演習問題

2024 年 4 月 11 日　　学籍番号 ＿＿＿＿＿＿＿＿　　氏名 ＿＿＿＿＿＿＿＿

[問 1]

(1)　Planck 定数の次元を MLT を用いて表せ。MLT とは M = mass(質量)、L = length(長さ)、T = time (時間) を用いた次元の表し方であり、例えば加速度 a は (長さ)/(時間)^2 なので、MLT で表すと $[a] = [\mathrm{LT}^{-2}]$ となる。

(2)　作用 S および角運動量 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{x} \times \boldsymbol{p}$ の次元を MLT を用いて表せ。作用はラグランジアンの時間積分であること、およびラグランジアンはエネルギーと同じ次元を持っていることを用いるとよい。

[解 1]

(1)　$h = 6.626 \times 10^{-34}\,\mathrm{kg\ m^2/s}$ より、$[h] = [\mathrm{ML^2T^{-1}}]$.

(2)　作用 S について、$[S] = [\mathrm{ML^2T^{-2}} \cdot \mathrm{T}] = [\mathrm{ML^2T^{-1}}]$. 角運動量 $\boldsymbol{L}$ について、$[\boldsymbol{x}] = [\mathrm{L}]$、$[\boldsymbol{p}] = [\mathrm{MLT^{-1}}]$ より $[\boldsymbol{L}] = [\mathrm{L} \cdot \mathrm{ML/T}] = [\mathrm{ML^2T^{-1}}]$. よって、Planck 定数は作用および角運動量と同じ次元を持つことがわかる。

[問 2]

Schrödinger 方程式

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

を用いて

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(t,x) = -\frac{\partial}{\partial x}j(t,x),$$

を示せ。ただし、確率密度と確率流は

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

で定義される。

[解 2]

Schrödinger 方程式を用いることで

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\rho(t,x) &= \frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t,x)|^2 \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(t,x)\right)\Psi(t,x) + \left(\Psi^*(t,x)\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t,x)\right) \\
&= \left(-\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi^*(t,x) + \frac{i}{\hbar}V(x)\Psi^*(t,x)\right)\Psi(t,x) + \Psi^*(t,x)\left(\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(t,x) - \frac{i}{\hbar}V(x)\Psi(t,x)\right) \\
&= -\frac{i\hbar}{2m}\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi^*(t,x)\right)\Psi(t,x) - \Psi^*(t,x)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(t,x)\right)\right] \\
&= -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\frac{\partial}{\partial x}\Psi^*(t,x)\right)\Psi(t,x) - \Psi^*(t,x)\left(\frac{\partial}{\partial x}\Psi(t,x)\right)\right] \\
&= -\frac{\partial}{\partial x}j(t,x),
\end{aligned}$$

となる。

[問 3]

Schrödinger 方程式の下で、以下の関係式

Ehrenfest の定理

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle,$$

を示せ。ただし $\langle p\rangle = \left\langle -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \Psi^*(t,x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(t,x)$ である。これは期待値が古典論の運動方程式に従うことを意味しており、Ehrenfest の定理と呼ばれる。

[解 3]

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle p\rangle &= \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \Psi^*(t,x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(t,x)\\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx\left[\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(t,x)\cdot\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(t,x) + \Psi^*(t,x)\cdot\frac{\partial}{\partial t}\left(\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(t,x)\right)\right]\\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx\left[\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(t,x)\cdot\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(t,x) + \Psi^*(t,x)\cdot\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t,x)\right)\right)\right]\\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx\left[-H\Psi^*(t,x)\cdot\frac{\partial}{\partial x}\Psi(t,x) + \Psi^*(t,x)\cdot\frac{\partial}{\partial x}\left(H\Psi(t,x)\right)\right]\\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx\left[-\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\Psi^*(t,x)\cdot\frac{\partial}{\partial x}\Psi(t,x) + \Psi^*(t,x)\cdot\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\Psi(t,x)\right]\\
&\overset{\text{部分積分}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} dx\left[-\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\Psi^*(t,x)\cdot\frac{\partial}{\partial x}\Psi(t,x) + \Psi^*(t,x)\cdot\frac{\partial}{\partial x}\left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\Psi(t,x)\right)\right]\\
&= -\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \Psi^*(t,x)\cdot\frac{\partial V}{\partial x}\cdot\Psi(t,x)\\
&= -\left\langle\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle.
\end{aligned}$$

ただし、「部分積分」の箇所では波動関数およびその微分たちが遠方で十分早く 0 になることを仮定した。

[問 4]

時刻 $t=0$ における波動関数が

$$\Psi(t=0,x) = \begin{cases} A(a^2-x^2) & (-a\le x\le a) \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases},$$

と表されているとする。ただし A, a は正の実数とする。

(1) 規格化定数 A を a の関数として表せ。

(2) $\langle x\rangle$ を求めよ。

(3) $\langle p\rangle$ を求めよ。

(4) $\langle x^2\rangle$ を求めよ。

(5) $\langle p^2\rangle$ を求めよ。

(6) σ_x^2 を求めよ。

(7) σ_p^2 を求めよ。

(8) 不確定性関係 $\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$ が成り立っていることを確かめよ。

[解 4]

(1)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ |\Psi(t=0,x)|^2 = A^2 \int_{-a}^{a} dx\ (a^2-x^2)^2 = \frac{16}{15}A^2a^5 \qquad \Longrightarrow \qquad A = \sqrt{\frac{15}{16a^5}}.$$

(2)

$$\langle x \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x(a^2-x^2)^2 = 0.$$

(3)

$$\langle p \rangle = -i\hbar A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\ (a^2-x^2)\frac{d}{dx}(a^2-x^2) = 0.$$

(4)

$$\langle x^2 \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x^2(a^2-x^2)^2 = \frac{a^2}{7}.$$

(5)

$$\langle p^2 \rangle = (-i\hbar)^2 A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\ (a^2-x^2)\frac{d^2}{dx^2}(a^2-x^2) = \frac{5\hbar^2}{2a^2}.$$

(6)

$$\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{a^2}{7}.$$

(7)

$$\sigma_p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \frac{5\hbar^2}{2a^2}.$$

(8)

$$\sigma_x \sigma_p = \sqrt{\frac{a^2}{7}}\sqrt{\frac{5\hbar^2}{2a^2}} = \sqrt{\frac{5}{14}}\hbar > \frac{\hbar}{2}.$$

[問 5]

時刻 $t=0$ における確率密度 $\rho(t=0,x)$ が

$$\rho(t=0,x)=Ae^{-\lambda(x-a)^2},$$

で与えられているとする。ここで A,a,λ は正の実数である。

(1)　規格化定数 A を求めよ。必要であれば、以下の Gauss 積分の導出のヒント

$$\left[\int_{-\infty}^{\infty}dx\ e^{-\lambda x^2}\right]^2=\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{-\infty}^{\infty}dy\ e^{-\lambda(x^2+y^2)}=\int_0^{\infty}rdr\int_0^{2\pi}d\theta\ e^{-\lambda r^2}=\int_0^{\infty}\frac{1}{2}d(r^2)\int_0^{2\pi}d\theta\ e^{-\lambda r^2},$$

を用いよ。

(2)　期待値 $\langle x\rangle,\langle x^2\rangle$ および分散 σ_x^2 を求めよ。

(3)　$\rho(t=0,x)$ のグラフの概形を描け。

[解 5]

(1)　Gauss 積分は

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\ e^{-\lambda x^2}=\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}},$$

となるから、

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\ \rho(t=0,x)=A\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}=1\qquad\Longrightarrow\qquad A=\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}.$$

(2)

$$\begin{aligned}
\langle x\rangle&=\int_{-\infty}^{\infty}dx\ x\rho(t=0,x)=\int_{-\infty}^{\infty}dx\ \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}xe^{-\lambda(x-a)^2}=\int_{-\infty}^{\infty}dx\ \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\left[(x-a)+a\right]e^{-\lambda(x-a)^2}=\int_{-\infty}^{\infty}dx\ \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}ae^{-\lambda(x-a)^2}=a,\\
\langle x^2\rangle&=\int_{-\infty}^{\infty}dx\ x^2\rho(t=0,x)=\int_{-\infty}^{\infty}dx\ \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}x^2e^{-\lambda(x-a)^2}=\int_{-\infty}^{\infty}dx\ \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\left[(x-a)^2+2a(x-a)+a^2\right]e^{-\lambda(x-a)^2}\\
&=\int_{-\infty}^{\infty}dx\ \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\left[(x-a)^2+a^2\right]e^{-\lambda(x-a)^2}=\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\left[-\frac{\partial}{\partial\lambda}+a^2\right]\int_{-\infty}^{\infty}dx\ e^{-\lambda(x-a)^2}=\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\left[-\frac{\partial}{\partial\lambda}+a^2\right]\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}\\
&=\frac{1}{2\lambda}+a^2,\\
\sigma^2&=\langle(x-\langle x\rangle)^2\rangle=\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2=\frac{1}{2\lambda}.
\end{aligned}$$

(3)　略。

[問 6]

波動関数 $\Psi(t,x)$ が

$$\Psi(t,x)=Ae^{-a\left(\frac{mx^2}{\hbar}+it\right)},$$

で与えられているとする。ただし m は考えている粒子の質量であり、A, a は正の実数とする。

(1) 規格化定数 A を a, m の関数として表せ。

(2) どのようなポテンシャル $V(x)$ に対して、上記の波動関数は Schrödinger 方程式の解となっているか。

(3) 任意の時刻 t における期待値 $\langle x\rangle, \langle x^2\rangle, \langle p\rangle, \langle p^2\rangle$ を求めよ。

(4) 分散 σ_x^2, σ_p^2 を求め、それらが不確定性関係 $\sigma_x\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$ に従っていることを確かめよ。

[解 6]

(1)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ |\Psi(t,x)|^2 = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-\frac{2amx^2}{\hbar}} = A^2\sqrt{\frac{\pi\hbar}{2am}} = 1 \qquad \Longrightarrow \qquad A = \left(\frac{2am}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}.$$

(2)

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t,x) &= a\hbar A e^{-a\left(\frac{mx^2}{\hbar}+it\right)} = a\hbar\Psi(x,t), \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(t,x) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{4am^2x^2}{\hbar^2} - \frac{2am}{\hbar}\right)\right] A e^{-a\left(\frac{mx^2}{\hbar}+it\right)} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{4am^2x^2}{\hbar^2} - \frac{2am}{\hbar}\right)\right]\Psi(x,t), \end{aligned}$$

を Schrödinger 方程式に代入して、

$$V(x)\Psi(t,x) = 2a^2mx^2\Psi(x,t),$$

よって

$$V(x) = 2a^2mx^2.$$

(3)

$$\begin{aligned} \langle x\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x|\Psi(t,x)|^2 = A^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\ xe^{-\frac{2amx^2}{\hbar}} = 0, \\ \langle x^2\rangle &= A^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\ x^2 e^{-\frac{2amx^2}{\hbar}} = \frac{\hbar}{4am}, \\ \langle p\rangle &= -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \Psi^*(t,x)\frac{\partial}{\partial x}\Psi(t,x) = 2iamA^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\ xe^{-\frac{2amx^2}{\hbar}} = 0, \\ \langle p^2\rangle &= (-i\hbar)^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \Psi^*(t,x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(t,x) = -\hbar^2A^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \left(\frac{4am^2x^2}{\hbar^2} - \frac{2am}{\hbar}\right)e^{-\frac{2amx^2}{\hbar}} = am\hbar. \end{aligned}$$

(4)

$$\begin{aligned} \sigma_x^2 &= \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = \frac{\hbar}{4am} \qquad \Longrightarrow \qquad \sigma_x = \sqrt{\frac{\hbar}{4am}}, \\ \sigma_p^2 &= \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2 = am\hbar \qquad \Longrightarrow \qquad \sigma_p = \sqrt{am\hbar}. \end{aligned}$$

よって

$$\sigma_x\sigma_p = \frac{\hbar}{2},$$

であるから、不確定性関係を満たしている。