量子力学A演習　解答例（演習1, 2）

演習1

(1) 電子線を結晶に当てて干渉の様子を見るためには、どの程度のエネルギー（eV）の電子線を使えば良いか。結晶の原子間隔は$1\mathrm{\AA}$とし、電子の質量は $9.1\times10^{-31}\mathrm{kg}$ とする。（$1\mathrm{eV}=1.6\times10^{-19}\mathrm{J}$）

（**解答例**）結晶を３次元の回折格子とみなすと電子の波長λが格子間隔程度（$1\mathrm{\AA}=10^{-10}\mathrm{m}$）であれば干渉が起きる。

$p=\dfrac{h}{\lambda}$ と $E=\dfrac{p^2}{2m}$ より$E=\dfrac{h^2}{2m\lambda^2}$. これより $E\sim2.4\times10^{-17}\mathrm{J}=150\mathrm{eV}$ が得られる。　　　$(h=6.6\times10^{-34}\mathrm{J\cdot sec})$

(2) 相対性理論によれば、静止質量 m_0 、運動量 p の粒子のエネルギーは $E=\sqrt{m_0^2c^4+p^2c^2}$ と書ける。ここで、c は光速である。今、光子の場合を考えると $p=\dfrac{h}{\lambda}$ を満たすことを示せ。（$m_0=0$、$E=h\nu$、$\lambda\nu=c$ を使う）

（**解答例**）光子の場合、静止質量 $m_0=0$ なので、$E=\sqrt{p^2c^2}$.　$E=h\nu$ と $\lambda\nu=c$ から $E=\dfrac{hc}{\lambda}=pc$. よって、$p=\dfrac{h}{\lambda}$が得られる。

(3)二重スリットの実験で、スリット S_1を通った波 ψ_1とスリット S_2を通った波 ψ_2 が「複素数の波」であるとしよう。$\Psi=\psi_1+\psi_2$として、$|\Psi(\mathbf{r})|^2=(\psi_1+\psi_2)^*(\psi_1+\psi_2)$ を展開しなさい。S_1のみ開いている場合の確率分布$|\psi_1|^2$とS_2のみ開いている場合の確率分布$|\psi_2|^2$の和以外の項を「干渉項」という。これを求めよ。今、$\psi_1=h_1e^{i\omega t}$, $\psi_2=h_2e^{i\omega t}$, $h_1=|h_1|e^{i\delta_1}$、$h_2=|h_2|e^{i\delta_2}$ （h_1、h_2は複素数）で表される時、具体的に干渉項を計算しなさい。

（**解答例**）$|\Psi(\mathbf{r})|^2=(\psi_1+\psi_2)^*(\psi_1+\psi_2)=\psi_1^*\psi_1+\psi_2^*\psi_2+\psi_1^*\psi_2+\psi_2^*\psi_1=|\psi_1|^2+|\psi_2|^2+\psi_1^*\psi_2+\psi_2^*\psi_1$

よって、干渉項は $\psi_1^*\psi_2+\psi_2^*\psi_1$

$\psi_1^*\psi_2+\psi_2^*\psi_1=(|h_1|e^{-i\delta_1}e^{-i\omega t})(|h_2|e^{i\delta_2}e^{i\omega t})+(|h_2|e^{-i\delta_2}e^{-i\omega t})(|h_1|e^{i\delta_1}e^{i\omega t})=|h_1||h_2|(e^{i(\delta_2-\delta_1)}+e^{-i(\delta_2-\delta_1)})$

Eulerの公式を使えば、干渉項は$2|h_1||h_2|\cos(\delta_2-\delta_1)$ となる。

演習2

(1)　式(2-2-4)の正弦波で表される波動関数を式(2-2-5)の通常の波動方程式に代入すると、$\omega^2 \propto k^2$ となってしまい、正しい分散関係(2-2-3)を満たさないことを示せ。

(解答例) $\psi(x,t) = \mathrm{A}\sin(kx - \omega t)$ なので、

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = k\mathrm{A}\cos(kx-\omega t)、\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2\mathrm{A}\sin(kx-\omega t)、\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\omega\mathrm{A}\cos(kx-\omega t)、\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -\omega^2\mathrm{A}\sin(kx-\omega t)$$

これを、$\dfrac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} - \dfrac{1}{v_{ph}^2}\dfrac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial t^2} = 0$ に代入すると　$-k^2\mathrm{A}\sin(kx-\omega t) = \dfrac{1}{v_{ph}^2}(-\omega^2)\mathrm{A}\sin(kx-\omega t)$

ゆえに、$k^2 = \dfrac{\omega^2}{v_{ph}^2}$.　この時の分散関係は$\omega^2 \propto k^2$となって分散関係(2-2-3)を満たさない。

(2) 2-2-1節に示したやり方で実際に(2-2-6)(2-2-7)の定数が $\alpha = -i\dfrac{2m}{\hbar}$、$\mathrm{A} = i$ となることを導びけ。

(解答例)

$\psi(x,t) = \cos(kx-\omega t) + \mathrm{A}\sin(kx-\omega t)$なので、

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \omega\sin(kx-\omega t) - \omega\mathrm{A}\cos(kx-\omega t)、$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = -k\sin(kx-\omega t) + k\mathrm{A}\cos(kx-\omega t)、\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2\cos(kx-\omega t) - k^2\mathrm{A}\sin(kx-\omega t)$$

これを、$\dfrac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} - \alpha\dfrac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = 0$ に代入すると、

$$-k^2\cos(kx-\omega t) - k^2\mathrm{A}\sin(kx-\omega t) = \alpha[\omega\sin(kx-\omega t) - \omega\mathrm{A}\cos(kx-\omega t)]$$

両辺のsinの係数が両辺等しいという条件から、$-k^2\mathrm{A} = \alpha\omega$.　これより、$\mathrm{A} = -\dfrac{\alpha\omega}{k^2}$.

両辺のcosの係数が両辺等しいという条件から、$-k^2 = -\alpha\omega A$.　これより、$\mathrm{A} = \dfrac{k^2}{\alpha\omega}$.

よって、$-\dfrac{\alpha\omega}{k^2} = \dfrac{k^2}{\alpha\omega}$.　これを変形して $\alpha^2 = \dfrac{-k^4}{\omega^2}$.

ここで、分散関係(2-2-3) $\omega = \dfrac{\hbar k^2}{2m}$ をこれに代入すると、$\alpha^2 = \dfrac{-k^4}{\omega^2} = -\dfrac{4m^2}{\hbar^2}$. よって、$\alpha = \pm i\dfrac{2m}{\hbar}$.

一方、$\mathrm{A} = -\dfrac{\alpha\omega}{k^2} = i\dfrac{2m}{\hbar}\dfrac{\omega}{k^2} = i$　(ただし、本文にあるように、$\alpha = -i\dfrac{2m}{\hbar}$ 負の符号を選んだ。また、$\omega = \dfrac{\hbar k^2}{2m}$ を使った。)

(3) 自由粒子の一次元の波動関数 $\psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)} = e^{i(px-Et)/\hbar}$ (2-2-9) は、分散関係(2-2-3)が成り立つなら、(2-2-8)のSchrödinger方程式を満たす。これを確かめよ。

(解答例) Schrödinger方程式 $i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$ に $\psi = e^{i(kx-\omega t)}$ を代入する。

左辺は　$i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t} = i\hbar(-i\omega)e^{i(kx-\omega t)} = \hbar\omega e^{i(kx-\omega t)}$.

右辺は、$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}(ik)^2 e^{i(kx-\omega t)} = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}e^{i(kx-\omega t)}$

結局、$\hbar\omega e^{i(kx-\omega t)} = \dfrac{\hbar^2k^2}{2m}e^{i(kx-\omega t)}$. よって、Schrödinger方程式が成り立つためには、$\omega = \dfrac{\hbar k^2}{2m}$ であれば良い。これは(2-2-3)の分散関係である。結局、(2-2-3)の分散関係が成り立つなら、$\psi = e^{i(kx-\omega t)}$ は波動関数(2-2-8)の解になっていることが示された。

(4) １次元調和振動子の古典的なハミルトニアンを書いて、2-3節の規則により、この系のハミルトニアン演算子と時間に依存したSchrödinger方程式を求めなさい。

(解答例)

１次元調和振動子の古典的なハミルトニアンは $H=\dfrac{p^2}{2m}+\dfrac{1}{2}k'x^2$ （ただし、k' はバネ定数とする）。

$p\to\hat{p}=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ の置き換え規則を使うと、ハミルトニアン演算子は$\hat{H}\equiv[-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}+\dfrac{1}{2}k'x^2]$。

Schrödinger方程式は $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\hat{H}\psi(x,t)$ であるから、求める方程式は、

$i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=[-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}+\dfrac{1}{2}k'x^2]\psi(x,t)$ となる。

(5) 角運動量 $\mathbf{L}\equiv\mathbf{r}\times\mathbf{p}$ の各成分 L_x,L_y,L_z に対応する量子力学的な演算子 $\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z$ を求めなさい。（L_x,L_y,L_zを x,y,z,p_x,p_y,p_z で表し、$p_x\to-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x},p_y\to-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial y},p_z\to-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial z}$ の規則で置き換えよ）

(解答例)

$$L_x=yp_z-zp_y\ \to\ y\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\Big)-z\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\Big)=-i\hbar\Big(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\Big)$$
$$L_y=zp_x-xp_z\ \to\ z\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Big)-x\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\Big)=-i\hbar\Big(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\Big)$$
$$L_z=xp_y-yp_x\ \to\ x\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\Big)-y\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Big)=-i\hbar\Big(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\Big)$$

(6) 位置と運動量の期待値について以下のことを求めなさい。

(a) 位置の期待値 $<x>$ は $\displaystyle\int\psi^*(x,t)x\psi(x,t)dx$ で与えられることを示せ。

(解答例) 粒子を $x\sim x+dx$ に見出す確率密度を$\mathscr{P}(x)$とすれば、確率は$\mathscr{P}(x)dx=|\psi(x,t)|^2dx$ と書ける。
よって、x の期待値は

$$<x>=\int_{-\infty}^{\infty}x\mathscr{P}(x)dx=\int_{-\infty}^{\infty}x|\psi(x,t)|^2dx=\int_{-\infty}^{\infty}x\psi^*(x,t)\psi(x,t)dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)x\psi(x,t)dx$$

（被積分関数の中でx はどこにあっても良いことに注意）

(b)運動量の期待値 $<p>$ を$m\dfrac{d<x(t)>}{dt}$から求めよ。

(解答例)

$$m\frac{d<x(t)>}{dt}=m\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)x\psi(x,t)dx=m\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)x\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}dx+m\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial t}x\psi(x,t)dx+m\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)\frac{\partial x}{\partial t}\psi(x,t)dx$$

ここで、x と t は独立な変数であるから、$\dfrac{\partial x}{\partial t}=0.$ よって上の式の最後の積分は消える。

Schrödinger方程式を変形して、$\dfrac{\partial\psi}{\partial t}=\dfrac{1}{i\hbar}\Big[-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V\psi\Big]$

これの複素共役を取ると、　$\dfrac{\partial\psi^*}{\partial t}=-\dfrac{1}{i\hbar}\Big[-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}+V\psi^*\Big]$

これらを、最初の積分の式に代入する。

$$m\frac{d<x(t)>}{dt}=m\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)x\psi(x,t)dx=m\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)x\frac{1}{i\hbar}\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V\psi\Big]dx+m\int_{-\infty}^{\infty}-\frac{1}{i\hbar}\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}+V\psi^*\Big]x\psi(x,t)dx$$

$$=m\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\hbar}{2mi}\Big[\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}x\psi-\psi^*x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\Big]dx=-\frac{i\hbar}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\Big[\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}x\psi-\psi^*x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\Big]dx\quad(*)$$

最後の式の第１項を部分積分すると、

$$\int_{-\infty}^{\infty}\Big[\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}x\psi\Big]dx=\Big[x\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\Big]_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\Big[\frac{\partial(x\psi)}{\partial x}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\Big]dx$$

ここで、この式の右辺第１項は、無限遠方には粒子がいない、という境界条件（$\psi(+\infty)=0,\ \psi(-\infty)=0$）を課す事によってゼロになる。右辺第２項をさらに部分積分すると、

$$-\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{\partial(x\psi)}{\partial x}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right]dx=-\left[\frac{\partial(x\psi)}{\partial x}\psi^*\right]_{-\infty}^{\infty}+\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{\partial^2(x\psi)}{\partial x^2}\psi^*\right]dx$$

この式の右辺第１項は、やはり、無限遠方には粒子がいない、という境界条件（$\psi^*(+\infty)=0,\ \psi^*(-\infty)=0$）を課す事によってゼロになる。

ここで、$\dfrac{\partial^2(x\psi)}{\partial x^2}=\dfrac{\partial}{\partial x}\dfrac{\partial}{\partial x}(x\psi)=\dfrac{\partial}{\partial x}(\psi+x\dfrac{\partial\psi}{\partial x})=2\dfrac{\partial\psi}{\partial x}+x\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$ なので、

全頁の（＊）の式は

$$m\frac{d<x(t)>}{dt}=-\frac{i\hbar}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}x\psi-\psi^*x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right]dx=-\frac{i\hbar}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\left[2\frac{\partial\psi}{\partial x}\psi^*+x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\psi^*-\psi^*x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right]dx$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\Big(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Big)\psi\,dx$$

$m\dfrac{d<x(t)>}{dt}=m<v>=<p>$ と考えれば運動量の期待値を表しているとみなせる。

(c) (b)の結果は $\int\psi^*(x,t)p\psi(x,t)dx$ 　で運動量 p を演算子 $-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ で置き換えたものと等しいことを確かめよ。

(解答例） 前問の結果より明らか。

(7) 時間$t=0$の時、粒子の存在確率密度$|\Psi(\mathrm{x})|^2$が幅Δのガウス分布を持つような波（波束と呼ぶことにする）を考える。この波束を実現するためには、重み$g(k)$で様々な波数kの波を重ね合わせねばならない。この時、$|g(k)|^2$は、中心がk_0で幅が$\dfrac{1}{\Delta}$であるようなガウス分布となる。この波束は時間がたつと、その中心は一定の速度$v_g=\dfrac{\hbar k_0}{m}$で運動するが、様々な波数（運動量）の波が重なっているため、その波束の幅（$|\Psi(\mathrm{x})|^2$の幅）は次第に広がっていく。その幅の変化は$\sigma=(\dfrac{\hbar}{m\Delta})t$ で与えられる（これは求めなくて良い）。以下の問いに答えよ。

(a) 電子($m=9.1\times10^{-31}\mathrm{kg}$)の場合、$\Delta\sim10^{-10}\mathrm{m}$として($\dfrac{\hbar}{m\Delta}$)を計算しなさい。$10^{-10}\mathrm{sec}$で波束の幅の変化 σ はどのくらいになるか求めよ。

(解答例） $\dfrac{\hbar}{m\Delta}\sim1.16\times10^6(\mathrm{m/s}).\ 10^{-10}\mathrm{sec}$で$1.16\times10^6(\mathrm{m/s})\times10^{-10}(\mathrm{s})\sim10^{-4}(\mathrm{m})$

(b) もし、$m=1$ gなら、波束の幅の変化 $\sigma\sim1\mathrm{mm}$になるまで、どの程度の時間がかかるか。

(解答例） $\sim10^{18}(\mathrm{sec})\sim1$ 兆年