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.

$$
\begin{aligned}
e^{ia\hat{p}/\hbar}\psi(x) &= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}(\frac{ia\hat{p}}{\hbar})^k\psi(x) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}(a\frac{d}{dx})^k\psi(x) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{a^k}{k!}\psi^{(k)}(x) \\
(&= \psi(x) + a\psi'(x) + \frac{a^2}{2}\psi''(x) + \cdots : \quad \psi(x+a) \text{ のテーラー展開になっている}) \\
&= \psi(x+a)
\end{aligned}
$$

(注：これは運動量演算子が座標を並進させる演算子であることを意味している．)

2. シュレーディンガー方程式に $\Psi(t,\vec{r}) = \sum_n a_n(t)\psi_n(\vec{r})$ を代入する．

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi &= \hat{H}\Psi \\
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_n a_n\psi_n &= \hat{H}\sum_n a_n\psi_n \\
i\hbar\sum_n \frac{da_n}{dt}\psi_n &= \sum_n a_n\hat{H}\psi_n
\end{aligned}
$$

両辺に左から ψ_m^* をかけて位置 $\vec{r}$ につき積分する

$$
\begin{aligned}
i\hbar\sum_n \frac{da_n}{dt}\int\psi_m^*\psi_n\, d^3\vec{r} &= \sum_n a_n\int\psi_m^*\hat{H}\psi_n\, d^3\vec{r} \\
i\hbar\frac{da_m}{dt} &= \sum_n H_{mn}a_n
\end{aligned}
$$

ここで $\int\psi_m^*\psi_n\, d^3 = \delta_{mn}$，$H_{mn} = \int\psi_m^*\hat{H}\psi_n\, d^3\vec{r}$ を用いた．最後の式が求める方程式である．行列と縦ベクトルで表すと以下のようになる．

$$
i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1N} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1} & H_{N2} & \cdots & H_{NN} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}
$$

3. 3 次元調和振動子についての時間に依存しないシュレーディンガー方程式は

$$
\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{1}{2}m\omega_x^2x^2 + \frac{1}{2}m\omega_y^2y^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2z^2\right]\Psi(x,y,z) = E\Psi(x,y,z)
$$

で与えられる．ここで m は振動子の質量，$\omega_x, \omega_y, \omega_z$ は正の実数定数である．波動関数 $\Psi(x,y,z)$ が変数分離できるとして $\Psi(x,y,z) = \phi_x(x)\phi_y(y)\phi_z(z)$ と置いて代入すると

$$
\begin{aligned}
&\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{1}{2}m\omega_x^2x^2 + \frac{1}{2}m\omega_y^2y^2 + \frac{1}{2}m\omega_z^2z^2\right]\phi_x(x)\phi_y(y)\phi_z(z) = E\phi_x(x)\phi_y(y)\phi_z(z) \\
&\frac{1}{\phi_x(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega_x^2x^2\right]\phi_x(x) + \frac{1}{\phi_y(y)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2}m\omega_y^2y^2\right]\phi_y(y) \\
&\qquad + \frac{1}{\phi_z(z)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2}m\omega_z^2z^2\right]\phi_z(z) = E
\end{aligned}
$$

左辺の第 1 項，第 2 項，第 3 項はそれぞれ x, y, z だけの関数であり，その和が右辺の定数になるので，各項も定数でなければならない．

$$\begin{aligned}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega_x^2x^2\right]\phi_x(x) &= E_x\phi_x(x)\\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2}+\frac{1}{2}m\omega_y^2y^2\right]\phi_y(y) &= E_y\phi_y(y)\\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}+\frac{1}{2}m\omega_z^2z^2\right]\phi_z(z) &= E_z\phi_z(z)\\ E_x+E_y+E_z &= E\end{aligned}$$

ϕ_x, ϕ_y, ϕ_z それぞれについての方程式は 1 次元調和振動子のシュレーディンガー方程式になっているので，エネルギー $E_n=\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$ の固有関数を ξ_n と記せば

$$\begin{aligned}\Psi(x,y,z) &= \xi_{n_x}(x)\xi_{n_y}(y)\xi_{n_z}(z)\\ E &= \hbar\omega_x(n_x+\frac{1}{2})+\hbar\omega_y(n_y+\frac{1}{2})+\hbar\omega_z(n_z+\frac{1}{2})\end{aligned}$$

4. (a) 1 次元での運動量演算子 $\hat{p}$ は，座標を q として $-i\hbar\dfrac{d}{dq}$ で与えられる．関数 $Ce^{ipq/\hbar}$ (C は規格化の定数) は 運動量演算子 $\hat{p}$ に対して

$$\hat{p}(Ce^{ipq/\hbar})=-i\hbar\frac{d}{dq}(Ce^{ipq/\hbar})=pCe^{ipq/\hbar}$$

となるので，固有値 p の固有関数である．規格化条件より定数 C を求めると

$$\begin{aligned}\delta(p-p') &= \int_{-\infty}^{\infty}dq\ \phi_{p'}^*(q)\phi_p(q)=|C|^2\int_{-\infty}^{\infty}dq\ e^{i(p-p')q/\hbar}\\ (\tfrac{q}{\hbar}=k\ \text{とおいて}) &= |C|^2\hbar\int_{-\infty}^{\infty}dk\ e^{i(p-p')k}=|C|^2\hbar2\pi\delta(p-p')\end{aligned}$$

よって $C=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ にとることができる．

(b) 自由粒子のハミルトニアンは $\hat{H}=\dfrac{(\hat{p})^2}{2m}$ で与えられる．これは運動量だけに依存するので，運動量の固有関数はこのハミルトニアンの固有関数である．固有値 E は，

$$E\phi_p(q)=\frac{(\hat{p})^2}{2m}\phi_p(q)=\frac{p^2}{2m}\phi_p(q)$$

より $E=p^2/2m$ である．

(c)

$$\delta(q) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dke^{ikq}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dp\frac{1}{\hbar}e^{ipq/\hbar}=\int_{-\infty}^{\infty}dp\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{e^{ipq/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

よって $c_p=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$

5. (a) 時間に依存しないシュレーディンガー方程式は

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

となる．

$x < 0$ または $L < x$ ではポテンシャルエネルギーの値が無限大となるので粒子は存在できない．よって

$$\psi(x) = 0 \quad (x < 0 \text{ または } L < x)$$

$0 \leq x \leq L$ では $V(x) = 0$ なので，シュレーディンガー方程式は次のようになる．

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x)$$

この微分方程式は容易に解けて一般解は

$$\psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} \quad (k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar})$$

$x = 0$ で $\psi(x) = 0$ となるため

$$\psi(0) = C_1 + C_2 = 0 \Rightarrow \psi(x) = C_1[e^{ikx} - e^{-ikx}] = 2iC_1 \sin(kx) \equiv A\sin(kx) \quad (A = 2iC_1)$$

$x = L$ で $\psi(x) = 0$ となるため

$$\psi(L) = A\sin(kL) = 0 \Rightarrow k = \frac{n\pi}{L} \quad (n \text{ は整数})$$

$n = 0$ は任意の x で $\psi(x) = 0$ となるので採用しない．n が負のときは $n = -\ell$ とおいて，

$$\psi = A\sin(\frac{n\pi}{L}) = A\sin(\frac{-\ell\pi}{L}) = -A\sin(\frac{\ell\pi}{L})$$

規格化定数 A には位相の不定性があるので $-A$ をあらためて A としてよい．よって n が自然数の時だけを考えればよい．定数 A は規格化条件より

$$1 = \int_{\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_0^L |A|^2 \sin^2(\frac{n\pi x}{L})dx = \frac{|A|^2 L}{2} \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}e^{i\theta} \quad (\theta \text{ は任意の実数})$$

と求められて，波動関数は以下のようになる．(位相の不定性 $e^{i\theta}$ は省略)

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0 \text{ または } L < x) \\ \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi x}{L}) & (0 \leq x \leq L) \end{cases}$$

このとき，エネルギー E の値は $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} = \dfrac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$ (n は自然数) であたえられ，とびとびの値をとる．

(b) パウリの排他律により，フェルミ粒子である電子は同じ状態に 2 つ以上の電子は存在できない．スピン 1/2 の向きの状態が二通りあることを考慮しながらこの系でエネルギーの低い状態から電子を順につめていくと，E_1 に 2 つ，E_2 に 2 つ，E_3 に 1 つとなるので，この場合のエネルギーの値は $2E_1 + 2E_2 + E_3$

(c) ボーズ粒子の場合は同じ状態にいくつも粒子が存在できるので，最も低いエネルギーの値は $5E_1$．