量子力学 I 試験問題　2022 年 1 月 21 日　田崎晴明

- 答だけではなく、考え方や計算の筋道を簡潔に書くこと。
- 問題は全部で 3 問ある。同じ解答用紙に異なった問題の答えを書かないように。
- 試験が終わったら、解答を適切な方法で電子ファイルにして、問題ごとに別のメールに添付し専用アドレスに送ること。メールの件名はそれぞれ `exam1`, `exam2`, `exam3` とする（数字はもちろん問題番号。この通りに書くこと）。メールの本文と解答用紙の**両方に**学籍番号と氏名を必ず書くこと。いわゆる白紙答案の場合には何も添付せずメール本文に「答案なし」と明記すること（白紙の大問が複数ある場合はそれぞれの問題についてメールを送るように）。
- 締め切りは 1 月 22 日の正午とする。なんらかの事故があったらすぐに連絡すること。
- 上記の指示を守っていなかったためにミスが生じて評価に影響があったとしてもそれは本人の責任なので原則として修正しない。

1. L を正の定数とする。一辺の長さが L の立方体状の領域に閉じ込められた質量 m の自由粒子の定常状態（エネルギー固有状態）のシュレディガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right\}\varphi(x,y,z)=E\,\varphi(x,y,z) \tag{1}$$

を考える。ただし、$0\le x\le L,\ 0\le y\le L,\ 0\le z\le L$ であり、x 方向、y 方向には周期境界条件、z 方向にはゼロ境界条件を取る。念のために正確に書けば、

$$\varphi(0,y,z)=\varphi(L,y,z),\quad \left.\frac{\partial\varphi(x,y,z)}{\partial x}\right|_{x=0}=\left.\frac{\partial\varphi(x,y,z)}{\partial x}\right|_{x=L}, \tag{2}$$

$$\varphi(x,0,z)=\varphi(x,L,z),\quad \left.\frac{\partial\varphi(x,y,z)}{\partial y}\right|_{y=0}=\left.\frac{\partial\varphi(x,y,z)}{\partial y}\right|_{y=L}, \tag{3}$$

$$\varphi(x,y,0)=\varphi(x,y,L)=0 \tag{4}$$

が任意の x,y,z について成り立つということである。

答案でエネルギー固有値を書く際には、定数

$$E_0=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m} \tag{5}$$

を用いて表わすこと。

(a) シュレディンガー方程式 (1) の解（つまり、エネルギー固有値とエネルギー固有状態）をすべて求めよ。エネルギー固有状態は規格化せよ。
導出は簡略でよいが、最終的な解答をまとめて書くこと。その際、自分で導入した変数（例えば、$n_{\mathrm{x}},n_{\mathrm{y}},n_{\mathrm{z}}$）の範囲を必ず明示すること。なお、自然数に 0 を含める流儀とそうでない流儀があるので、自然数という表現は用いないこと。

エネルギー固有値を低い方から順に E_{GS}, E_{1st}, E_{2nd}, E_{3rd}, E_{4th} とする。（これらは全て異なった値をとることに注意。）

(b) E_{GS}, E_{1st}, E_{2nd}, E_{3rd}, E_{4th} を求め、それぞれの縮退度（エネルギー固有値に対応する独立なエネルギー固有状態の個数）を求めよ。

2. a, b を $a > b$ を満たす正の定数、V_0 を正の定数とする。区間 $-a \le x \le a$ におけるポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & -a \le x < -b \text{ または } b < x \le a \text{ のとき} \\ 0 & -b \le x \le b \text{ のとき} \end{cases} \tag{6}$$

の中の質量 m の粒子の定常状態（エネルギー固有状態）のシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + V(x)\,\varphi(x) = E\,\varphi(x) \tag{7}$$

を考える。境界条件は $\varphi(-a) = \varphi(a) = 0$ とする。

ここでは、$0 < E < V_0$ を満たすエネルギー固有値と対応するエネルギー固有状態に注目する。解答では必要に応じて $v_0 = 2mV_0/\hbar^2$ という定数を用いて表式を簡単にすること。

ポテンシャルが $V(x) = V(-x)$ を満たすので、エネルギー固有状態は（$x = 0$ を中心とする反転について）対称か反対称かのいずれかに取れる。$x = \pm a$ での境界条件を考慮すれば、対称なエネルギー固有状態の波動関数は一般に

$$\varphi(x) = \begin{cases} \sinh(\theta(-x-a)) & -a \le x \le -b \\ C\cos(kx) & |x| \le b \\ \sinh(\theta(x-a)) & b \le x \le a \end{cases} \tag{8}$$

と書ける（k と θ は正の未知定数、C も未知の定数)。ただしここでは波動関数を規格化していない。

(a) エネルギー固有値 E を k で表わせ。エネルギー固有値 E を θ で表わせ。これらから θ と k の関係を求めよ。

(b) 波動関数の接続条件から k を決める方程式を導け。

(c) 反対称なエネルギー固有状態の波動関数の (8) に相当する一般形を書け。k を決める方程式を導け。

(d) 基底状態と第一励起状態の波動関数の概形をグラフに描け。（基底状態の波動関数は対称であり、第一励起状態の波動関数は反対称であることが知られている。その事実を用いてよい。）

3. 1 次元の 1 粒子の量子力学系を考え、$\hat{x}$, $\hat{p}$ をそれぞれ位置と運動量の演算子とする。講義でみたように

$$\hat{a} := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\ \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\ \hat{p}, \quad \hat{a}^\dagger := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\ \hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\ \hat{p} \tag{9}$$

と定義すると、調和振動子のハミルトニアンは $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2})$ と書ける（$m > 0$ は粒子の質量、$\omega > 0$ は振動子の角振動数)。

(a) 交換関係 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ を示せ。ただし、$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ を証明抜きで使ってよい。

$|\varphi_0\rangle$ を、$\hat{a}|\varphi_0\rangle = 0$ と $\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1$ を満たす状態とし、$|\varphi_1\rangle := \hat{a}^\dagger|\varphi_0\rangle$ という状態を定義する。(このとき $\langle\varphi_1| = \langle\varphi_0|\hat{a}$ である。)

(b) $|\varphi_0\rangle, |\varphi_1\rangle$ は $\hat{H}$ の固有状態であることを示し、それぞれの固有値（つまり、固有エネルギー）を求めよ。$|\varphi_1\rangle$ が規格化されていることを示せ。

(c) $\langle\varphi_0|\hat{x}^2|\varphi_0\rangle, \langle\varphi_1|\hat{x}^2|\varphi_1\rangle, \langle\varphi_1|\hat{x}^3|\varphi_0\rangle, \langle\varphi_1|\hat{x}^3|\varphi_1\rangle$ を計算せよ。