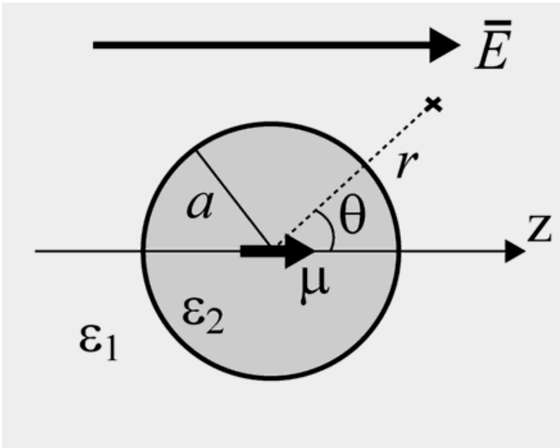
［化学物理II（専門）］（全2題）

［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，

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

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

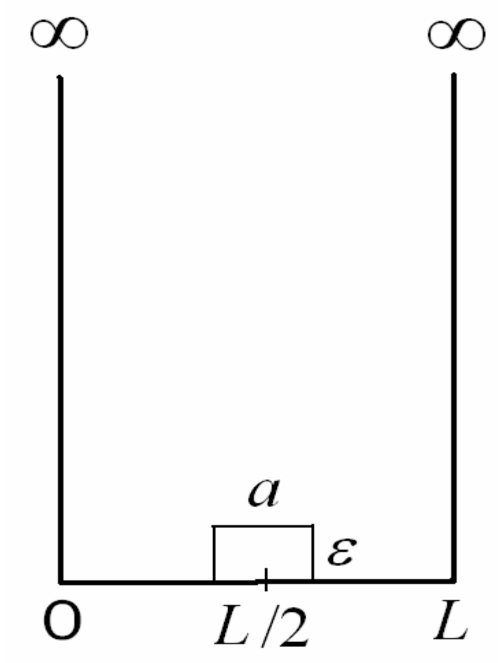
と決まる．空欄（ア）～（オ）に入る数または数式を答えよ．

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．