量子力学 I 演習 問題

2000 年 2 月 15 日

樋口 さぶろお[1]

この文書の最新版は http://rice.c.u-tokyo.ac.jp/~hig/qm1-99/all.pdf にあるかもしれません.

[1] hig@rice.c.u-tokyo.ac.jp, URL:http://rice.c.u-tokyo.ac.jp/~hig/,
へや: 駒場 16 号館 809B, でんわ: (03)5454.6735

第1回　1999年10月18日

はじめに

内容と予備知識　この演習では, 冬学期の前半では, 講義 量子力学 I (清水先生) に必要な数学について説明し, 問題をときます. 冬学期の後半では, 講義 量子力学 I (清水先生) の進度に同期して問題を解きます. 量子力学 I の講義を受講せず, この演習だけを受講する場合には, 相当する内容を各自で学習して下さい.

教科書　講義の教科書 [2] に沿った記号を用いたり, のっている問題を出題したりするかもしれません.

評価　出席重視. 試験は行わない予定. 授業の際, または授業の後に提出する, 答案 (レポート) により判定します.

通知　この演習に関する通知は, 基礎科学科掲示版, 16 号館 809B 号室の前の壁, および URL: `http://rice.c.u-tokyo.ac.` で行ないます.

演習の進め方　授業時間中には持参したレポート用紙 (なるべく A4) に問題を解き， 授業の最後に提出して下さい. これにより出席もチェックします. たくさん解けなかった場合でも, 授業中に物理を考えていたことがわかるように何か書いて提出して下さい.

　また, その週の木曜日までに, 暇と興味に応じて好きなだけ問題を解いて, レポートとして 16-809B の前のポストに提出して下さい.

1.1　アンケート

問題

- 量子力学関係で, これまでに受けた授業, 今学期受ける授業を列挙して下さい.
- 今日の基礎科学科進学内定生歓迎会は, 何時からどこで行われますか.

ベクトルの空間の内積

1.2　複素ベクトルの内積

問題

$\mathbb{C}^3$ の次のベクトルの間の内積を計算せよ.

$$\vec{v}_1 = (1,0,i), \quad \vec{v}_2 = (i,1,1), \quad \vec{v}_3 = (2i+3,1,i). \tag{1.2Q.1}$$

1.3　正規直交完全系

問題

次のベクトルの組 $\langle \vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3 \rangle$ が $\mathbb{C}^3$ の正規直交完全系であることを確かめよ.

$$\vec{v}_1 = (1/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3}, i/\sqrt{3}), \tag{1.3Q.1}$$
$$\vec{v}_2 = (-1/\sqrt{6}, 2/\sqrt{6}, -i/\sqrt{6}), \tag{1.3Q.2}$$
$$\vec{v}_3 = (1/\sqrt{2}, 0, -i/\sqrt{2}). \tag{1.3Q.3}$$

1.4　正規直交完全系による展開

問題

$\mathbb{C}^3$ のベクトル $\vec{w} = (1+2i, i+1, 3)$ を上の正規直交完全系で展開した時の展開係数を求めよ.

関数空間の内積

1.5　たかだか 2 次の関数の空間

問題

定義域 $[-1,1]$ の, たかだか 2 次の関数全体の空間を考える. 関数系

$$\left\langle 1, \quad e^{\frac{3}{4}i}x, \quad \sqrt{-1}\left(x^2 - \frac{1}{3}\right) \right\rangle \tag{1.5Q.1}$$

は直交完全系になっている. これを示せ. また規格化せよ. 関数 $1+x+x^2$ をこの関数系で展開せよ.

1.6　関数系による展開

問題

$[0,1]$ 上の実関数で, $f(0)=f(1)=0$ を満たすもの全体の集合を考える.

1. 関数系 $\{f_n(x)\}(n=1,2,\ldots)$ ただし

$$f_n(x)=\sqrt{2}\sin n\pi x \tag{1.6Q.1}$$

は正規直交系であることを示せ.

2. 上の関数系は実は完全系である. 関数

$$g(x)=\begin{cases}1 & (\frac{1}{4}<x<\frac{3}{4})\\ 0 & (\text{otherwise})\end{cases} \tag{1.6Q.2}$$

を, 上の関数系で展開したときの展開係数を求めよ.

第2回　1999年10月25日

2.1　Fourier 級数展開

問題

次の周期 L の周期関数 $f(x)$ を

$$f(x)=\sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n \frac{1}{\sqrt{L}} \mathrm{e}^{2\pi n i x/L} \tag{2.1Q.1}$$

と展開した時の f_n を求めよ. なお, 基本周期 $-\frac{L}{2}<x<\frac{L}{2}$ だけを下に与える.

$$f(x)=\sin\frac{2\pi x}{L}\sin\frac{4\pi x}{L} \tag{2.1Q.2}$$

$$f(x)=1-\left|\frac{2}{L}x\right| \tag{2.1Q.3}$$

$$f(x)=\begin{cases}1 & (|x|<\frac{L}{4})\\ 0 & \text{otherwise}\end{cases} \tag{2.1Q.4}$$

2.2　微分方程式の特解

問題

強制振動の方程式

$$mx''(t)+m\omega_0^2 x(t)=mag(t) \tag{2.2Q.1}$$

の特解 $x(t)$ を, Fourier 級数として求めよ. ただし, $g(t)$ は周期 T の関数で, 基本周期 $[-\frac{T}{2},\frac{T}{2}]$ で

$$g(t)=\begin{cases}-1 & (-\frac{T}{2}<t<0)\\ +1 & (0<t<\frac{T}{2})\end{cases}. \tag{2.2Q.2}$$

2.3　微分方程式の特解

問題

強制振動の方程式

$$mx''(t) + m\gamma x'(t) + m\omega_0^2 x(t) = ma\cos\omega t \tag{2.3Q.1}$$

の特解を, 解 $x(t)$ が

$$x(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n \frac{1}{\sqrt{2\pi/\omega}} \exp(in\omega t) \tag{2.3Q.2}$$

と展開されると仮定して求めよ.

2.4 Fourier 級数と波動方程式

問題

境界条件 $u(0,t) = u(L,t) = 0$ のもとでの波動方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x,t) = v^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t) \tag{2.4Q.1}$$

を考える. 時刻 $t = 0$ で,

$$u(x,0) = a\sin\frac{\pi x}{L} \tag{2.4Q.2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,0) = b\sin\frac{2\pi x}{L} \tag{2.4Q.3}$$

だったとする. 任意の時刻での $u(x,t)$ を次の手順で求めよ.

1. まず一般解を求める. $u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t)\sin\frac{n\pi}{L}x$ と展開できると仮定し, $a_n(t)$ を求めよ.
2. 次に, $u(x,t)$ に対して, $u(x,0)$ での条件を課して, $a_n(t)$ を決定せよ.

2.5 Fourier 変換

問題

次の関数の Fourier 変換を求めよ. ただし, $a, \ell > 0$ は定数.

$$f(x) = \begin{cases} e^{-ax} & (x \geq 0), \\ 0 & \text{otherwise}, \end{cases} \tag{2.5Q.1}$$

$$f(x) = \begin{cases} 1 - |x| & (|x| \leq 1), \\ 0 & \text{otherwise}, \end{cases} \tag{2.5Q.2}$$

$$f(x) = e^{-a^2x^2} \tag{2.5Q.3}$$

Hint. Gauss 積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-a^2x^2} = \sqrt{\pi}/a. \tag{2.5Q.4}$$

第3回　1999年11月1日

3.1　Fourier 級数 の復習

問題

次の周期 $L=1$ の関数を Fourier 級数展開せよ.

$$f(x)=\begin{cases}0 & (0<x<1/2)\\ 1 & (1/2<x<1)\end{cases} \tag{3.1Q.1}$$

$$f(x)=x \quad (0<x<1) \tag{3.1Q.2}$$

3.2　Fourier 変換

問題

次の関数の Fourier 変換を求めよ. ただし, $a,\ell>0$ は定数.

$$f(x)=\begin{cases}\mathrm{e}^{-ax} & (x\geq 0),\\ 0 & \text{otherwise},\end{cases} \tag{3.2Q.1}$$

$$f(x)=\begin{cases}1-|x| & (|x|\leq 1),\\ 0 & \text{otherwise},\end{cases} \tag{3.2Q.2}$$

$$f(x)=\mathrm{e}^{-a^2x^2} \tag{3.2Q.3}$$

Hint. Gauss 積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \mathrm{e}^{-a^2x^2}=\sqrt{\pi}/a. \tag{3.2Q.4}$$

3.3　Fourier 変換と波動方程式

問題

無限区間 $-\infty<x<\infty$ で波動方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x,t)=v^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t) \tag{3.3Q.1}$$

を考える. 時刻 $t=0$ で,

$$u(x,0)=u_0\exp(-x^2/a^2) \qquad \frac{\partial}{\partial t}u(x,0)=0 \tag{3.3Q.2}$$

だったとする. 以後の時刻での $u(x,t)$ を, 次の手順で求めよ.

1. Fourier 積分表示 $u(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dka(k,t)\mathrm{e}^{ikx}$ を代入して, $a(k,t)$ の満たす微分方程式を求める.
2. $u(x,0),\dot{u}(x,0)$ を Fourier 変換して $a(k,0),\dot{a}(k,0)$ を求める.
3. 時間について積分して, $a(k,t)$ を求める.
4. 逆 Fourier 変換で $f(x,t)$ を求める.

3.4 Fourier 変換と波動方程式

問題

無限区間 $-\infty<x<\infty$ で波動方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x,t)=v^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t) \tag{3.4Q.1}$$

を考える. 時刻 $t=0$ で,

$$u(x,0)=f(x):=\begin{cases} u_0\times(1-|x/a|) & (|x|<a), \\ 0 & (\text{otherwise}), \end{cases} \tag{3.4Q.2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,0)=0 \tag{3.4Q.3}$$

だったとする. 以後の時刻での $u(x,t)$ を, 次の手順で求めよ.

1. Fourier 積分表示 $u(x,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dka(k,t)\mathrm{e}^{ikx}$ を代入して, $a(k,t)$ の満たす微分方程式を求める.
2. $u(x,0),\dot{u}(x,0)$ を Fourier 変換して $a(k,0),\dot{a}(k,0)$ を求める.
3. 時間について積分して, $a(k,t)$ を求める.
4. 逆 Fourier 変換は, 少し面倒なのでしなくてよい.

3.5 波動方程式と初期値問題

問題

上の問題で, $u(x,t)$ を, 次の手順にしたがって求めてみよ.

1. 任意の f_1, f_2 について $f(x,t) = f_1(x+vt) + f_2(x-vt)$ は波動方程式の解なのだった. そこで, ある f_1, f_2 で

$$u(x,t) = f_1(x+vt) + f_2(x-vt) \tag{3.5Q.1}$$

とかけると仮定する. 時刻 $t = 0$ での初期条件から, f_1, f_2 を定めよ.

2. 波 $u(x,t)$ の時間変化を描け.

第4回　1999年11月8日

4.1　Bra, ket vector と正規直交完全系

問題

1. 関数系 $\{\phi_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ を考える．この関数系が正規直交系であるということの定義を, bra, ket 記号 $\langle|,|\rangle$ を用いて書け.

2. 以下, この関数系が正規直交系であるとする. ある関数 ψ が, 係数 $c^k\in\mathbb{C}$ を用いて,

$$\psi(x)=\sum_{k\in\mathbb{N}}c^k\phi_k(x) \tag{4.1Q.1}$$

   と表されているとする. $c^k=\langle\phi_k|\psi\rangle$ を示せ.

3. $|f\rangle,|g\rangle$ が $|\phi_k\rangle$ を用いて,

$$|f\rangle=\sum_k f^k|\phi_k\rangle,\quad |g\rangle=\sum_k g^k|\phi_k\rangle \tag{4.1Q.2}$$

   と展開されるとする. このとき, 内積が

$$\langle f|g\rangle=\sum_k f^{k*}g^k \tag{4.1Q.3}$$

   と書けることを示せ.

4. 任意の波動関数 ψ が, ある係数 $c_k\in\mathbb{C}$ を用いて, 式 (4.1Q.1) のように表されるとき, 関数系 $\{\phi_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ は完全系であるという. 完全系であることと, ‘閉包の式’

$$1=\sum_{k\in\mathbb{N}}|\phi_k\rangle\langle\phi_k| \tag{4.1Q.4}$$

   が成立することとが同値であることを示せ.

4.2　δ-関数

問題

(超) 関数で

$$\text{任意の関数}\ f(x)\ \text{に対して}\int_{-\infty}^{\infty}dx\,f(x)\delta(x)=f(0) \tag{4.2Q.1}$$

あるいは

$$f(x) = \begin{cases} \infty & (x=0) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \delta(x) = 1 \tag{4.2Q.2}$$

を満たすような関数 $\delta(x)$ を delta 関数という. Delta 関数の一つの表示は

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, \mathrm{e}^{ikx} \tag{4.2Q.3}$$

である.

1. Delta 関数の Fourier 変換を求めよ.
2. $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{ikx}$ の Fourier 変換を求めよ.
3. $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$ を示せ.
4. $x = x_0$ が $f(x)$ の唯一の零点であるとき, $\delta(f(x)) = \frac{1}{|f'(x_0)|}\delta(x - x_0)$ を示せ.
5. $\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{|2a|}(\delta(x-a) + \delta(x+a))$ を示せ.

4.3 Fourier 変換と bra, ket 記法

問題

2 つの正規直交完全系 $\lambda_y(x) = \delta(x-y), (x \in \mathbb{R})$, $\phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{ikx}, (k \in \mathbb{R})$ を考える.

1. 閉包の式

$$1 = \int dk\ |\lambda_y\rangle\langle\lambda_y| = \int dk\ |y\rangle\langle y| \tag{4.3Q.1}$$

の両辺に, 左から $\langle k|$, 右から関数 $f(x)$ に対応する $|f\rangle$ を作用させた結果を, 普通の記法で書け.

2. 閉包の式

$$1 = \int dk\ |\phi_k\rangle\langle\phi_k| = \int dk\ |k\rangle\langle k| \tag{4.3Q.2}$$

の両辺に, 左から $\langle x|$, 右から関数 $f(x)$ に対応する $|f\rangle$ を作用させた結果を, 普通の記法で書け.

3. 閉包の式

$$1 = \int dk\ |\phi_k\rangle\langle\phi_k| = \int dk\ |k\rangle\langle k| \tag{4.3Q.3}$$

の両辺に, 左から $\langle x|$, $|y\rangle$ を作用させた結果を, 普通の記法で書け.

4. $f(x), g(x)$ の Fourier 変換をそれぞれ $F(k), G(k)$ とする. 関係

$$\int dk\, F^*(k)G(k) = \int dx\, f^*(x)g(x) \tag{4.3Q.4}$$

を, bra, ket の記号を用いて書き, 証明せよ.

4.4　Fourier 変換に関する恒等式

問題

関数 $f(t), f_i(t)$ の Fourier 変換をそれぞれ $F(\omega), F_i(\omega)$ とする. すなわち

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega F(\omega) \mathrm{e}^{i\omega t}. \tag{4.4Q.1}$$

次の関数の Fourier 変換を求めよ.

$$f(t - t_0) \tag{4.4Q.2}$$
$$f^{(n)}(t) \tag{4.4Q.3}$$
$$f(t)\mathrm{e}^{i\omega_0 t} \tag{4.4Q.4}$$
$$t^n f(t) \tag{4.4Q.5}$$
$$f_1(t) \times f_2(t) \tag{4.4Q.6}$$
$$(f_1 * f_2)(t) \tag{4.4Q.7}$$

ただし

$$(f_1 * f_2)(t) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f_1(\tau) f_2(t - \tau) d\tau \tag{4.4Q.8}$$

で定義される演算 $*$ のことを convolution (たたみこみ) という.

第5回　1999年11月15日

5.1　固有値と固有ベクトル

問題

次の行列の固有値, 固有ベクトルを求めよ.

$$\begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & i & 1 \\ -i & 0 & i \\ 1 & -i & 0 \end{pmatrix}.$$

5.2　対角化

問題

行列

$$A = \begin{pmatrix} 5 & -2 & 4 \\ 2 & 0 & 2 \\ -2 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

の固有値を求めよ. また, 行列 $Q = P^{-1}AP$ が対角行列となるような基底変換行列 P を求めよ.

5.3　正規直交系による対角化

問題

行列

$$\begin{pmatrix} 1 & i & 1 \\ -i & 1 & i \\ 1 & -i & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & \omega & \omega^2 \\ \omega^2 & 1 & \omega \\ \omega & \omega^2 & 1 \end{pmatrix}$$

が対角行列となるような正規直交基底をそれぞれ求めよ. ただし $\omega = (-1+\sqrt{-3})/2$.

5.4　対角化の応用

問題

行列

$$A = \begin{pmatrix} 0 & i & 1 \\ -i & 0 & i \\ 1 & -i & 0 \end{pmatrix}$$

について, $A^n, \exp(tA), \cos(tA)$ を求めよ.

5.5　固有 vector 展開 (微分方程式)

問題

時刻に依存する vector 変数 $\vec{x}(t) = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{pmatrix}$ が, 微分方程式

$$\frac{d^2}{dt^2}\vec{v}(t) = M\vec{v}(t), \quad ただし \quad M = \begin{pmatrix} -2 & -i \\ i & -2 \end{pmatrix}$$

にしたがって時間発展する. 初期条件は

$$\vec{v}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{d}{dt}\vec{v}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

次の手順で解 $\vec{v}(t)$ を求めよ.

1. 行列 M の固有値, (規格直交) 固有 vector $\lambda_i, \vec{v}_i$ を求める.
2. 固有 vector $\vec{v}_i$ を基底として, $\vec{v}(0), \frac{d}{dt}\vec{v}(0)$ をその線型結合としてかく.
3. 固有 vector $\vec{v}_i$ を基底として, 解を

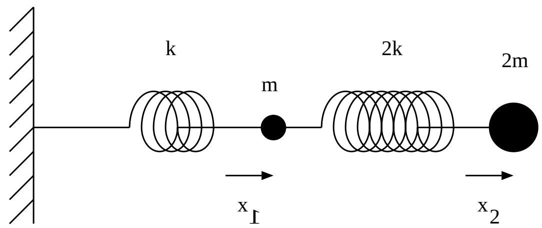
   $$\vec{v}(t) = \sum_{j=1,2} a_j(t)\vec{v}_j$$

   とかく. このとき, 係数 $a_j(t)$ の従う微分方程式を求め, 解く.
4. 初期条件を満たす解 $\vec{v}(t)$ を求める.

5.6　対角化の応用: 連成振動

問題

下のような振動子系で, 振動の一般解を求めよ. ただし, x_i はつりあいの位置からの変位とする.


k
2k
m
2m
x1
x2

第6回　1999年11月29日

6.1　演算子

問題

次の演算子を x の関数 1(恒等関数), x, $\exp kx$ に作用させてみよ. ただし, $a, b \in \mathbb{C}$ は定数. これらが線型演算子であることを納得せよ.

$$f(x) \mapsto (a + b\tfrac{d}{dx}) f(x), \tag{6.1Q.1}$$

$$f(x) \mapsto (a + bx) f(x), \tag{6.1Q.2}$$

$$f(x) \mapsto \int_0^1 dy\, e^{x+y} f(y). \tag{6.1Q.3}$$

また, 次のような演算子は線型でないことを納得せよ. ただし $A \in \mathbb{C}, A \neq 0$.

$$f(x) \mapsto A, \quad f(x) \mapsto f(x) + A, \quad f(x) \mapsto (f(x))^2.$$

6.2　演算子の固有値, 固有関数

問題

次の演算子の固有値, 固有関数 $f(x)$ をみつけよ (それですべてであることは示さなくてもよい).

$$-\sqrt{-1}\frac{d}{dx},$$

$$-\frac{d^2}{dx^2},$$

$$-\frac{d^2}{dx^2} + a,$$

$$a = a \times \mathbf{1}, \quad [\mathbf{1} : f(x) \mapsto f(x)]$$

$$x, \qquad [x : f(x) \mapsto x \times f(x)].$$

6.3　固有 vector 展開 (微分方程式)

問題

時刻に依存する vector 変数 $\vec{x}(t) = \binom{x_1(t)}{x_2(t)}$ が, 微分方程式

$$\frac{d^2}{dt^2}\vec{v}(t) = M\vec{v}(t), \quad ただし \quad M = \begin{pmatrix} -2 & -i \\ i & -2 \end{pmatrix}$$

にしたがって時間発展する. 初期条件は

$$\vec{v}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{d}{dt}\vec{v}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

次の手順で解 $\vec{v}(t)$ を求めよ.

1. 行列 M の固有値, (規格直交) 固有 vector $\lambda_i, \vec{v}_i$ を求める.
2. 固有 vector $\vec{v}_i$ を基底として, $\vec{v}(0), \frac{d}{dt}\vec{v}(0)$ をその線型結合としてかく.
3. 固有 vector $\vec{v}_i$ を基底として, 解を

   $$\vec{v}(t) = \sum_{j=1,2} a_j(t)\vec{v}_j$$

   とかく. このとき, 係数 $a_j(t)$ の従う微分方程式を求め, 解く.
4. 初期条件を満たす解 $\vec{v}(t)$ を求める.

6.4　固有関数展開 (微分方程式)

問題

時刻 t にも依存する x の関数 $f(x;t)$ が, 微分方程式

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} f(x;t) = Af(x;t)$$

にしたがって時間発展する. ただし, $|x| \to \infty$ で $|f(x)| \to \infty$ とならないような関数だけを考える. ただし, A は演算子 $A = v^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. ($v$ は定数). 初期条件は

$$f(x;t=0) = \exp(-x^2/a^2), \qquad \frac{\partial}{\partial t} f(x;t=0) = 0.$$

次の手順で解 $f(x;t)$ を求めよ.

1. 演算子 A の固有値, 固有関数 $\{\phi_k(x)\}_{k\in\mathbb{R}}$ を求める.
2. $f(x;t=0), \frac{\partial}{\partial t} f(x;t=0)$ を固有関数 $\phi_k(x)$ の線型結合としてかく.

3. 固有関数 $\phi_k(x)$ を基底として, 解を

$$f(x;t) = \int dk\, F_k(t)\phi_k(x)$$

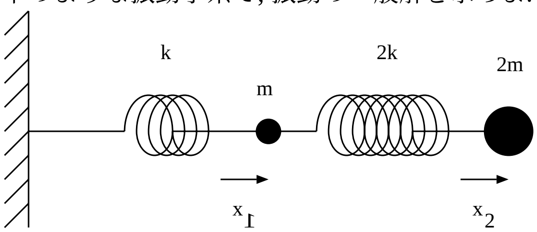
とかく. このとき, 係数関数 $F_k(t)$ の従う微分方程式を求め, 解く.

4. 初期条件を満たす解 $f(x;t)$ を求める.

6.5 対角化の応用: 連成振動

問題

下のような振動子系で, 振動の一般解を求めよ. ただし, x_i はつりあいの位置からの変位とする.



第7回　1999年12月6日

7.1　2つの状態を持つ量子力学系

問題

Spin 1/2 とよばれる系を考える (空間の一点に固定された, しかしその場で回転はできる 矢印型分子のような系を量子化したもの). Hilbert 空間は $H = \mathbb{C}^2$ である.

1. Spin の x,y,z-成分 (矢印の x,y,z-成分) という物理量を表す演算子は

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7.1Q.1}$$

   である. Spin の z-成分を測定して得られる可能性のある値は何か.

2. 系が状態 $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}\binom{2i}{1}$, にあるとする. Spin の z-成分を正確に測定した時, どのような値がどのような確率で得られるか.

3. 系が上の状態にあるとき, Spin の z-成分の期待値を求めよ.

7.2　離散固有値の確率解釈

問題

1 次元空間 $0 < x < L$ で定義された波動関数 $\psi(x)$ で周期的境界条件 $\psi(0) = \psi(L)$ を満たすものの空間を H とかく. H に属する波動関数の族

$$\psi_n(x) = A_n \mathrm{e}^{i\frac{2n\pi}{L}x}(n \in \mathbb{Z}). \tag{7.2Q.1}$$

を考える.

1. この族が直交系であることを示せ.

2. $A_n \in \mathbb{C}$ を適当に定めて, この族が正規直交系になるようにせよ.

3. $\psi_n(x)$ が, 運動量演算子 $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ の固有関数であることを示せ. 固有値を求めよ.

4. $\psi_n(x)$ が, 自由粒子の Hamiltonian $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ の固有関数であることを示せ. 固有値を求めよ.

5. 規格化されていない, H に属する波動関数

$$\phi(x) = \sin\frac{2\pi}{L}x + 2\sqrt{-1}\cos\frac{4\pi}{L}x \tag{7.2Q.2}$$

を考える. 運動量 p を測定したときに, どのような結果がどのような確率で得られるか. 運動量の期待値は何か.

6. $\phi(x)$ を考える. 運動量の 2 乗 p^2 を測定したときに, どのような結果がどのような確率で得られるか. 運動量の 2 乗の期待値は何か. p^2 に対応する演算子は $\hat{p}^2$ である.

7.3 離散状態, 確率解釈

問題

1 次元空間 $0 < x < L$ の波動関数 $\psi(x)$ で, 固定端の条件 $\psi(0) = \psi(L) = 0$ を満たすものからなる空間を H とかく.

1. 空間 H のなかで, 演算子 (自由粒子の Hamiltonian) $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ の固有関数とその固有値をすべて求めよ.
2. それを規格化し, 正規直交系にせよ.
3. 系が状態

$$\phi(x) = 3 - \cos\frac{2\pi}{L}x - 2\cos\frac{4\pi}{L}x \tag{7.3Q.1}$$

にあるとする. $\hat{H}$ に対応する物理量を測定したときに, どのような結果がどのような確率で得られるか. また, その期待値を求めよ.

7.4 Bra , ket vectors

問題

演算子 A の, 固有値 λ の固有状態を $|\psi_\lambda\rangle$ とする. しばしば, $|\psi_\lambda\rangle = |\lambda\rangle$ という略記が用いられる. 例えば, 演算子 $\hat{x}$ を, x 倍する演算子 $x\times$ とする. その, 固有値 x_0 の固有状態を $|x_0\rangle$ とすると

$$\hat{x}|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle \tag{7.4Q.1}$$

である.

1. $|x_0\rangle$ に対応する関数は, $\delta(x - x_0)$ なのだった. $\langle x_0|x_1\rangle$ を求めよ.
2. 演算子 $\hat{p} = -i\frac{\partial}{\partial x}$ とする. その固有値 p_0 の固有状態を $|p_0\rangle$ とかく. $|p_0\rangle$ に対応する関数は, $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ip_0x}$ なのだった. $\langle p_0|p_1\rangle$ を求めよ.
3. $\langle x_0|p_0\rangle, \langle p_0|x_0\rangle$ を求めよ.

4. 関数系 $\{|x_0\rangle\}_{x_0\in\mathbb{R}}, \{|p_0\rangle\}_{p_0\in\mathbb{R}}$ はいずれも完全系をなすので, 閉包の式

$$\int dx_0\,|x_0\rangle\,\langle x_0| = \int dp_0\,|p_0\rangle\,\langle p_0| = 1 \tag{7.4Q.2}$$

がなりたつ.

任意の状態 $|\psi\rangle$ について,

$$\langle p_0|\psi\rangle = \int dx_0 \langle p_0|x_0\rangle\langle x_0|\psi\rangle,$$
$$\langle x_0|\psi\rangle = \int dp_0 \langle x_0|p_0\rangle\langle p_0|\psi\rangle.$$

が成り立つことを示せ. それが Fourier 変化と逆変換であり $\langle x_0|\psi\rangle$ が $\psi(x_0)$, $\langle p_0|\psi\rangle$ がその Fourier 変換であることを説明せよ.

5. スペクトル分解

$$\hat{x} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|x\rangle\,x\,\langle x|\,,$$
$$\hat{p} = \int_{-\infty}^{\infty} dp\,|p\rangle\,p\,\langle p|\,,$$

が成立することを, 右辺を関数に作用させることによって示せ. なお, 右辺に現れる x, p は (演算子でなく) 実数.

第 8 回　1999 年 12 月 13 日

8.1　固有状態, 規格直交性, 期待値

問題

有限な 1 次元空間 $-\frac{L}{2} < x < +\frac{L}{2}$ を運動する粒子の波動関数

$$\psi_k(x) = A_k \exp(ikx) \tag{8.1Q.1}$$

を考える. $A_k > 0, k \in \mathbb{R}$.

1. 周期境界条件 $\psi_k(-L/2) = \psi_k(L/2)$ を課す. このとき, k に対する条件を求めよ. 以下, k はこの条件を満たすとする.

2. 規格化定数 $A_k > 0$ の値を定めよ.

3. 粒子が, 上の波動関数 $\psi_k(x)$ であらわされる状態にある. 位置を測定した時に, 結果が x となる確率密度 $\rho(x)$ を求めよ. x の期待値を求めよ. 位置を測定した時に, 粒子が $-\frac{L}{4} < x < \frac{L}{4}$ で発見される確率を求めよ.

4. 粒子が, 上の波動関数の重ねあわせ

$$\psi(x) = \psi_{k=2\pi/L}(x) - 2\psi_{k'=4\pi/L}(x) \tag{8.1Q.2}$$

であらわされる状態にある. 粒子の位置を測定したときに結果 x をえる 確率密度 $\rho(x)$ のグラフを描け.

5. 上の波動関数であらわされる状態にある粒子の位置を測定したとき, $-\frac{1}{4}L < x < +\frac{1}{4}L$ で発見される確率を求めよ.

注意. 規格化.

8.2　Gaussian wave packet

問題

1 次元の規格化された波動関数

$$\psi(x) = \pi^{-1/4} d^{-1/2} \exp\left[ikx - \frac{x^2}{2d^2}\right] \tag{8.2Q.1}$$

を考える ($d > 0$).

1. この波動関数 (の実部) の概形を描け.

2. 座標 $\hat{x}$ を測定したときに, 結果 x をえる確率密度 $\rho_x(x)$ を求めよ.

3. 運動量 $\hat{p}$ を測定したときに, 結果 p をえる確率密度 $\rho_p(p)$ を求めよ.

4. 演算子 $\hat{x}, \hat{x}^2, \hat{p}, \hat{p}^2$ の期待値を求めよ.

Hint. Gauss 積分, 平方完成.

5. 演算子を $\widehat{\Delta x} := \hat{x} - \langle \hat{x} \rangle, \widehat{\Delta p} := \hat{p} - \langle \hat{p} \rangle$ と定義する. 式

$$\langle (\widehat{\Delta x})^2 \rangle \times \langle (\widehat{\Delta p})^2 \rangle = \hbar^2/4 \tag{8.2Q.2}$$

を示せ. ただし, $\langle \cdot \rangle$ は(8.2Q.1) についての期待値.

Remark. これは, 不確定性関係 $\Delta x \times \Delta p \geq \hbar/2$ で等号が成り立っている場合である. 実は, 全く任意の波動関数に対して, 正準交換関係だけから出発して, ((8.2Q.2) の左辺) $\geq \hbar^2/4$ が成り立つことが示せる.

8.3 運動量表示の波動関数

問題

規格化された波動関数

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d(\tfrac{p}{\hbar}) \phi(p) \mathrm{e}^{ipx/\hbar} \tag{8.3Q.1}$$

を考える. 関数 $\phi(p)$ を, 波動関数 $\psi(x)$ であらわされる状態の, 運動量表示の波動関数という (世の中では $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} d(\frac{p}{\hbar})$ を $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} dp$ に置き換えた定義も使われる).

1. 運動量の期待値 $\langle \psi | -\hbar \frac{d}{dx} | \psi \rangle$ を $\phi(p)$ であらわせ.

Hint 先に x-積分を実行する.

2. 位置の期待値 $\langle \psi | x | \psi \rangle$ を $\phi(p)$ であらわせ.

Hint 被積分関数の中の x を d/dp などで書き直せないか.

3. 位置表示の波動関数 $\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{ikx}$ を運動量表示にせよ.

上の過程で, おそらく, δ-関数の積分表示 (テキストの問題 1-5[4] 参照)

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp(ipx) \tag{8.3Q.2}$$

および δ-関数の性質

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x - x_0) f(x) = f(x_0) \quad (f \text{ は任意の関数}) \tag{8.3Q.3}$$

を用いることになるだろう.

8.4 離散状態, 確率解釈

問題

1 次元空間 $0 < x < L$ の波動関数 $\psi(x)$ で, 固定端の条件 $\psi(0) = \psi(L) = 0$ を満たすものからなる空間を H とかく.

1. 空間 H のなかで, 演算子 (自由粒子の Hamiltonian) $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ の固有関数とその固有値をすべて求めよ.

2. それを規格化し, 正規直交系にせよ.

3. 系が状態

$$\phi(x) = 3 - \cos\frac{2\pi}{L}x - 2\cos\frac{4\pi}{L}x \tag{8.4Q.1}$$

にあるとする. $\hat{H}$ に対応する物理量を測定したときに, どのような結果がどのような確率で得られるか. また, その期待値を求めよ.

第9回　1999年12月20日

9.1　演算子の代数

問題

1. 演算子 $[x, \frac{d}{dx}]$ を求めよ.
2. 演算子 A, B を
$$A = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{dx} + x\right), \quad B = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{dx} - x\right) \tag{9.1Q.1}$$
と定義する. 次を求めよ.
$$\text{関数} \quad B(x\exp(-x^2/2)), \tag{9.1Q.2}$$
$$\text{関数} \quad (2AB+1)\exp(-x^2/2), \tag{9.1Q.3}$$
$$\text{演算子} \quad [A, B], \tag{9.1Q.4}$$
$$\text{演算子} \quad [A, B^2]. \tag{9.1Q.5}$$

9.2　交換子の性質

問題

1. 任意の演算子 A, B, C に対して次を示せ.
$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C \ \text{ (Leibniz rule)}. \tag{9.2Q.1}$$
2. 関係 $[[A, B], B] = 0$ が成り立つとき,
$$[A, B^n] = n[A, B]B^{n-1}, \qquad (n \in \mathbb{N}) \tag{9.2Q.2}$$
$$[A, g(B)] = [A, B]\,\frac{dg}{dz}(B). \tag{9.2Q.3}$$
を示せ. ただし, g は巾級数
$$g(z) = \sum_{j=0}^{\infty} g_j z^j \tag{9.2Q.4}$$
で定義される関数 (十分よい収束性を持つとしてよい).

3. 演算子 A,B に対して, $[A,B]=1$ とする. 次の式を簡単にせよ.

$$[B,A], \quad [A^2,B^2], \quad [A,\mathrm{e}^B]. \tag{9.2Q.5}$$

9.3 同時対角化可能性

問題

演算子 A,B が可換であるとする.

1. 波動関数 ϕ が, 演算子 A の固有値 a の固有関数であるとする. $B\phi \neq 0$ なら, 波動関数 $B\phi$ も, 演算子 A の固有値 a の固有関数であることを示せ.
2. 演算子 A の固有値 a の固有関数は, ϕ (とその定数倍) しかないとする. (これを, '固有値 a に縮退がない' という). このとき, ϕ は B の固有関数でもあることを示せ.

9.4 Hermitian operators

問題

演算子 A,B が, 任意の波動関数 $\phi(x),\psi(x)$ に対し, 式

$$\langle\psi|A|\phi\rangle = \langle\phi|B|\psi\rangle^*(\equiv \langle B\psi|\phi\rangle) \tag{9.4Q.1}$$

を満たすとき, B を A の Hermite 共役演算子といい, $B=A^\dagger$ とかく. $A=A^\dagger$ のとき, A は Hermite 演算子であるという. $A=-A^\dagger$ のとき, A は 反 Hermite 演算子であるという. テキストの例題 1.9 参照.

1. 演算子 A と数 (定数倍演算子) $a\in\mathbb{C}$ に対して, $(aA)^\dagger = a^*A^\dagger$ であることを示せ.
2. A が Hermite 演算子, a が実数 [純虚数] のとき, aA は Hermite [反 Hermite] 演算子であることを示せ.
3. A,B が Hermite 演算子のとき, $\{A,B\} := AB+BA$ は Hermite 演算子. $[A,B] := AB-BA$ は反 Hermite 演算子であることを示せ. 一般の演算子 A,B に対して $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ が成立することを用いてよい.
4. 演算子 $x, p=-i\hbar(d/dx), H=p^2/2m$ が hermitian であることを示せ.

Hint. これらの演算子に作用される波動関数 $\psi(x)$ は, 規格化可能で $|x|\to\infty$ で $\psi(x)\to 0$ であるとする.

5. 時間と興味のある人は $(A^\dagger)^\dagger = A$, $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ を示せ.

9.5 Hermite 演算子の固有値, 固有状態

問題

1. 演算子 A が Hermite であるということの定義をかけ.

2. Hermite 演算子 A の固有値は実数であることを示せ.

Hint. 演算子 A の固有状態 $|\phi\rangle$ を考える: $A|\phi\rangle = a|\phi\rangle$. 固有値 $a = \langle\phi|A|\phi\rangle$ が a^* に等しいことをいえばよい.

3. 反 Hermite 演算子の固有値は純虚数であることを示せ.

4. Hermite 演算子 A の, 異なる固有値に属する固有状態はたがいに直交することを示せ.

Hint. 2 つの固有状態 ϕ_1, ϕ_2 を考える: $A|\phi_1\rangle = a_1|\phi_1\rangle, A|\phi_2\rangle = a_2|\phi_2\rangle, a_1 \neq a_2$. 行列要素 $\langle\phi_1|A|\phi_2\rangle$ を評価するときに, A を $\langle\phi_1|$ に作用させてもよいし, $|\phi_2\rangle$ に作用させてもよい.

第10回　2000年1月17日

10.1　Spin-1/2 の時間発展

問題

Spin-$\frac{1}{2}$ の系を考える. Hilbert 空間は $H \simeq \mathbb{C}^2$. Spin の x,y,z 成分という物理量を表す演算子は

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{10.1Q.1}$$

である.

1. 演算子 S_x, S_y の固有値, 固有状態を求めよ.
2. 系の Hamiltonian を, $\frac{eB}{mc}$ を定数として,
$$H = -\frac{eB}{mc} S_z \tag{10.1Q.2}$$
とする. 系の固有エネルギーとエネルギー固有状態を求めよ.
3. 系の状態 $|\psi_t\rangle$ は, Schrödinger 方程式
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_t\rangle = H|\psi_t\rangle \tag{10.1Q.3}$$
にしたがって時間発展する. 時刻 $t = 0$ で $|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\binom{1}{1}$, であるとしたとき, 時刻 t での状態 $|\psi_t\rangle$ を求めよ.
4. 上の問の状況で, 時刻 t に Spin の x-成分を正確に測定した時, どのような値がどのような確率で得られるか.

10.2　理想的測定

問題

Spin-$\frac{1}{2}$ の系を考える. Hilbert 空間は $H \simeq \mathbb{C}^2$. Spin の x,y,z 成分という物理量を表す演算子は

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{10.2Q.1}$$

である. いま, Hamiltonian は zero, すなわち系は時間発展しないとする (測定の際を除いては)

1. 系が状態
$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2 \tag{10.2Q.2}$$
の状態にあるとき S_y について, ‘理想的な’ 測定を行なう. 測定結果が $+\frac{\hbar}{2}$ となる確率は何か.

2. S_y についての ‘理想的な’ 測定の結果, $+\frac{\hbar}{2}$ という結果を得たとする. 続いて S_z を測定した時, どのような結果がどのような確率で得られるか.

10.3 波動関数の時間発展

問題

有限な 1 次元空間 $0 < x < L$ を運動する自由粒子 ($H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$) の規格化された波動関数
$$\phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(ikx) \tag{10.3Q.1}$$
を考える. $k \in \mathbb{R}$. 周期境界条件 $\phi_k(0) = \phi_k(L)$ を課す (したがって $k = 2\pi n/L, n \in \mathbb{Z}$).

1. 時刻 $t = 0$ で, $\Psi(x,0) = \phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp ikx$ である波動関数の時間発展を求めよ.
2. 時刻 $t = 0$ で, $\Psi(x,0) = A(\phi_k(x) - i\phi_{2k}(x))$ であるとき, 波動関数 $\Psi(x,t)$ を求めよ. $A \in \mathbb{C}$ は規格化定数.
3. 上の 2 つの場合について, 運動量 p を測定した時, どのような結果がどのような確率で得られるか.
4. 上の 2 つの場合について, 位置 x を測定した時の, 測定結果の確率密度分布 $\rho(x,t)$ を求めよ.

10.4 Ket vector の時間発展

問題

時間 t に依存する ket vector $|\psi(t)\rangle$ が, 微分方程式
$$i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = A|\psi(t)\rangle \tag{10.4Q.1}$$
にしたがって時間発展する. A は演算子.

1. 演算子 A の固有値, 固有 ket vector を $\lambda_j, |\phi_j\rangle$ とする. 系 $|\phi_j\rangle$ が正規直交完全系をなしているとき,
$$A = \sum_j |\phi_j\rangle \lambda_j \langle\phi_j| \tag{10.4Q.2}$$
であることを示せ.

2. 係数 $\langle \phi_j | \psi(t) \rangle$ の時間発展を求めよ.

3. $|\psi(t)\rangle$ の時間発展が

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j \mathrm{e}^{-i\lambda_j t} \langle \phi_j | \psi(0) \rangle |\phi_j\rangle \tag{10.4Q.3}$$

であることを示せ.

第11回　2000年1月24日

11.1　無限に深い井戸型ポテンシャル

問題

ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (|x| < a) \\ +\infty & (|x| > a > 0) \end{cases} \tag{11.1Q.1}$$

のもとで運動する, 質量 m の粒子を考える. 正準量子化して得られる Hamiltonian $\hat{H}$ について, 固有値問題 $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ の Schrödinger 表現

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x) \tag{11.1Q.2}$$

を考える.

1. (境界条件を考慮せずに) $x < |a|$ での $\psi(x)$ の一般解を求めよ.
2. 両端 $x = \pm a$ で境界条件を課して, 固有値 E, 固有状態 $\psi(x)$ を求めよ.
3. 確率の規格化条件から, 規格化定数を定めよ.
4. エネルギーの低い方から, いくつかの波動関数の概形を描け.
5. 基底状態について, x, p の期待値を求めよ.

11.2　有限の深さの井戸型ポテンシャル

問題

質量 m の粒子が, 1 次元空間を, 幅 $2a$, 深さ V_0 の ‘井戸型’ ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} V_0(>0) & (x < -a, \text{領域 I}) \\ 0 & (|x| < a, \text{領域 II}) \\ V_0(>0) & (x > +a, \text{領域 III}) \end{cases} \tag{11.2Q.1}$$

のもとで運動している. Schrödinger 表現された固有値問題をといて, エネルギー固有状態のうち束縛されたもの ($|x| \to \infty$ で $|\psi(x)| \to 0$ となるもの) とそのエネルギー固有値を求めよ. 基底状態, いくつかの励起状態の波動関数の概形を示せ.

解き方が思いうかばない人は, 以下の手順に従ってもよい. 規格化は気にしなくてよい.

1. エネルギーを E とおき, 領域 I, II, III で, 境界条件を気にせず, それぞれ固有状態を求めよ (それぞれ, 2 つの解の線型結合となる). ここで, 固有値 E は領域によらない量であることに注意.
2. 領域 I, III で, $|x| \to \infty$ での境界条件を課せ (一方の解のの係数が 0 になる).
3. 点 $x = \pm a$ で, 2 つの波動関数が正しく接続するという条件を課せ. 連続になるべきものは何か.

11.3　片側有限井戸型ポテンシャル

問題

1 次元の粒子が, ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & (x < 0) \\ 0 & (0 < x < a) \\ 0 < V_0 < \infty & (x > a) \end{cases} \tag{11.3Q.1}$$

のもとで運動している. 束縛された (i.e. $|x| \to \infty$ で $|\psi(x)| \to 0$ となる) エネルギー固有状態とエネルギー固有値を考えよう.

1. 基底状態, 第 1,2,3 励起状態が存在するとして, その波動関数の様子を直観的に描け.
2. 以下の手順に従って, 束縛状態がいくつあるかを厳密に考えよう. まず, 境界条件を考慮すると, 領域 I $(0 < x < a)$, 領域 II $(x > a)$ それぞれで, Schrödinger 方程式の解が
$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = A\sin(kx), \tag{11.3Q.2}$$
$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = B\exp(-\kappa x) \tag{11.3Q.3}$$
であることを示せ. ただし Hamiltonian の固有値は
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = V_0 - \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}. \tag{11.3Q.4}$$
3. $x = a$ での接続条件 $\psi_{\mathrm{I}}(a) = \psi_{\mathrm{II}}(a)$, $\psi'_{\mathrm{I}}(a) = \psi'_{\mathrm{II}}(a)$ から, 条件
$$ka\cot(ka) = -\kappa a \tag{11.3Q.5}$$
を導け.
4. (12.3Q.4) から κa を ka で表す式をもう一つ作れ.
5. 縦軸を κa, 横軸を ka にとり, 許される k の値を 2 つのグラフの交点として示せ.

第12回　2000年1月31日

12.1　有限の深さの井戸型ポテンシャル

問題

質量 m の粒子が, 1 次元空間を, 幅 $2a$, 深さ V_0 の ‘井戸型’ ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} V_0(>0) & (x < -a, \text{領域 I}) \\ 0 & (|x| < a, \text{領域 II}) \\ V_0(>0) & (x > +a, \text{領域 III}) \end{cases} \tag{12.1Q.1}$$

のもとで運動している. Schrödinger 表現された固有値問題をといて, エネルギー固有状態のうち束縛されたもの ($|x| \to \infty$ で $|\psi(x)| \to 0$ となるもの) とそのエネルギー固有値を求めよ. 基底状態, いくつかの励起状態の波動関数の概形を示せ.

解き方が思いうかばない人は, 以下の手順に従ってもよい. 規格化は気にしなくてよい.

1. エネルギーを E とおき, 領域 I, II, III で, 境界条件を気にせず, それぞれ固有状態を求めよ (それぞれ, 2 つの解の線型結合となる). ここで, 固有値 E は領域によらない量であることに注意.
2. 領域 I, III で, $|x| \to \infty$ での境界条件を課せ (一方の解のの係数が 0 になる).
3. 点 $x = \pm a$ で, 2 つの波動関数が正しく接続するという条件を課せ. 連続になるべきものは何か.

12.2　不確定性関係を用いた基底状態の評価

問題

質量 m の 1 次元の調和振動子の Hamiltonian は

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \tag{12.2Q.1}$$

で与えられる. 基底状態 を $|\psi_0\rangle$ についての期待値を $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi_0|\hat{A}|\psi_0\rangle$ と略記する.

不確定性関係

$$\left\langle(\widehat{\delta x})^2\right\rangle\left\langle(\widehat{\delta p})^2\right\rangle \geq \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \tag{12.2Q.2}$$

を利用して, 基底エネルギー $\langle\hat{H}\rangle$ の下限を求めよ.

ただし,

$$\widehat{\delta x} = \hat{x} - \langle \hat{x} \rangle, \quad \widehat{\delta p} = \hat{p} - \langle \hat{p} \rangle. \tag{12.2Q.3}$$

12.3　片側有限井戸型ポテンシャル

問題

1 次元の粒子が, ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & (x < 0) \\ 0 & (0 < x < a) \\ 0 < V_0 < \infty & (x > a) \end{cases} \tag{12.3Q.1}$$

のもとで運動している. 束縛された (i.e. $|x| \to \infty$ で $|\psi(x)| \to 0$ となる) エネルギー固有状態とエネルギー固有値を考えよう.

1. 基底状態, 第 1,2,3 励起状態が存在するとして, その波動関数の様子を直観的に描け.
2. 以下の手順に従って, 束縛状態がいくつあるかを厳密に考えよう. まず, 境界条件を考慮すると, 領域 I ($0 < x < a$), 領域 II ($x > a$) それぞれで, Schrödinger 方程式の解が

$$\psi_{\mathrm{I}}(x) = A\sin(kx), \tag{12.3Q.2}$$
$$\psi_{\mathrm{II}}(x) = B\exp(-\kappa x) \tag{12.3Q.3}$$

   であることを示せ. ただし Hamiltonian の固有値は

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = V_0 - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}. \tag{12.3Q.4}$$

3. $x = a$ での接続条件 $\psi_{\mathrm{I}}(a) = \psi_{\mathrm{II}}(a)$, $\psi'_{\mathrm{I}}(a) = \psi'_{\mathrm{II}}(a)$ から, 条件

$$ka\cot(ka) = -\kappa a \tag{12.3Q.5}$$

   を導け.
4. (12.3Q.4) から κa を ka で表す式をもう一つ作れ.
5. 縦軸を κa, 横軸を ka にとり, 許される k の値を 2 つのグラフの交点として示せ.

12.4　無限に高い井戸型ポテンシャル

問題

ポテンシャルの壁の高さが有限の場合の解答の過程の適当な時点で極限 $V_0 \to \infty$ をとり, ポテンシャルの壁が無限に高い場合の固有値と固有状態

$$\psi_n(x) = \frac{1}{2\sqrt{a}}\left(\mathrm{e}^{i\frac{n\pi}{2a}x} + (-1)^{n+1}\mathrm{e}^{-i\frac{n\pi}{2a}x}\right),\ E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2}, (n = 1, 2, 3, \ldots) \tag{12.4Q.1}$$

を導け.

第13回　2000年2月7日

お知らせ

- この演習の評価は, 毎週の提出物で行ないます. 試験はありません.
- 今回の演習のレポートは 2 月 14 日まで受け付けます. ただし, 前回以前の問題で, すでに解答を配ってしまったものについては 成績には算入しません.
- 今回の演習の答案と解答は, 2 月 16 日以降に, 16-809B の前のポストから各自とっていって下さい. ただし, 3 月以降は処分してしまうかもしれません.
- 以下は 4 年生でない方の場合の日程です. 4 年生は日程が異なりますので, 事前に個別に相談しましょう.
- 2 月 16 日までに成績に関する掲示を行ないます.
- 成績についての疑問, 質問, 相談は 2 月 24 日までにお願いします. (2 月中には樋口が不在の期間がありますので, 時間がない場合には, 電話, mail, 伝言などでもけっこうですので, とりあえず疑問 etc. があることを連絡して下さい)

13.1　1 次元の確率の流れ密度

問題

1 次元の波動関数 $\Psi(x,t)$ を考えたとき, 関数

$$\rho(x,t) := |\Psi(x,t)|^2 \tag{13.1Q.1}$$

は確率密度と解釈される. 確率流れ密度 $j(x,t)$ を

$$j(x,t) = \frac{\hbar}{2m}\left[\Psi(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)^* - \Psi(x,t)^*\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)\right]$$

と定義する.

1. 次の波動関数について, 確率密度, 確率流れ密度を求めよ ($k,\omega,a \in \mathbb{R}, A \in \mathbb{C}$).

$$\Psi(x,t) = A\exp(ikx - i\omega t),$$
$$\Psi(x,t) = A\exp(-x/a - i\omega t).$$

2. Hamiltonian $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ のもとで時間発展する波動関数 $\Psi(x,t)$ について, 局所的な確率保存則 (連続の式)

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} j(x,t) = 0 \tag{13.1Q.2}$$

が成立することを示せ.

Remark. 確率流れ密度は, 3 次元では vector となり,

$$\mathbf{j}(\mathbf{x},t) = \frac{\hbar}{2m}\left[\Psi(\mathbf{x},t)\nabla\Psi(\mathbf{x},t)^* - \Psi(\mathbf{x},t)^*\nabla\Psi(\mathbf{x},t)\right] \tag{13.1Q.3}$$

と書かれる.

13.2 1 次元での散乱問題 (トンネル効果)

問題

1 次元の potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x \le 0 : \text{領域 I}) \\ V_0 > 0 & (0 \le x \le a : \text{領域 II}) \\ 0 & (x \ge a : \text{領域 III}) \end{cases} . \tag{13.2Q.1}$$

のもとで, 境界条件

$$\psi(x) \overset{x\to+\infty}{\to} C\mathrm{e}^{ikx} \; (\exists k > 0, C \neq 0) \tag{13.2Q.2}$$

を満たす (時間に依存しない) Schrödinger 方程式の解を, (与えられた) エネルギー固有値 $0 < E < V_0$ に対して求めよ.

これは束縛状態でないので, E の値は定まらない (連続的な値が許される). また規格化はしなくてよい (できない).

方針が思い浮かばない人は, 以下の方針にしたがってもよい.

1. Hamiltonian $H = p^2/2m + V(x)$ の固有値 E の固有関数を求めよ (領域 I, II, III にわけて考えよ).

Hint. 境界条件がないので, この段階では積分定数は決まらない.

2. 以下, $0 < E < V_0$ の場合を考える. 領域 III で x の正の方向に進む解 $\psi_{\mathrm{III}}(x) = C\mathrm{e}^{ikx}$ $(k > 0)$ を考えたとき, それに接続する領域 II での解を求めよ.

Hint. $x = a$ で, 波動関数とその微分の連続性が接続の条件.

3. 上で求めた領域 II での解を接続して領域 I の解を求めよ.

13.3　1次元での散乱問題(トンネル効果)

問題

1次元の potential のもとで, $x = -\infty$ の側から正の向きに入射する質量 m の粒子の散乱を考える:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x \leq 0 : \text{領域 I}) \\ V_0 > 0 & (0 \leq x \leq a : \text{領域 II}) \\ 0 & (x \geq a : \text{領域 III}) \end{cases} . \tag{13.3Q.1}$$

粒子の透過係数, 反射係数を

- エネルギー $0 < E < V_0$ のとき
- エネルギー $E > V_0$ のとき

に求めよ. 入射波がすべて反射されたり, すべて透過したりするようなエネルギー E はあるか.

方針が思い浮かばない人は, 以下の方針にしたがってもよい.

1. 散乱されている粒子を表す波動関数 $\psi(x)$ は, 次を満たすと考えられる.
   - Hamiltonian の固有関数である.
   - $x \to -\infty$ での漸近形が, ある波数 $k > 0$ で $\psi(x) \sim A\exp[ikx] + B\exp[-ikx]$ である (ここで, $A\exp[ikx]$ が入射波, $B\exp[-ikx]$ が反射波を表す).
   - $x \to +\infty$ での漸近形が, ある波数 $k > 0$ で $\psi(x) \sim C\exp[ikx]$ である (これは散乱波を表す. 粒子は負の方向から入射しているので, $D\exp[-ikx]$ のような成分はない).

   そのような波動関数を求める.

2. 確率流れ密度は

$$j(x,t) = \frac{\hbar}{2m}\left[\Psi(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)^* - \Psi(x,t)^*\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)\right] \tag{13.3Q.2}$$

   で定義されるのだった. 無限遠 $x \to \pm\infty$ での, 入射波, 反射波, 散乱波 (透過波) の確率流れ密度 $j_{\mathrm{I}}(x = -\infty), j_{\mathrm{r}}(x = -\infty), j_t(x = +\infty)$ を用いて, 反射係数 R, 透過係数 T を

$$R := \frac{|j_{\mathrm{r}}(x = -\infty)|}{|j_{\mathrm{I}}(x = -\infty)|}, T := \frac{|j_{\mathrm{t}}(x = +\infty)|}{|j_{\mathrm{I}}(x = -\infty)|} \tag{13.3Q.3}$$

   と定義する. 確率の保存 $R + T = 1$ は成り立っているか.

13.4　1次元での散乱問題

問題

Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0), \\ V_0(< 0) & (x > 0). \end{cases} \tag{13.4Q.1}$$

に, $x = -\infty$ からエネルギー E の粒子が入射する散乱問題を考える.

1. エネルギーが $E > 0(> V_0)$ のとき, 透過係数, 反射係数を求めよ.

Hint. 透過係数, 反射係数の定義をよく思い出す.

関連図書

[1] 清水先生の講義ノート http://as2.c.u-tokyo.ac.jp/lecture_note/index.html

[2] サクライ, 現代の量子力学 (吉岡書店)