量子力学 II　演習問題 11

2017 年 7 月 4 日

1．基底状態から励起状態への遷移（水素原子）

基底状態の水素原子を電極のあいだに置き、一様な電場 $E = E(t)$ をかけたとする：

$$E(t) = \begin{cases} 0 & (t < 0) \\ E_0\, e^{-t/\tau} & (t \geq 0) \end{cases}$$

このとき、時間に依存する摂動論を用いて、十分長い時間が経ったあとに原子が第 1 励起状態にある確率を最低次の近似で求めよ。ただし、基底状態および第 1 励起状態の水素原子の波動関数は以下のとおりである（$\psi_{n,\,l,\,m}$ は、主量子数 n、軌道角運動量 l、磁気量子数 m の固有状態の波動関数である）：

$$\psi_{1,\,0,\,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi a_0^3}}\, 2\, e^{-r/a_0}$$

$$\psi_{2,\,0,\,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi a_0^3}}\, \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$$

$$\psi_{2,\,1,\,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi a_0^3}}\, \frac{r}{2\sqrt{2}\, a_0} e^{-r/2a_0} \cos\theta$$

$$\psi_{2,\,1,\,\pm 1} = \sqrt{\frac{1}{4\pi a_0^3}}\, \frac{r}{4a_0} e^{-r/2a_0} e^{\pm \mathrm{i}\phi} \sin\theta$$

2．準古典的量子化条件

1 次元的に運動する量子力学的粒子で、ハミルトニアンが

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

と与えられるものを考える。ただし、ポテンシャル V はただひとつの極小値をもつものとし、そのなかの束縛状態を考える。

(1) WKB 近似を用いて、束縛状態の固有エネルギー E が

$$\int_{x_{\min}(E)}^{x_{\max}(E)} \sqrt{2m\,(E - V(x))}\,dx = \pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad (n = 0,\,1,\,2,\cdots)$$

を近似的に満たすことを示せ（準古典的量子化条件）。ただし、$x_{\min}(E)$, $x_{\max}(E)$ は $V(x) = E$ の解で、$x_{\min}(E) < x_{\max}(E)$ を満たす。

(2)　$V(x) = mg|x|$ $(g > 0)$ のとき、設問 (1) で得られた準古典的量子化条件を用いてエネルギー固有値を近似的に求めよ。また、この場合は Airy 関数を用いれば Schrödinger 方程式は厳密に解け、エネルギー固有値は Airy 関数のゼロ点を用いて厳密に求めることができる。Airy 関数のゼロ点の数値を調べて、WKB 近似によって得られた結果と厳密解を比較せよ。

注意　Airy 関数 $\mathrm{Ai}(x)$ は、微分方程式

$$\frac{d^2 z}{dx^2} - xz = 0$$

の解である。ゼロ点の数値を含めた詳しい性質については、多くの文献やウェブページに載っているが、たとえば `http://dlmf.nist.gov/9` を参照せよ。

3. 二重井戸ポテンシャル

左右対称な二重井戸ポテンシャルのなかにある粒子の、$V_{\mathrm{min}} < E \ll V(x=0)$ を満たす束縛状態を考える。(図 1)。$V(x) = E$ の正の解を $0 < x_1 < x_2$ とする。ポテンシャル障壁 $V(x=0)$ が無限大であれば、この系は独立なふたつの 1 次元調和振動子系と等価になるが、ポテンシャル障壁が $V(x=0)$ が（大きいものの）有限であれば、他方の井戸の影響が加わり、エネルギースペクトルは調和振動子のものからシフトする。この問題では、そのエネルギーシフトを WKB 近似を用いて評価しよう。

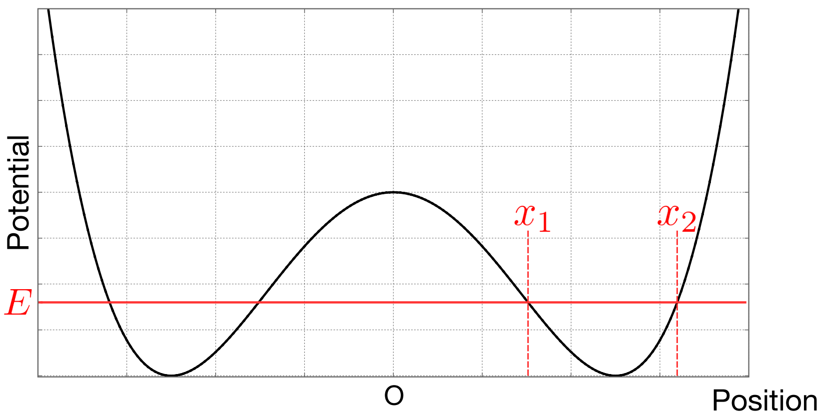

図 1: 二重井戸ポテンシャル

(1)　WKB 近似を用いて、$x > 0$ における準古典的波動関数を書き下せ（$x = x_1, x_2$ における接続条件も考えること）。

(2)　一般に、ポテンシャル $V(x)$ が左右対称であれば（偶関数であれば）、固有状態は奇関数または偶関数となることを示せ。

(3) 二重井戸ポテンシャルは左右対称なので、固有状態は奇関数または偶関数である。このことを用いて、量子化条件

$$\int_{x_1}^{x_2} p\,(x)\,dx \simeq \pi\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right) \pm \frac{\hbar}{2}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{-x_1}^{x_1} |p\,(x)|\,dx\right] \quad (n=0,\,1,\,2,\,\cdots)$$

が成り立つことを示せ。ただし、

$$p\,(x) = \sqrt{2m\,(E - V\,(x))}$$

であり、複号は、波動関数が偶関数のときに $-$、奇関数のときに $+$ となるように取るものとする。

(4) とくに、二重井戸が

$$V\,(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{2} m\omega^2\,(x+a)^2 & (x<0) \\ \dfrac{1}{2} m\omega^2\,(x-a)^2 & (x>0) \end{cases}$$

と表される場合を考える ($m\omega a^2/\hbar \gg 1$)。このとき、固有エネルギーは適当に定めた S_0 を用いて

$$E_n^{\pm} \simeq \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \pm \frac{\hbar\omega}{2\pi}\,e^{-S_0/\hbar}$$

となることを示し、S_0 を求めよ。