[化学物理II(専門)] (全2題)

[問題 1] 調和振動子の波動関数についての以下の文を読み，問 A, B に答えよ.

座標 x の一次元調和振動子の波動関数とエネルギーは次の Schrödinger 方程式により決定される.

$$\hat{H}\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x) \tag{1}$$

ここで，$\hat{H}$ は Hamiltonian 演算子，$\varphi_n(x)$ と E_n は 0 以上の整数 n に対して決まる固有関数と固有エネルギーである. Hamiltonian 演算子 $\hat{H}$ は以下のような運動エネルギー演算子 $\hat{K}$ とポテンシャルエネルギー演算子 $\hat{V}$ を用いて表される.

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V} \tag{2}$$

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{3}$$

$$\hat{V} = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{4}$$

ここで，$\hbar = h/2\pi$，h は Planck 定数，m は質点の質量，ω は調和振動子の角振動数である. 振動基底固有状態 $\varphi_0(x)$ と振動第一励起固有状態 $\varphi_1(x)$ は

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \tag{5}$$

$$\varphi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} x\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \tag{6}$$

と表され，それぞれ 1 に規格化(normalize)されている. 図 1 に $\varphi_0(x)$ と $\varphi_1(x)$ を示す. 以下の計算において，必要ならば次の積分公式を用いてよい.

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp\left(-ax^2\right)\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \tag{7}$$

問 A $\varphi_0(x)$ と $\varphi_1(x)$ を重ね合わせることにより，局在化した波束 $\psi(x)$ を作ることを考える．波動関数の幅は $\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle}$ で定義されるとする．$\langle\ \rangle$ はその波動関数で表される状態での期待値(expectation value)を表し，$\Delta x = x - \langle x \rangle$ である．任意の関数 $g(x)$ の期待値は，

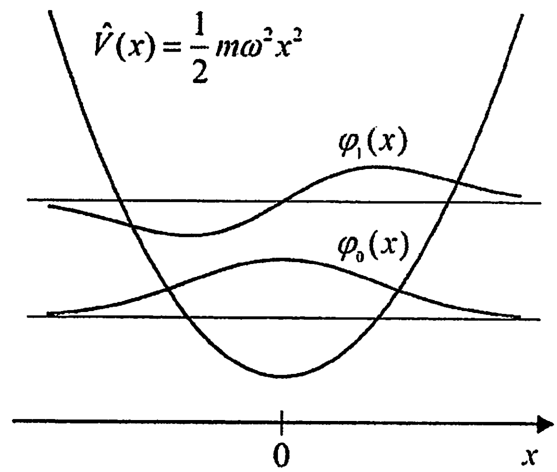

図 1 ポテンシャルエネルギー関数 $\hat{V}(x)$ と波動関数 $\varphi_0(x)$，$\varphi_1(x)$

$$\langle g(x) \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) g(x) \psi(x) \mathrm{d}x}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) \mathrm{d}x} \tag{8}$$

である．$\psi(x)$ を $\varphi_0(x)$ と $\varphi_1(x)$ の重ね合わせをパラメータ θ を用いて次式のように表す．

$$\psi(x) = \sin\theta\ \varphi_0(x) + \cos\theta\ \varphi_1(x) \tag{9}$$

次の問（ア）～（エ）に答えよ．

（ア）$\psi(x)$ は 1 に規格化されていることを示せ．

（イ）$\langle x \rangle$ を $\hbar$，m，ω 及び θ を用いて表せ．

（ウ）$\langle x^2 \rangle$ を $\hbar$，m，ω 及び θ を用いて表せ．ただし，調和振動子の固有状態では，運動エネルギーの期待値とポテンシャルエネルギーの期待値が等しいため，固有エネルギー E_n について、次の関係式が成り立つことを用いてよい．

$$E_n = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \hat{K} \varphi_n(x) \mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \hat{V} \varphi_n(x) \mathrm{d}x = 2\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n^*(x) \hat{V} \varphi_n(x) \mathrm{d}x \tag{10}$$

（エ）波束の幅 $\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle}$ が最小となる θ を求め，そのときの幅を $\hbar$，m 及び ω を用いて表せ．

問 B　問 A で求めた $\psi(x)$ の時間発展を考える．すなわち，時刻 t での波動関数を $\Psi(x,t)$ とし，時刻 $t=0$ での波束を問 A で求めた $\psi(x)$ とする：

$$\Psi(x,0)=\psi(x) \tag{11}$$

波動関数の時間発展は，次の時間依存の Schrödinger 方程式に従う．

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=\hat{H}\Psi(x,t) \tag{12}$$

次の問（ア）～（ウ）に答えよ．

（ア）$\Psi(x,t)$ は 1 に規格化されていることを示せ．

（イ）状態 $\Psi(x,t)$ での位置の期待値 $\langle x \rangle_t$ は時間に依存して振動する．ここで，任意の関数 $g(x)$ の状態 $\Psi(x,t)$ における期待値は，

$$\langle g(x) \rangle_t=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(x,t)g(x)\Psi(x,t)\mathrm{d}x \tag{13}$$

である．転回点 (turning point)

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle x \rangle_t=0 \tag{14}$$

での $\langle x \rangle_t$ を $\hbar$，m 及び ω を用いて表せ．

（ウ）$\Psi(x,t)$ の 幅 $\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle_t}$ も時間にともない変化する．最初に幅が最大になるときの時間，及びそのときの幅を $\hbar$，m 及び ω を用いて表せ．

［問題2］ 物質の誘電的性質に関する以下の問 A〜E に答えよ．

問 A　原子内の電子（質量 m，電荷 $-e$）の平衡位置からの変位 x に対し，一次元調和振動子モデルを適用し，ばね定数 (spring constant) を $m\omega_0^2$ とする．ただし，原子核は静止しているとする．この電子が時間変動する電場 $E(t)$ の下にあり，速度に比例する摩擦力 (frictional force) $-m\gamma(\mathrm{d}x/\mathrm{d}t)$ を受けるとして，電子の古典的運動方程式を書け．

問 B　問 A のモデルに従う原子の集合体からなる物質を考える．単位体積当りの電子数を N とすると，この物質の電気分極 (polarization) は $P=-Nex$ と書ける．真空誘電率 (permittivity of vacuum) を ε_0，電気変位 (electric displacement) を $D=\varepsilon_0 E+P$ とすると，この物質の比誘電率(relative permittivity) ε_r は $D=\varepsilon_0\varepsilon_\mathrm{r}E$ で定義される．$x(t)=x_0\mathrm{e}^{-i\omega t}$，$E(t)=E_0\mathrm{e}^{-i\omega t}$ とおくことにより，この物質に角振動数 ω の振動電場をかけたときの誘電関数 $\varepsilon_\mathrm{r}(\omega)$ を求めよ．

問 C　次に，$\omega_0\to 0$，$\gamma\to 0$ の極限を考える．このとき誘電関数は

$$\varepsilon_\mathrm{r}(\omega)=1-(\omega_\mathrm{p}^2/\omega^2) \tag{1}$$

の形になる．ω_p を上で与えた物質定数等により表せ．また，上記の極限が固体中で成り立つとき，どのような電気的性質を持つと考えるのが適切か．簡潔に記せ．

問 D　物質による電磁波の複素屈折率(refractive index)は $n=\sqrt{\varepsilon_\mathrm{r}}$，反射率(reflectivity)は

$$R=\left|\frac{n-1}{n+1}\right|^2 \tag{2}$$

で与えられる．(1)式の $\varepsilon_\mathrm{r}(\omega)$ を用いて，ω の関数として $R(\omega)$ の概形を描け．

問 E　ある物質は，(1)式の誘電関数をもち，$\omega_\mathrm{p}/2\pi=3\times10^{15}\,\mathrm{s}^{-1}$ であるとする．この物質の外観の特徴について最も適切なものを以下から選び，理由とともに示せ．光速は $c=3\times10^{8}\,\mathrm{m\,s^{-1}}$ とする．

（ア）無色透明　（イ）金属光沢　（ウ）青色　（エ）黒色