量子力学A演習 解答例 （演習10）

1. 自由粒子の場合、$\hat{H}$ と $\hat{p}$ の交換関係は $[\hat{H},\hat{p}]=0$ となる事を示せ

（解答例）自由粒子のハミルトニアンは $\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}$なので、$[\hat{H},\hat{p}]=\dfrac{1}{2m}[\hat{p}^2,\hat{p}]=\dfrac{1}{2m}(\hat{p}[\hat{p},\hat{p}]+[\hat{p},\hat{p}]\hat{p})=0.$

2. 無限に高い障壁からできた次の１次元井戸型ポテンシャル問題について、以下の問いに答えよ 。

$$V(x)=\begin{cases}0 & |x|\le \frac{a}{2}\\ \infty & |x|>\frac{a}{2}\end{cases}$$

(1) 基底状態の固有関数が奇関数でなく偶関数である理由を考えよ。

（解答例） 波動関数の空間変化が大きいほど運動量は大きく、運動エネルギーも大きくなる(p.78参照）。なので、固有関数の節がなくなり空間変化が一番小さくなるのは偶関数で波長が一番大きいときしかありえない（奇関数なら節が必ずできてしまう）。このとき、エネルギーが最低（基底状態）となる。

(2) 固有関数 $\varphi_n(x)$ の規格化定数は、量子数 n によらず $\sqrt{2/a}$ であることを示せ。

（解答例） 規格化条件、$\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}|\varphi(x)|^2dx=\int_{-a/2}^{+a/2}|\varphi(x)|^2dx=1$ より決める。

[n が奇数のとき]　$\varphi_n(x)=c_n\cos\left(\dfrac{n\pi}{a}x\right)$　$(n=1,3,5,\ldots)$

$$\int_{-a/2}^{+a/2}\varphi_n(x)^*\varphi_n(x)dx=\int_{-a/2}^{+a/2}c_n^*\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)c_n\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx=|c_n|^2\int_{-a/2}^{+a/2}\cos^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx=|c_n|^2\int_{-a/2}^{+a/2}\frac{1+\cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2}dx$$

$$=|c_n|^2\left[\frac{1}{2}x\right]_{-a/2}^{+a/2}+\frac{1}{2}\int_{-a/2}^{+a/2}\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)dx=\frac{1}{2}a|c_n|^2$$

(注) $\displaystyle\int_{-a/2}^{+a/2}\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)dx=\frac{a}{2n\pi}\int_{-n\pi}^{+n\pi}\cos\theta\, d\theta=0$

$\dfrac{1}{2}a|c_n|^2=1$ より、$c_n=\sqrt{\dfrac{2}{a}}$

[n が偶数のとき]　$\varphi_n(x)=c_n\sin\left(\dfrac{n\pi}{a}x\right)$　$(n=2,4,6,\ldots)$

$$\int_{-a/2}^{+a/2}\varphi_n(x)^*\varphi_n(x)dx=\int_{-a/2}^{+a/2}c_n^*\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)c_n\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx=|c_n|^2\int_{-a/2}^{+a/2}\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx=|c_n|^2\int_{-a/2}^{+a/2}\frac{1-\cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2}dx$$

$$=|c_n|^2\left[\frac{1}{2}x\right]_{-a/2}^{+a/2}-\frac{1}{2}\int_{-a/2}^{+a/2}\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)dx=\frac{1}{2}a|c_n|^2,$$

$\dfrac{1}{2}a|c_n|^2=1$ より、$c_n=\sqrt{\dfrac{2}{a}}$

よって、 $\varphi_n(x)$ の規格化定数は、量子数 n によらず $\sqrt{2/a}$

(3) 量子数の異なる固有関数 $\varphi_n(x)$ 、$\varphi_m(x)$ は互いに直交していることを示せ。

（解答例） $\displaystyle<\varphi_n|\varphi_m>=\delta_{nm}\to\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi_n(x)^*\varphi_m(x)dx=\int_{-a/2}^{+a/2}\varphi_n(x)^*\varphi_m(x)dx=\delta_{nm}$ を示す。

(n 奇数、m 奇数の場合)

・$n\neq m$ のとき、

$$\frac{2}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\cos\left(\frac{m\pi}{a}x\right)dx=\frac{2}{a}\frac{1}{2}\int_{-a/2}^{+a/2}\left[\cos\left(\frac{(n+m)\pi}{a}x\right)+\cos\left(\frac{(n-m)\pi}{a}x\right)\right]dx$$

$$=\frac{1}{a}\left\{\left[\left(\sin\frac{(n+m)\pi x}{a}\right)\frac{a}{(n+m)\pi}\right]_{-a/2}^{+a/2}+\left[\left(\sin\frac{(n-m)\pi x}{a}\right)\frac{a}{(n-m)\pi}\right]_{-a/2}^{+a/2}\right\}$$

$$=\left(\sin\frac{(n+m)\pi}{2}+\sin\frac{(n+m)\pi}{2}\right)\frac{1}{(n+m)\pi}+\left(\sin\frac{(n-m)\pi}{2}+\sin\frac{(n-m)\pi}{2}\right)\frac{1}{(n-m)\pi}=0$$

ここで三角関数の公式 $\cos x\cdot\cos y=\dfrac{1}{2}\{\cos(x+y)+\cos(x-y)\}$と、 $n+m$，$n-m$ が偶数になる事を使った。

・$n = m$ のとき、

$$\frac{2}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}\cos^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx = \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}\left[\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)+1\right]dx = \frac{1}{a}\cdot a = 1$$

(n 偶数、m 偶数の場合)

$$\frac{2}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)dx = \frac{2}{a}\frac{1}{2}\int_{-a/2}^{+a/2}\left[\cos\left(\frac{(n-m)\pi}{a}x\right)-\cos\left(\frac{(n+m)\pi}{a}x\right)\right]dx = \delta_{nm}$$

ここで三角関数の公式 $\sin x\cdot\sin y = \frac{1}{2}\{\cos(x-y)-\cos(x+y)\}$と、 $n+m$，$n-m$ が偶数になる事を使った。

(n 偶数、m 奇数の場合)

$$\frac{2}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\cos\left(\frac{m\pi}{a}x\right)dx = \frac{2}{a}\frac{1}{2}\int_{-a/2}^{+a/2}\left[\sin\left(\frac{(n+m)\pi}{a}x\right)+\sin\left(\frac{(n-m)\pi}{a}x\right)\right]dx = \delta_{nm}$$

ここで三角関数の公式 $\sin x\cdot\cos y = \frac{1}{2}\{\sin(x+y)+\sin(x-y)\}$と、 $n+m$，$n-m$ が奇数になる事を使った。

以上、 $n \neq m$ のとき、全ての場合で $\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi_n(x)^*\varphi_m(x)dx = 0$ （直交する） が示された。

(4) 質量が$m = 9.11\times10^{-31}\mathrm{kg}$、井戸の幅が $a = 10^{-10}\mathrm{m}$ 、プランクの定数が $h = 6.63\times10^{-34}\mathrm{Js}$ として基底状態のエネルギー E_1 を求めよ。

（解答例）$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2} = \frac{(6.63\times10^{-34})(6.63\times10^{-34})(3.14\times3.14)}{2\times(9.11\times10^{-31})\times10^{-10}\times10^{-10}} = 2.38\times10^{-16}(\mathrm{J})$

(5) 質量、井戸の幅、プランク定数を増減すると何がどう変わるか。

（解答例）$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2,\quad E_{n+1} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{(n+1)\pi}{a}\right)^2,$

E_n の間隔は、$E_{n+1}-E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}((n+1)^2-n^2) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(2n+1)$ であるから、

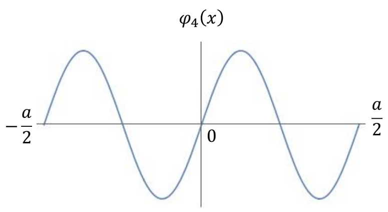
・質量：$m\to$ 小で、$E_n\to$ 大、E_n の間隔（$E_{n+1}-E_n$）も大となる。これは、軽い粒子ほど量子化が顕著である事をを意味する。

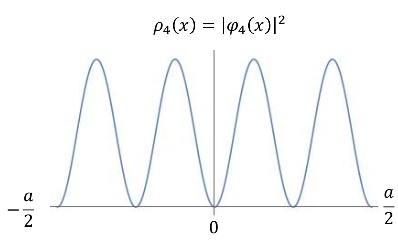
・井戸の幅：$a\to$ 小で、$E_n\to$ 大、E_n の間隔（$E_{n+1}-E_n$）も大となる。これは、狭いところに粒子を閉じ込めるほど量子化が顕著である事をを意味する。

・プランク定数：$\hbar\to$ 大で、$E_n\to$ 大、E_n の間隔（$E_{n+1}-E_n$）も大となる。これは、$\hbar$ が大きいほど量子化が顕著である事をを意味する（実際には $\hbar$ の大きさを変えることはできない）。

(6) $n = 4$ のエネルギー固有関数 $\varphi_4(x)$ と 確率密度 $\rho_4(x) = |\varphi_4(x)|^4$ のグラフの概略を書きなさい

（解答例）$\varphi_4(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{4\pi}{a}x\right)$、$\rho_4(x) = \frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{4\pi}{a}x\right)$、節の数は $n-1$ なの 3 個.





(7) 基底状態 ($n=1$)において、 $<\hat{x}>_{\varphi_1}^2$ 、 $<\hat{x}^2>_{\varphi_1}$ 、 $<\hat{p}>_{\varphi_1}^2$ 、 $<\hat{p}^2>_{\varphi_1}$ を求め、不確定性関係を満たしていることを示せ。

（解答例）（注）すべてのnで $<\hat{x}>_{\varphi_n}=0,\ <\hat{p}>_{\varphi_n}=0$ であることは、すでに講義ノートで示してあるが、ここでは、波動関数 $\varphi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)$ を実際に使い計算する。

・ $<\hat{x}>_{\varphi_1}=\int_{-a/2}^{+a/2}\varphi_1^*(x)x\varphi_1(x)dx=\frac{2}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}x\cos^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)dx=0$ 、 $\therefore <\hat{x}>_{\varphi_1}^2=0$

(参考) x は奇関数、$\cos^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$ も $\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$ も偶関数なので、その積、$x\cos^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$ や $x\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$ は奇関数になる。なので、 $|x|\le\frac{a}{2}$ の範囲での積分はnによらず０となる。よって、すべてのnに対して、

$<\hat{x}>_{\varphi_n}=<\hat{x}>_{\varphi_n}^2=0$ が成り立つ。）

・ $<\hat{x}^2>_{\varphi_1}=\int_{-a/2}^{+a/2}\varphi_1^*(x)x^2\varphi_1(x)dx=\frac{2}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}x^2\cos^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)dx=\frac{2}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}x^2\frac{1}{2}\left(1+\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\right)dx$

$=\frac{1}{a}\left[\int_{-a/2}^{+a/2}x^2dx+\int_{-a/2}^{+a/2}x^2\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)dx\right]=\frac{a^2}{12}\left(1-\frac{6}{\pi^2}\right).$

・ $<\hat{p}>_{\varphi_1}=\int_{-a/2}^{+a/2}\varphi_1^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_1(x)dx=\frac{2}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)\right)dx$

$=-i\hbar\frac{2}{a}\frac{a}{\pi}\int_{-a/2}^{+a/2}\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)dx=0$、 $\therefore <\hat{p}>_{\varphi_1}^2=0$

・ $<\hat{p}^2>_{\varphi_1}$

$=\int_{-a/2}^{+a/2}\varphi_1^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_1(x)dx=-\hbar^2\int_{-a/2}^{+a/2}\varphi_1^*(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_1(x)dx=-\hbar^2\frac{2}{a}\int_{-a/2}^{+a/2}\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)\Big)dx$

$=\hbar^2\frac{2}{a}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2\int_{-a/2}^{+a/2}\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)dx=\hbar^2\left(\frac{\pi}{a}\right)^2(=\hbar^2k^2)$

よって、

$<(\Delta\hat{x})^2>_{\varphi_1}=<\hat{x}^2>_{\varphi_1}-<\hat{x}>_{\varphi_1}^2=\frac{a^2}{12}\left(1-\frac{6}{\pi^2}\right)$

$<(\Delta\hat{p})^2>_{\varphi_1}=<\hat{p}^2>_{\varphi_1}-<\hat{p}>_{\varphi_1}^2=\hbar^2\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$

$<(\Delta\hat{x})^2>_{\varphi_1}<(\Delta\hat{p})^2>_{\varphi_1}=\frac{a^2}{12}\left(1-\frac{6}{\pi^2}\right)\cdot\hbar^2\left(\frac{\pi}{a}\right)^2=\frac{\hbar^2}{12}\left(\pi^2-6\right)\approx 0.32\hbar^2$

一方、不確定性関係の右辺は $\frac{1}{4}\hbar^2\approx 0.25\hbar^2$

以上から、基底状態は不確定性関係 $<(\Delta\hat{x})^2>_{\varphi_1}<(\Delta\hat{p})^2>_{\varphi_1}>\frac{1}{4}\hbar^2$ を満たしている $(0.32\hbar^2>0.25\hbar^2)$

(8) 基底状態と第一励起状態の固有関数 $\varphi_1(x)$ 、$\varphi_2(x)$ を重ね合わせた波動関数 $\Psi(x,t)$ の時間変化を考える。

$\Psi(x,t)=C_1\varphi_1(x)e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t}+C_2\varphi_2(x)e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t}$ ． ここで、$C_1=C_1=1/\sqrt{2}$ とする。

この時の位置の期待値の時間変化 $<\hat{x}>_{\Psi(x,t)}=\int_{-a/2}^{+a/2}\Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx$

を計算しなさい。また、エネルギーの期待値 $<\hat{H}>_{\Psi(x,t)}=\int_{-a/2}^{+a/2}\Psi^*(x,t)H\Psi(x,t)dx$

は時間変化しないことを示せ。

（解答例）

$\omega_1 = E_1/\hbar,\ \omega_2 = E_2/\hbar$とする

$$< \hat{x} >_{\Psi(x,t)} = \int_{-a/2}^{+a/2} \Psi^*(x,t) x \Psi(x,t) dx = \int_{-a/2}^{+a/2} x(C_1^*\varphi_1^* e^{i\omega_1 t} + C_2\varphi_2^* e^{i\omega_2 t})(C_1\varphi_1 e^{-i\omega_1 t} + C_2\varphi_2 e^{-i\omega_2 t}) dx$$

$$= \underbrace{\int_{-a/2}^{+a/2} x|C_1|^2|\varphi_1|^2 dx}_{\text{(奇関数なので0)}} + \underbrace{\int_{-a/2}^{+a/2} x|C_2|^2|\varphi_2|^2 dx}_{\text{(奇関数なので0)}} + \int_{-a/2}^{+a/2} xC_1^*C_2\varphi_1^*\varphi_2 e^{i(\omega_1-\omega_2)t} dx + \int_{-a/2}^{+a/2} xC_1C_2^*\varphi_1\varphi_2^* e^{-i(\omega_1-\omega_2)t}) dx$$

$$= C_1^*C_2 e^{i(\omega_1-\omega_2)t}\int_{-a/2}^{+a/2} x\varphi_1^*\varphi_2 dx + C_1C_2^* e^{-i(\omega_1-\omega_2)t}\int_{-a/2}^{+a/2} x\varphi_1\varphi_2^* dx$$

$$= I(C_1^*C_2 e^{i(\omega_1-\omega_2)t} + C_1C_2^* e^{-i(\omega_1-\omega_2)t}) = I[\frac{1}{2}(e^{i(\omega_1-\omega_2)t} + e^{-i(\omega_1-\omega_2)t})]$$

$$= I\cos[(\omega_1-\omega_2)t]$$

ここで、$I \equiv \int_{-a/2}^{+a/2} x\varphi_1^*\varphi_2 dx = \int_{-a/2}^{+a/2} x\varphi_1\varphi_2^* dx = \int_{-a/2}^{+a/2} \left\{x\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right\} dx$

$$= \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{+a/2} x[\sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) - \sin\left(\frac{-\pi x}{a}\right)] dx = \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{+a/2} x\sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) dx + \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{+a/2} x\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx$$

右辺の積分の各項は、部分積分などにより、それぞれ、

$\frac{1}{a}\int_{-a/2}^{+a/2} x\sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) dx = -\frac{2a}{9\pi^2}$、　$\frac{1}{a}\int_{-a/2}^{+a/2} x\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = +\frac{2a}{\pi^2}$ なので、

$I = 16a/9\pi^2$ となる. よって、 $< x(t) > = (16a/9\pi^2)\cos[(E_1 - E_2)t/\hbar] \sim 0.18a\cos[(E_1 - E_2)t/\hbar]$

$$< \hat{H} >_{\Psi(x,t)} = \int_{-a/2}^{+a/2} \Psi^*(x,t) H \Psi(x,t) dx = \int_{-a/2}^{+a/2} (C_1^*\varphi_1^* e^{i\omega_1 t} + C_2\varphi_2^* e^{i\omega_2 t}) H (C_1\varphi_1 e^{-i\omega_1 t} + C_2\varphi_2 e^{-i\omega_2 t}) dx$$

$$= \int_{-a/2}^{+a/2} (C_1^*\varphi_1^* e^{i\omega_1 t} + C_2\varphi_2^* e^{i\omega_2 t})(E_1C_1\varphi_1 e^{-i\omega_1 t} + E_2C_2\varphi_2 e^{-i\omega_2 t}) dx$$

$$= E_1|c_1|^2\underbrace{\int_{-a/2}^{+a/2} |\varphi_1|^2 dx}_{\text{(規格化より１)}} + E_2|c_2|^2\underbrace{\int_{-a/2}^{+a/2} |\varphi_2|^2 dx}_{\text{(規格化より１)}} + E_1c_1c_2^* e^{i(\omega_2-\omega_1)t}\underbrace{\int_{-a/2}^{+a/2} \varphi_1\varphi_2^* dx}_{\text{(直交性より0)}} + E_2c_2c_1^* e^{-i(\omega_2-\omega_1)t}\underbrace{\int_{-a/2}^{+a/2} \varphi_1^*\varphi_2 dx}_{\text{(直交性より0)}}$$

$$= \frac{E_1 + E_2}{2}$$

よって、時間変化しない。

(9) このポテンシャルに閉じ込められている粒子が、量子数 n の状態から量子数 $n-1$ の状態へ、光子を放出して遷移する場合の光子の振動数を求めよ。$n \gg 1$の時、これはエネルギー E_n を持つ古典的な粒子が、このポテンシャルの中を往復運動する時の振動数に等しいことを示せ。

（解答例）

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2, \quad E_{n-1} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{(n-1)\pi}{a}\right)^2$$

$\Delta E = E_n - E_{n-1} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n^2 - (n-1)^2) = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(2n-1)$、$\Delta E = h\nu$ なので、$\nu = \frac{\Delta E}{2\pi\hbar} = \frac{(2n-1)\pi\hbar}{4ma^2}$

$n \gg 1$ なので、$\nu \approx \frac{n\pi\hbar}{2ma^2}$　　$\cdots$(＊)　　古典的粒子の場合、$P_n = \sqrt{2mE_n} = \frac{n\pi\hbar}{a}$ 、$v_n = \frac{n\pi\hbar}{ma}$

a を往復する時間は $T_n = 2\frac{a}{v_n} = \frac{2ma^2}{n\pi\hbar}$ なので、$\nu_n = \frac{1}{T_n} = \frac{n\pi\hbar}{2ma^2}$ となり、(＊) と一致する。