、

$$B(n,m)=\int_0^1 t^{n-1}(1-t)^{m-1}\,dt$$

$$\Gamma(z)=\int_0^\infty e^{-t}t^{z-1}dt$$

で表される。以下の公式を示せ。

$$(a)\qquad \Gamma(\ell+1)=\ell!$$

$$(b)\quad B(n,m)=\frac{\Gamma(n)\Gamma(m)}{\Gamma(n+m)}$$

答: (a) まず、部分積分を用いて、

$$\begin{aligned}
\Gamma(\ell+1) &= \int_0^\infty e^{-t}t^\ell dt \\
&= \left[-e^{-t}t^\ell\right]_0^\infty+\int_0^\infty e^{-t}\ell t^{\ell-1}dt \\
&= \lim_{M\to\infty}\left(-\frac{M^\ell}{e^M}\right)+\ell\int_0^\infty e^{-t}t^{\ell-1}dt \\
&= 0+\ell\Gamma(\ell) \\
&= \ell\Gamma(\ell)
\end{aligned} \tag{9-3-1}$$

を得る。また、

$$\begin{aligned}
\Gamma(1) &= \int_0^\infty e^{-t}dt \\
&= \left[-e^{-t}\right]_0^\infty \\
&= 0+1 \\
&= 1
\end{aligned} \tag{9-3-2}$$

であり、 (9-3-1) を繰り返し用いると、

$$\begin{aligned}
\Gamma(\ell+1) &= \ell\Gamma(\ell) \\
&= \ell(\ell-1)\Gamma(\ell-1) \\
&= \ell!\Gamma(1) \\
&= \ell!
\end{aligned} \tag{9-3-3}$$

となる。

(b) ガンマ関数の積は、

$$
\begin{aligned}
&\Gamma(n)\Gamma(m) \\
=\ & \int_0^\infty e^{-t}t^{n-1}dt\int_0^\infty e^{-s}s^{m-1}ds \\
=\ & \int_0^\infty\int_0^\infty t^{n-1}s^{m-1}e^{-(t+s)}dtds \\
=\ & \int_0^\infty\int_0^\infty \left(\frac{t}{t+s}\right)^{n-1}\left(\frac{s}{t+s}\right)^{m-1}(t+s)^{n+m-2}e^{-(t+s)}dtds
\end{aligned}
\tag{9-3-4}
$$

である。ここで、

$$
\begin{aligned}
u &= \frac{t}{t+s} \\
v &= t+s
\end{aligned}
\tag{9-3-5}
$$

と変数変換すると、

$$
t = u(t+s) = uv \tag{9-3-6}
$$

$$
s = v - t = v - uv = v(1-u) \tag{9-3-7}
$$

であり、変換のヤコビアンは、

$$
\begin{vmatrix} \frac{\partial t}{\partial u} & \frac{\partial t}{\partial v} \\ \frac{\partial s}{\partial u} & \frac{\partial s}{\partial v} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} v & u \\ -v & 1-u \end{vmatrix} = v(1-u) - (-uv) = v \tag{9-3-8}
$$

となる。積分範囲は、

$$
0 \le u \le 1、0 \le v < \infty \tag{9-3-9}
$$

であるから、結局、

$$
\begin{aligned}
\Gamma(n)\Gamma(m) &= \int_0^1\int_0^\infty u^{n-1}(1-u)^{m-1}v^{n+m-2}e^{-v}vdudv \\
&= \int_0^1 u^{n-1}(1-u)^{m-1}du\int_0^\infty v^{n+m-1}e^{-v}dv \\
&= B(n,m)\Gamma(n+m)
\end{aligned}
\tag{9-3-10}
$$

が得られる。よって、

$$
B(n,m) = \frac{\Gamma(n)\Gamma(m)}{\Gamma(n+m)} \tag{9-3-11}
$$

g140826 水野 洋輔 (g140826@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (01/12/25)

問題 9-4. ラゲールの陪多項式 $L_1^1, L_2^1, \cdots$ の形を求め、水素原子の $1s, 2s, 2p$ 軌道の動径方向の関数形を示せ。

答: 水素原子の動径方向の関数 $R_{nl}(r)$は ラゲールの陪多項式

$$
L_p^q(x) = \frac{d^q}{dx^q}\left\{e^x\frac{d^p}{dx^p}\left(e^{-x}x^p\right)\right\}
$$

と量子数 n, l、ボーア半径a_0 を用いて

$$R_{nl}(r) = -\sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n\{(n+l)!\}^3}} e^{-\rho_n/2}\rho_n^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho_n)$$

と表される。まず、 L_1^1, L_2^1, L_3^3 を求めると,

$$\begin{aligned} L_1^1(r) &= \frac{d}{dr}\left\{e^r \frac{d}{dr}\left(e^{-r}r\right)\right\} \\ &= \frac{d}{dr}\left\{e^r\left(-e^{-r}r + e^{-r}\right)\right\} \\ &= \frac{d}{dr}\left(-r+1\right) \\ &= -1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} L_2^1(r) &= \frac{d}{dr}\left\{e^r \frac{d^2}{dr^2}\left(e^{-r}r^2\right)\right\} \\ &= \frac{d}{dr}\left\{e^r\left(e^{-r}r^2 - 4e^{-r}r + 2e^{-r}\right)\right\} \\ &= \frac{d}{dr}\left(r^2 - 4r + 2\right) \\ &= 2r - 4 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} L_3^3 &= \frac{d^3}{dr^3}\left\{e^r \frac{d^3}{dr^3}\left(e^{-r}r^3\right)\right\} \\ &= \frac{d^3}{dr^3}\left\{e^r\left(-e^{-r}r^3 + 9e^{-r}r^2 - 18e^{-r}r + 6\right)\right\} \\ &= \frac{d^3}{dr^3}\left(-r^3 + 9r^2 - 18r + 6\right) \\ &= -6 \end{aligned}$$

となる。 $1s, 2s, 2p$ 軌道の動径方向の関数はそれぞれ R_{10}, R_{20}, R_{21} であり以下計算すると,

$$\begin{aligned} R_{10} &= -2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0} L_1^1\left(\frac{2r}{a_0}\right) \\ &= 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} R_{20} &= -\frac{1}{4\sqrt{2}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/2a_0} L_2^1\left(\frac{r}{a_0}\right) \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} R_{21} &= -\frac{1}{12\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0} L_3^3\left(\frac{r}{a_0}\right) \\ &= \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0} \end{aligned}$$

となる。

g240897 及川一誠 (g240897@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (2002/10/31)

問題 9-5. 水素原子の 2p 軌道は、動径方向に節がないが、 1s 軌道との直交性が保たれていることを説明せよ。

答:

問題 (9-1) より、

$$R_{21}\ (r)\ = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_o}$$

$$R_{10}\ (r) = 2\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}e^{-r/a_0}$$

であったから、 2p 軌道, 1s 軌道は動径方向に節が無い。従って、 r 方向の積分を考えても直交しないが、 2p 軌道と 1s 軌道においては、方位量子数 l が異なる値をとるので、角度部分の積分に対しての規格直交化条件

$$\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi Y_{lm}^{*}Y_{l'm'} = \delta_{l'l}\delta_{m'm} \tag{9-5-1}$$

を用いると、 i=1,0,-1 として、

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{100}^{*}(x,y,z)\psi_{21i}(x,y,z)dxdydz\\
=\ &\int_0^{\infty}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\psi_{100}^{*}(r,\theta,\varphi)\psi_{21i}(r,\theta,\varphi)r^2\sin\theta d\theta d\varphi dr\\
=\ &\int_0^{\infty}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}(R_{10}(r)Y_{00}(\theta,\varphi))^{*}R_{21}(r)Y_{1i}(\theta,\varphi)r^2\sin\theta d\theta d\varphi dr\\
=\ &\int_0^{\infty}R_{10}^{*}(r)R_{21}(r)r^2dr\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}Y_{00}^{*}(\theta,\varphi)Y_{1i}(\theta,\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi\\
=\ &0
\end{aligned} \tag{9-5-2}$$

となり、 1s 軌道と 2p 軌道の直交性が角度方向の積分によって保たれることが分かる。

250237G　平野雅規 (g250237@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (2002/11/26)

問題 9-6. n, ℓ の量子数で表される動径分布関数は $n-\ell-1$ の節があることを確かめよ。

答:

水素原子の場合に成り立つことを示す。（一般の原子でも同様のことが期待される。）まず (9.23) より、動径方向の節に関わるのが Laguerre の陪多項式であることがわかる。つまり Laguerre の陪多項式が $(0,\infty)$ の範囲に $n-\ell-1$ 個の零点を持つことを示せばよい。

$$P_n(x) = e^{-x}x^n \tag{9-6-1}$$

とおく。 $k = 0,1,2,...,n-1$ に対して

$$P_n^{(k)}(0) = P_n^{(k)}(\infty) = 0 \tag{9-6-2}$$

であり、 $P_n(x) = e^{-x}x^n$ は $0 < x$ で連続であるから、 Rolle の定理から $(0,\infty)$ の範囲に $P_n'(x_1^{(1)}) = 0$ なる $x_1^{(1)}$ が存在する。 $(9-6-2)$ と、 Rolle の定理から、 $P_n^{(2)}(x) = 0$ なる x が $(0,x_1^{(1)})$,$(x_1^{(1)},\infty)$ の範囲に少なくとも各々一つずつ存在し、これを $x_1^{(2)}$,$x_2^{(2)}$ とする。 $(9-6-2)$ から、また Rolle の定理から、 $P_n^{(3)}(x) = 0$ なる x が $(0,x_1^{(2)})$,$(x_1^{(2)},x_2^{(2)})$,$(x_2^{(2)},\infty)$ の範囲に少なくとも各々一つずつ存在する。これを以下帰納的に利用すると、 $P_n^{(n)}(x) = 0$ なる x が $(0,\infty)$ の範囲に少なくとも n

個存在する。ここで $P_n(x)=0$ はせいぜい n 個の実数解しかもたないから、この解は $(0,\infty)$ の範囲に n 個存在する。ここで、

$$L_p(x)=\frac{e^x}{p!}P_p(x) \tag{9-6-3}$$

であるが、 $\frac{e^x}{p!}$ の部分は $L_p(x)$ の零点を与えないので、零点の数は $(0,\infty)$ の範囲に p 個あるとしてよい。この p 個の零点を基盤として、また上と同様にして Rolle の定理を帰納的に用いれば、 $\frac{d^q}{dx^q}L_p(x)=0$ の解は少なくとも $p-q$ 個となる。しかし $\frac{d^q}{dx^q}L_p(x)=0$ は高々 $p-q$ 個の実数解しか持たないから、 $\frac{d^q}{dx^q}L_p(x)=L_p^q(x)$ の零点の数が $(0,\infty)$ の範囲に $p-q$ 個あることが示された。以上より、 n,ℓ の量子数で表される動径分布関数は $p-q$ 個、 (9.27) と (9.17) を比べて $p=n+\ell, q=2\ell+1$ であるから、すなわち $n-\ell-1$ 個であることが示された。
注； Rolle の定理とは、平均値の定理で考える両端点での関数値が等しい場合に帰着させたものである。

g240916 高城重宏 (g240916@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (/02/12/16)

問題 9-7. 次の原子の基底状態の電子配置を表 9.3 に従って $(1\mathrm{s})^2(2\mathrm{s})^2\ldots$ のように表せ。

(a)Si　(b)Au　(c)Er　(d)Ga　(e)As

答: 18 族元素 (不活性ガス)X の電子配置を [X] で表す。表 9.3 を参考に、どの軌道にいくつの電子が入っているかを調べれば良い。なお、 (b)Au は例外である。答えは、

$$(a)\quad \mathrm{Si}\quad : \quad [\mathrm{Ne}](3s)^2(3p)^2 \tag{9-7-1}$$
$$(b)\quad \mathrm{Au}\quad : \quad [\mathrm{Xe}](6s)(4f)^{14}(5d)^{10} \tag{9-7-2}$$
$$(c)\quad \mathrm{Er}\quad : \quad [\mathrm{Xe}](6s)^2(4f)^{12} \tag{9-7-3}$$
$$(d)\quad \mathrm{Ga}\quad : \quad [\mathrm{Ar}](4s)^2(3d)^{10}(4p) \tag{9-7-4}$$
$$(e)\quad \mathrm{As}\quad : \quad [\mathrm{Ar}](4s)^2(3d)^{10}(4p)^3 \tag{9-7-5}$$

g140826 水野 洋輔 (g140826@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (01/12/25)

問題 9-8. 原子核の電荷が Ze のクーロンポテンシャル中の 1s 軌道エネルギーを、水素原子の結果を用いて表せ。 Z がいくつのとき 1s のエネルギーが電子の静止エネルギー mc^2 になるか？

答: 1s 軌道とは、 $n=1,\ell=0$ のことである。（9.21）の式

$$E_n=-\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \tag{9-8-1}$$

において ee を Zee に置き換え、 $n=1$ としたものが求める答えである。ゆえに、

$$E_{1s}=\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{me^4}{2\hbar^2}Z^2 \tag{9-8-2}$$

が答えである。又、

$$E_{1s}=\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{me^4}{2\hbar^2}Z^2=mc^2 \tag{9-8-3}$$

の方程式に $\pi = 3.14, \varepsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} F \cdot m^{-1}, e = 1.602 \times 10^{-19} C, \hbar = 1.055 \times 10^{-34} J \cdot s, c = 2.998 \times 10^8 m \cdot s^{-1}$ を代入して、

$$\begin{aligned}&\left(\frac{1}{4 \times 3.14 \times 8.85 \times 10^{-12}}\right)^2 \frac{m(1.602 \times 10^{-19})^4}{2 \times (1.055 \times 10^{-34})^2} Z^2 \\ = \quad & m(2.998 \times 10^8)^2 \end{aligned} \tag{9-8-4}$$

これを解き、

$$Z^2 \approx 37533 \tag{9-8-5}$$

Z は正の整数なので、

$$Z \approx 194 \tag{9-8-6}$$

となる。

注：実際には、電子の運動エネルギーが大きくなると電子の質量が相対論的補正を受けて大きくなるので Z の値がもっと小さな値（~ 130）で E_{1s} に達する。

g140828 武川　純 (g140828@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (01/12/25)

問題 9-9. 原子から電子を取った陽イオンや、電子を加えた負イオンの電子状態は、中性の原子の電子状態に比べてエネルギーの大きさはどう変化するであろうか？定性的に説明せよ。

答: 電子のエネルギーは、一電子近似を用いて

$$E = -\frac{{z^*}^2 m_e e^4}{8{\epsilon_0}^2 h^2 n^2} \tag{9-9-1}$$

と表される (z^* は、実験的に E を求め、それを用いて上式より求めた電荷、すなわち有効核電荷)。原子から電子を取った陽イオンにおいては、中性原子よりも電子間の反発が小さくなる。更に、他の電子が核を取り囲んでいるためにある電子の感じる核電荷が減少する「遮蔽効果」が小さくなる (有効核電荷の値が大きくなる）ので、電子のエネルギーは小さくなる。逆に、負イオンにおいては、中性原子よりも電子間の反発が大きくなり、更に「遮蔽効果」が大きくなる (有効核電荷の値が小さくなる) ので、電子のエネルギーは大きくなる。

250237G　平野雅規 (g250237@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (2002/11/27)

問題 え. :

答: 炭

10-1 (答) 作成 (炭素原子 2 個のクラスター C_2 の $2s$,$2p_x$,$2p_y$,$2p_z$, でつくる重なり行列の一番目と二番目の炭素原子の間の小行列成分 s_{12} を表せ。) 素原子の電子配置は $(1s)^2(2s)^2(2p)^2$ だから C_2 の総電子数は 12 個である。一原子の軌道は $1s$,$2s$ が各一個,$2p$ が三個（$2p_x, 2p_y, 2p_z$）である。よって、二原子で計 10 軌道である。C_2 の 1s 軌道に電子は 4 個入るから $12 - 4 = 8$Q 個の電子が 2s,2p 軌道に入るので、 8×8 の行列で S_{ij} は表される。同じ原子での積分は 4×4 の小行列 s_{ii} で表される。非対角項は原子の軌道が直交しているので 0, 対角項は例えば

$$2s{\times}2s =< \phi|\phi >= 1 \tag{え -1}$$

のようになるから

$$s_{11} = s_{22} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{え -2}$$

となる。 C_1 と C_2 との積分は S_{ij} の全体が 8×8 のエルミート行列であることを利用して小行列で $s_{12} = ^t s^*_{21}$ の関係がある。原子軌道関数の対称性を考慮して、原子波動関数を含む積分で 0 にならないのは

1)$2s$ と $2s$, 2)$2s$ と $2p_x$, 3)$2p_x$ と $2s$, 4)$2p_x$ と $2p_x$, 5)$2p_y$ と $2p_y$, 6)$2p_z$ と $2p_z$/

の積分である。パラメータＳの正の定義に注意して

1) は S_{ss} で小行列の (1,1) 成分

2) は $-S_{sp}$ で小行列の (1,2) 成分

3) は S_{sp} で小行列の (2,1) 成分

4) は $-S_{\sigma}$ で小行列の (2,2) 成分

5) は S_{π} で小行列の (3,3) 成分

6) は S_{π} で小行列の (4,4) 成分

となるから

$$s_{12} = ^t s^*_{21} = \begin{pmatrix} S_{ss} & -S_{sp} & 0 & 0 \\ S_{sp} & -S_{\sigma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S_{\pi} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{\pi} \end{pmatrix} \qquad (え\text{-}3)$$

となる。

参考までに

$$S_{ij}$$

は

$$S_{ij} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{pmatrix} \qquad (え\text{-}4)$$

となる。

250517D 薮本　大紀 (g250517@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) (作成 02/1/4)

問題 10-4. 正 6 角形の炭素クラスターで、原子 2 の σ 軌道 $\varphi_i(i = 1, 2, 3)$ における混成軌道の $2s, 2p_x, 2p_y$ 原子軌道の係数を求めよ。

答: 教科書 p.131 の図 10.5 において考える。 sp^2 混成軌道においては、3 つの σ 結合のための軌道ができ、σ 結合のエネルギーが最も得られるように、軌道は原子が伸びる方向に作られるので、原子 2 では 1 番目と 3 番目の方向に伸びる軌道が作られる。従って、原子の軌道が規格直交化する条件を考慮に入れ、原子 2 の sp^2 軌道は、次の波動関数の形で表される。

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= C_1|2s> - \sqrt{1 - {C_1}^2}|2p_x> \\ \varphi_2 &= C_2|2s> + \sqrt{1 - {C_2}^2}\left(\frac{1}{2}|2p_x> + \frac{\sqrt{3}}{2}|2p_y>\right) \\ \varphi_3 &= C_3|2s> + C_4|2p_x> + C_5|2p_y> \end{aligned} \qquad (10\text{-}4\text{-}1)$$

ここで、波動関数の規格直交化条件 $< \varphi_i|\varphi_j >= \delta_{ij}$ とユニタリーな関係 $|\varphi_1|^2 + |\varphi_2|^2 + |\varphi_3|^2 = ||2s>|^2 + ||2p_x>|^2 + ||2p_y>|^2$ より、

$$C_1C_2 - \frac{1}{2}\sqrt{1-C_1^2}\sqrt{1-C_2^2} = 0$$
$$C_1C_3 - \sqrt{1-C_1^2}C_4 = 0$$
$$C_2C_3 + \frac{1}{2}C_4\sqrt{1-C_2^2} + \frac{\sqrt{3}}{2}\sqrt{1-C_2^2}C_5 = 0$$
$$C_1^2 + C_2^2 + C_3^2 = 1$$
$$(1-C_1^2) + \frac{(1-C_2^2)}{4} + C_4^2 = 1$$
$$\frac{3(1-C_2^2)}{4} + C_5^2 = 1$$

これを解くと $C_1 = C_2 = C_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}, C_4 = \frac{1}{\sqrt{6}}, C_5 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$ となる。

250237G　平野雅規 (g250237@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (2002/12/17)

問題 250517D 薮本　大紀. g250517@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp

答: 02/1/4

10-5 ($(1,1,1)$ にある H を H_a,$(-1,-1,1)$ にある H を H_b,$(-1,1,-1)$ にある H を H_c,$(1,-1,-1)$ にある H を H_d とおく。$C\vec{H}_a = (1,1,1)$,$C\vec{H}_b = (-1,-1,1)$,
$C\vec{H}_c = (-1,1,-1)$,$C\vec{H}_d = (1,-1,-1)$ だから

$$\phi_1 = C_1|2s> + C_2(|p_x> + |p_y> + |p_z>) \qquad (250517D 薮本　大紀 -1)$$
$$\phi_2 = C_3|2s> + C_4(-|p_x> - |p_y> + |p_z>) \qquad (250517D 薮本　大紀 -2)$$
$$\phi_3 = C_5|2s> + C_6(-|p_x> + |p_y> - |p_z>) \qquad (250517D 薮本　大紀 -3)$$
$$\phi_4 = C_7|2s> + C_8(|p_x> - |p_y> - |p_z>) \qquad (250517D 薮本　大紀 -4)$$

直交規格化条件から

$$C_1^2 + 3C_2^2 = 1 \qquad (250517D 薮本　大紀 -5)$$
$$C_3^2 + 3C_4^2 = 1 \qquad (250517D 薮本　大紀 -6)$$
$$C_5^2 + 3C_6^2 = 1 \qquad (250517D 薮本　大紀 -7)$$
$$C_1C_3 + C_2C_4(-1-1+1) = 0 \qquad (250517D 薮本　大紀 -8)$$
$$C_1C_5 + C_2C_6(-1+1-1) = 0 \qquad (250517D 薮本　大紀 -9)$$
$$C_1C_7 + C_2C_8(1-1-1) = 0 \qquad (250517D 薮本　大紀 -10)$$
$$C_3C_5 + C_4C_6(1-1-1) = 0 \qquad (250517D 薮本　大紀 -11)$$
$$C_3C_7 + C_4C_8(-1+1-1) = 0 \qquad (250517D 薮本　大紀 -12)$$
$$C_5C_7 + C_6C_8(-1-1+1) = 0 \qquad (250517D 薮本　大紀 -13)$$

式の形から

$$C_1 = C_2 = C_3 = C_4 = C_5 = C_6 = C_7 = C_8 \qquad (250517D 薮本　大紀 -14)$$

を予想して

$$C_1 = C_2 = C_3 = C_4 = C_5 = C_6 = C_7 = C_8 = \frac{1}{2} \qquad (250517D 薮本　大紀 -15)$$

を得る。この値は上の式を満たすので予想は正しかったのでこれが求める原子軌道の係数になる.) 作成 (メタン CH_4 の分子軌道では、 H の 1s 軌道と C の $2s$,$2p_x$,$2p_y$,$2p_z$ 軌道が混じる。炭素の混成軌道は sp^3 混成軌道と呼ばれるが原子軌道への係数を求めよ。但し、 C は原点にあり、 4 つの H は、 $(1,1,1)$,$(-1,-1,1)$,$(-1,1,-1)$,
$(1,-1,-1)$ の方向にあるとせよ。)

問題 11-1. 2 次元の正方格子 (正方形を単位胞とする格子) の基本格子ベクトルを、$\vec{a}_1 = (a, 0), \vec{a}_2 = (0, a)$ とおくことができる。このとき逆格子ベクトル $\vec{b}_1, \vec{b}_2$ を求めよ。ブリルアン領域を示せ。また、エネルギーバンドを表示するとすれば、どの対称線にそって描けば良いか。

答: 逆格子ベクトル $\vec{b}_1, \vec{b}_2$ を

$$\vec{b}_1 = \begin{pmatrix} b_{1x} \\ b_{1y} \end{pmatrix} \tag{11-1-1}$$

$$\vec{b}_2 = \begin{pmatrix} b_{2x} \\ b_{2y} \end{pmatrix} \tag{11-1-2}$$

とおく。 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{b}_1, \vec{b}_2$ を (11.7) 式

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij} \tag{11-1-3}$$

に代入すると、

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{b}_1 = ab_{1x} = 2\pi \tag{11-1-4}$$

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{b}_2 = ab_{2x} = 0 \tag{11-1-5}$$

$$\vec{a}_2 \cdot \vec{b}_1 = ab_{1y} = 0 \tag{11-1-6}$$

$$\vec{a}_2 \cdot \vec{b}_2 = ab_{2y} = 2\pi \tag{11-1-7}$$

となり、これを解いて、

$$b_{1x} = \frac{2\pi}{a} \tag{11-1-8}$$

$$b_{1y} = 0 \tag{11-1-9}$$

$$b_{2x} = 0 \tag{11-1-10}$$

$$b_{2y} = \frac{2\pi}{a} \tag{11-1-11}$$

が得られる。故に逆格子ベクトル $\vec{b}_1, \vec{b}_2$ は、

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{11-1-12}$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{11-1-13}$$

となる。ブリルアン領域は、 $\vec{b}_1, \vec{b}_2$ で張られる正方形である。また、エネルギーバンドを表示するには、その正方形の頂点のひとつを X、中心を Γ、 X を含む辺の中心のひとつを M としたとき、 X $\to$ Γ $\to$M$\to$X の順に描けばよい。

g140826 水野 洋輔 (g140826@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (01/12/25)

問題 11-2. 正三角形を平面に敷き詰めた格子を三角格子という。一辺の長さを a とするとき、基本格子ベクトルを求めよ。ただし、辺のひとつは x 軸の方向を向くものとする。また、逆格子ベクトル $\vec{b}_1, \vec{b}_2$ を求めよ。ブリルアン領域を示せ。また、エネルギーバンドを表示するとすれば、どの対称線にそって描けば良いか。

答: 三角格子の基本格子ベクトルを $\vec{a}_1, \vec{a}_2$ とすると、

$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix} \tag{11-2-1}$$

$$\vec{a}_2 = a \begin{pmatrix} \cos 60^\circ \\ \sin 60^\circ \end{pmatrix} = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} \tag{11-2-2}$$

である。ここで、逆格子ベクトル $\vec{b}_1, \vec{b}_2$ を

$$\vec{b}_1 = \begin{pmatrix} b_{1x} \\ b_{1y} \end{pmatrix} \tag{11-2-3}$$

$$\vec{b}_2 = \begin{pmatrix} b_{2x} \\ b_{2y} \end{pmatrix} \tag{11-2-4}$$

とおく。 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{b}_1, \vec{b}_2$ を (11.7) 式

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij} \tag{11-2-5}$$

に代入すると、

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{b}_1 = ab_{1x} = 2\pi \tag{11-2-6}$$

$$\vec{a}_1 \cdot \vec{b}_2 = ab_{2x} = 0 \tag{11-2-7}$$

$$\vec{a}_2 \cdot \vec{b}_1 = \frac{a}{2}\left(b_{1x} + \sqrt{3}b_{1y}\right) = 0 \tag{11-2-8}$$

$$\vec{a}_2 \cdot \vec{b}_2 = \frac{a}{2}\left(b_{2x} + \sqrt{3}b_{2y}\right) = 2\pi \tag{11-2-9}$$

となり、これを解くと、

$$b_{1x} = \frac{2\pi}{a} \tag{11-2-10}$$

$$b_{1y} = -\frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \tag{11-2-11}$$

$$b_{2x} = 0 \tag{11-2-12}$$

$$b_{2y} = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \tag{11-2-13}$$

が得られる。故に、逆格子ベクトル $\vec{b}_1, \vec{b}_2$ は、

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \tag{11-2-14}$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{2}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \tag{11-2-15}$$

となる。ブリルアン領域は、 $\vec{b}_1, \vec{b}_2$ で張られるひし形であるが、もとの三角格子の対称性を考えると、正六角形になる。また、エネルギーバンドを表示するには、その正六角形の頂点のひとつを K、中心を Γ、 K を含む辺の中心のひとつを M としたとき、 K→ Γ →M→K の順に描けばよい。

g140826 水野 洋輔 (g140826@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (01/12/25)

問題 11-4. ある半導体は常温で、 $1\mu m$ 以下の光だと吸収されることがわかっている。この半導体のエネルギーギャップは何 eV か？また、青色の光を発する半導体はエネルギーギャップが何 eV 程度でなければならないか？

答: $1\mu m$ の波長のエネルギーは、

$$E = \frac{hc}{\lambda} \tag{11-4-1}$$

より、 $h=6.626\times10^{-34}J\cdot s, c=2.998\times10^{8}m\cdot s^{-1}, 1eV=1.602\times10^{-19}J$ を用いて

$$E\approx1.239eV \tag{11-4-2}$$

となる。よって、この半導体のエネルギーギャップの大きさは１．２４ V （以下）である。「以下」としたのは、吸収がおきないものもあるからである。

また、青色の光の波長領域は $0.43\mu m\sim0.49\mu m$ であるので

$$E=\frac{hc}{\lambda} \tag{11-4-3}$$

より、 $h=6.626\times10^{-34}J\cdot s, c=2.998\times10^{8}m\cdot s^{-1}, 1eV=1.602\times10^{-19}J$ を用いて E は $2.53eV$〜$2.88eV$。よって、 $2.53eV$〜$2.88eV$ のエネルギーギャップである。

g140828 武川　純 (g140828@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (01/12/25)

問題 11-5. ２次元グラファイトの Γ、K、M 点の k ベクトルの値を座標軸を示して、 k_x, k_y 座標で示せ。また、逆格子ベクトル $\overrightarrow{b_1}$, $\overrightarrow{b_2}$ で表すとどのようにかけるか？

答: 図 11.6 において Γ を原点、M 方向を k_x 軸、k_x 軸に対して垂直上向きに k_y 軸をとる。
a を基本格子ベクトルの長さとすると、（11.16）より

$$\overrightarrow{b_1}=(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a},\frac{2\pi}{a}),\ \overrightarrow{b_2}=(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a},-\frac{2\pi}{a}) \tag{11-5-1}$$

であるので求める座標は

$$\Gamma(0,0),\quad \mathrm{M}(\frac{2\pi}{\sqrt{3}\mathrm{a}},0),\quad \mathrm{K}(\frac{2\pi}{\sqrt{3}\mathrm{a}},\frac{2\pi}{3\mathrm{a}}) \tag{11-5-2}$$

となる。また $\overrightarrow{b_1}$, $\overrightarrow{b_2}$ で表すと

$$\Gamma=0,\quad \mathrm{M}=\frac{1}{2}(\overrightarrow{b_1}+\overrightarrow{b_2}),\quad \mathrm{K}=\frac{2}{3}\overrightarrow{b_1}+\frac{1}{3}\overrightarrow{b_2} \tag{11-5-3}$$

となる。

g140828 武川　純 (g140828@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (01/12/25)

問題 11-6. ２次元グラファイトの π,π^* バンド（11.20）で、重なり積分の値ｓを０とおくとき、Γ、K、M 点でのエネルギーの値を求めよ。

答: ｓ＝０より、（11.20）式は、

$$E=\frac{\varepsilon_{2p}\pm tw(k)}{1} \tag{11-6-1}$$

となる。ここで、

$$w(k)=\sqrt{1+4\cos\frac{\sqrt{3}k_xa}{2}\cos\frac{k_ya}{2}+4\cos^2\frac{k_ya}{2}} \tag{11-6-2}$$

である。よって、

$$E=\varepsilon_{2p}\pm t\sqrt{1+4\cos\frac{\sqrt{3}k_xa}{2}\cos\frac{k_ya}{2}+4\cos^2\frac{k_ya}{2}} \tag{11-6-3}$$

となる。これに、問題 11.5 で解いた $(k_x,\ k_y)$ の値、 $\Gamma(0,0)$, $\mathrm{M}(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a},0)$, $\mathrm{K}(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a},\frac{2\pi}{3a})$ を代入すると、

$$\begin{aligned} E_\Gamma &= \varepsilon_{2p} \pm t\sqrt{1+4\cos 0\cos 0+4\cos^2 0} \\ &= \varepsilon_{2p} \pm 3t \end{aligned} \tag{11-6-4}$$

$$\begin{aligned} E_\mathrm{M} &= \varepsilon_{2p} \pm t\sqrt{1+4\cos \pi\cos 0+4\cos^2 0} \\ &= \varepsilon_{2p} \pm t \end{aligned} \tag{11-6-5}$$

$$\begin{aligned} E_\mathrm{K} &= \varepsilon_{2p} \pm t\sqrt{1+4\cos \pi\cos \frac{\pi}{3}+4\cos^2 \frac{\pi}{3}} \\ &= \varepsilon_{2p} \end{aligned} \tag{11-6-6}$$

以上より答えは、 ε_{2p} をエネルギーの原点において、

$$E_\Gamma = \pm 3t,\ E_\mathrm{M} = \pm t,\ E_\mathrm{K} = 0 \tag{11-6-7}$$

g140828 武川　純 (g140828@mail.ecc.u-tokyo.ac.jp) 作成 (01/12/25)