演習問題

2024 年 4 月 18 日　　学籍番号 ＿＿＿＿＿＿＿＿　　氏名 ＿＿＿＿＿＿＿＿

[問 1]
時刻 $t = 0$ において、粒子の波動関数が 2 つの定常状態の重ね合わせ

$$\Psi(t=0,x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x),$$

にあったとする。$\psi_1(x), \psi_2(x)$ のエネルギーを E_1, E_2 とし、簡単のため c_1, c_2 は実数とする。一般の時刻 t における波動関数 $\Psi(t,x)$ を書き下せ。また、一般の時刻 t において位置 x に粒子を見出す確率密度 $|\Psi(t,x)|^2$ を書き下し、その振る舞いを見ることで、この状態は定常状態かどうか判定せよ。

[解 1]　波動関数は

$$\Psi(t,x) = c_1\psi_1(x)e^{-\frac{iE_1t}{\hbar}} + c_2\psi_2(x)e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}},$$

確率密度は

$$|\Psi(t,x)|^2 = \left|c_1\psi_1(x)e^{-\frac{iE_1t}{\hbar}} + c_2\psi_2(x)e^{-\frac{iE_2t}{\hbar}}\right|^2 = c_1^2\psi_1^2(x) + c_2^2\psi_2^2(x) + 2c_1c_2\psi_1(x)\psi_2(x)\cos\left(\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}\right),$$

となる。確率密度の最終項 $2c_1c_2\psi_1(x)\psi_2(x)\cos\left(\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}\right)$ は角振動数 $\frac{(E_2-E_1)t}{\hbar}$ で振動するため、この状態は定常状態ではない。

[問 2]
空間 1 次元においては、束縛状態に**縮退 (degeneracy)** がないことを背理法により示そう。縮退とは、2 つ (あるいはそれ以上) の異なる波動関数 $\psi_n(x)$ が同じエネルギー固有値を持つことである。「異なる波動関数」という用語について、波動関数 $\psi_1(x), \psi_2(x)$ が定数倍の違いのみであれば同じ波動関数とする。以下の方針に従うとよい。まず、異なる 2 つの波動関数を $\psi_1(x), \psi_2(x)$ とする。時間に依存しない Schrödinger 方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi_1(x) = E_1\psi_1(x), \qquad \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi_2(x) = E_2\psi_2(x),$$

であるが、縮退がある場合

$$\frac{\frac{d^2}{dx^2}\psi_1(x)}{\psi_1(x)} = \frac{\frac{d^2}{dx^2}\psi_2(x)}{\psi_2(x)},$$

となることを示し、これと各固有関数が無限遠で 0 であることから $\psi_1(x) \propto \psi_2(x)$ を導き、矛盾を示せ。

[解 2]　定数倍しても一致しない 2 つの固有関数 $\psi_1(x), \psi_2(x)$ に対し、$E_1 = E_2$ とすると、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi_1(x) = E_1\psi_1(x), \qquad \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi_2(x) = E_2\psi_2(x),$$

より

$$\frac{\frac{d^2}{dx^2}\psi_1(x)}{\psi_1(x)} = \frac{2m(V(x)-E_1)}{\hbar^2} = \frac{2m(V(x)-E_2)}{\hbar^2} = \frac{\frac{d^2}{dx^2}\psi_2(x)}{\psi_2(x)},$$

であるが、これを変形して

$$\frac{d}{dx}\left[\psi_1(x)\frac{d}{dx}\psi_2(x)-\psi_2(x)\frac{d}{dx}\psi_1(x)\right]=0,$$

となる。したがって

$$\psi_1(x)\frac{d}{dx}\psi_2(x)-\psi_2(x)\frac{d}{dx}\psi_1(x)=\text{定数},$$

であるが、各固有関数が無限遠で十分速く 0 となることから、定数部分は 0 である。すると

$$\frac{d}{dx}\left[\ln\psi_1(x)-\ln\psi_2(x)\right]=0,$$

となるから、

$$\ln\psi_1(x)=\ln\psi_2(x)+\text{定数},$$

すなわち $\psi_1(x)\propto\psi_2(x)$ である。これは 2 つの固有関数が定数倍しても一致しないことに矛盾する。よって背理法より、定数倍しても一致しない 2 つの固有関数 $\psi_1(x),\psi_2(x)$ に対してはエネルギー準位の縮退 $E_1=E_2$ は起こらない。

[問 3]

調和振動子

$$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2.$$

について、励起状態の波動関数を求めよう。

$$\xi:=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x,$$

を導入すると、波動関数 $\Psi(t,x)=\psi(x)\varphi(t)$ の $\psi(x)$ 部分について、

$$\psi(\xi)=\left(a_0+a_1\xi+a_2\xi^2+\cdots\right)e^{-\xi^2/2},$$

と展開したときの係数が漸化式

$$a_{j+2}=\frac{(2j+1)-K}{(j+1)(j+2)}a_j\quad(j=0,1,\cdots),$$

を満たすことを見た。さらに、波動関数が発散しないためには

$$K=2n+1\quad(n\in\mathbb{Z},\ n\geq 0),$$

でなければならないことも見た。さて、この漸化式を用いて $\psi_5(x)$ および $\psi_6(x)$ を求めよ。規格化定数は求めなくてよい。また、それらが Hermite 多項式 $H_n(\xi)$ に対する Rodrigues の公式

$$\psi_n(\xi)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{2^nn!}}H_n(\xi)e^{-\xi^2/2},\qquad H_n(\xi)=(-1)^ne^{\xi^2}\left(\frac{d}{d\xi}\right)^ne^{-\xi^2}.$$

を用いて求めた $\psi_5(\xi)$ および $\psi_6(\xi)$ に比例することを確認せよ。

[解 3] $n=5$ について、偶数系列は $a_0=a_2=\cdots=0$ である。奇数系列は漸化式より

$$a_3=\frac{3-11}{2\cdot 3}a_1=-\frac{4}{3}a_1,\qquad a_5=\frac{7-11}{4\cdot 5}a_3=\frac{4}{15}a_1,\qquad a_7=\frac{11-11}{6\cdot 7}a_5=0,$$

となる。$n=6$ について、奇数系列は $a_1=a_3=\cdots=0$ である。偶数系列は漸化式より

$$a_2=\frac{1-13}{1\cdot 2}a_0=-6a_0,\qquad a_4=\frac{5-13}{3\cdot 4}a_2=4a_0,\qquad a_6=\frac{9-13}{5\cdot 6}a_4=-\frac{8}{15}a_0,\qquad a_8=\frac{13-13}{7\cdot 8}a_6=0,$$

となる。また、Hermite 多項式は Rodrigues の公式より

$$\begin{aligned}
H_0(\xi)&=1,\\
H_1(\xi)&=2\xi,\\
H_2(\xi)&=4\xi^2-2,\\
H_3(\xi)&=8\xi^3-12\xi,\\
H_4(\xi)&=16\xi^4-48\xi^2+12,\\
H_5(\xi)&=32\xi^5-160\xi^3+120\xi,\\
H_6(\xi)&=64\xi^6-480\xi^4+720\xi^2-120,
\end{aligned}$$

であるから、

$$\begin{aligned}
\psi_5(\xi)&=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{2^5 5!}}\left(120\xi-160\xi^3+32\xi^5\right)e^{-\xi^2/2},\\
\psi_6(\xi)&=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{2^6 6!}}\left(-120+720\xi^2-480\xi^4+64\xi^6\right)e^{-\xi^2/2}.
\end{aligned}$$

となり、漸化式を使って求めた結果に比例している。

[問 4]

調和振動子の基底状態 $\psi_0(\xi)$ について、波動関数が古典的には禁止されている領域 ($E_0<V(x)$ となる領域) にも分布していることがわかる。粒子の位置を測定したとき、この古典的な禁止領域に粒子を見つける確率はいくらか、図 1 を参考に大まかに見積もれ。

[解 4] $|\psi_0(\xi)|^2\propto e^{-\xi^2}$ であり、また

$$E_0<V(x)\qquad\Longrightarrow\qquad\frac{\hbar\omega}{2}<\frac{1}{2}m\omega^2x^2\qquad\Longrightarrow\qquad\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}<x^2\qquad\Longrightarrow\qquad\xi<-1\ \text{ or }\ \xi>1,$$

である。図 1 より、大雑把に $\xi<-1,\xi>1$ にはどちらも全体の 10% 程度の確率が分布している。よって、古典的禁止領域に粒子を見つける確率は約 20% である。(正確に見積もると約 15.7% となる。)

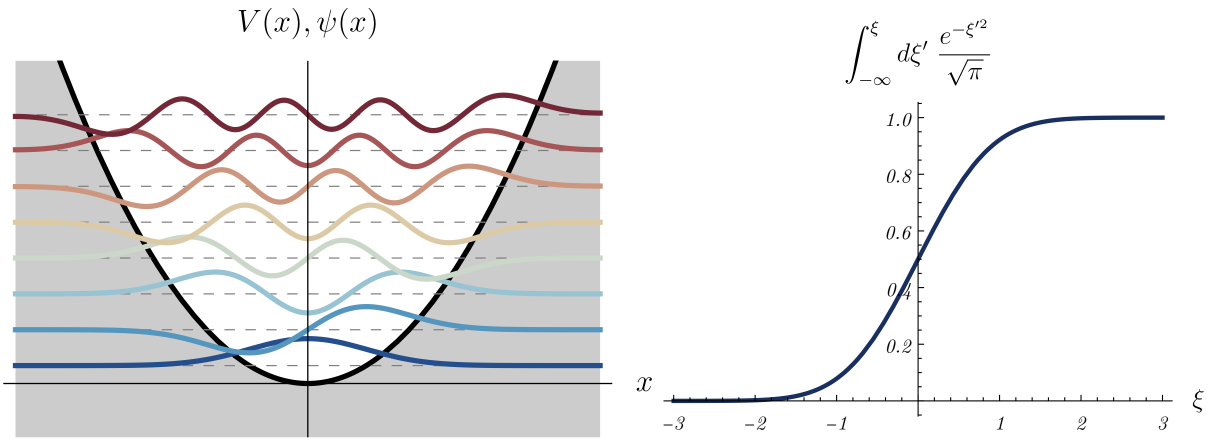

図 1: 調和振動子ポテンシャル (左)、および [問 4] の参考図 (右)。