量子力学 II 演習問題 No. 1

問題は 1-1 から 1-5 まであります。
「レポート問題」：問題 1-1
「基本問題」：問題 1-2(iv), 問題 1-3(i), (ii), (iii), 問題 1-4(i), 問題 1-5(i)

問題 1-1 [レポート]：一次元調和振動子

一次元調和振動子のハミルトニアンは、位置演算子 $\hat{x}$ と運動量演算子 $\hat{p}$ を用いて、

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

で与えられる。ただしここで、m は質量、ω は角振動数である。昇降演算子 $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ を、$\hat{x}$ と $\hat{p}$ より、

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} + i\,\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\ , \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{x} - i\,\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\omega\hbar}}$$

で定義する。

以下の問に答えよ。

(i) 位置演算子 $\hat{x}$、運動量演算子 $\hat{p}$ が、$[\hat{x}\,,\,\hat{p}] = i\hbar$、および $[\hat{x}\,,\,\hat{x}] = [\hat{p}\,,\,\hat{p}] = 0$ を満たしていることを用いて $\left[\hat{a}\,,\,\hat{a}^\dagger\right]$ を求めよ。

昇降演算子 $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ を用いて、$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ と定義される演算子 $\hat{N}$ を個数演算子と呼ぶ。

(ii) 個数演算子 $\hat{N}$ がエルミート演算子であることを示せ。

(iii) 任意の状態 $|\psi\rangle$ に対する $\hat{N}$ の期待値が半正定値、すなわち $\langle\psi|\hat{N}|\psi\rangle \geq 0$ であることを示せ。

(iv) $[\hat{N}\,,\,\hat{a}]$ と $[\hat{N}\,,\,\hat{a}^\dagger]$ を計算せよ。

(v) $\hat{N}$ の固有値を n、対応する規格化された固有状態を $|n\rangle$ とする。上の (iii) と (iv) の結果を用いて、下記の問に答えよ。

(a) $n \geq 0$ であることを示せ

(b) $n \geq 1$ に対して $|n\rangle$ が存在するとする。$\hat{a}|n\rangle$ が $\hat{N}$ の固有状態であることを示し、その固有値を求めよ。

(c) $0 \leq n < 1$ の場合、可能な状態は $n = 0$ の $|0\rangle$ のみであることを示せ。

(d) $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ が $\hat{N}$ の固有状態であり、その固有値が $n+1$ であることを示せ。

上の結果から、n はゼロ以上の整数値、すなわち $n = 0, 1, 2, \ldots$ であることが示される。また、問 (v)(c) の $|0\rangle$ から次々と、固有値が $1, 2, 3, \ldots$ となる状態 $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$, $\ldots$ が得られることになる。

問題 1-2 調和振動子 No.2

問題1-1で考えた1次元調和振動子、及び、個数演算子に関して以下の問に答えよ。

(i) 問題1-1の問(v)(b)で、$n \geq 1$に対して

$$\hat{a}|n\rangle = C^{(-)}_{n-1}|n-1\rangle$$

とする。$C^{(-)}_{n-1}$を求めよ。

(ii) 問題1-1の問(v)(d)に対して、

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = C^{(+)}_{n+1}|n+1\rangle$$

とする。$C^{(+)}_{n+1}$を求めよ。

(iii) 個数演算子$\hat{N}$の規格化された固有状態$|n\rangle$を、問題1-1問(v)(c)の$|0\rangle$と$\hat{a}^\dagger$を用いてあらわせ。

(iv) [基本問題] $\hat{x}$と$\hat{p}$を、$\hat{a}$と$\hat{a}^\dagger$を用いてあらわせ。

(v) ハミルトニアン演算子が、個数演算子を用いて

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)$$

とあらわされることを示せ。

(vi) 調和振動子のエネルギー固有値を求めよ。また、対応する(規格化された)エネルギーの固有状態を個数演算子の固有状態$|n\rangle$であらわせ。

問題 1-3 ：一次元の箱の中の粒子の運動

ポテンシャルが、$a > 0$として

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 < x < a) \\ \infty & (x < 0\,,\ a < x) \end{cases}$$

で与えられる場合の、1次元における質量mの粒子の運動を量子力学的に考える。

以下の問に答えよ。

(i) [基本問題] ハミルトニアンの固有関数を$u(x)$、エネルギー固有値をEとして、時間に依存しないシュレーディンガー方程式を書け。

(ii) [基本問題] $x < 0$または$x > a$(箱の外)での固有関数$u(x)$を書け。[これは、粒子が箱の外には存在しないことを示している。]

(iii) [基本問題] $x = 0$と$x = a$(箱の端)で固有関数$u(x)$は連続でなければならない。このことと問(ii)の結果から固有関数$u(x)$が$x = 0$と$x = a$で満たすべき条件を書け。

(iv) $E > 0$ の場合に、$0 < x < a$ での時間に依存しないシュレーディンガー方程式を解き、(iii) の条件を課すことにより、エネルギー固有値 E はとびとびの値のみ許されることを示せ。そして、そのエネルギー固有値 E_n と対応する規格化された固有関数 u_n を求めよ。

ポテンシャル中の粒子の波動関数が次のように与えられる場合に以下の問に答えよ。

$$\psi(x) = \begin{cases} C\left(\sin\dfrac{\pi x}{a} + \dfrac{1}{2}\sin\dfrac{2\pi x}{a} + \dfrac{1}{3}\sin\dfrac{3\pi x}{a}\right) & (0 < x < a) \\ 0 & (x < 0,\ a < x) \end{cases}$$

ただしここで、$C > 0$ とする。

(v) 波動関数 $\psi(x)$ をエネルギーの固有関数 $u_n(x)$ のうちの適当なものの線形結合としてあらわせ。

(vi) 固有関数 u_n の規格直行条件は、$u_n^*(x)$ を $u_n(x)$ の複素共役として

$$\int dx\, u_n^*(x)\, u_\ell(x) = \int_0^a dx\, u_n^*(x)\, u_\ell(x) = \delta_{n\ell}$$

で与えられる。ただしここで、n と ℓ は自然数であり、$\delta_{n\ell}$ はクロネッカーのデルタである。この規格直行条件を用いて、波動関数 $\psi(x)$ が規格化されていることから係数 C を決定せよ。

(vii) エネルギーの測定を一回行ったときに得られるエネルギーの値を、確率とともに求めよ。

(viii) エネルギーの測定を多数回繰り返し行った結果得られるエネルギーの平均値を求めよ。

問題 1-4 ： 水素様原子の波動関数

水素様原子の相対運動の動径波動関数 $R(r)$ に対する動径方程式は、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right\} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right] R(r) = E\,R(r) \tag{4.1}$$

で与えられる。ここで、μ は換算質量であり、陽子の質量 M と電子の質量 m より

$$\mu = \frac{Mm}{M+m}$$

で与えられる。また、r は陽子と電子の間の相対距離、ϵ_0 は真空の誘電率、e は電子の電荷を表す。ℓ は方位量子数をあらわし、角運動量を量子化することにより $\ell = 0, 1, 2, \ldots$ の値をとることがわかっている。E はエネルギー固有値をあらわし、ここでは $E < 0$ の場合のみ考えることにする。また、電子は点粒子とし、陽子の大きさは無視する。

この問題を扱うときには、変数 ρ と λ を

$$\rho = \frac{\sqrt{8\mu|E|}}{\hbar}\, r\ , \quad \lambda = \alpha\sqrt{\frac{\mu c^2}{2|E|}}\ , \quad \left(\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}\ :,\ \text{微細構造定数}\ ,\quad c\ :\ \text{光速}\right)$$

として導入することが便利である。ρ, λ, α を用いて動径方程式 (4.1) を書き直すと、

$$\frac{d^2\, R(r)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d\, R(r)}{d\rho} - \left\{\frac{1}{4} - \frac{\lambda}{\rho} + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right\} R(r) = 0 \tag{4.2}$$

を得る。ここで、$\rho \to \infty$ での解の漸近形 $e^{-\rho/2}$ を考慮して、$R(r) = e^{-\rho/2}\, G(\rho)$ ととることにすると、(ここでの e は指数関数をあらわす。) $G(\rho)$ に対して次の方程式が導かれる。

$$\frac{d^2\, G}{d\rho^2} - \left(1 - \frac{2}{\rho}\right)\frac{d\, G}{d\rho} + \left\{\frac{\lambda - 1}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right\} G = 0 \tag{4.3}$$

以下の問に答えよ。

(i) [基本問題] 方程式 (4.3) は、$G(\rho) = C\rho^s$ の形の解を持つことが知られている。ここで C は規格化定数であり、s は実数とする。

$\frac{dG}{d\rho}$ と $\frac{d^2\,G}{d\rho^2}$ を計算せよ。

(ii) 前問の G を用いて、方位量子数 ℓ が与えられたときに、方程式 (4.3) が任意の ρ に対して成り立つことより、s と λ を ℓ を用いてあらわせ。

($R(r=0) < \infty$、すなわち、$G(\rho = 0) < \infty$ より $s \geq 0$ であることに注意せよ。)

(iii) 問 (ii) の場合のエネルギー固有値を求めよ。

(iv) 問 (iii) で求めたエネルギー固有値のうち、最小となるものは基底状態のエネルギーを与えることがわかっている。規格化条件を

$$\int_0^\infty dr\, r^2 |R(r)|^2 = 1$$

としたとき、規格化された基底状態の動径固有関数 $R(r)$ を求めよ。

(v) 問 (iv) で求めた $R(r)$ より、基底状態の電子の動径方向での存在確率 $P(r) = r^2|R(r)|^2$ を定義する。

$P(r)$ の概形を図示し、$P(r)$ が最大となる r の値を求めよ。

問題 1-5 2 次元の円内に閉じ込められた粒子の運動

2 次元の平面内で、原点を中心とする半径 a の円内に閉じ込められた質量 m 粒子の運動を量子力学的に考える。2 次元の座標を x、y とし、対応する運動量を p_x、p_y とする。また、$r \equiv \sqrt{x^2+y^2}$ とする。量子力学的ハミルトニアンは、

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + V(\hat{r})$$

で与えられる。ただしここで、ポテンシャル V は、$r \equiv \sqrt{x^2+y^2}$ のみの関数であり、

$$V(r) = \begin{cases} 0 & (r < a) \\ \infty & (r > a) \end{cases}$$

である。また、角運動量演算子を次のように定義する。

$$\hat{L} = \hat{x}\,\hat{p}_y - \hat{y}\,\hat{p}_x$$

(通常の 3 次元での角運動量は 3 成分を持つベクトルだが、この問題では 2 次元を扱っているので角運動量は 1 成分しかない。)

上の演算子で、

$$\hat{p}_x \;\to\; \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\,, \quad \hat{p}_y \;\to\; \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}$$

の置き換えを行うことにより、座標空間でのハミルトニアン演算子、角運動量演算子が次の形で与えられることがわかる。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right] + V(r)\,, \quad \hat{L} = \frac{\hbar}{i}\left[x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right] \tag{5.1}$$

この問題を扱う場合、次の極座標を使うことが便利である。

$$x = r\cos\theta\,, \quad y = r\sin\theta \tag{5.2}$$

以下の問に答えよ。

(i) [基本問題] $\begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial r} \\ \frac{1}{r}\frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{1}{r}\frac{\partial y}{\partial \theta} \end{pmatrix}$ を計算せよ。

(ii) 式 (5.1) に式 (5.2) を用いることにより、$\hat{H}$ と $\hat{L}$ を極座標を用いてあらわせ。

(iii) 時間に依存しないシュレーディンガー方程式は、エネルギー固有値を E、エネルギーの固有関数を $\Psi(r,\theta)$ として、次の形で与えられる。

$$\hat{H}\Psi(r,\theta) = E\,\Psi(r,\theta) \tag{5.3}$$

前問の答を用いて容易に確かめられるように、$\hat{H}$ と $\hat{L}$ は互いに交換する。

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{L}\right] = 0$$

これは、ハミルトニアン演算子と角運動量演算子の同時固有状態をとることができることを意味する。角運動量演算子 $\hat{L}$ は、座標 θ のみに依存し、r には依存していない。そこで、エネルギーの固有関数 $\Psi(r,\theta)$ を

$$\Psi(r,\theta) = R(r)\,\Theta(\theta)$$

と変数分離することにする。ここで、$\Theta(\theta)$ は角運動量演算子の固有関数であり、固有値を λ として、次の固有値方程式を満たしている。

$$\hat{L}\,\Theta(\theta) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\theta}\,\Theta(\theta) = \lambda\,\Theta(\theta) \tag{5.4}$$

また、$\theta = 0$ と $\theta = 2\pi$ における固有関数が等しいことから、次の形の境界条件を満たしている。

$$\Theta(\theta = 0) = \Theta(\theta = 2\pi) \tag{5.5}$$

固有値方程式 (5.4) の解が、境界条件 (5.5) を満たすことから、λ と $\Theta(\theta)$ を求めよ。(ここでは、固有関数 $\Theta(\theta)$ の規格化定数は決めなくてもよい。)

(iv) 上で求めた $\Theta(\theta)$ を時間に依存しないシュレーディンガー方程式 (5.3) に代入することにより、$0 < r < a$ において動径方向の波動関数 $R(r)$ が満たすべき固有値方程式を求めよ。

(v) $r > a$ に対しては $V(r) = \infty$ なので、$R(r) = 0$ である。よって、$r = a$ での連続性より、動径方向の波動関数は $R(r = a) = 0$ を満たす。一方、上で求めた固有値方程式の解で原点で発散しないものは、C を規格化定数として、

$$R(r) = C\,J_\ell(\rho)\ , \quad \rho = k\,r\ , \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

と、ベッセル関数 J_ℓ を用いてあらわされることが知られている。

条件 $J_\ell(\rho) = 0$、$\rho > 0$ を満たす ρ はとびとびの値をとる。これを $\rho_{\ell,n}$ $(n = 1, 2, 3, \ldots)$ とする。結果として、許されるエネルギー固有値はとびとびの値をとる。エネルギー固有値 $E_{\ell,n}$ を $\rho_{\ell,n}$ を用いてあらわせ。

(参考: $\ell = 0$ の場合の小さいほうから 3 番目までの $\rho_{0,n}$ の近似値は次のようになる。$\rho_{0,1} = 2.404$, $\rho_{0,2} = 5.520$, $\rho_{0,3} = 8.654$)