

演習 3 解答例

問題 1.

幅 L の無限に深い1次元井戸形ポテンシャルに閉じ込められた質量 m の電子の規格化された波動関数は、エネルギーの低いほうから順に $n=1,2,\dots$ と番号をつけて $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$ と表される。また、エネルギー固有値は、 $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$ となる。このとき、

- (1) $n=1$ と 2 の間の遷移を起こさせる入射光の角周波数 ω を求めよ(m, L などの式で表す)。

E_2 と E_1 の差が光子エネルギー $\hbar\omega$ と等しいことから

$$\hbar\omega = E_2 - E_1 \Leftrightarrow \omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{\pi^2 \hbar}{2mL^2} (4 - 1) = \frac{3\pi^2 \hbar}{2mL^2}$$

- (2) $m = 0.26 m_0, L = 2 \text{ nm} = 2.0 \times 10^{-9} \text{ m}$ の値を用いて上記に対応する周波数 $f [\text{Hz}]$ を計算しなさい。ただし $m_0 = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$, $\hbar = 1.1 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ を用いよ。

$$\begin{aligned} f &= \frac{\omega}{2\pi} = \frac{3\pi\hbar}{4mL^2} = \frac{3\pi \times 1.1 \times 10^{-34} \text{ Js}}{4 \times 0.26 \times 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (2.0 \times 10^{-9} \text{ m})^2} \\ &= \frac{3\pi \times 1.1 \times 10^{-34} \text{ Js}}{4 \times 0.26 \times 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 4 \times 10^{-18} \text{ m}^2} = \frac{3\pi \times 1.1 \times 10^{15} \text{ Js}}{4 \times 0.26 \times 9.1 \times 4 \text{ kg m}^2} \approx 2.7 \times 10^{14} \text{ Hz} \\ &\quad (270 \text{ THz}) \end{aligned}$$

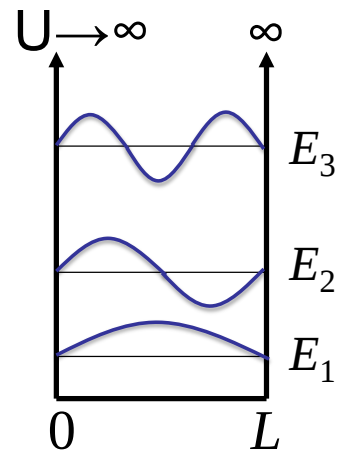
$$\begin{aligned} \text{ちなみにエネルギー差は, } E_2 - E_1 &= \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{3\pi \times (1.1 \times 10^{-34} \text{ Js})^2}{2 \times 0.26 \times 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (2.0 \times 10^{-9} \text{ m})^2} \\ &\approx 1.9 \times 10^{19} \text{ J} \\ &\approx 1.2 \text{ eV} \end{aligned}$$

- (2) $n=1$ と 2 の間の電気双極子モーメントの長さ $|x_{12}|$ を式で示せ。

ただし、 $x_{mn} = \int_0^L \varphi_m^* x \varphi_n dx$ である。(L などを用いて式で表す)

$\sin$ 関数なので、部分積分などを使って解析的に積分が実行できる。

$$x_{mn} = \int_0^L \varphi_m^* x \varphi_n dx = \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) \cdot x \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx$$



$$\begin{cases} 0 \leq x \leq L & : U(x) = 0 \\ x < 0, L < x & : U(x) \rightarrow \infty \end{cases}$$

三角関数の積和公式 $\sin \alpha \sin \beta = \frac{\cos(\alpha-\beta)-\cos(\alpha+\beta)}{2}$ を用いて $\sin$ の積を $\cos$ の和に直して元の式に代入すると,

$$x_{mn} = \frac{1}{L} \int_0^L \left[x \cdot \cos \left\{ \frac{(m-n)\pi}{L} x \right\} - x \cdot \cos \left\{ \frac{(m+n)\pi}{L} x \right\} \right] dx$$

第1項の積分のみ,部分積分を用いて計算すると, $m \neq n$ として

$$\begin{aligned} & \int_0^L x \cdot \cos \left\{ \frac{(m-n)\pi}{L} x \right\} dx \\ &= \frac{L}{(m-n)\pi} \left[x \cdot \sin \left\{ \frac{(m-n)\pi}{L} x \right\} \right]_0^L - \frac{L}{(m-n)\pi} \int_0^L \sin \left\{ \frac{(m-n)\pi}{L} x \right\} dx \\ &= \frac{L}{(m-n)\pi} L \cdot \sin(m-n)\pi + \left(\frac{L}{(m-n)\pi} \right)^2 \left[\cos \left\{ \frac{(m-n)\pi}{L} x \right\} \right]_0^L = \left(\frac{L}{(m-n)\pi} \right)^2 \{ \cos(m-n)\pi - 1 \} \end{aligned}$$

第2項も $m-n \rightarrow m+n$ と置換するだけでまったく同じ計算になる. よって,

$$x_{mn} = \frac{L}{\pi^2} \left[\frac{\cos(m-n)\pi - 1}{(m-n)^2} - \frac{\cos(m+n)\pi - 1}{(m+n)^2} \right]$$

題意により, $m=1, n=2$ を代入すると,

$$x_{12} = \frac{L}{\pi^2} \left[-2 - \frac{-2}{9} \right] = -\frac{16}{9} \frac{L}{\pi^2}$$

長さは絶対値をとって, $|x_{12}| = \frac{16}{9} \frac{L}{\pi^2}$

(4) (2)と同じ数値を用いて $|x_{12}|$ を値で示せ。

$$|x_{12}| = \frac{16}{9} \frac{L}{\pi^2} = \frac{16}{9} \cdot \frac{2.0 \times 10^{-9} m}{\pi^2} \approx 0.36 \times 10^{-9} m = 0.36 nm$$