# 量子力学 A 試験問題 (2019, 6/10) 担当：栗本

- **以下の<u>大問 1 に必答し</u>，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．**<u>この問題への解答は結果のみを記すこと</u>**．　(各 10 点，計 70 点)
あなたの学籍番号の末尾 2 桁を $ab$ とする．たとえば学籍番号が 11940163 なら $a = 6, b = 3$ である．(オープンクラス，科目等履修生等は $a = 9, b = 1$ とせよ) 小問 (1)，(2)，(3) の計算には，そうして求めた $a$ と $b$ を用いること．計算に必要な定数として，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 を用いよ．

(1) ある電磁波を構成する光子 1 個のエネルギーが $1 \times 10^{b+1}$ eV のとき，[m] **を単位として**，この電磁波の波長を**有効数字一桁**で求めよ．

(2) 電子の運動エネルギーが $\dfrac{2}{1.6 \times 9.1} \times 10^{4-2a}$ [eV] のとき，[m] **を単位として**，この電子の物質波の波長を**有効数字一桁**で求めよ．

(3) 2 次元で，波動関数が $\psi(x) = Ne^{-(a+2)(x^2+y^2)}$ で与えられている．($N$ は正の実数定数)
規格化条件より $N$ を求めよ．　(hint: $k$ を正の実数として $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} e^{-kx^2}\, dx = \sqrt{\frac{\pi}{k}}$ )

(4) 1 次元で，波動関数が

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

($L$ は正の実数定数) で与えられている場合，$0 \leq x \leq \frac{L}{3}$ の領域でこの粒子を観測する確率を求めよ．

(5) 規格直交化された関数の集合: $\{\phi_n\}$ $(n = 1, 2, 3, \cdots)$ が与えられている: $\displaystyle\int \{\phi_n\}^* \phi_m\, dV = \delta_{nm}$．
ある物理量に対応する演算子 $\hat{G}$ がこれらの関数に作用すると $\hat{G}\phi_n = g(n)\phi_{n+2}$ ($g(n)$ は $n$ だけに依存する関数) となる．波動関数 $\psi = \displaystyle\sum_n a_n \phi_n$ ($a_n$ は定数の係数) で表される状態での $\hat{G}$ の期待値を $a_n$ と $g(n)$ を用いて表せ．

(6) 一次元で，運動量演算子を $\hat{p}$ と記すとき，交換関係 $[\, x\hat{p}\, , x^2\, ]$ の値を求めよ．

(7) 3 つの独立な状態 $|1\rangle$，$|2\rangle$，$|3\rangle$ があり，規格直交化されている: $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$ $(n, m = 1, 2, 3)$ これらの状態に演算子 $\hat{K}$ を作用させると以下のようになる．

$$\hat{K}|1\rangle = 0 \quad , \hat{K}|2\rangle = w|1\rangle \quad , \hat{K}|3\rangle = w|2\rangle \quad (w \text{ は正の実数定数})$$

このとき，演算子 $\hat{K}$ の行列表現，すなわち以下の行列を求めよ．

$$\begin{pmatrix} \langle 1|\hat{K}|1\rangle & \langle 1|\hat{K}|2\rangle & \langle 1|\hat{K}|3\rangle \\ \langle 2|\hat{K}|1\rangle & \langle 2|\hat{K}|2\rangle & \langle 2|\hat{K}|3\rangle \\ \langle 3|\hat{K}|1\rangle & \langle 3|\hat{K}|2\rangle & \langle 3|\hat{K}|3\rangle \end{pmatrix}$$

2. 1次元で運動している質量 $m$ の粒子のハミルトニアン演算子 $\hat{H}$ が以下で与えられている．

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \qquad (\omega \text{ は正の定数})$$

(1) 波動関数 $\psi$ について，**時間に依存する**シュレーディンガー方程式を書き下せ．(5点)

(2) $\psi$ が (1) のシュレーディンガー方程式を満たしているとき，波動関数 $\psi$ の複素共役 $\psi^*$ が満たす方程式を求めよ．(5点)

(3) $\psi$ による演算子 $\hat{A}$ の期待値: $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\hat{A}\psi)\ dx$ を $\langle \hat{A} \rangle$ と記す．$\hat{A}$ が時間に依存しないとき $\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle$ が成立することを示せ．ただし，無限遠 $(x \to \pm\infty)$ で波動関数の値は 0 になるものとする．(10点)

(4) $\hat{A}$ として運動量演算子 $\hat{p}$ をとるとき，$\frac{d}{dt}\langle \hat{p} \rangle = -m\omega^2 \langle x \rangle$ を示せ．(5点)

(5) $\langle \hat{p} \rangle$ と $\langle x \rangle$ をそれぞれニュートン力学での運動量と位置とみなすとき，(4) で求めた方程式は粒子のどのような運動を記述しているか説明せよ．(5点)

3. ハミルトニアン演算子を行列 $H$ で，波動関数 をベクトル $\psi$ で表したものが以下で与えられている．

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ \hbar & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \psi = \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix}$$

ここで $c_1(t)$ と $c_2(t)$ は時間 $t$ だけに依存する関数である．以下の問いに答えよ．

(1) 波動関数が規格化されるための条件を $c_1(t)$ と $c_2(t)$ を用いて表せ．(4点)

(2) 行列 $H$ の 2 つの相異なる固有値を求めよ．(6点)

(3) 時間に依存するシューレーディンガー方程式を用いて，$c_1(t)$ と $c_2(t)$ に対する微分方程式を求めよ．(10点)

(4) (3) で求めた微分方程式を，初期条件 $c_1(0) = 1$，$c_2(0) = 0$ の下で解け．(10点)

以上

**解答例**

1. (1) 光子の波長を $\lambda$，振動数を $\nu$ とすると，そのエネルギー $E$ は $E = h\nu = hc/\lambda$ で与えられるので，

$$\lambda = \frac{hc}{E} = \frac{(6.6\times10^{-34})\times(3.0\times10^{8})}{1\times10^{b+1}\times(1.6\times10^{-19})} = \frac{19.6}{1.6}\times10^{-(b+8)} \simeq 1\times10^{-(b+7)}\ \ \mathrm{m}$$

(注: 分母のところで，エネルギーは [eV] から [J] へ換算している)

(2) 電子の運動量の大きさを $p$，運動エネルギーを $E$ とすると $E = \dfrac{p^2}{2m_e}$．物質波の波長 $\lambda$ は $\lambda = h/p$ で与えられるので，

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{\sqrt{2\times(9.1\times10^{-31})\times\frac{2\times10^{4-2a}}{1.6\times9.1}\times1.6\times10^{-19}}} = \frac{6.6\times10^{-34}}{2\times10^{2-a}\times10^{-25}}\\ &\simeq 3\times10^{a-11}\ \ \mathrm{m}\end{aligned}$$

(3) 規格化条件より

$$\begin{aligned}1 &= \int|\psi|^2\,dV = N^2\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2(a+2)(x^2+y^2)}\,dxdy = N^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2(a+2)x^2}\,dx\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2(a+2)y^2}\,dy\\ &= N^2\left(\sqrt{\frac{\pi}{2(a+2)}}\right)^2 = \frac{N^2\pi}{2(a+2)}\quad \text{よって}\quad N = \sqrt{\frac{2(a+2)}{\pi}}\end{aligned}$$

(4) 波動関数 $\psi(x) = \sqrt{\dfrac{2}{L}}\ \sin(\dfrac{2\pi x}{L})$ は

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2dx &= \int_0^L\frac{2}{L}\sin^2(\frac{2\pi x}{L})\,dx = \frac{2}{L}\int_0^L\frac{1}{2}\{1-\cos(\frac{4\pi x}{L})\}\,dx\\ &= \frac{1}{L}\left[x-\frac{L}{4\pi}\sin(\frac{4\pi x}{L})\right]_0^L = 1\end{aligned}$$

となって規格化されている．よって $0\le x\le\frac{L}{3}$ の領域でこの粒子を観測する確率は

$$\begin{aligned}\int_0^{L/3}\frac{2}{L}\sin^2(\frac{2\pi x}{L})\,dx &= \frac{2}{L}\int_0^{L/3}\frac{1}{2}\{1-\cos(\frac{4\pi x}{L})\}\,dx = \frac{1}{L}\left[x-\frac{L}{4\pi}\sin(\frac{4\pi x}{L})\right]_0^{L/3}\\ &= \frac{1}{3}-\frac{1}{4\pi}\sin(\frac{4\pi}{3}) = \frac{1}{3}-\frac{1}{4\pi}(-\frac{\sqrt{3}}{2}) = \frac{1}{3}+\frac{\sqrt{3}}{8\pi}\end{aligned}$$

(5) 求める期待値は

$$\begin{aligned}\int\psi^*(\hat{G}\psi)\,dV &= \int\left(\sum_k a_k\phi_k\right)^*\hat{G}\left(\sum_n a_n\phi_n\right)\,dV = \sum_k\sum_n\int a_k^*\phi_k^*a_ng(n)\phi_{n+2}\,dV\\ &= \sum_k\sum_n a_k^*a_ng(n)\int\phi_k^*\phi_{n+2}\,dV = \sum_k\sum_n a_k^*a_ng(n)\delta_{k,(n+2)}\\ &= \sum_n a_{n+2}^*a_ng(n)\end{aligned}$$

(6) $\hat{A}$，$\hat{B}$，$\hat{C}$ を演算子とするとき

$$\begin{aligned}[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{C}\hat{A}\hat{B} = \hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{A}\hat{C}\hat{B}+\hat{A}\hat{C}\hat{B}-\hat{C}\hat{A}\hat{B} = \hat{A}[\hat{B},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{C}]\hat{B}\\ [\hat{A},\hat{B}\hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{A}\hat{C}+\hat{B}\hat{A}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A} = [\hat{A},\hat{B}]\hat{C}+\hat{B}[\hat{A},\hat{C}]\end{aligned}$$

である．これと $[x,\hat{p}] = i\hbar$ を用いて

$$[\ x\hat{p}\ ,x^2\ ] = x[\hat{p},x^2]+[x,x^2]\hat{p} = x\left([\hat{p},x]x+x[\hat{p},x]\right)+0 = (-i\hbar)x^2+x^2(-i\bar{h}) = -2i\hbar x^2$$

(7)

$$\begin{pmatrix}\langle1|\hat{K}|1\rangle & \langle1|\hat{K}|2\rangle & \langle1|\hat{K}|3\rangle\\ \langle2|\hat{K}|1\rangle & \langle2|\hat{K}|2\rangle & \langle2|\hat{K}|3\rangle\\ \langle3|\hat{K}|1\rangle & \langle3|\hat{K}|2\rangle & \langle3|\hat{K}|3\rangle\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & \langle1|w|1\rangle & \langle1|w|2\rangle\\ 0 & \langle2|w|1\rangle & \langle2|w|2\rangle\\ 0 & \langle3|w|1\rangle & \langle3|w|2\rangle\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & w & 0\\ 0 & 0 & w\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}$$

2. (1)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi$$

(2) (1) の複素共役をとって

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^* = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi^*$$

(3) (1), (2) より

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi \ \ , \ \ \frac{\partial}{\partial t}\psi^* = -\frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi^*$$

これらと，$\hat{A}$ が時間に依存しないことを用いて

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle &= \frac{d}{dt}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\hat{A}\psi)\ dx\right) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\psi^*}{\partial t}(\hat{A}\psi)\ dx + \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\hat{A}\frac{\partial\psi}{\partial t})\ dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\{-\frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi^*\}(\hat{A}\psi)\ dx \\
&\quad + \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\hat{A}\{\frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi\})\ dx \\
&\quad \text{(第 1 項で部分積分を 2 回行い，無限遠で波動関数が 0 であることを用いると)} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{1}{(-i\hbar)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\hat{A}\psi\ dx \\
&\quad + \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\hat{A}\{\frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\psi\})\ dx \\
&= \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\{\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H}\}\psi\ dx = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{A}]\rangle
\end{aligned}$$

(別解) ハミルトニアンがエルミート演算子なので

$$\int\psi_1^*(\hat{H}\psi_2)\ dV = \int(\hat{H}^\dagger\psi_1^*)\psi_2\ dV = \int(\hat{H}\psi_1^*)\psi_2\ dV$$

が成立する．これと $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi$，およびその複素共役 $-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^* = \hat{H}^*\psi^* = \hat{H}\psi^*$ (問題文にある $\hat{H}$ に複素数が含まれていないことを用いた) より

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle &= \frac{d}{dt}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\hat{A}\psi)\ dx\right) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\psi^*}{\partial t}(\hat{A}\psi)\ dx + \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\hat{A}\frac{\partial\psi}{\partial t})\ dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{(-i\hbar)}(\hat{H}\psi^*)\hat{A}\psi + \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{(i\hbar)}\psi^*(\hat{A}\hat{H}\psi) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{(-i\hbar)}\psi^*(\hat{H}(\hat{A}\psi)) + \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{(i\hbar)}\psi^*(\hat{A}\hat{H}\psi) \\
&= \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\{\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H}\}\psi\ dx = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{A}]\rangle
\end{aligned}$$

(4) $\hat{H} = \frac{(\hat{p})^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ なので，$\hat{A} = \hat{p}$ のとき，

$$[\hat{H},\hat{p}] = [\frac{(\hat{p})^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2,\hat{p}] = \frac{1}{2}m\omega^2[x^2,\hat{p}] = \frac{1}{2}m\omega^2\left(x[\hat{x},\hat{p}]+[\hat{x},\hat{p}]x\right) = \frac{1}{2}m\omega^2(2i\hbar x) = i\hbar m\omega^2 x$$

これと (3) の結果を用いて

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{p}]\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle(i\hbar m\omega^2x)\rangle = -m\omega^2\langle x\rangle$$

(5) $\langle \hat{p} \rangle$ をニュートン力学での運動量 $p$，$\langle x \rangle$ を位置 $x$ とみなせば，(4) の方程式は $\dfrac{dp}{dt} = -m\omega^2 x$ となる．速度を $v$ とすると $p = mv$ なので $m\dfrac{dv}{dt} = -m\omega^2 x$ すなわち $\dfrac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2 x$ となって，これは角振動数 $\omega$ での単振動をあらわす運動方程式となる．

3. (1) $|c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2 = 1$

(2) $H$ の固有値を $E$ とすると固有値方程式より

$$0 = |E - H| = \begin{vmatrix} E & -\hbar \\ -\hbar & E \end{vmatrix} = E^2 - \hbar^2 \implies E = \pm\hbar$$

よって $H$ の固有値は $\pm\hbar$.

(3) 時間に依存するシュレーディンガー方程式 $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi$ より

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \hbar \\ \hbar & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} = \hbar\begin{pmatrix} c_2(t) \\ c_1(t) \end{pmatrix}$$

よって，求める微分方程式は $\dfrac{d}{dt}c_1(t) = -ic_2(t)$ と $\dfrac{d}{dt}c_2(t) = -ic_1(t)$.

(4) (3) の結果から

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2}c_1(t) &= \frac{d}{dt}(\frac{d}{dt}c_1(t)) = \frac{d}{dt}(-ic_2(t)) = -i\frac{d}{dt}c_2(t) = -c_1(t) \\ \frac{d^2}{dt^2}c_2(t) &= \frac{d}{dt}(\frac{d}{dt}c_2(t)) = \frac{d}{dt}(-ic_1(t)) = -i\frac{d}{dt}c_1(t) = -c_2(t) \end{aligned}$$

よって，一般解は以下で与えられる．

$$c_1(t) = F_1 \sin t + F_2 \cos t\ , \quad c_2(t) = G_1 \sin t + G_2 \cos t \quad (F_{1,2} \text{と } G_{1,2} \text{ は定数})$$

元の微分方程式 $\dfrac{d}{dt}c_1(t) = -ic_2(t)$ から $F_1 = -iG_2$，$-F_2 = -iG_1$．初期条件 $c_1(0) = 1$ から $F_2 = 1$．初期条件 $c_2(0) = 0$ から $G_2 = 0$．よって $F_1 = 0$，$G_1 = -i$，これらを用いて

$$c_1(t) = \cos t\ \ , \quad c_2(t) = -i\sin t$$