量子力学 II レポート問題 (3)

(出題 2006/05/14、〆切 2006/05/28 の授業まで)

Report 8. (シュレディンガー方程式における時間の分離)
質量 m の粒子がポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ 中を運動している。

1. シュレディンガー方程式の時間変数について変数分離された解 $\psi(\boldsymbol{r},t) = f(t)\varphi(\boldsymbol{r})$ を仮定する。このとき、シュレディンガー方程式の変数分離を実行し、分離定数を E として $f(t)$, $\varphi(\boldsymbol{r})$ が満たす方程式を示せ。

2. 上の問題での分離定数として $E = E_n (n = 0, 1, 2, \ldots)$ という値のみが許されるとする。このとき、次の波動関数がシュレディンガー方程式の解であることを示せ。

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \sum_n C_n e^{-iE_n t/\hbar}\varphi_n(\boldsymbol{r}) \quad \cdots \quad (*)$$

   ただし、φ_n は分離定数が $E = E_n$ のときに、(1) で求められる φ についての方程式の解である。

Report 9. (階段型ポテンシャルでの反射と透過)
次の 1 次元ポテンシャル $V(x)$ 中を質量 m の粒子が運動している。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ V_0 > 0 & (x \geq 0) \end{cases}$$

1. $E > V_0$ において、シュレディンガー方程式の一般解を 2 つの独立な解の一次結合として求めよう。$k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $k' = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ を用いて、

$$\varphi(x) = \begin{cases} A\exp(ikx) + B\exp(-ikx) & (x < 0) \\ C\exp(ik'x) + D\exp(-ik'x) & (x \geq 0) \end{cases}$$

   とおき、$(C, D) = (1, 0)$ の解を $\varphi_C(x)$、$(C, D) = (0, 1)$ の解を $\varphi_D(x)$ とすると、一般解は $\varphi(x) = C\varphi_C(x) + D\varphi_D(x)$ と表せる。$\varphi_C(x), \varphi_D(x)$ を求めよ。

2. $E < V_0$ において、シュレディンガー方程式の一般解を求めよ。ただし、$k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $\rho = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ とし、波動関数が発散しないことは条件として課すこととする。

Report 10. (トンネル効果)
次の 1 次元ポテンシャル $V(x)$ に、$x = -\infty$ から質量 m の粒子がエネルギー E で入射した場合の透過率、反射率を求めよ。ただし、$k = \sqrt{2mE}/\hbar$, $k' = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$ で与えられる k, k' を用いてよい。

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0, x \geq \ell) \\ -V_0 < 0 & (0 \leq x < \ell) \end{cases}$$

Report 11. (束縛状態)
一次元ポテンシャル $V(x)$ 中を質量 m の粒子が運動している。

$$V(r) = \begin{cases} +\infty & (x < 0) \\ -V_0 & (0 \leq x < a) \\ 0 & (x \geq a) \end{cases}$$

このとき、束縛状態が 1 つ以上存在するための、V_0 についての条件を求めよ。
(ヒント: $x < 0$ において、$\varphi = 0$ であり、$x = 0$ において φ は連続であるが、φ' は不連続となることを用いてよい。)

量子力学 II レポート問題略解 (2)(Report 5, 6)

Report 5. (確率の保存と確率密度流)

1. $\dfrac{\partial\rho}{\partial t}=\dfrac{1}{i\hbar}\left[\psi^*(\hat{H}\psi)-(\hat{H}\psi)^*\psi\right]=\dfrac{i\hbar}{2m}\left[\psi^*\psi''-(\psi'')^*\psi\right]=\dfrac{i\hbar}{2m}\dfrac{\partial}{\partial x}\left[\psi^*\psi'-(\psi')^*\psi\right]$ となるので、 $j(x)=-\dfrac{1}{m}\Re\left[\psi^*\left(-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}\right)\psi\right]$ とおくと、 $\dfrac{\partial\rho}{\partial t}+\dfrac{\partial j}{\partial x}=0$ となることがわかる。
2. (略, x の 2 階微分にたいして、部分積分を 2 度繰り返して用いる。)

Report 6. (エーレンフェストの定理)

(1) シュレディンガー方程式、(2) 運動量演算子の表現 $\hat{p}=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ 、(3) ポテンシャルが実数であること、(4) 波動関数が $x\to\pm\infty$ で十分速く 0 になること、を利用すると、

$\dfrac{d\langle p\rangle}{dt}=\dfrac{1}{i\hbar}\displaystyle\int dx\left[\psi^*\hat{p}(\hat{H}\psi)-(\hat{H}\psi)^*\hat{p}\psi\right]=\dfrac{1}{i\hbar}\int dx\left[\psi^*\hat{p}(V\psi)-V\psi^*\hat{p}\psi\right]=\dfrac{1}{i\hbar}\int dx\psi^*(-i\hbar)\dfrac{\partial V}{\partial x}\psi$

となり、 $\dfrac{d\langle p\rangle}{dt}=-\langle\dfrac{\partial V}{\partial x}\rangle$ が示せる。

(1 つ目の等式で (1)、2 つ目の等式で (3), (4)、3 つ目の等式で (2) を使っている。)

ここで (4) については、$\hat{H}$ の運動エネルギー部分で、$\varphi=\hat{p}\psi$ とおいて、

$\displaystyle\int dx\left[\psi^*(\partial^2\varphi/\partial x^2)-(\partial^2\psi^*/\partial x^2)\varphi\right]=\left[\psi^*(\partial\varphi/\partial x)-(\partial\psi^*/\partial x)\varphi\right]_{-\infty}^{\infty}=0$

とする部分で利用している。

$\dfrac{d\langle p\rangle}{dt}=\dfrac{1}{i\hbar}\langle[\hat{p},\hat{H}]\rangle$ から出発してもよい。

第 2 章「シュレディンガー方程式」のまとめ

1. シュレディンガー方程式の作り方: 古典力学の関係式 ($E=H=\boldsymbol{p}^2/2m+V(\boldsymbol{r})$) において、$\boldsymbol{p}\to-i\hbar\boldsymbol{\nabla}$, $E\to i\hbar\partial/\partial t$ と置き換えて波動関数に作用する演算子とする。

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2\psi+V(\boldsymbol{r})\psi$$

2. 波束の進む速度は「位相が異なる k に対して停留的」の条件から決まる群速度である。波動関数の位相は古典力学の「作用」に対応する。

$$\psi=e^{iS/\hbar}\quad\to\quad\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2+V(x)\left[-\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}\right]=0$$

3. 粒子をある点に見いだす確率は $|\psi|^2$ に比例する。確率密度の和は保存する。

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{j}=0\ (\rho=|\psi|^2\ ,\ \boldsymbol{j}=\frac{1}{m}\Re\left[\psi^*\hat{\boldsymbol{p}}\psi\right])\quad\to\quad N=\int d^3r\rho=\mathrm{const.}$$

4. 演算子の期待値とその時間微分は次のように与えられる。

$$\langle A\rangle=\int d^3r\psi^*\hat{A}\psi\quad\to\quad\frac{d\langle A\rangle}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle$$

5. シュレディンガー方程式の時間変数を分離した解は、定常状態を表す。

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=e^{-iEt/\hbar}\varphi(\boldsymbol{r})\ ,\quad\hat{H}\varphi=-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2\varphi+V\varphi=E\varphi$$