量子力学第二演習　　No.1　98/4/16

1. 量子系の状態が ケットベクトル $|\Psi>$ 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 $|x>$ を用いて $|\Psi>$ を

$$|\Psi>=\int \mathrm{d}x <x|\Psi> |x>$$

のように展開し、係数 $<x|\Psi>$ 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 $<x|\Psi>$ 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 $m\int j(x)\mathrm{d}x=<\Psi|\hat{p}|\Psi>$ 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 $\hat{H}|E>=E|E>$ を解き、縮重した二つの解 $|E>_1$ と $|E>_2$ 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、$|E>_1$ と $|E>_2$ 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 $\hat{H}|E>=E|E>$ 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

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

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

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

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 $|1>$ と 2 番目に低い状態 $|2>$ について、対応する波動関数の絶対値二乗 $|<x|1>|^2$ および $|<x|2>|^2$ 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 $|1>$ に入っていたとしよう (つまり、$c_n(0)=\delta_{n1}$)。このとき、$|<x|t>|^2$ 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 $|1>$ と 2 番目にエネルギーの低い状態 $|2>$ 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、$|<x|t>|^2$ 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

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

を考える。以下の問いに答えよ。

(1) 波動関数 $<x|n>$ 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。