物理学演習II　第10回　量子力学の原理

2015年12月4日　担当：佐藤 純

問題1 [**正準交換関係**]

位置 x と運動量 p を表す演算子 $\hat{x}, \hat{p}$ を

$$\hat{p}f(x) = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x) = -\mathrm{i}\hbar f'(x), \quad \hat{x}f(x) = xf(x)$$

で定義する．

(1-1) $\hat{x}\hat{p}f(x)$ を計算せよ．

$$\hat{x}\hat{p}f(x) = x\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x)\right) = -\mathrm{i}\hbar xf'(x)$$

(1-2) $\hat{p}\hat{x}f(x)$ を計算せよ．

$$\hat{p}\hat{x}f(x) = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\{xf(x)\} = -\mathrm{i}\hbar\{(x)'f(x) + xf'(x)\} = -\mathrm{i}\hbar f(x) - \mathrm{i}\hbar xf'(x)$$

(1-3) これらの結果から，位置と運動量の交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}$ を計算せよ．

$$[\hat{x}, \hat{p}]f(x) = \hat{x}\hat{p}f(x) - \hat{p}\hat{x}f(x) = \mathrm{i}\hbar f(x)$$

より，$\boxed{[\hat{x}, \hat{p}] = \mathrm{i}\hbar}$

問題2 [**一次元運動**]

ポテンシャル $V(x)$ の中で x 軸上を運動する質量 m の粒子を考える．この粒子の定常状態における波動関数 $\psi(x)$ は Schrödinger 方程式

$$\mathcal{H}\psi(x) = E\psi(x), \qquad \mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)$$

を満たす．

(2-1) ポテンシャルがないとき（$V(x) = 0$），波動関数 $\psi(x) = A\exp\left(\mathrm{i}\frac{p}{\hbar}x\right)$ は Schrödinger 方程式を満たすことを示し，エネルギー E を求めよ．

$$\mathcal{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}A\exp\left(\mathrm{i}\frac{p}{\hbar}x\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\mathrm{i}\frac{p}{\hbar}\right)^2\psi(x) = \frac{p^2}{2m}\psi(x)$$

より，$\boxed{E = \frac{p^2}{2m}}$

(2-2) 調和振動子ポテンシャル $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ のとき，波動関数 $\psi(x) = A\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$ は Schrödinger 方程式を満たすことを示し，エネルギー E を求めよ．(下図左参照)

$$\begin{aligned}
\psi'(x) &= \left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)' A\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) = -\frac{m\omega}{\hbar}xA\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right), \\
\psi''(x) &= \left(-\frac{m\omega}{\hbar}x\right)' A\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) - \frac{m\omega}{\hbar}x\left\{A\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)\right\}', \\
&= -\frac{m\omega}{\hbar}A\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) + \left(-\frac{m\omega}{\hbar}x\right)^2 A\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right),
\end{aligned}$$

$$= \left(\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} x^2 - \frac{m\omega}{\hbar} \right) A \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right)$$

より，

$$\mathcal{H}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\mathrm{i}\frac{p}{\hbar}\right)^2 \psi(x) = \frac{\hbar\omega}{2}\psi(x)$$

なので，$\boxed{E = \frac{\hbar\omega}{2}}$ を得る．

問題 3 ［**一次元の閉じ込め運動**］

ポテンシャル $V(x<0) = V(a<x) = \infty$, $V(0<x<a) = 0$ によって $0<x<a$ の領域に閉じ込められた質量 m の粒子を考える．(下図右参照)

(3-1) 領域 $0<x<a$ における Schrödinger 方程式 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) = E\psi(x)$ の一般解を求めよ．

$$\psi''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$$

より，$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ とおくと，一般解は $\boxed{\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx}$ となる．

(3-2) 接続条件 $\psi(0) = \psi(a) = 0$ から，エネルギー E が量子化されることを示せ．

$\psi(0) = \psi(a) = 0$ より，$0 = \psi(0) = A\cos 0 + B\sin 0 = A$ より，$A = 0$ なので，$\psi(x) = B\sin kx$ となる．次に，$\psi(a) = 0$ より，$B\sin ka = 0$ なので，$ka = n\pi$（n は整数）となる．よって，$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2$ とエネルギーが量子化される．

(3-3) 確率の規格化条件 $\int_0^a |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = 1$ から，波動関数を決定せよ．

$$1 = \int_0^a |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = |B|^2 \int_0^a \sin^2 kx \mathrm{d}x = |B|^2 \int_0^a \frac{1-\cos 2kx}{2}\mathrm{d}x$$
$$= |B|^2 \left[\frac{1}{2}x - \frac{1}{4k}\sin 2kx \right]_0^a \mathrm{d}x = |B|^2 \frac{a}{2}$$

より，$B = \sqrt{\frac{2}{a}}$ なので，$\boxed{\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x}$ となる．