量子力学 I

2023 年 1 月 27 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け（単純な計算問題は答だけでよい）。**第 n 問の解答は n 枚目の解答用紙に書く**こと（ここで、$n = 1, 2, 3, 4$）。解答用紙の裏面も使用してもよい（解答用紙のスペースが不足する場合には追加の用紙を渡す。一枚の用紙に複数の問題の解答を書かないこと）。試験後、答案を受け取りにくること。2023 年 9 月を過ぎたら答案を予告なく処分する。

問題用紙は 2 枚あり、問題は第 4 問まである。

1. L を正の定数とする。辺の長さが L の正方形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

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

を考える。ただし、$0 \le x \le L$, $0 \le y \le L$ であり、x 方向、y 方向ともに周期的境界条件を取る。

(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。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、$n_{\mathrm{x}}, n_{\mathrm{y}}$）の範囲を必ず明示すること。

エネルギー固有値を低い方から順に E_{GS}, E_{1st}, E_{2nd}, E_{3rd} 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} 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. 区間 $[0, a]$ における（十分に性質のよい）任意のポテンシャル $U(x)$ を考える。$U(x)$ の最小値を $U_{\rm min}$ とする。

(a) 二回微分可能で $\varphi(0) = \varphi(a) = 0$ を満たす任意の波動関数 $\varphi(x)$ について、

$$\int_0^a dx\,\{\varphi(x)\}^*\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x)+U(x)\varphi(x)\right\} = \frac{\hbar^2}{2m}\int_0^a dx\,|\varphi'(x)|^2+\int_0^a dx\,U(x)\,|\varphi(x)|^2 \tag{2}$$

が成り立つことを示せ。

ゼロ境界条件 $\varphi(0) = \varphi(a) = 0$ のもとでの区間 $[0, a]$ におけるシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + U(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{3}$$

を考える。

(b) 不等式 (2) を用いて、(3) で決まる任意のエネルギー固有値 E が

$$E \geq U_{\rm min} \tag{4}$$

を満たすことを証明せよ。

(c) (時間が余った人のための満点外の問題) ここまでは講義でやったそのままだが、もう少し工夫すると、任意のエネルギー固有値について

$$E \geq \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} + U_{\rm min} \tag{5}$$

が示せる。これを証明せよ。

3. a, b, V_0 を正の定数とする。区間 $[0, a+b]$ に閉じ込められ、ポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & a < x \leq a+b \end{cases} \tag{6}$$

からの力を受ける質量 m の粒子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 $\varphi(0) = \varphi(a+b) = 0$ である。エネルギー固有値 E が $E > V_0$ を満たすエネルギー固有状態について考えよう。講義と同様、$v_0 = 2mV_0/\hbar^2$ とする。

(a) エネルギー固有状態の波動関数の（候補）を、$0 \leq x \leq a$ の範囲で、（未知の）波数 $k_1 > 0$ を用いて三角関数で表せ。波動関数は境界条件 $\varphi(0) = 0$ を満たすことに注意。規格化のことは気にせず全体の任意定数を残せばよい。

(b) エネルギー固有状態の波動関数の（候補）を、$a < x \leq a+b$ の範囲で、（未知の）波数 $k_2 > 0$ を用いて三角関数で表せ。波動関数は境界条件 $\varphi(a+b) = 0$ を満たすことに注意。規格化のことは気にせず全体の任意定数を残せばよい。

(c) k_1 と k_2 の関係を求めよ。

(d) $x = a$ での接続条件から k_2 の満たすべき関係を求めよ。tan を使うといい。この関係には k_1（あるいは、k_2 以外の未知の量）を含めないこと。

(e) $ak_1 \ll 1$ が成り立つような k_2 の範囲だけを考える。$|x| \ll 1$ なら $\tan(x) \simeq x$ という近似を用いて (d) で求めた関係を簡単化せよ。グラフを描いて、簡単化された関係から k_2 がどのように決まるかを調べよ。

4.　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

$$\hat{a} := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\ \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\ \hat{p}, \quad \hat{a}^\dagger := \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\ \hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\ \hat{p} \tag{8}$$

と定義すると、調和振動子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \tag{9}$$

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) $\langle\varphi_0|\hat{x}|\varphi_0\rangle, \langle\varphi_1|\hat{x}|\varphi_1\rangle$、$\langle\varphi_0|\hat{x}^2|\varphi_0\rangle, \langle\varphi_1|\hat{x}^2|\varphi_1\rangle$, を求めよ。