量子力学第一 ２０１１年度期末試験

1　井戸型ポテンシャル

井戸型ポテンシャル

$$U(x) = 0 \quad (|x| \leq a), \quad U(x) = +\infty \quad (|x| \geq a).$$

中の粒子を量子力学的に扱う。粒子の質量を m とする。

1-1 基底状態の波動関数 $\psi_0(x)$ を求めよ。全体の係数は、規格化条件 $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = 1$ および $\psi_0(\frac{a}{10}) > 0$ によって決めること。

答

$$\psi_0 = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{\pi}{2a}x\right) & (|x| \leq a) \\ 0 & (|x| \geq a) \end{cases}$$

$|x| \geq a$ での波動関数を与えていない人が多かったです。（与えていなくても減点はしていません。）図を書けば少なくともコサインであることは一目瞭然だと思うのですが、わざわざ式をたてて失敗している人が多かったようです。

1-2 第一励起状態の波動関数 $\psi_1(x)$ を求めよ。全体の係数は、規格化条件 $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_1(x)|^2 dx = 1$ および $\psi_1(\frac{a}{10}) > 0$ によって決めること。

答

$$\psi_0 = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) & (|x| \leq a) \\ 0 & (|x| \geq a) \end{cases}$$

第２励起状態を書いている人がいました。これもグラフを書けば間違わずに済むことです。

1-3 波動関数 $\psi(x) = (\psi_0(x) + \psi_1(x))/\sqrt{2}$ によって表わされる状態に対して座標 x の期待値を求めよ。

答

$$\langle \hat{x} \rangle = \frac{32}{9\pi^2} a.$$

計算は少し面倒です。0 と答えた人、波動関数のグラフを書いてみてください。

2　階段型ポテンシャル

ポテンシャル

$$U(x) = 0 \quad (x \le 0), \quad U(x) = U_0 \quad (x \ge 0)$$

に質量 m の粒子を x の負の側から入射させた場合の透過、散乱について考える。$U_0 < 0$ とする。入射波の波数を k、透過波の波数を k' とし、波動関数を次のようにおく。

$$\psi(x) = e^{ikx} + Ae^{-ikx} \quad (x \le 0), \quad \psi(x) = Be^{ik'x} \quad (x \ge 0)$$

2-1 k と k' の関係を与えよ。

答

$$\frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{\hbar^2}{2m}k'^2 + U_0$$

エネルギー保存の式です。

2-2 係数 A を k と k' を用いて表わせ。

答

$$A = \frac{k - k'}{k + k'}$$

ψ と $d\psi/dx$ に対する接続条件を連立させて解くだけです。

2-3 透過率を k と k' を用いて表わせ。

答

$$\frac{4kk'}{(k + k')^2}$$

$[2k/(k + k')]^2$ と書いている人多数。$|B|^2$ ではないので注意。

3　調和振動子

ばね定数 k の調和振動子について考える。シュレーディンガー方程式は

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

である。

3-1 適当な変数変換 $x=cy$ を行うことによりシュレーディンガー方程式を次のように書き換える。

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dy^2}+\frac{1}{2}y^2\right)\psi(y)=\lambda\psi(y)$$

定数 c を求めよ。

答

$$c=\left(\frac{\hbar^2}{mk}\right)^{1/4}$$

自分で変形したことがないとちょっと手間取ったかもしれませんが、とにかく $x=cy$ を代入してみれば、右辺の二つの項の係数が等しくなるという条件からすぐに決まります。

3-2 昇降演算子

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(y+\frac{d}{dy}\right),\quad \hat{a}^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(y-\frac{d}{dy}\right)$$

を用いて 3-1 のシュレーディンガー方程式を書き換えよ。

答

$$\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right)\psi=\lambda\psi,\quad \left(\hat{a}\hat{a}^\dagger-\frac{1}{2}\right)\psi=\lambda\psi,\quad \frac{1}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^\dagger)\psi=\lambda\psi.$$

どれでも正解です。

3-3 第一励起状態の波動関数 $\psi_1(y)$ を y 座標を用いて与えよ。規格化は行わなくてよい。

答

$$\psi_1(y)=ye^{-\frac{y^2}{2}}$$

数係数は何でもいいです。エルミート多項式を用いて $H_1(y)e^{-\frac{y^2}{2}}$ と書いていた人、もちろん正解ですが、1 次の奇関数なんだから $H_1(y)\propto y$ であることはすぐに分かりますよね。

4　ビリアル定理

ハミルトニアン

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{U}, \quad \hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad \hat{U} = a|\hat{x}|^n, \quad (n > 0, a > 0).$$

によって表わされる系を考える。演算子 $\hat{D} = \hat{x}\hat{p}/(i\hbar)$ を定義する。

4-1 交換関係 $[\hat{D}, \hat{K}]$ を計算せよ。

答

$$2\hat{K}$$

$\hat{p} = -i\hbar d/dx$, $\hat{x} = x$ を使って計算するだけです。

4-2 交換関係 $[\hat{D}, \hat{U}]$ を計算せよ。

答

$$-n\hat{U}$$

絶対値の基本は場合分けです。$-nax|x|^{n-1}$ と書いた人、$n = 2$ のような簡単な例で考えてみれば、それが間違いであることはすぐに分かったはずです。

4-3 エネルギー固有状態 $|\psi\rangle$ に対して $[\hat{D}, \hat{H}] = [\hat{D}, \hat{K}] + [\hat{D}, \hat{U}]$ の両辺の期待値を計算することにより $\hat{K}$ と $\hat{U}$ の期待値の比 $\frac{\langle\psi|\hat{U}|\psi\rangle}{\langle\psi|\hat{K}|\psi\rangle}$ を求めよ。

答

$$\frac{\langle\psi|\hat{U}|\psi\rangle}{\langle\psi|\hat{K}|\psi\rangle} = \frac{2}{n}$$

問題文中の式の左辺の期待値が 0 であることに気付けば、4-1、4-2 で求めた結果からすぐに答えが出ます。