

量子力学2008：まとめテスト（1）

注：答案用紙4枚、計算用紙1枚。答案用紙1枚目には問題1を、2枚目には問題2を、3枚目には問題3、4枚目には問題4を解答せよ。答案用紙は、必ず4枚とも提出すること（計算用紙は回収しない）。

1

2次元自由電子について、 x, y 方向に距離 L の周期的境界条件を置き ($\phi(x+L, y) = \phi(x, y), \phi(x, y+L) = \phi(x, y)$)、面積 $S \equiv L^2$ に含まれる電子を考える。シュレーディンガー方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \phi = \varepsilon \phi \quad (1)$$

となる。

(a) 解を $\phi(x, y) = X(x)Y(y)$ と変数分離する。 $X(x), Y(y)$ に対する方程式を、それぞれ書け。

(b) エネルギー準位と、対応する波動関数を求めよ。

(c) エネルギーを低い方から、 $E_1, E_2, \dots$ と名付ける。 $E = E_1$ となる状態は、いくつあるか。波動関数の具体的表式と共に答えよ。また、 $E = E_2$ となる状態は、いくつあるか。波動関数の具体的表式と共に答えよ。

(d) $L = 1\text{cm}, L = 10\text{nm}$ の場合について、エネルギー差 $\Delta E \equiv E_2 - E_1$ のだいたいの値を SI 単位と eV 単位で概算せよ。 $m \approx 10^{-30}\text{kg}, \hbar \approx 10^{-34}\text{Js}, 1\text{eV} \approx 2 \times 10^{-19}\text{J}$ 。

2

球面調和関数 $Y_{lm}(\theta, \phi)$ のうち $l = 1$ の関数は、以下で与えられる；

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{+i\phi} \quad (1)$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad (2)$$

$$Y_{1-1} = +\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\phi} \quad (3)$$

ここで、以下の関数を定義する。

$$f \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (-Y_{11} + Y_{1-1}), \quad g \equiv \frac{i}{\sqrt{2}} (Y_{11} + Y_{1-1}) \quad (4)$$

f, g が、 $\hat{l}^2$ の固有関数になっていることを示せ。ただし、 $\hat{l}^2$ の定義は、

$$\hat{l}^2 \equiv -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}. \quad (5)$$

注：実際に $\hat{l}^2$ を作用させて、

$$\hat{l}^2 f = (\text{定数}) f \quad (6)$$

を満たすことを確かめ、上式の「(定数)」を具体的に求める。 g についても、同様。

3

[A] リチウム (Li) の電子配置は、

$$\text{Li} : (1s)^2(2s)^1$$

と書ける。(a) 同様の記法で、N, S, S^{1-} , S^{2-} の電子配置を書け。(b) 安定に存在すると思われるイオンは、 S^{1-} か S^{2-} か。理由と共に書け。

[B] 次の文章にある (1) - (7) に当てはまる語句を、下記の語句欄からそれぞれ選べ。

量子力学に特徴的な量として (1) 定数 $\hbar$ があるが、これは (2) の次元をもつ。波動関数は (3) 方程式を解くことで得られる。水素原子を極座標 (r, ϕ, θ) で変数分離した解では、角度成分 ((ϕ, θ) 成分) の解から、s 軌道、p 軌道、d 軌道 … が定義され、問題 2 の (1)-(3) 式の関数は、(4) 軌道に相当する。電子はスピン自由度をもち、その古典的イメージは電子の (5) 運動に相当する。結果として、スピン自由度では (6) 種類の状態しかとりえない。複数の電子が存在する場合、電子は同じ状態を占めることができないが、この原理を (7) 原理という。

[語句] 長さ、エネルギー、運動量、角運動量、速度、シュレーディンガー、ボーア、プランク、パウリ、フェルミ、自転、公転、反転、1、2、3、4、5、6、7、8、9、s、p、d。

4

水素原子に対するシュレーディンガー方程式のうち、動径成分の方程式は、以下の常微分方程式に帰着できる；

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} u(r) = Eu(r). \quad (1)$$

ここで、 l はゼロまたは自然数 ($l = 0, 1, 2, \dots$) であり、電子の質量を m 、電子の電荷量の絶対値を e 、真空の誘電率を ϵ_0 、プランク定数を $\hbar$ とした。

(a) 原点付近 ($r \approx 0$) で解の振る舞いだけを知りたいときは、

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} u(r) = 0 \quad (2)$$

と置くことができる。式 (2) に対し、

$$u(r) = r^\mu \quad (3)$$

の形をした解があることを示し、具体的に μ を求めよ。ただし、 $r \rightarrow +0$ の極限で $u(r)/r$ が発散しない、境界条件を置く。

(b) (a) では、式 (1) の左辺第 2 項 (クーロン相互作用の項)、式 (1) の右辺、を無視している。なぜ、このような扱いが許されるのか、考えよ。

注：下記の本の持ち込みを、認める；原康夫・岡崎誠「工科系のための現代物理学」裳華房。原島鮮「初等量子力学」裳華房。小出昭一郎「量子力学 I」裳華房。また、A 4 用紙 1 枚の「まとめメモ」の持ち込みを認める (裏面使用可。手書きでもコピーでも可)。試験後に「まとめメモ」を提出しても良い (内容によっては、加点対象となる。次週返却する)。

以上。