物理学演習 B [発展コース] 問題 解答例

担当 栗本 (krmt@sci.u-toyama.ac.jp)

1. (a) 一次元でのシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{H}\Psi = \left[\frac{(\hat{p})^2}{2m} + V(x)\right]\Psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right]\Psi$$

へ $\Psi = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}e^{-ax^2}$ を代入する．

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}e^{-\frac{i}{\hbar}Et}e^{-ax^2} = Ee^{-\frac{i}{\hbar}Et}e^{-ax^2} = E\Psi \\
\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right]\Psi &= e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx}(-2axe^{-ax^2}) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 e^{-ax^2}\right] \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\left[\frac{a\hbar^2}{m}\{e^{-ax^2} - 2ax^2e^{-ax^2}\} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 e^{-ax^2}\right] \\
&= \left[\frac{a\hbar^2}{m} + \{-\frac{2a^2\hbar^2}{m} + \frac{1}{2}m\omega^2\}x^2\right]\Psi
\end{aligned}$$

任意の x で両辺が等しくなるには x^2 に比例する項が 0 にならなくてはいけないので，$-\frac{2a^2\hbar^2}{m} + \frac{1}{2}m\omega^2 = 0$，すなわち $a = \frac{m\omega}{2\hbar}$．($a < 0$ の解は波動関数が $|x| \to \infty$ で発散するので採用しない．) このとき

(b) (a) より $a = \frac{m\omega}{2\hbar}$ なので，

$$E = \frac{a\hbar^2}{m} = \frac{m\omega}{2\hbar}\frac{\hbar^2}{m} = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

2. (a)

$$\hat{H}\psi_{1,2} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi_{1,2}(x) = E\psi_{1,2}(x)$$

(b)

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dx}\left[\psi_2\frac{d\psi_1}{dx} - \psi_1\frac{d\psi_2}{dx}\right] &= \psi_2\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{d\psi_2}{dx}\frac{d\psi_1}{dx} - \frac{d\psi_1}{dx}\frac{d\psi_2}{dx} - \psi_1\frac{d^2\psi_2}{dx^2} \\
&= \psi_2\frac{(-2m)}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right]\psi_1 - \psi_1\frac{(-2m)}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right]\psi_2 = 0
\end{aligned}$$

(c) (b) より

$$\psi_2\frac{d\psi_1}{dx} - \psi_1\frac{d\psi_2}{dx} = c \quad (c\text{ は定数})$$

束縛状態では無限遠での波動関数の値は 0 になるので，それと矛盾しないためいは $c = 0$ でなくてはならない．

$$\begin{aligned}
\psi_2\frac{d\psi_1}{dx} &= \psi_1\frac{d\psi_2}{dx} \\
\frac{1}{\psi_1}\frac{d\psi_1}{dx} &= \frac{1}{\psi_2}\frac{d\psi_2}{dx} \\
\frac{d}{dx}\ln\psi_1 &= \frac{d}{dx}\ln\psi_2 \\
\ln\psi_1 &= \ln\psi_2 + c_2 \quad (c_2\text{ は定数}) \\
\psi_1 &= e^{C_2}\psi_2
\end{aligned}$$

3. 波動関数はシュレーディンガー方程式

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

を満たしている．この複素共役をとると

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*(t,\vec{r}) = \hat{H}^*\Psi^*(t,\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\Psi^*(t,\vec{r})$$

これらを用いて

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) = \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi + \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}\\ &= \frac{i}{\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\Psi^*\Psi + \Psi^*\frac{(-i)}{\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\Psi\\ &= \frac{\hbar}{2im}\left[(\Delta\Psi^*)\Psi - \Psi^*(\Delta\Psi)\right] = \nabla\cdot\frac{\hbar}{2im}\left[(\nabla\Psi^*)\Psi - \Psi^*(\nabla\Psi)\right] = -\nabla\cdot\vec{j}\end{aligned}$$

よって $$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\vec{j} = 0$$

4. $x<0$ で $V(x)=\infty$ なので，そこでは波動関数は 0 になる．$0\le x$ では

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi - V_0\psi = E\psi \quad (0\le x\le a)\\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi \quad (a<x)\end{aligned}$$

それぞれの解は，境界条件 $(\psi(0)=\psi(\infty)=0)$ を考慮して

$$\begin{aligned}\psi = A\sin(kx)\ ,\ k = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} \quad (0\le x\le a)\\ \psi = Be^{-\kappa x}\ ,\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (a<x)\end{aligned}$$

束縛されているため無限遠には粒子が存在しないので，$E<0$ である．$x=a$ で ψ,ψ' が連続となる条件は

$$\begin{aligned}A\sin(ka) &= Be^{-\kappa a}\\ Ak\cos(ka) &= -B\kappa e^{-\kappa a}\end{aligned}$$

これらより

$$k\cos(ka) = -\kappa\sin(ka)$$

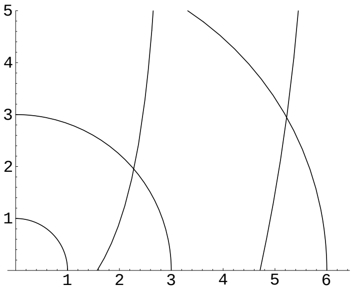
これをみたす E がエネルギーとなる．上式を変形して

$$\kappa a = -(ka)\cot(ka)$$

一方 k,κ の表式より

$$(\kappa a)^2 + (ka)^2 = \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}$$

ka を x 軸に，κa を y 軸にとって，それぞれをグラフで表すと右図のようになる．



グラフの交点から E の値を求めることができる．$\dfrac{2ma^2V_0}{\hbar^2} < \dfrac{\pi^2}{4}$ では交点となる解が無いので，束縛状態が存在しないことが分かる．

5. 立方体の箱の一つの頂点を座標軸の原点に置き，垂直な 3 辺の方向に x, y, z 軸をとる．このときポテンシャル $V(x,y,z)$ は

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0 & (0 < x < a \text{ かつ } 0 < y < a \text{ かつ } 0 < z < a \text{ のとき}) \\ \infty & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

波動関数を $\psi(x,y,z)$ と記すと

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x,y,z) \right] \psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

x, y, z いずれかの座標の値が 0 から a の間に入らない場合，ポテンシャルは ∞ となるので波動関数の値は 0 になる．$0 < x < a$ かつ $0 < y < a$ かつ $0 < z < a$ の場合，$\psi(x,y,z) = \phi_x(x)\phi_y(y)\phi_z(z)$ と変数分離してシュレーディンガー方程式に代入すると

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2\phi_x}{dx^2}\phi_y\phi_z + \phi_x\frac{d^2\phi_y}{dy^2}\phi_z + \phi_x\phi_y\frac{d^2\phi_z}{dz^2} \right] &= E\phi_x\phi_y\phi_z \\ \frac{1}{\phi_x}\frac{d^2\phi_x}{dx^2} + \frac{1}{\phi_y}\frac{d^2\phi_y}{dy^2} + \frac{1}{\phi_z}\frac{d^2\phi_z}{dz^2} &= -\frac{2mE}{\hbar^2} \end{aligned}$$

左辺の第 1,2,3 項はそれぞれ x, y, z だけの関数，右辺は定数なのでこの方程式が成立するには左辺の第 1,2,3 項がそれぞれ定数でなければならない．

$$\frac{1}{\phi_x}\frac{d^2\phi_x}{dx^2} = -\frac{2mE_x}{\hbar^2}\ ,\ \frac{1}{\phi_y}\frac{d^2\phi_y}{dy^2} = -\frac{2mE_y}{\hbar^2}\ ,\ \frac{1}{\phi_z}\frac{d^2\phi_z}{dz^2} = -\frac{2mE_z}{\hbar^2}$$

$$E_x\ ,\ E_y\ ,\ E_z \text{ は定数で } E_x + E_y + E_z = E$$

まず ϕ_x について考えると

$$\frac{d^2\phi_x}{dx^2} = -\frac{2mE_x}{\hbar^2}\phi_x$$

この一般解は

$$\phi_x = C_{1x}e^{ik_x x} + C_{2x}e^{-ik_x x}\ ,\quad k_x = \frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar}$$

境界条件 $\phi_x(0) = \phi_x(a) = 0$ より

$$C_{1x} + C_{2x} = 0\ ,\quad C_{1x}e^{ik_x a} + C_{2x}e^{-ik_x a} = 0$$

これらから $C_{1x} = -C_{2x}$, $\sin(k_x a) = 0$ よって $k_x = \frac{n_x\pi}{a}$ (n_x は自然数)，$E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2 n_x^2}{2ma^2}$．$\phi_x = C_x\sin(\frac{n_x\pi x}{a})$．同様にして $E_y = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2 n_y^2}{2ma^2}$．$\phi_y = C_y\sin(\frac{n_y\pi y}{a})$．$E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2 n_z^2}{2ma^2}$．$\phi_z = C_z\sin(\frac{n_z\pi z}{a})$．これらより

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)\quad (n_z,\ n_y,\ n_z \text{ は自然数}) \\ \psi(x,y,z) &= C\sin(\frac{n_x\pi x}{a})\sin(\frac{n_y\pi y}{a})\sin(\frac{n_z\pi z}{a}) \end{aligned}$$