演習問題

2025 年 4 月 17 日　　学籍番号 ＿＿＿＿＿＿＿＿　　氏名 ＿＿＿＿＿＿＿＿

[問 1]

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 1]

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

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 2]

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 2]

(1)

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

(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 3]

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 3]　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 4]

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 4]　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。