量子力学第二演習　　No.7　97/6/5

1. 量子系の状態が ケットベクトル $|\Psi\rangle$ によって記述されているとき、位置の演算子 $\hat{x}$ の固有状態 $|x\rangle$ を用いて $|\Psi\rangle$ を

$$|\Psi\rangle = \int \mathrm{d}x \langle x|\Psi\rangle |x\rangle$$

のように展開し、係数 $\langle x|\Psi\rangle$ を波動関数と呼ぶ。これについて以下の問いに答えよ。

(1) 波動関数 $\langle x|\Psi\rangle$ を $\Psi(x)$ と書くことにする。このとき、フラックス $j(x)$ を

$$j(x) = \frac{\hbar}{2mi}\{\Psi^*(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Psi(x) - \Psi(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Psi^*(x)\}$$

と定義しよう。このとき、運動量演算子 $\hat{p}$ の行列要素とフラックスの間に $m\int j(x)\mathrm{d}x = \langle\Psi|\hat{p}|\Psi\rangle$ の関係があることを示せ。

(2) ハミルトニアンが $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$ で与えられる一次元の自由粒子系を考える。エネルギー $E > 0$ が与えられたときに、固有値問題 $\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$ を解き、縮重した二つの解 $|E\rangle_1$ と $|E\rangle_2$ が存在することを示せ。

(3) ハミルトニアン $\hat{H}$ と運動量 $\hat{p}$ は可換なので、$|E\rangle_1$ と $|E\rangle_2$ の適当な線形結合をとると、ハミルトニアンと運動量の同時固有状態をつくることができる。 それら同時固有状態の波動関数からフラックスを計算せよ。

(4) $x < 0$ においてはハミルトニアンが $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$ で、 $x > 0$ においては $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V$ で与えられるとしよう。V は正定数である。このとき、エネルギー $0 < E < V$ に対する固有値問題 $\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$ を考え、固有状態に対応する波動関数のフラックス $j(x)$ が $x > 0$ では 0 になることを示せ。

2. 時間に依存する Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|t\rangle = \hat{H}|t\rangle$$

を考える。$\hat{H}$ は一次元の井戸型ポテンシャル系のハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}),\quad U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & x < 0,\ x > a \end{cases}$$

である。

(1) 固有方程式 $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ が成り立ち、固有ケット $|n\rangle$ が完全系をつくるとする。このとき、$|t\rangle$ を $|n\rangle$ で展開して $|t\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle$ と書ける。 Schrödinger 方程式の解が

$$|t\rangle = \sum_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n t\right) c_n(0)|n\rangle$$

で与えられることを示せ。

(2) 実際に (1) の固有方程式を解いて E_n を求めよ。エネルギーの最も低い状態 $|1\rangle$ と 2 番目に低い状態 $|2\rangle$ について、対応する波動関数の絶対値二乗 $|\langle x|1\rangle|^2$ および $|\langle x|2\rangle|^2$ を x の関数として図示せよ。

(3) 時刻 $t = 0$ において系が最低エネルギー状態 $|1\rangle$ に入っていたとしよう (つまり、$c_n(0) = \delta_{n1}$)。このとき、$|\langle x|t\rangle|^2$ の $x = a/4$ における時間変化を図示せよ。

(4) 時刻 $t = 0$ において系が最低エネルギー状態 $|1\rangle$ と 2 番目にエネルギーの低い状態 $|2\rangle$ の線形結合に入っていて、$c_1(0) = c_2(0) = C$ であるとしよう。時刻 $t = 0$ における波動関数の規格化条件より、定数 C の値を計算せよ。

(5) 初期状態が (4) で述べたようになっているとき、$|\langle x|t\rangle|^2$ の $x = a/4$ における時間変化を図示せよ。

3. 1 次元の調和振動子の Schrödinger 方程式

$$\left(\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2\right)|n\rangle = E_n|n\rangle$$

を考える。以下の問いに答えよ。

(1) 波動関数 $\langle x|n\rangle$ に対する微分方程式を書き下し、さらに変数変換 $\xi = x\sqrt{m\omega/\hbar}$ を行え。

(2) $\Psi = v(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$ と置き換え、$v(\xi)$ の満たす微分方程式を導け。

(3) $v(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k\xi^k$ とおき、(2) で求めた微分方程式に代入せよ。その結果から、係数 c_k の間に成立する漸化式を求めよ。

(4) $v(\xi)$ が多項式になるように エネルギー E_n の値を定めよ。

(5) エネルギーの最も低い状態と二番目に低い状態について、対応する波動関数の絶対値二乗を x の関数として図示せよ。