問題 III

量子力学に関する以下の 3 問を解け。**問 1** と**問 2** は水素原子に関する問題であり、**問 3** は一次元導体における自由電子の伝播に関する問題である。電子はスピンを持たないとする。また $\hbar$ はプランク定数 h を使い $\hbar = h/2\pi$ と表せる定数であり、電子の質量を M、電荷の大きさを e とし、真空の誘電率を ϵ_0 とする。

問 1　クーロンポテンシャルを $V(r)(r = \sqrt{x^2+y^2+z^2})$ として原点に固定された水素原子の波動関数が従う Schrödinger 方程式は

$$[\frac{(-i\hbar)^2}{2M}\triangle + V(r)]\psi(t,\vec{x}) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t,\vec{x})$$

で表されるとする。ここで、

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}$$

$$\triangle = \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial z}\right)^2$$

である。この水素原子の束縛状態に関する以下の設問に答えよ。

1-1. 角運動量演算子は $\vec{l} = \vec{x}\times\vec{p}$ と定義される。これが、交換関係

$$[l_x, l_y] = i\hbar l_z, \quad [l_y, l_z] = i\hbar l_x, \quad [l_z, l_x] = i\hbar l_y$$

$$[l_x, y] = i\hbar z, \quad [l_y, z] = i\hbar x, \quad [l_z, x] = i\hbar y$$

を満すことを示せ。

1-2. 球対称ポテンシャルのもとでは角運動量が保存量であることを示せ。

1-3. 定常状態の空間座標に依存する波動関数を球座標 (r,θ,φ) の関数として $R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ と書くとき、動径成分 $R(r)$ の満たす式をもとめよ。ここで $\vec{l}^{\,2}Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta,\varphi)$ とする。但し球座標では以下の関係式が成立する。

$$(-i\hbar)^2\triangle = (-i\hbar)^2(\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{\vec{l}^{\,2}}{r^2}$$

1-4. 基底状態の波動関数は球対称な r の指数関数であることが判っている。これを使い、この状態のエネルギー固有値と固有関数をもとめよ。

問 2　電磁波との相互作用による水素の原子状態の遷移を、電磁波を古典的に扱い時間に依存する摂動論を使い考察する。電磁波はベクトルポテンシャル $\vec{A}$ で表すことが出来、また電磁波との相互作用を含む水素原子のハミルトニアンは運動量 p_i を $p_i + eA_i$ で置き換えた

$$H_{total} = \frac{1}{2M}((p_x + eA_x)^2 + (p_y + eA_y)^2 + (p_z + eA_z)^2) + V(r)$$

で得られるとする。以下の設問に答えよ。

2-1. 電磁場との相互作用を含む上記のハミルトニアンは $(eA_i)^2$ の項を無視する近似で

$$H_{total} = H + eH_1$$

と分けて書くことが出来る。ここで H は**問 1** のハミルトニアンであり、H_1 は e に依らないとする。H_1 の具体形をもとめよ。

2-2. エネルギー E_1 を持つ H のある励起状態 $\psi_1(t, \vec{x})$ にある原子が電磁波を放出してエネルギー E_0 を持つ H の基底状態 $\psi_0(t, \vec{x})$ に遷移する現象を調べる。H の他の励起状態の寄与を無視する近似をとり系の波動関数を

$$a_0(t)\psi_0(t, \vec{x}) + a_1(t)\psi_1(t, \vec{x})$$

と表す時、時間に依存する係数 $a_0(t)$, $a_1(t)$ は

$$i\hbar\frac{d}{dt}a_0(t) = eC(t)a_0(t) + eD(t)a_1(t)$$
$$i\hbar\frac{d}{dt}a_1(t) = eF(t)a_0(t) + eG(t)a_1(t)$$

の形の方程式を満す。係数 $C(t)$、$D(t)$、$F(t)$、$G(t)$ を H_1、$\psi_0(t, \vec{x})$ と $\psi_1(t, \vec{x})$ を使い表せ。

2-3. 前問の方程式で解を e についての巾で展開し、e について二次以上の項を無視し一次までの項をとる近似で解をもとめよ。但し初期条件を

$$a_0(0) = 0, \quad a_1(0) = 1$$

とし、係数 $C(t)$、$D(t)$、$F(t)$、$G(t)$ を使い解を表せ。

2-4. 電磁波が角振動数 ω と適当な偏光を持つ平面波であるときこの遷移がおきたとする。前問の結果より t が無限大での $a_0(t)$ をもとめ、この振る舞いより放出された電磁波の振動数と水素原子のエネルギー固有値との関係をもとめよ。

問 3　長さ L の一次元導体中での電子の量子力学的運動について考察する。定常状態にある電子の一粒子波動関数は方程式

$$\frac{1}{2M}(-i\hbar\frac{d}{dx})^2\psi(x) = E\psi(x)$$

と周期境界条件

$$\psi(x+L) = \psi(x)$$

に従うとする。ここで L はマクロなスケールの十分大きな長さとする。以下の設問に答えよ。

3-1. 上記の境界条件と方程式を満すエネルギー固有値と固有関数をもとめよ。

3-2. 運動量が p と $p+\delta p$ との間にある状態数をもとめよ。またこの値よりエネルギーが E と $E+\delta E$ との間にある状態数をもとめよ。ここで δp や δE は p や E と比較すると十分小さいがこの範囲内には十分多くの状態があるとする。

3-3. また、上記エネルギー幅内で正方向の速度をもつ全ての一粒子状態を一個づつ電子が占めているとき、これらの電子が与える電流の総和をもとめよ。