物理学演習 II 期末試験　解答　　2017.01.31 実施

注意事項：

1. 【1】、【2】を別々の解答用紙に解答すること。
2. すべての解答用紙に氏名および学生証番号を書くこと。
3. 断らない限り h はプランク定数であり、$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$ とする。

【1】一次元空間において量子力学に従う質量 m の粒子があり、それが受けるポテンシャルは、$V_0 > 0$ として以下の通りである：

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & (|x| \geq a) \\ 0, & (|x| < a) \end{cases} .$$

以下、このポテンシャルにおける、束縛状態となっている固有状態（束縛固有状態）について考える。なお、粒子のエネルギーは E とする。

1. このエネルギー E の束縛固有状態について、それが満たすべき時間に依存しないシュレディンガー方程式を、$|x| < a$ および $|x| \geq a$ のそれぞれの領域において一般解を求めよ。ただし束縛状態であることは考慮すること。また、束縛固有状態が存在するための、E の正負および、E と V_0 の大小関係についても答えよ。

2. 境界 $x = -a, x = a$ における接続条件を求めよ。

3. いま n を自然数（$n = 1, 2, \cdots$）とし、このポテンシャルにおける束縛固有状態の固有エネルギーを E_n と表記する。ただし、$n \geq m$ のとき $E_n \geq E_m$ なるように E_n の順番は定義されているとし、束縛固有状態の個数が仮に有限個（N 個）の場合はその数だけ E_1 から E_N までが定義されているとする。固有エネルギー E_n に対応する固有状態を表す、規格化された波動関数 $\varphi_n(x)$ を求めよ。ただし、波動関数の中に現れる E_n はそのまま E_n として扱い、具体的な形を求める必要は無い。

4. 次の性質を満たす $\varphi_n(x)$ が存在するためには V_0 および a にはどのような関係が成立すればよいか?:（i） 偶関数、（ii） 奇関数。

5. $\epsilon \equiv \frac{\hbar^2}{2mV_0a^2}$ なる量を定義すると、E_n は ϵ の関数となる。$V_0 \to \infty$（すなわち $\epsilon \to 0$）の極限における E_n の極限値 α_n および α_n への漸近形を $\alpha_n + \beta_n \epsilon^{\gamma_n}$ の形で求めよ。ただし β_n はゼロでない有限の実数とする。（より正確には $\lim_{\epsilon\to 0}(E_n - \alpha_n)/\epsilon^{\gamma_n} = \beta_n$ かつ β_n が非ゼロ有限実数となるような α_n、β_n、γ_n とを決定すること。）

6. 粒子の波動関数が $\varphi_n(x)$ であるとする。簡単のために $\varphi_n(a) \equiv \varphi_n(x = a)$ と定義する。$|\varphi_n(a)|^2$ の $V_0 \to \infty$ での漸近形を $|\varphi_n(a)|^2 = \alpha'_n + \beta'_n \epsilon^{\gamma'_n}$ として求めよ。ただし β'_n はゼロでない有限の実数とする。（より正確には $\lim_{\epsilon\to 0}(|\varphi_n(a)|^2 - \alpha'_n)/\epsilon^{\gamma'_n} = \beta'_n$ かつ β'_n が非ゼロ有限実数となるような α'_n、β'_n、γ'_n とを決定すること。）

【2】次の三次元定常状態シュレディンガー方程式の基底状態について考察を試みる。

$$H\psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{\alpha}{r}\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (\alpha : \text{正定数}).$$

ここで $\mathbf{r} = (x, y, z)$、$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ である。なお、三次元空間上における波動関数の物理的意味付けとしては次を採用する: 微小領域 $[x, x+dx] \times [y, y+dy] \times [z, z+dz]$ において粒子が存在する確率は、$Cdxdydz|\psi(\mathbf{r})|^2$($C$:無次元規格化定数) で与えられる。

1. 波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ の次元は長さ (L) の何乗か。

2. 演算子 A, B の間に交換関係 $[A, B] = 0$ が成り立つとする。$\psi(\mathbf{r})$ が縮退の無い A の固有状態であれば、それは B の固有状態でもあることを示せ。

3. $[\frac{\partial}{\partial x}]^\dagger = -\frac{\partial}{\partial x}$ を示せ。ただし、エルミート共役 † の定義は次の通りである。

   $$B = A^\dagger \Leftrightarrow \text{三次元上の関数 } f(\mathbf{r}), g(\mathbf{r}) \text{ について、} \int d\mathbf{r}[f(\mathbf{r})]^*[Ag(\mathbf{r})] = \int d\mathbf{r}[Bf(\mathbf{r})]^* g(\mathbf{r})$$

   なお $f(\mathbf{r}), g(\mathbf{r})$ はなめらかかつ遠方で十分早く 0 に収束するとしてよい。

4. H を次のように変形する。このとき実定数 a, b, c の具体形を与えよ。以降では具体形は用いずにそのまま a, b, c として問題に解答しても差し支えない。

   $$H = \sum_i A_i^\dagger A_i + c; \quad A_i = \left(a\frac{x_i}{r} + b\frac{\partial}{\partial x_i}\right) \quad ((x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)).$$

5. 次の交換関係を計算せよ。(i)$[A_i, A_j]$ $(i \neq j)$ (ii)$[A_i, A_i^\dagger]$

6. 一般の状態について，演算子 $A_i^\dagger A_i$ の期待値 $\langle A_i^\dagger A_i \rangle \geq 0$ を示せ。

7. すべての i について $\langle A_i^\dagger A_i \rangle = 0$ を同時に満たす状態の波動関数 $\psi(\mathbf{r}) \equiv \psi_0(\mathbf{r})$ の具体形 (規格化は必要ない) を与え、H の基底状態のエネルギー固有値を求めよ。そのような状態が存在しないならば、その根拠を述べよ。

【1】題材は、どの量子力学入門を対象とした教科書にも掲載されている、有限高さの井戸型ポテンシャル問題である。V_0 が $+\infty$ になると、無限高さの井戸型ポテンシャル問題になる。このことを意識して波動関数などを設定すれば見通しは良くなる。

1. $k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ および $\kappa=\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$ として

$$\text{一般解は}\psi(x)=\begin{cases}A_1e^{-\kappa x} & a\le x\\ A_2\cos kx+A_3\sin kx & -a\le x\le a\\ A_4e^{\kappa x} & x\le -a\end{cases} \tag{1}$$

となる。ここで、A_1 から A_4 は任意の定数である。また、束縛状態が存在するための条件は

$$0<E \qquad \text{かつ} \qquad E<V_0 \tag{2}$$

である。

2. 波動関数の連続性より $x=a$ および $x=-a$ それぞれにおいて

$$A_1e^{-\kappa a}=A_2\cos ka+A_3\sin ka \tag{3}$$
$$A_4e^{-\kappa a}=A_2\cos ka-A_3\sin ka \tag{4}$$

を得る。また、波動関数の１階微分も連続であるべきであり、$x=a$ および $x=-a$ それぞれにおいて

$$-\kappa A_1e^{-\kappa a}=-kA_2\cos ka+kA_3\sin ka \tag{5}$$
$$\kappa A_4e^{-\kappa a}=kA_2\cos ka+A_3\sin ka \tag{6}$$

を得る。

3. $\psi_n(x)$ が偶関数の場合、

$$\text{一般解は}\psi_n(x)=\begin{cases}A^{(e)}e^{\kappa a}\cos ka\cdot e^{-\kappa x} & a\le x\\ A^{(e)}\cdot\cos kx & -a\le x\le a\\ A^{(e)}e^{\kappa a}\cdot\cos ka\cdot e^{\kappa x} & x\le -a\end{cases} \tag{7}$$

となり、ただし $A^{(e)}$ は規格化定数として

$$\left|A^{(e)}\right|=\left(a+\frac{\cos^2 ka}{\kappa}+\frac{\sin 2ka}{2k}\right)^{-\frac{1}{2}} \tag{8}$$
$$=\left(a+\frac{1}{\kappa}\right)^{-\frac{1}{2}} \tag{9}$$

である。

一方で、$\psi_n(x)$ が奇関数の場合、

$$\text{一般解は}\psi_n(x) = \begin{cases} A^{(o)} e^{\kappa a} \sin ka \cdot e^{-\kappa x} & a \le x \\ A^{(o)} \cdot \sin kx & -a \le x \le a \\ -A^{(o)} e^{\kappa a} \cdot \sin ka \cdot e^{\kappa x} & x \le -a \end{cases} \tag{10}$$

となり、ただし $A^{(o)}$ は規格化定数として

$$\left|A^{(o)}\right| = \left(a + \frac{\sin^2 ka}{\kappa} - \frac{\sin 2ka}{2k}\right)^{-\frac{1}{2}} \tag{11}$$

$$= \left(a + \frac{1}{\kappa}\right)^{-\frac{1}{2}} \tag{12}$$

である。

4. 基本的な考え方は $x = a$ および $x = -a$ での境界条件（3）から（6）を満たすように k と κ が決定されることに着目すればよい。解法の詳細は適当な教科書（例：猪木・川合著「量子力学 I」講談社）に譲るとする。

   (a) 問題の前提条件のように $V_0 > 0$ かつ $a > 0$ ならば必ず偶関数の束縛固有状態は存在する。

   (b) $\frac{2mV_0}{\hbar^2} \ge \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2$ であればよい。

5. ψ_n に対応する k を k_n とすれば、$V_0 \to \infty$ で $k_n = \frac{n\pi}{2a}$ となるべきであることに着目すればよい。β_n と γ_n の計算はやや煩雑だが、α_n だけはほぼ計算なしで導出可能である。

$$\alpha_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{2a}\right)^2 \tag{13}$$

$$\beta_n = -\frac{\hbar^2}{4ma^2} \cdot n\pi \tag{14}$$

$$\gamma_n = \frac{1}{2} \tag{15}$$

6. 基本方針は前小問と同様である。また α'_n はほぼ計算なしで導出可能である。

$$\alpha'_n = 0 \tag{16}$$

$$\beta'_n = \left(\frac{n\pi}{2}\right)^2 \frac{1}{a} \tag{17}$$

$$\gamma'_n = 1 \tag{18}$$

【2】コメント: 題材は一見ぎょっとするが，1–6 については量子力学の基本的知識と数式操作を問うているにすぎない (実際全体的な出来はよかった)．交換関係の計算は気をつけないと煩雑になりがちなので，分配則などの公式や index の入れ替えなどを用いて簡単化を心がけて欲しい．どの項とどの項が打ち消しそうか，という当たりをつけてから変形を進めるのも重要である．

1. $dxdydz|\psi(\mathbf{r})|^{\mathbf{2}}$ が無次元なので，$L^{-3/2}$.

2. 問題設定より，$A\psi(\mathbf{r}) = a\psi(\mathbf{r})$ (a : 複素定数) とおける．両辺左から B を演算すると

$$BA\psi(\mathbf{r}) = AB\psi(\mathbf{r}) = aB\psi(\mathbf{r}) \quad (\because [A,B]=0). \tag{19}$$

上式は $B\psi(\mathbf{r})$ が固有値 a をもつ A の固有状態であることを意味するが，縮退がないことから $B\psi(\mathbf{r})$ は $\psi(\mathbf{r})$ の定数倍となる必要がある．よって $B\psi(\mathbf{r}) = b\psi(\mathbf{r})$ (b : 複素定数) とおける．以上で題意は示された.

3.

$$\begin{aligned}\int d\mathbf{r} f(\mathbf{r})^* \frac{\partial}{\partial x} g(\mathbf{r}) &= \int dy \int dz \int dx \left[\frac{\partial}{\partial x}\Big(f(\mathbf{r})^* g(\mathbf{r})\Big) - \Big(\frac{\partial}{\partial x} f(\mathbf{r})^*\Big) g(\mathbf{r})\right] \\ &= -\int dy \int dz \int dx \Big(\frac{\partial}{\partial x} f(\mathbf{r})\Big)^* g(\mathbf{r})\end{aligned} \tag{20}$$

一行目から二行目において f, g が遠方で十分早く 0 に収束することを用いた．以上により命題は示された.

4.

$$\begin{aligned}A_i^\dagger A_i &= \left(a\frac{x_i}{r} - b\frac{\partial}{\partial x_i}\right)\left(a\frac{x_i}{r} + b\frac{\partial}{\partial x_i}\right) \\ &= a^2\frac{x_i^2}{r^2} - ab\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{x_i}{r} + ab\frac{x_i}{r}\frac{\partial}{\partial x_i} - b^2\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}.\end{aligned} \tag{21}$$

第二項について変形を進めると

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{x_i}{r} = \frac{r^2 - x_i^2}{r^3} + \frac{x_i}{r}\frac{\partial}{\partial x_i}.$$

前の式に代入して

$$A_i^\dagger A_i = a^2\frac{x_i^2}{r^2} - ab\frac{r^2 - x_i^2}{r^3} - b^2\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}. \tag{22}$$

両辺 i について和をとって，$\sum_i x_i^2 = r^2$ に気をつけると

$$\begin{aligned}\sum_i A_i^\dagger A_i &= a^2 - ab\frac{3r^2 - r^2}{r^3} - b^2\nabla^2 \\ &= a^2 - 2ab\frac{1}{r} - b^2\nabla^2. \\ \Leftrightarrow \sum_i A_i^\dagger A_i + c &= a^2 - 2ab\frac{1}{r} - b^2\nabla^2 + c\end{aligned} \tag{23}$$

最終型ともとのハミルトニアンが一致するように a, b, c を決めると,

$$b^2 = \frac{\hbar^2}{2m}, \quad 2ab = \alpha, \quad a^2 + c = 0.$$

$$\Rightarrow b = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}, \quad a = \frac{\alpha}{2b} = \sqrt{\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}}, \quad c = -a^2 = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}. \tag{24}$$

コメント: $\sum_i A_i^\dagger A_i$ の変形後に x_i の一階偏微分が残っている答案は，演算子の積の取扱いを理解していないと捉え，厳しく減点した．演算子に関する式変形は，演算子がかかる関数が常に右に存在すると暗に認めた上で進める必要がある．

5. (i)

$$\begin{aligned}[A_i, A_j] &= \left[a\frac{x_i}{r} + b\frac{\partial}{\partial x_i}, a\frac{x_j}{r} + b\frac{\partial}{\partial x_j}\right] \\ &= ab\left(\left[\frac{x_i}{r}, \frac{\partial}{\partial x_j}\right] - \left[\frac{x_j}{r}, \frac{\partial}{\partial x_i}\right]\right). \end{aligned} \tag{25}$$

第一項を変形すると

$$\left[\frac{x_i}{r}, \frac{\partial}{\partial x_j}\right] = \frac{x_i}{r}\frac{\partial}{\partial x_j} - \left(\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{x_i}{r}\right) - \frac{x_i}{r}\frac{\partial}{\partial x_j} = \frac{x_i x_j}{r^3} \tag{26}$$

この形は $i \leftrightarrow j$ の交換について不変なので $\left[\frac{x_i}{r}, \frac{\partial}{\partial x_j}\right] = \left[\frac{x_j}{r}, \frac{\partial}{\partial x_i}\right]$．よって $[A_i, A_j] = 0$.

(ii)

$$\begin{aligned}[A_i, A_i^\dagger] &= \left[a\frac{x_i}{r} + b\frac{\partial}{\partial x_i}, a\frac{x_i}{r} - b\frac{\partial}{\partial x_i}\right] \\ &= -2ab\left[\frac{x_i}{r}, \frac{\partial}{\partial x_i}\right]. \\ \left[\frac{x_i}{r}, \frac{\partial}{\partial x_i}\right] &= = \frac{x_i}{r}\frac{\partial}{\partial x_i} - \left(\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{x_i}{r}\right) - \frac{x_i}{r}\frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{x_i^2 - r^2}{r^3}\text{なので,} \\ [A_i, A_i^\dagger] &= 2ab\frac{r^2 - x_i^2}{r^3}. \end{aligned} \tag{27}$$

6. 一般の状態についての演算子 $A_i^\dagger A_i$ の期待値は，その波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ を用いて次のように書ける

$$\begin{aligned}\langle A_i^\dagger A_i\rangle &= \frac{\int d\mathbf{r}\psi^*(\mathbf{r})A_i^\dagger A_i\psi(\mathbf{r})}{\int d\mathbf{r}|\psi(\mathbf{r})|^2} \\ &= \frac{\int d\mathbf{r}\left[A_i\psi(\mathbf{r})\right]^* A_i\psi(\mathbf{r})}{\int d\mathbf{r}|\psi(\mathbf{r})|^2} \\ &= \frac{\int d\mathbf{r}|A_i\psi(\mathbf{r})|^2}{\int d\mathbf{r}|\psi(\mathbf{r})|^2} \geq 0.\ \text{(証明終)} \end{aligned} \tag{28}$$

コメント: 上の変形においてエルミート共役について $(A^\dagger)^\dagger = A$ は既知とした．その点を非自明として確認をした，より丁寧な答案もあった．なお，ブラケット記法を用いて議論した答案も正解とした．

7. 前問より，$\langle A_i^\dagger A_i\rangle = 0$ となるのは $A_i\psi(\mathbf{r}) = 0$ となるときであることがわかる．この条件をすべての i について満たす波動関数が存在するかはこの時点で非自明であるが，そのような波動関数を発見できればそれが目的の波動関数 $\psi_0(\mathbf{r})$ である．

設定する関数型としては，全ての A_i についてゼロ固有値を返す必要があるので，x, y, z の入れ替えについて不変な形をしているものが候補である．一般には $X_1 = x + y + z, X_2 = x^2 + y^2 + z^2 = r^2, X_3 = xy + yz + zx, X_4 = xyz$ について依存する $\psi(X_1, X_2, X_3, X_4)$ のようなものがあてはまる．今回は $\frac{\partial r}{\partial x_i} = \frac{x_i}{r}$ をヒントに，$\psi_0(\mathbf{r}) = \psi_0(r)$ という形の解が適当だと当たりがつく．実際，

$$\begin{aligned} A_i\psi_0(r) &= \left(a\frac{x_i}{r} + b\frac{\partial}{\partial x_i}\right)\psi_0(r) = \left(a\frac{x_i}{r}\psi_0(r) + b\frac{x_i}{r}\frac{d\psi_0(r)}{dr}\right) = 0 \\ &\Leftrightarrow a\psi_0(r) + b\frac{d\psi_0(r)}{dr} = 0 \\ &\Leftrightarrow \psi_0(r) = C\exp\left[-\frac{a}{b}r\right] (C: \text{規格化定数}). \end{aligned} \tag{29}$$

この波動関数は全ての i に対して自明に $A_i\psi_0(\mathbf{r}) = 0$ を満たす.

このことにより，

$$H\psi_0(\mathbf{r}) = c\psi_0(\mathbf{r}). \tag{30}$$

$\psi_0(\mathbf{r})$ は最小エネルギー期待値を与える状態であり，かつ固有状態であるので，これは基底状態であり，対応するエネルギー固有値は $c = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$ である.

コメント: 得られた解 $\psi_0(r) = C\exp\left[-\frac{a}{b}r\right]$ が物理的に適当な解かどうかは a, b の正負に依存している．仮に両者が異符号の場合，波動関数が遠方で指数関数的に発散してしまうため．物理的解釈を与えることは出来ない．今回は 4. で見たとおり両者とも同符号であるので，この問題は起こらない．今回はこの点について言及しているか否かは採点に考慮しなかった.

コメント: この大問で取り上げた手法は一般の n 次元空間における $1/r$ 型引力ポテンシャル問題 (ただし $r = \sqrt{\sum_i^n x_i^2}$) の基底状態に対する処方箋を与える.

コメント: 本問題を作るにあたり以下を参考にした.

Angular momentum, by B. Zwiebach, Chap. 7 (MIT Open Course Ware, 2013)

https://ocw.mit.edu/courses/physics/8-05-quantum-physics-ii-fall-2013/lecture-notes/MIT8_05F13_Chap_09.pdf