量子力学A 試験問題 (H30, 6/4) 担当：栗本

- 以下の 大問 1 に必答し，残りの大問 **2, 3** から **1** つを選んで解答せよ．
- 全ての解答用紙に氏名と番号を記入すること。
- 大問 **1** を除き，解答は物理学科の同級生に説明するつもりで論理をはっきりとさせ，他人に読んでもらうことを意識して解答を記すこと．結果だけの解答、途中の論理や計算が不明な解答はたとえ答が合っていても大幅な減点とする。

1. **(必答問題)** 以下の問いに答えよ．この問題への解答は結果のみを記すこと．
   (a)，(b) の計算には，プランク定数 $h = 6.6 \times 10^{-34}$ [J s]，$\hbar = h/(2\pi) = 1.1 \times 10^{-34}$ [J s]，光速 $c = 3.0 \times 10^{8}$ [m/s]，電子の質量 $m_e = 9.1 \times 10^{-31}$ [kg]，1 [eV] $= 1.6 \times 10^{-19}$ [J]，1 [Å] $= 1.0 \times 10^{-10}$ [m] を用いよ．　(各 10 点，計 70 点)

   (a) ある金属の仕事関数 (光電効果で電子が出てくるために必要な最小のエネルギー) は 4.5 [eV] である．この金属に電磁波をあてて光電効果が起きる電磁波の波長 λ についての制限を **有効数字 1 桁** で求めよ．

   (b) 電子の物質波の波長を 5 [Å] 以下にするために必要な電子の運動エネルギー E についての制限を **[eV] を単位として，有効数字 1 桁** で求めよ．

   (c) 1 次元で，ある粒子の波動関数が $\psi(x) = Ne^{-|x|/d}$ で与えられている．(N, d は正の実数定数) 規格化条件を用いて N を d で表わせ．

   (d) 1 次元で，波動関数 $\psi(x)$ が $\psi(x+L) = \psi(x)$ という周期境界条件を満たしている．波動関数を $\psi(x) = Ce^{ipx/\hbar}$ (C は 0 でない定数) とした場合，p がとりうる値を求めよ．ただし，答に整数が入る場合はそれを n と記すこと．

   (e) ある物理量 Z に対応するエルミート演算子 $\hat{Z}$ の固有値を $z_1, z_2, \ldots, z_n, \ldots$ とし，縮退はないものとする．各固有値に対する規格化された固有関数を $\phi_1, \phi_2, \ldots, \phi_n, \ldots$ とする．粒子の波動関数 ψ が $\psi = \displaystyle\sum_{k=1}^{\infty} a_k\ \phi_k = a_1\phi_1 + a_2\phi_2 + \cdots$ で表されているとき，波動関数 ψ の規格化条件を a_n を用いて表せ．

   (f) 位置の演算子を $\hat{x}$，運動量の演算子を $\hat{p}$ とし，新しい演算子を $\hat{a} = \hat{x} + i\hat{p}$ で定義する．このとき，交換関係 $[\ \hat{a}\ ,\ \hat{a}^\dagger\ ]$ の値を求めよ．

   (g) 状態 $|1\rangle$，$|2\rangle$ を考え，それらは $\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1$，$\langle 1|2\rangle = \langle 2|1\rangle = 0$ と規格直交化されているとする．ハミルトニアン演算子 $\hat{H}$ が $|1\rangle$，$|2\rangle$ に作用すると

   $$\hat{H}|1\rangle = i\hbar\omega|2\rangle\ ,\quad \hat{H}|2\rangle = -i\hbar\omega|1\rangle\quad (\omega \text{ は正の実数定数})$$

   となるとき $\hat{H}$ の $|1\rangle$，$|2\rangle$ による行列表現，

   $$\begin{pmatrix} \langle 1|\hat{H}|1\rangle & \langle 1|\hat{H}|2\rangle \\ \langle 2|\hat{H}|1\rangle & \langle 2|\hat{H}|2\rangle \end{pmatrix}$$

   を求めよ．

2. 3 次元で，粒子のハミルトニアン演算子 $\hat{H}$ が球座標 ($x = r\sin\theta\cos\phi,\ y = r\sin\theta\sin\phi,\ z = r\cos\theta$) を用いて以下のように与えられているとする．

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \quad (\omega \text{ は正の実数定数})$$

(a) 波動関数を $\psi = Ne^{-br^2}$ (N, b は正の実数定数) と仮定した場合，この波動関数が $\hat{H}$ の固有関数となるように b を決めよ．また，その場合の固有値を求めよ．(20 点)

(b) 規格化条件から N を求め，b を用いて表せ．(10 点)
(hint: 3 次元の積分で $dx\,dy\,dz = r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\phi$ である．必要なら公式 $\int_0^\infty r^2 e^{-kr^2}\,dr = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{k^3}}$ (k は正の実数定数) は証明抜きで用いてよい．)

3. 1 次元で質量 m の**自由粒子**の運動を考える．波動関数 $\psi_1 = N\ e^{-i(\omega_1 t - k_1 x)}$，$\psi_2 = N\ e^{-i(\omega_2 t + k_2 x)}$ (N，$E_{1,2}$，$k_{1,2}$ は正の実数定数で $k_1 > k_2$) として以下の問いに答えよ．

(a) ψ_1 と ψ_2 はともに運動量演算子の固有関数であることを示し，それぞれの運動量固有値を求めよ．(6 点)

(b) ψ_1 が時間に依存するシュレーディンガー方程式を満たすことから，ω_1 と k_1 の間に成立する関係式を求めよ．また，ψ_2 についても同様に ω_2 と k_2 の間に成立する関係式を求めよ．(6 点)

(c) ψ_1 と ψ_2 の重ね合わせの状態: $f = \psi_1 + \psi_2$ をとり，その状態での粒子の確率密度 ($|f|^2$) を x と t の関数として表わせ．ただし，N は規格化定数になっているとして，そのままでよいが，結果には虚数が現れない形にすること．(8 点)

(d) 確率密度が最大の位置は時間の経過に従ってどう変わっていくか説明せよ．(10 点)

以上

解答例

1. (a) 電磁波の振動数を ν とすると光子のエネルギー E は $E = h\nu = \dfrac{hc}{\lambda}$ で与えられる．これが仕事関数以上でなければならないので

$$\begin{aligned} \frac{hc}{\lambda} &\geq 4.5\ [\mathrm{eV}] = 4.5 \times (1.6 \times 10^{-19})\ [\mathrm{J}] \\ \lambda &\leq \frac{hc}{4.5 \times 1.6 \times 10^{-19}} = \frac{(6.6 \times 10^{-34}) \times (3.0 \times 10^{8})}{4.5 \times 1.6 \times 10^{-19}} = 2.75 \times 10^{-7} \simeq 3 \times 10^{-7}\ [\mathrm{m}] \end{aligned}$$

よって $\lambda < 3 \times 10^{-7}$ [m].

(b) 電子の運動量の大きさを p とすると，運動エネルギーは $\dfrac{p^2}{2m_e}$ となる．また，物質波の波長 λ は $\lambda = \dfrac{h}{p}$ で与えられる．これが 5 [Å] 以下であるから

$$\begin{aligned} 5 \times 10^{-10}\ [\mathrm{m}] &\geq \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e E}} \\ E &\geq \frac{h^2}{25 \times 10^{-20} \times 2m_e} = \frac{(6.6 \times 10^{-34})^2}{5 \times 10^{-19} \times 9.1 \times 10^{-31}}\ [\mathrm{J}] \\ &= \frac{(6.6 \times 10^{-34})^2}{5 \times 10^{-19} \times 9.1 \times 10^{-31} \times (1.6 \times 10^{-19})}\ [\mathrm{eV}] \\ &= \frac{6.6^2}{8 \times 9.1} \times 10\ [\mathrm{eV}] \simeq 6\ [\mathrm{eV}] \end{aligned}$$

よって $E \geq 6$ [eV].

(c) 規格化条件より

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2|x|/d} dx = 2N^2 \int_0^{\infty} e^{-2x/d} dx = 2N^2 \left[-\frac{d}{2} e^{-2x/d} \right]_0^{\infty} = N^2 d \\ N &= \frac{1}{\sqrt{d}} \end{aligned}$$

(d) $\psi(x) = Ce^{ipx/\hbar}$ を $\psi(x+L) = \psi(x)$ に代入して

$$Ce^{ip(x+L)/\hbar} = Ce^{ipx/\hbar} \quad \Rightarrow \quad e^{ipL/\hbar} = 1$$

これが成立するには n を整数として $pL/\hbar = 2n\pi$．すなわち $p = \dfrac{2n\pi\hbar}{L}$.

(e) 規格化条件は

$$1 = \int \psi^* \psi \ dV = \int (\sum_k a_k \phi_k)^* (\sum_n a_n \phi_n)\ dV = \sum_{k,n} (a_k)^* a_n \int (\phi_k)^* \phi_n\ dV$$

ϕ_k はエルミート演算子の固有関数であり，規格化され縮退はないので $\int (\phi_k)^* \phi_n\ dV = \delta_{kn}$．よって，規格化条件は，$1 = \sum_{k,n} (a_k)^* a_n \delta_{kn} = \sum_k |a_k|^2$，すなわち $\sum_k |a_k|^2 = 1$ となる．

(f)

$$[\ \hat{a}\ ,\ \hat{a}^\dagger\ ] = [\ \hat{x} + i\hat{p}\ ,\ \hat{x} - i\hat{p}\ ] = [\ \hat{x}\ ,\ (-i\hat{p})\ ] + [\ i\hat{p}\ ,\ \hat{x}] = (-i)(i\hbar) + i(-i\hbar) = 2\hbar$$

(g) $\langle 1|\hat{H}|1\rangle = \langle 1|i\hbar\omega|2\rangle = 0$，$\langle 1|\hat{H}|2\rangle = \langle 1|(-i\hbar\omega)|1\rangle = -i\hbar\omega$，$\langle 2|\hat{H}|1\rangle = \langle 1|i\hbar\omega|1\rangle = i\hbar\omega$，$\langle 2|\hat{H}|2\rangle = \langle 2|(-i\hbar\omega)|1\rangle = 0$ より

$$\begin{pmatrix} \langle 1|\hat{H}|1\rangle & \langle 1|\hat{H}|2\rangle \\ \langle 2|\hat{H}|1\rangle & \langle 2|\hat{H}|2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -i\hbar\omega \\ i\hbar\omega & 0 \end{pmatrix}$$

2. (a) $\psi = Ne^{-br^2}$ は r だけに依存するので

$$\begin{aligned}
\Delta\psi &= \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) Ne^{-br^2} \\
\frac{d}{dr}(e^{-br^2}) &= -2bre^{-br^2} \\
\frac{d^2}{dr^2}(e^{-br^2}) &= \frac{d}{dr}\left[-2bre^{-br^2}\right] = -2b\left[e^{-br^2} - 2br^2e^{-br^2}\right] = -2b(1-2br^2)e^{-br^2} \\
&\text{よって} \\
\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) Ne^{-br} &= N\left[4b^2r^2 - 2b - 4b\right]e^{-br^2} = N\left[4b^2r^2 - 6b\right]e^{-br^2} \\
\hat{H}\psi &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{1}{2}m\omega^2r^2\right]\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[4b^2r^2 - 6b\right]Ne^{-br^2} + \frac{1}{2}m\omega^2r^2Ne^{-br} \\
&= \frac{3\hbar^2b}{m}\psi + \left[\frac{1}{2}m\omega^2 - \frac{2b^2\hbar^2}{m}\right]r^2\psi
\end{aligned}$$

ψ が H の固有関数となるには $\frac{1}{2}m\omega^2 - \frac{2b^2\hbar^2}{m} = 0$．すなわち

$$b^2 = \frac{m^2\omega^2}{4\hbar^2} \;\Rightarrow\; b = \frac{m\omega}{2\hbar} \quad (b \text{ は正なので})$$

このとき，エネルギー固有値は

$$\frac{3\hbar^2b}{m} = \frac{3\hbar^2}{m}\frac{m\omega}{2\hbar} = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

(b) 規格化条件 $\int \psi^*\psi\, dV = 1$ に $\psi = Ne^{-br^2}$ を代入して

$$\begin{aligned}
1 &= \int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi} N^2e^{-2br^2}r^2\sin\theta d\phi d\theta dr = 4\pi N^2\int_0^\infty e^{-2br^2}r^2\,dr \\
&= 4\pi N^2\frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{(2b)^3}} = N^2\sqrt{\frac{\pi^3}{(2b)^3}}
\end{aligned}$$

よって $N = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{3/4}$

3. (a) 1 次元で運動量演算子は $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ で与えられるので

$$\begin{aligned}
\hat{p}\psi_1 &= -i\hbar\frac{d}{dx}(Ne^{-i(\omega_1 t - k_1 x)}) = \hbar k(Ne^{-i(\omega_1 t - kx)}) = h\bar{k}\psi_1 \\
\hat{p}\psi_2 &= -i\hbar\frac{d}{dx}(Ne^{-i(\omega_2 t + k_2 x)}) = (-\hbar k)(Ne^{-i(\omega_2 t + kx)}) = (-h\bar{k})\psi_2
\end{aligned}$$

となり，ψ_1 は固有値 $\hbar k_1$ の，ψ_2 は固有値 $-\hbar k_2$ の固有関数である．

(b) 時間に依存するシュレーディンガー方程式は $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi$ であり，1 次元の自由粒子なので $\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}$ である．ψ_1 に対し

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1 &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}Ne^{-i(\omega_1 t - k_1 x)} = \hbar\omega Ne^{-i(\omega_1 t - k_1 x)} \\
\hat{H}\psi_1 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}Ne^{-i(\omega_1 t - k_1 x)} = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m}Ne^{-i(\omega_1 t - k_1 x)}
\end{aligned}$$

よって，時間に依存するシュレーディンガー方程式が成立するには $\hbar\omega_1 = \dfrac{\hbar^2 k_1^2}{2m}$ でなくてはならない．同様にして，ψ_2 に関しても $\hbar\omega_2 = \dfrac{\hbar^2 k_2^2}{2m}$ でなくてはならない．

(c) 粒子の確率密度は波動関数の絶対値の二乗で与えられるので

$$\begin{aligned}
|f|^2 &= |\psi_1 + \psi_2|^2 = N^2|e^{-i(\omega_1 t - k_1 x)} + e^{-i(\omega_2 t + k_2 x)}|^2 \\
&= N^2\left[1 + 1 + e^{i(\omega_1 t - k_1 x)}e^{-i(\omega_2 t + k_2 x)} + e^{-i(\omega_1 t - k_1 x)}e^{i(\omega_2 t + k_2 x)}\right] \\
&= N^2\left[2 + e^{i\{(\omega_1 - \omega_2)t - (k_1 + k_2)x\}} + e^{-i\{(\omega_1 - \omega_2)t - (k_1 + k_2)x\}}\right] \\
&= N^2\left[2 + 2\cos\{(\omega_1 - \omega_2)t - (k_1 + k_2)x\}\right]
\end{aligned}$$

(d) 確率密度が最大になるのは $(\omega_1 - \omega_2)t - (k_1 + k_2)x = 2n\pi$ (n は整数) になる位置である．これより

$$\begin{aligned}
x &= \frac{(\omega_1 - \omega_2)t}{k_1 + k_2} + \frac{2n\pi}{k_1 + k_2} = \frac{1}{(k_1 + k_2)}\frac{\hbar(k_1^2 - k_2^2)}{2m}t + \frac{2n\pi}{k_1 + k_2} \\
&= \frac{\hbar(k_1 - k_2)}{m}t + \frac{2n\pi}{k_1 + k_2}
\end{aligned}$$

$k_1 > k_2$ なので，確率密度が最大の位置は速さ $\dfrac{\hbar(k_1 - k_2)}{m}$ で x 軸の正の方向に移動する．