量子力学 II 演習 問題 (第 4回)

樋口 さぶろお*

1998 年 5 月 12 日

Schrödinger 方程式

波動関数 $\Psi(x,t)$ の時間発展は, (時間に依存する) Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(x,t) = H\Psi(x,t) \tag{1}$$

にしたがって発展する. ただし, H は Hamiltonian 演算子で, 典型的には

$$H\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t) \tag{2}$$

ここで $V(x)$ はポテンシャルエネルギー.

[4-1] Schrödinger 方程式

1. Hamiltonian H が時刻 t によらないとする. 変数分離 $\Psi(x,t) = \psi(x)T(t)$ により, $T(t)$ を求めよ. そのとき, $\psi(x)$ は, ある定数により

$$H\psi(x) = E\psi(x) \tag{3}$$

をみたすことを示せ. 関係 (3) を, 定常状態の Schrödinger 方程式といい, ' ψ は, 固有値 E の, H の固有関数である' と表現する.

2. 上で求めた波動関数 $\Psi(x,t) = \psi(x)T(t)$ について, 粒子の存在確率密度 $\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$ が, 時刻 t に依存しないことを示せ.

*hig@rice.c.u-tokyo.ac.jp, URL: http://rice.c.u-tokyo.ac.jp/~hig/, Room: Komaba 16-809B, Phone: (03)54.54.67.35

[4-2]　演算子の表現行列

周期的境界条件 $\psi(0) = \psi(L)$ の課せられた 1 次元空間 $0 \leq x \leq L$ に自由粒子が閉じ込められている．規格化された波動関数の族

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} \exp\left[\frac{2n\pi i x}{L}\right] \quad (n \in \mathbb{Z}) \tag{4}$$

を考える．

1. 自由粒子の Hamiltonian の表現行列 $\langle\psi_m|p^2/2m|\psi_n\rangle$ を求めよ．
2. 運動量演算子の表現行列 $\langle\psi_m|p|\psi_n\rangle$ を求めよ．
3. 座標演算子の表現行列 $\langle\psi_m|x|\psi_n\rangle$ を求めよ．
4. 規格化された波動関数

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{5}}\psi_1(x) + \frac{2}{\sqrt{5}}\psi_{-2}(x) \tag{5}$$

   を考える．$\{\psi_n\}$ を基底にしたとき，ϕ はどのようなベクトルで表されるか．
5. 内積 $\langle\psi_1|\phi\rangle$，期待値 $\langle\phi|p^4|\phi\rangle$，$\langle\phi|xp|\phi\rangle$ を，行列とベクトルを用いて計算せよ．

[4-3]　Schrödinger eq

系の状態の空間が，2 つだけの関数 $\phi_1(x), \phi_2(x)$ からなる (Hamiltonian の固有関数とは限らない) 正規直交完全系を持っているとする．例えば，壁で 2 つに仕切られた箱に 1 粒子が入っている系で，$\phi_1(\phi_2)$ は右 (左) 側に粒子のある状態などと思えばよい．任意の波動関数 ψは

$$\psi(x,t) = a_1(t)\phi_1(x) + a_2(t)\phi_2(x)$$

とかける．

1. 波動関数 ψ に対する Schrödinger 方程式 (1) から，$a_1(t), a_2(t)$ の時間発展を決める微分方程式が，次で与えられることを示せ．

$$-i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\phi_1|H|\phi_1\rangle & \langle\phi_1|H|\phi_2\rangle \\ \langle\phi_2|H|\phi_1\rangle & \langle\phi_2|H|\phi_2\rangle \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \end{pmatrix} =: \mathbf{Ha}(t).$$

2. Hamiltonian の行列表示 が

$$\mathbf{H} = \Delta \times \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

であるとする. これは, 粒子が壁を透過することを許していることに相当する. 上で求めた微分方程式を用いて, 時刻 $t = 0$ で箱の右側にいた粒子を, 時刻 t で左側に発見する確率を求めよ.

[4-4] 同時対角化

3 つの状態 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle$ からなる正規直交完全系を持つような系がある. 物理量 A を表す演算子と, 物理量 B を表す演算子の表現行列はそれぞれ,

$$A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & ib \\ 0 & -ib & 0 \end{pmatrix} \tag{6}$$

である.

1. B の固有値に縮退があることを示せ.
2. A と B が可換な演算子であることを示せ.
3. 従って, A と B は同時測定可能なはずである. A, B の両方の測定値が確定値をとるような, 新しい正規直交完全系を見つけよ.