

a-4 物性基礎

(i)(a) $|x| < a/2$ で $V(x) = 0$ であるので, シュレーディンガー方程式を書き直すと

$$\frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0 \quad (1)$$

となり, 一般解が次のように求まる.

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad , \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (2)$$

但し, A, B は定数である.

ここで境界条件

$$\begin{cases} \varphi(-a/2) = 0 \\ \varphi(a/2) = 0 \end{cases}$$

を用いると, $2ka = 2(n+1)\pi$ となる.* (但し, $n = 0, 1, 2, 3 \dots$ である.) よって, この粒子のエネルギーが次のように求まる.

$$k^2 = \left(\frac{(n+1)\pi}{a} \right)^2 \quad (3)$$

$$\frac{2mE_n}{\hbar^2} = \left(\frac{(n+1)\pi}{a} \right)^2 \quad (4)$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n+1)^2 \quad (5)$$

次に波動関数を求める.

< $n = 0$ のとき (状態 0) >

式 (2) において $A = B$ となるので,

$$\varphi_0(x) = A \cos \frac{\pi}{a} x \quad (6)$$

であり, 規格化条件

$$\int_{-a/2}^{a/2} |\varphi(x)|^2 dx = 1 \quad (7)$$

より, 定数 A が決定されるので状態 0 における波動関数は

$$\varphi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi}{a} x \quad (8)$$

と求まる.

< $n = 1$ のとき (状態 1) >

式 (2) において $A = -B$ となるので,

$$\varphi_1(x) = A \sin \frac{2\pi}{a} x \quad (9)$$

であり, 規格化条件

$$\int_{-a/2}^{a/2} |\varphi(x)|^2 dx = 1 \quad (10)$$

* $n = 0$ で基底状態となるようにしました.



より, 定数 A が決定されるので状態 1 における波動関数は

$$\varphi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi}{a} x \quad (11)$$

と求まる.

(b) 状態 p を表すケットを $|p\rangle$, 状態 q を表すケットを $|q\rangle$, として $|x\rangle$ で展開すると,

$$|p\rangle = \int \langle x|p\rangle |x\rangle dx = \int \psi_p |x\rangle dx \quad (12)$$

$$|q\rangle = \int \langle x|q\rangle |x\rangle dx = \int \psi_q |x\rangle dx \quad (13)$$

これらの状態ケットの内積が 0 であることを示せば良い.

$$\langle p|q\rangle = \int \psi_p \psi_q^* dx \quad (14)$$

$$= \frac{1}{2} \left\{ \int |\psi_0|^2 dx - \int |\psi_1|^2 dx + \int (\psi_0^* \psi_1 - \psi_0 \psi_1^*) dx \right\} \quad (15)$$

$$= \frac{1}{2} \int (\psi_0^* \psi_1 - \psi_0 \psi_1^*) dx \quad (16)$$

$$= \left(e^{i\frac{E_0-E_1}{\hbar}t} - e^{-i\frac{E_0-E_1}{\hbar}t} \right) \times \int \varphi_0 \varphi_1^* dx \quad (17)$$

$$= 0 \quad (18)$$

なぜならば, (a) の結果より

$$\int_{-a/2}^{a/2} \varphi_0 \varphi_1^* dx = \frac{2}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \cos \frac{\pi}{a} x \sin \frac{2\pi}{a} x dx \quad (19)$$

$$= \frac{1}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \left(\sin \frac{3\pi}{a} x + \sin \frac{\pi}{a} x \right) dx \quad (20)$$

$$= 0 \quad (21)$$

$t = 0$ における波動関数の概形は Fig.1 のようになる. 単純に $\cos x + \sin 2x, \cos x - \sin 2x$ をプロットしているので軸の目盛は無視してください. **以下全ての図も形だけに注意して下さい.**

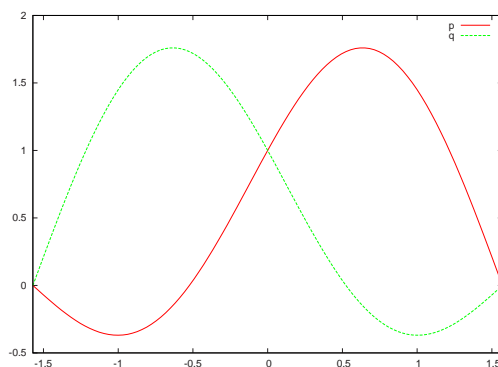


Fig.1 波動関数の図

(c) 状態 p の $t > 0$ における確率密度は次式で表される.

$$|\psi_p(x, t)|^2 = \frac{1}{a} \left\{ \left(\cos^2 \frac{\pi}{a} x + \sin^2 \frac{2\pi}{a} x \right) + 2 \cos \left(\frac{E_1 - E_0}{\hbar} t \right) \cos \frac{\pi}{a} x \sin \frac{2\pi}{a} x \right\} \quad (22)$$

式 (22) の右辺第一項は時間不変である. 一方, 右辺第二項は時間変化する.

これらの項をグラフにしたのが Fig.2 と Fig.3 である.

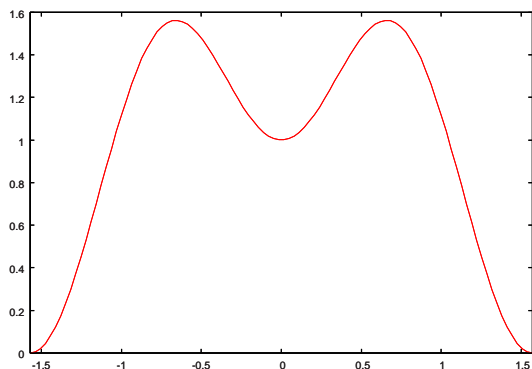


Fig.2 時間不変の項のグラフ

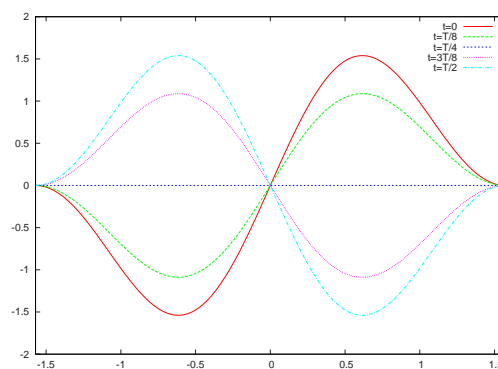


Fig.3 時間変化する項のグラフ

Fig.2 と Fig.3 を足したものが求める確率密度であるから, 答えは次の図のようになる.[†]

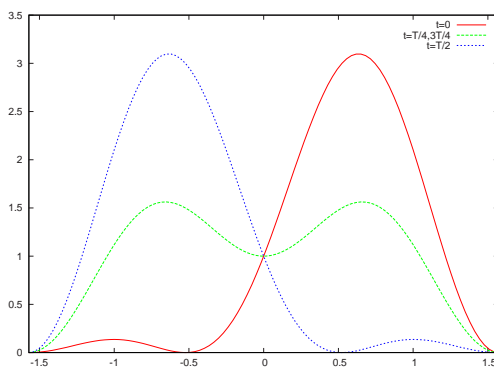


Fig.4 $|\psi_p(x, t)|^2$ の時間変化

(ii)(a) $\varphi(x)$ がシュレーディンガー方程式を満たすとする,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \varphi(x) = E_n \varphi(x) \quad (23)$$

であり, $x \rightarrow -x$ と置き換えると

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(-x) \right) \varphi(-x) = E_n \varphi(-x) \quad (24)$$

となる. ここで $V(x)$ が対称であることから $V(-x) = V(x)$ とすることができるので,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \varphi(-x) = E_n \varphi(-x) \quad (25)$$

[†] 時間によって粒子は, 井戸の右側によったり左側によったりしています. 井戸中央での確率密度が時間によらないのは面白いですね.

を得る. 式 (23), 式 (25) より $\varphi(x)$ と $\varphi(-x)$ は同じ固有値 E_n に属する固有関数であることが分かる.

以下では, この固有値に対して複数の固有関数があるかどうか (i.e. 固有値 E_n が縮退しているかどうか) で場合分けして考える.

< 固有値 E_n が縮退していないとき >

このとき $\varphi(x)$ と $\varphi(-x)$ は一次従属でなければならない. よって c を複素数として,

$$\varphi(-x) = c\varphi(x) \quad (26)$$

と書ける. ここで,

$$\varphi(x) = \varphi(-(-x)) \quad (27)$$

$$= c\varphi(-x) \quad (28)$$

$$= c^2\varphi(x) \quad (29)$$

$$\Rightarrow c = \pm 1 \quad (30)$$

であるので

$$\begin{cases} \varphi(x) = \varphi(-x) \text{ のとき対称な解} \\ \varphi(x) = -\varphi(-x) \text{ のとき反対称な解} \end{cases} \quad (31)$$

というように解を持つ.

< 固有値 E_n が縮退しているとき >

このとき $\varphi(x)$ と $\varphi(-x)$ は一次独立である場合もある.(一次従属の場合は上のように題意を示せばよい.)

$\varphi(x)$ と $\varphi(-x)$ が一次独立であるとき, シュレーディンガー方程式が対称, 反対称な解を持つことを, 実際にそのような解を示すことによって証明する.

$\varphi(x), \varphi(-x)$ がシュレーディンガー方程式を満たすので, シュレーディンガー方程式の線形性より, 次の二つの関数もシュレーディンガー方程式の解となる.

$$\begin{cases} \varphi_S(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi(x) + \varphi(-x)) : \text{対称な解} \\ \varphi_A(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi(x) - \varphi(-x)) : \text{反対称な解} \end{cases} \quad (32)$$

以上より, 題意を示せた.

(b) $x < 0$ の領域にある井戸を井戸 1, $x > 0$ の領域にある井戸を井戸 2 と呼ぶことにする. また, 井戸 1, 2 における波動関数の時間に依存しない関数を $\varphi_1(x), \varphi_2(x)$ とする.

これらの波動関数を, 以下の境界条件においてシュレーディンガー方程式を解くことによって求める.

$$\begin{cases} \varphi_1(-a) = 0 \\ \varphi_1(-\epsilon) = \varphi_2(\epsilon) = 0 \\ \varphi_2(a) = 0 \end{cases} \quad (\epsilon \ll 1)$$

$\epsilon \rightarrow 0$ と基底状態であることも考慮すると式 (2) より

$$\varphi_1(x) = \pm A \sin \frac{\pi}{a} x \quad (-a < x < 0) \quad (33)$$

$$\varphi_2(x) = \pm A \sin \frac{\pi}{a} x \quad (0 < x < a) \quad (34)$$



定数 A は規格化条件より次のように求まる.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = \int_{-a}^0 |\varphi_1(x)|^2 dx + \int_0^a |\varphi_2(x)|^2 dx \quad (35)$$

$$= 1 \quad (36)$$

$$\Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{a}} \quad (37)$$

よって求める関数は以下になる.[†]

$$\begin{cases} \varphi_S(x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \left| \sin \frac{\pi}{a} x \right| \\ \varphi_A(x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{\pi}{a} x \end{cases} \quad (38)$$

(c) 状態 S と状態 A を一対一の確率で見出すような状態の波動関数は, それぞれの状態の波動関数に (規格化するために) $1/\sqrt{2}$ をかけて足したものである. つまり, $E_S = E_A = E_0$ とすると,

$$\psi(x, t) = 1/\sqrt{2} \psi_S(x, t) + 1/\sqrt{2} \psi_A(x, t) \quad (39)$$

$$= 1/\sqrt{2} e^{-iE_0 t/\hbar} (\varphi_S(x) + \varphi_A(x)) \quad (40)$$

となる. ここで $t = 0$ と前問の結果を代入すると, 求める波動関数が次のように得られる.

$$\begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi}{a} x & (0 \leq x \leq a) \\ 0 & (-a \leq x \leq 0) \end{cases} \quad (41)$$

この波動関数の概形を図示すると, Fig.5 のようになる.

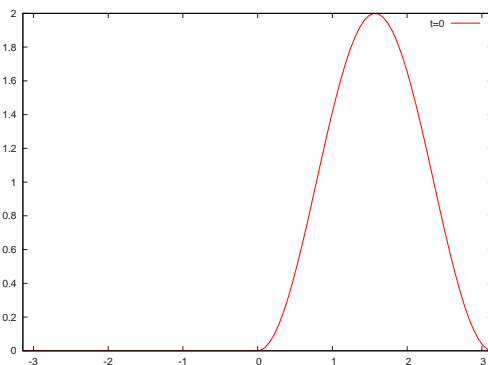


Fig.5 波動関数の図

(d) この重ね合わせ状態の確率密度は (c) で求めた波動関数の大きさを二乗すれば良いので, 次式のように表される.

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2} (|\varphi_S(x)|^2 + |\varphi_A(x)|^2) \quad (42)$$

よって, この確率密度は時間変化しない.[‡]

[†] \pm がつくんじゃないか, と思われる方がいると思いますが, 波動関数に大きさ 1 の項をかけることに意味はありません. たまに同じ問題の答えで波動関数に i が付いていたり付かなかったりしているのを見たことある人もあると思います. どちらでも良いのです.

[‡] 固有関数の確率密度は時間変化しません. $\varphi_S(x)$ と $\varphi_A(x)$ は同じ固有値 E_0 に属する固有関数なので, その線形結合である $\psi(x, t)$ も固有値 E_0 に属する固有関数です.

(e) $E_A - E_S = 2\pi\hbar/T$ であるから, 対称-反対称な波動関数は次のように表される.

$$\psi_S(x, t) = e^{-iE_S t/\hbar} \varphi_S(x) \quad (43)$$

$$\psi_A(x, t) = e^{-i(E_S/\hbar + 2\pi/T)t} \varphi_A(x) \quad (44)$$

よって, 問 (c) の重ね合わせ状態の波動関数は,

$$\psi(x, t) = e^{-iE_S/\hbar} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_S(x) + e^{-i2\pi t/T} \varphi_A(x)) \quad (45)$$

であるので確率密度は次式で表される.

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{a} \left(\sin^2 \frac{\pi}{a} x + \cos \frac{2\pi t}{T} \left| \sin \frac{\pi}{a} x \right| \sin \frac{\pi}{a} x \right) \quad (46)$$

時間変化を以下に示す. 時間 T 経つと確率密度はまた Fig.6 にもどるので, 周期 T で変化することが分かる.[†]

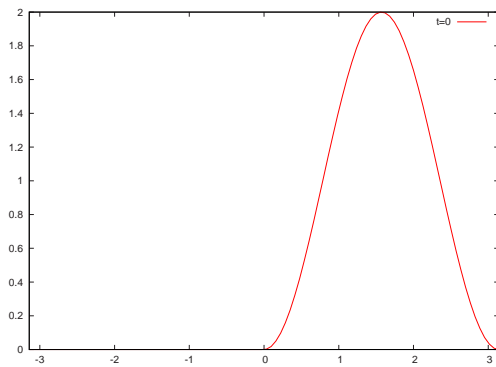


Fig.6 $t=0$

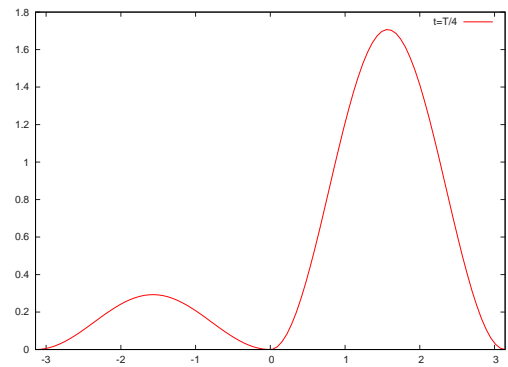


Fig.7 $t=T/4$

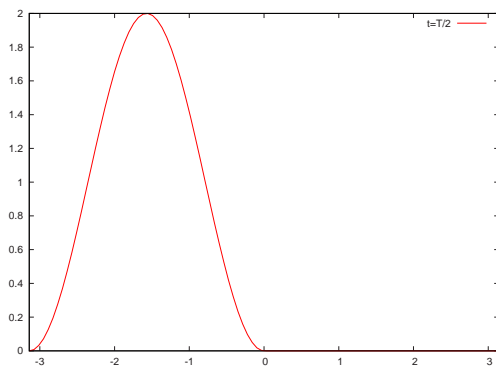


Fig.8 $t=T/2$

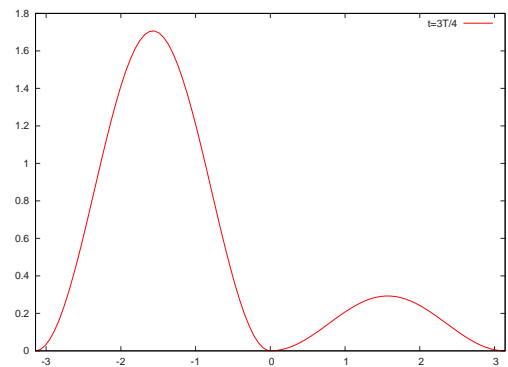


Fig.9 $t=3T/4$

[†] この答えを吟味してみましょう. 問 (c) のように状態 S と状態 A が縮退している場合, 時間発展しても確率密度は Fig.5 から動きません. これは粒子が常に井戸 2 に存在しているということです. しかし, 問 (e) のように非縮退の場合, 時間発展すると粒子は井戸 1 と井戸 2 を行ったり来たりするわけです. そしてその振動の角周波数は $\omega = (E_A - E_S)/\hbar$ となります. この角周波数はどこかで見たことはありませんか?