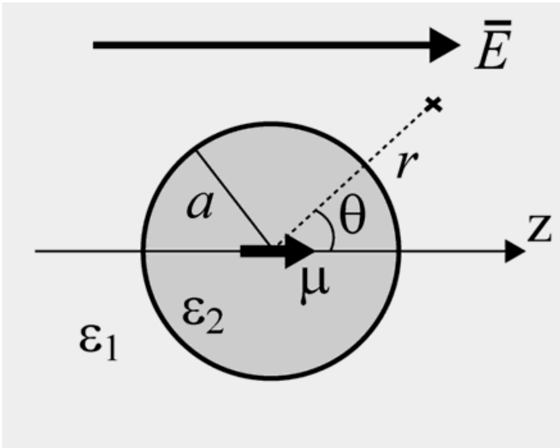
［化学物理II（専門）］（全2題）

［問題 1］

次の文章を読んで，以下の問いに答えよ．



誘電率 ε_1 の無限にひろがった均一な溶媒中に，半径が a で誘電率が ε_2 の球状の物質がある． z 軸方向に一定電場 $\bar{E}$ がかかっており，中心には z 軸に向いた電気点双極子 μ が置かれている．球状物質の中心を原点とし，空間の点を中心からの距離 r，及び z 軸とのなす角 θ で表す．ここで，誘電率 ε の誘電体中の点電荷 q のつくる静電ポテンシャル Φ_q は，

$\Phi_q = \dfrac{q}{4\pi\varepsilon r}$ で表される．

問 A　一定電場 $\bar{E}$ の静電ポテンシャル $\Phi_{\bar{E}}$ を r と θ の関数で表せ．

問 B　誘電率 ε_2 の一様な誘電体中の，点双極子 μ による静電ポテンシャル Φ_μ を， r と θ の関数で表せ．

問 C　全体の静電ポテンシャル Φ は，

$$\Phi = A\Phi_\mu + \Phi_{\bar{E}} \qquad (r > a)$$
$$\Phi = \Phi_\mu + B\Phi_{\bar{E}} \qquad (r < a)$$

と表される． $r = a$ での電場 $\mathbf{E}$ の接線成分，及び電気変位 $\mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E}$ の法線成分の連続条件を記せ．必要ならば， $E_a = \dfrac{2\mu}{4\pi\varepsilon_2 a^3}$ と置け．

問 D　問 C の連続条件により，係数 A と B は，

$$A = \frac{\boxed{（ア）}\varepsilon_2}{\boxed{（イ）}\varepsilon_1 + \varepsilon_2} - \boxed{（ウ）}$$

$$B = \frac{\boxed{（エ）}\varepsilon_1}{\boxed{（オ）}\varepsilon_1 + \varepsilon_2} + \frac{E_a}{\bar{E}} \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2\varepsilon_1 + \varepsilon_2}$$

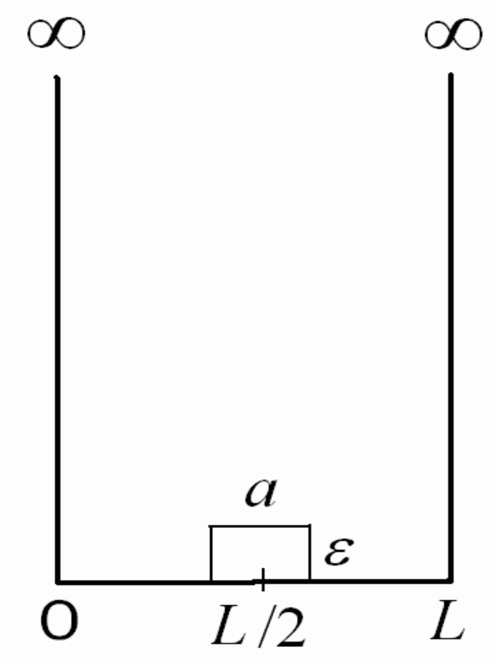
と決まる．空欄（ア）～（オ）に入る数または数式を答えよ．

問 E　$\bar{E} \to 0$ のとき，点双極子 μ により誘起分極された球状物質外部の溶媒が，球状物質内部に与える電場 $\mathbf{R} = \left(R_x, R_y, R_z\right)$ を求めよ．問 D の結果を用いてよい．

問 F　$\mu \to 0$ のとき，球状物質外部の静電ポテンシャルは，$\Phi_{\bar{E}}$ 自身と，$\bar{E}$ による誘起分極を表す静電ポテンシャル $\Phi_{\mu'}$ の和で記述される．ここで，$\Phi_{\mu'}$ は誘電率 ε_2 の誘電体中の原点上の誘起点双極子 μ' による静電ポテンシャルで表される．μ' を求めよ．

［問題 2］

次の文章を読んで，以下の問いに答えよ.



長さLの 1 次元の箱の中の質量mの粒子を考える.
ポテンシャルは,

$$V(x)=\begin{cases}\infty & (x\le 0)\\ 0 & (0<x<L)\\ \infty & (x\ge L)\end{cases}$$

とする.

問 A　$0<x<L$における波動関数は,

$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{ikx}+B\mathrm{e}^{-ikx}$$

と表せる. このとき，エネルギーEと波数kとの関係を書け.

問 B　$x=0$と$x=L$において$\psi(x)$の満たすべき境界条件を示し，それらより係数AとBの間の関係，および波数kの満たすべき条件を求めよ.

問 C　固有エネルギーE_n（$n=1,2,3,\cdots$）と，規格化された波動関数$\psi_n(x)$を求めよ.

問 D　上記のポテンシャルの中央部分に長さa，高さεの小さなステップ状の摂動

$$H'(x)=\begin{cases}\varepsilon & \left(\frac{1}{2}(L-a)\le x\le\frac{1}{2}(L+a)\right)\\ 0 & (\text{上記以外})\end{cases}$$

を加えたとする. 問Cで求めた非摂動の波動関数$\psi_n(x)$に対する$H'(x)$の期待値が,

$$H'_n\equiv\langle\psi_n(x)\,|\,H'(x)\,|\,\psi_n(x)\rangle=\varepsilon\left[\frac{a}{L}-\frac{(-1)^n}{n\pi}\sin\left(\frac{n\pi a}{L}\right)\right]$$

であることを示せ（これは 1 次の摂動エネルギーである）.

問 E　$a = L/6$ のとき，基底状態（$n=1$）と第一励起状態（$n=2$）について，H'_n を計算せよ.（ε の定数倍の形で，小数点以下3ケタまで示せ.）両者の結果を比較し，その大きさの違いについて，波動関数の形に基づいて定性的解釈を述べよ.（必要ならば，$\sqrt{2}=1.41$，$\sqrt{3}=1.73$，$\pi=3.14$ を用いてよい.）

問 F　1 次の摂動論によれば，摂動 $H'(x)$ があるときの波動関数は，非摂動の波動関数 $\psi_n(x)$ を用い

$$\psi'_n(x) = \psi_n(x) + \sum_{m\neq n} c_m \psi_m(x)$$

と近似される. このとき，量子数 n の偶奇によって，摂動補正項に含まれる $\psi_m(x)$ の m の偶奇はどうなるか，理由とともに述べよ.