１９章章末問題

問題 19-1　sin 関数をオイラーの公式 $e^{\pm ix} = \cos(x) \pm i\sin(x)$をつかって表し以下の式を証明せよ。

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x = \begin{cases} 1, & n=m \\ 0 & n \neq m \end{cases}$$

解答例

$$\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) = \frac{1}{2i}(e^{i\frac{n\pi}{a}x} - e^{-i\frac{n\pi}{a}x})$$

$$\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) = -\frac{1}{4}(e^{i\frac{n\pi}{a}x} - e^{-i\frac{n\pi}{a}x})(e^{i\frac{m\pi}{a}x} - e^{-i\frac{m\pi}{a}x})$$

$$= -\frac{1}{4}(e^{i\frac{(n+m)\pi}{a}x} - e^{i\frac{(n-m)\pi}{a}x} - e^{-i\frac{(n-m)\pi}{a}x} + e^{-i\frac{(n+m)\pi}{a}x}) = -\frac{1}{2}\left(\cos\left(\frac{n+m}{a}\pi x\right) - \cos\left(\frac{n-m}{a}\pi x\right)\right)$$

$n$=$m$ のとき

$$\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) = -\frac{1}{2}\left(\cos\left(\frac{2n}{a}\pi x\right) - 1\right)$$

$$-\frac{1}{2}\int_0^a\left(\cos\left(\frac{2n}{a}\pi x\right) - 1\right)\mathrm{d}x = \frac{a}{4n\pi}\left[\sin\left(\frac{2n}{a}\pi x\right)\right]_0^a + \frac{1}{2}\left[x\right]_0^a = \frac{a}{2}$$

$n \neq m$ のとき

$$\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) = -\frac{1}{2}\left(\cos\left(\frac{n+m}{a}\pi x\right) - \cos\left(\frac{n-m}{a}\pi x\right)\right)$$

$$-\frac{1}{2}\int_0^a\left(\cos\left(\frac{n+m}{a}\pi x\right) - \cos\left(\frac{n-m}{a}\pi x\right)\right)\mathrm{d}x$$

$$= -\frac{1}{2}\left[\frac{a}{(n+m)\pi}\sin\left(\frac{n+m}{a}\pi x\right)\right]_0^a + \frac{1}{2}\left[\frac{a}{(n-m)\pi}\sin\left(\frac{n-m}{a}\pi x\right)\right]_0^a = 0$$

となり，波動関数の正規直交性が示された。

問題 19-2　オイラーの式 $e^{\pm ix} = \cos x \pm i \sin x$ を使って，(19.21), (19.22),(19.25)の積分を導くときに使った以下の式を証明せよ。$(fg)' = f'g + fg'$, $\int f'g = fg - \int fg'$ で示される部分積分をつかえ。

問題と略解

$$x\sin^2(kx)=x\left[\frac{1}{2i}(e^{ikx}-e^{-ikx})\right]^2=-\frac{1}{4}x(e^{2ikx}+e^{-2ikx}-2)$$

$$\int x\sin^2(kx)\,\mathrm{d}x=\frac{1}{4}x^2-\frac{1}{4}x\left(\frac{1}{2ik}e^{2ikx}+\frac{1}{-2ik}e^{-2ikx}\right)+\frac{1}{4}\int\left(\frac{1}{2ik}e^{2ikx}+\frac{1}{-2ik}e^{-2ikx}\right)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{4}x^2-\frac{1}{4k}x\sin(2kx)-\frac{1}{8k^2}\cos(2kx)$$

$$x^2\sin^2(kx)=\frac{x^2}{2}-\frac{1}{4}x^2(e^{2ikx}+e^{-2ikx})$$

$$\int x^2\sin^2(kx)\mathrm{d}x=\frac{x^3}{6}-\frac{x^2}{4}\left(\frac{e^{2ikx}}{2ik}+\frac{e^{-2ikx}}{-2ik}\right)+\frac{1}{2}\int x\left(\frac{e^{2ikx}}{2ik}+\frac{e^{-2ikx}}{-2ik}\right)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{x^3}{6}-\frac{x^2}{4k}\sin(2kx)+\frac{1}{2k}\int x\sin(2kx)\mathrm{d}x=\frac{x^3}{6}-\frac{x^2}{4k}\sin(2kx)-\frac{x}{4k^2}\cos(2kx)-\frac{1}{4k^2}\int\cos(2kx)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{x^3}{6}-\left(\frac{x^2}{4k}-\frac{1}{8k^3}\right)\sin(2kx)-\frac{x}{4k^2}\cos(2kx)$$

$$\int_0^a\sin(k_nx)\cos(k_nx)\,\mathrm{d}x=\int_0^a\frac{1}{4i}(e^{ik_nx}-e^{-ik_nx})(e^{ik_nx}+e^{-ik_nx})\mathrm{d}x$$

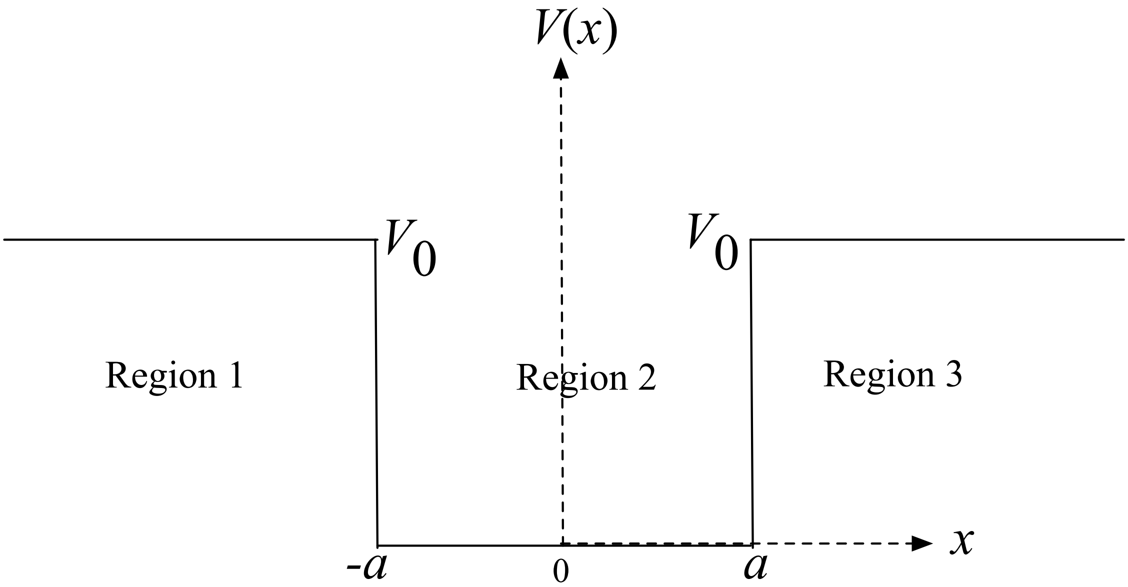
$$=\frac{1}{4i}\int_0^a(e^{2ik_nx}+1-1-e^{-2ik_nx})\,\mathrm{d}x=\frac{1}{4i}\frac{1}{2ik_n}\left[e^{2ik_nx}+e^{-2ik_nx}\right]_0^a=0$$

問題 19-3　(19.36)から(19.42)を導け　　　(解答略)

問題 19-4　Fig.19. 7 の CdTe ナノ粒子の蛍光の色の違いを定性的に説明せよ
蛍光は光を吸収した励起状態からの基底状態に戻る時に発する光であり，このナノ粒子を１次元の量子井戸とみなせば，蛍光のエネルギーはナノ粒子のサイズの二乗に反比例する。

問題 19-5
１次元のポテンシャル孔(Well)ついて波動関数をといて，井戸の中にある束縛状態を議論せよ。孔のポテンシャルは以下の通りである。
解答：WEB potential well に解答あり

$$V(x)=\begin{cases} V_0, x<-a \\ 0, -a<x<+a \\ V_0, x>+a \end{cases}$$

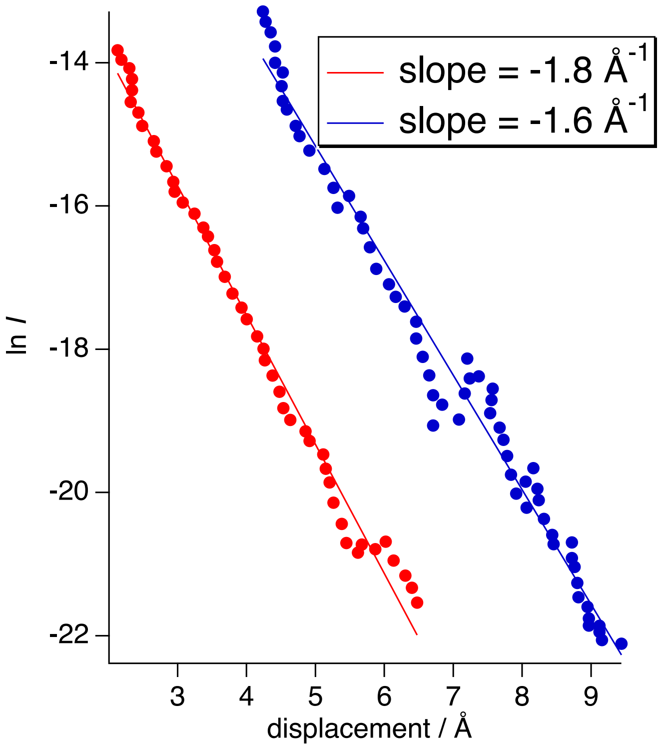



問題 19-6 (19.49)から(19.51)式を丁寧に導け　　　（解答略）

$$A+B=C+D$$
$$A-B=\frac{ik'}{ik}(C-D)$$
$$2A=C(1+\frac{k'}{k})+D(1-\frac{k'}{k})$$
$$C+De^{-2ik'a}=Fe^{i(k-k')a}$$
$$C-De^{-2ik'a}=\frac{ik}{ik'}Fe^{i(k-k')a}$$
$$C=\frac{F}{2}e^{i(k-k')a}(1+\frac{k}{k'})$$
$$D=\frac{F}{2}e^{i(k+k')a}(1-\frac{k}{k'})$$
$$A=\frac{C}{2}(1+\frac{k'}{k})+\frac{D}{2}(1-\frac{k'}{k})$$
$$=\frac{F}{4}e^{i(k-k')a}(1+\frac{k}{k'})(1+\frac{k'}{k})+\frac{F}{4}e^{i(k+k')a}(1-\frac{k}{k'})(1-\frac{k'}{k})$$
$$=\frac{F}{4}\left[e^{i(k-k')a}\left(1+\frac{k'}{k}+\frac{k}{k'}+1\right)+e^{i(k+k')a}\left(1-\frac{k'}{k}-\frac{k}{k'}+1\right)\right]$$
$$=\frac{F}{4}e^{ika}\left[e^{-ik'a}\left(\frac{2kk'+k'^2+k^2}{kk'}\right)+e^{ik'a}\left(\frac{2kk'-k'^2-k^2}{kk'}\right)\right]$$
$$=\frac{F}{4kk'}e^{ika}\left[e^{-ik'a}(k+k')^2-e^{ik'a}(k-k')^2\right]$$
$$F=\frac{4kk'e^{-ika}}{(k+k')^2e^{-ik'a}-(k-k')^2e^{ik'a}}A=\frac{4kk'e^{-ika}}{(k+k')^2[\cos(k'a)-i\sin(k'a)]-(k-k')^2[\cos(k'a)+i\sin(k'a)]}A$$
$$=\frac{4kk'e^{-ika}}{4kk'\cos(k'a)-2i(k^2+k'^2)\sin(k'a)}A$$
$$\left|F\right|^2=F^*F=\frac{4kk'e^{ika}}{4kk'\cos(k'a)+2i(k^2+k'^2)\sin(k'a)}\frac{4kk'e^{-ika}}{4kk'\cos(k'a)-2i(k^2+k'^2)\sin(k'a)}A^*A$$
$$=\frac{16k^2k'^2}{16k^2k'^2\cos^2(k'a)+4(k^2+k'^2)^2\sin^2(k'a)}\left|A\right|^2$$
$$T=\frac{\left|J_{\mathrm{T}}\right|}{\left|J_0\right|}=\frac{\left|F\right|^2}{\left|A\right|^2}=\frac{1}{\cos^2(k'a)+\frac{1}{4}\frac{(k^2+k'^2)^2}{k^2k'^2}\sin^2(k'a)}=\frac{1}{1+\frac{1}{4}\left[\frac{(k^2+k'^2)^2}{k^2k'^2}-4\right]\sin^2(k'a)}$$
$$=\frac{1}{1+\frac{1}{4}\left(\frac{k^2-k'^2}{kk'}\right)^2\sin^2(k'a)}$$
$$k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},k'=\frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}=\frac{\sqrt{2mV_0(\gamma-1)}}{\hbar},\gamma\equiv E/V_0$$
$$\left(\frac{k^2-k'^2}{kk'}\right)^2=\frac{V_0^2}{E(E-V_0)}=\frac{1}{\gamma(\gamma-1)}$$
$$T=\frac{1}{1+\frac{1}{4\gamma(\gamma-1)}\sin^2(\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}a\sqrt{\gamma-1})}$$
$$R=1-T=1-\frac{1}{1+\frac{1}{4\gamma(\gamma-1)}\sin^2(\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}a\sqrt{\gamma-1})}=\frac{1}{\frac{4\gamma(\gamma-1)}{\sin^2(\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}a\sqrt{\gamma-1})}+1}$$

問題 19-7 (19.55)から(19.62)式を丁寧に導け　　　（解答略）

問題 19-8
以下のデータは 1982 年に STM の開発者である IBM チューリッヒ研究所の Binnig らが報告した白金表面にタングステンチップを近づけて行った時の電流の変化である。縦軸は電流の自然対数，横軸はチップの移動距離である。
今 ln$I$ は ln$T$ であらわされるとして，(19.64)式と図中に示した 2 つの直線の傾きを使って $V_0$ を eV 単位で求めよ。すべて SI 単位系で計算し，最後に J を eV に変換するとよい。ちなみに Binnig らはより詳細な理論[(19.64)式で求めた障壁の半分となる]を用いて障壁の高さは 3.2 eV と見積もっている。




G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, and E. Weibel, *Appl. Phys. Lett.* 40, 178 (1982)の Fig.2 のデータより著者が再プロットした

解答 $(1.8\text{-}1.6)\times 10^{10}\ \mathrm{m}^{-1} = 4\pi m^{1/2} h^{-1} V_0^{1/2}$,　　$[(1.8\text{-}1.6)\times 10^{10}]^2 = 16\pi^2 m\, h^{-2} V_0$

$$V_0 = [(1.8\text{-}1.6)\times 10^{10}]^2\, h^2 / (16\pi^2 m) = [(1.8\text{-}1.6)\times 10^{10}]^2\, h^2 / (16\pi^2 m)$$

$$= [(1.8\text{-}1.6)\times 10^{10}]^2 (6.626070\times 10^{-34})^2 / (16\pi^2\, 9.1093837\times 10^{-31})$$

$$= (9.9\text{-}7.8)\times 10^{-19}\ \mathrm{J} = 6.2\text{-}4.9\ \mathrm{eV}$$

問題 19-9　(19.68)から(19.76)式を丁寧に導け　　　（解答略）

問題 19-10　(19.77)から(19.76)式を丁寧に導け　　　（解答略）

問題 19-11　水素分子 $H_2$，重水素分子 $D_2$, 三重水素分子 $T_2$ の分子振動は調和振動子と見なせるとする。それぞれの分子は原子核の質量だけが変わっただけであり，その化学的な性質例えば結合の強さをあらわすバネ定数は等しい。

1) 水素分子 $H_2$，重水素分子 $D_2$, 三重水素分子 $T_2$ で振動のポテンシャルに変化はあるのか？
2) 水素分子 $H_2$ の角振動数は $\omega = 8.289\times10^{14}\ s^{-1}$, 換算質量 $\mu = m_{H\,/}\ 2 = 8.363\times10^{-28}$ kg である。$\omega = [\,k / \mu]^{1/2}$ を使って，重水素分子 $D_2$, 三重水素分子 $T_2$ の角振動数 ω を求めよ。$m_D = 2m_H$, $m_T = 3m_H$ である。
3) 水素分子 $H_2$，重水素分子 $D_2$, 三重水素分子 $T_2$ の全てのエネルギー固有値で位置および運動量の期待値はゼロとなるのか？
4) 水素分子 $H_2$，重水素分子 $D_2$, 三重水素分子 $T_2$ の位置の広がり $\Delta x$，運動量の広がり $\Delta p$，その不確定性 $\Delta x\Delta p$ はどうなるのか？

解答例

1) 変化ない
2) $\omega_D = \omega_H\ /\ \sqrt{2}$,　$\omega_T = \omega_H\ /\ \sqrt{3}$
3) 水素分子 $H_2$，重水素分子 $D_2$, 三重水素分子 $T_2$ の全てのエネルギー固有値で位置および運動量の期待値はゼロとなる。
4) (19.86)より，換算質量は 2，3 倍，角振動数は $1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{3}$ となるので，その積は，$\sqrt{2}$, $\sqrt{3}$ となる。$\Delta x(D_2) = \Delta x(H_2) / \sqrt{2}$,　$\Delta x(T_2) = \Delta x(H_2) / \sqrt{3}$ 質量がおもくなるのでその分位置の不確さは小さくなる.　$\Delta p(D_2) = \sqrt{2}\Delta p(H_2)$, $\Delta p(T_2) = \sqrt{3}\Delta p(H_2)$ となり，位置と運動量の不確定性 $\Delta x(H_2)\Delta p(H_2) = \Delta x(D_2)\Delta p(D_2) = \Delta x(T_2)\Delta p(T_2)$は変わらない。