2023 年度夏学期「基礎方程式とその意味を考える」中間試験

教員名：浜口幸一

日時：2023 年 5 月 25 日 (木) 5 限

試験時間：17:15〜18:30（75 分）

問題用紙：このページを含めて 6 ページ.

解答用紙：両面 2 枚.

持ち込み可	ノート (紙媒体)、ノートを印刷したもの、講義ノートを印刷したもの.
持ち込み不可	教科書、参考書、タブレット・PC・スマホなどの電子機器.

- **試験開始時刻まで、この冊子の中は見ないでください。**

- 講義の目次に沿って問題を出していますが、全体として問題数が多いかもしれませんので、解きやすい問題から解いていって下さい。
- 講義中や講義ノートで示した式や定理は既知として構いません。
- 「. . . を求めよ」という問題は、答だけでなく（雑で良いので）途中式なども残すようにして下さい。

- 問題に出題ミスや誤植と思われる場所を見つけた場合は、適宜修正した上で解答するか、あるいは挙手でお知らせ下さい。（修正が必要だと判断した場合には黒板で他の学生にもお知らせします。）
- 出題ミスや誤植の修正以外では、試験問題の内容に関する質問には基本的に試験中はお答えできません。
- その他、トイレに行きたい場合など必要に応じて挙手でお知らせ下さい。

$\boxed{\mathbf{1}}$ 講義の § 1 では準備として複素数の復習や複素指数関数の導入などを行なった。

複素数についての以下の命題 (1)(2) について、真偽を答え、「真」の場合は命題を証明し、「偽」の場合には具体的な反例を一つ示せ。ただし複素数 $|z|$ は z の絶対値を表す。

(1) 任意の複素数 z_1, z_2 に対して、$|z_1 z_2| = |z_1||z_2|$ が成立する。

(2) 複素数 z_1, z_2 が $|z_1| = |z_2|$ を満たすとき、$z_1 = \pm z_2$ である。

2 講義の § 2 では座標表示のシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x,t). \tag{1}$$

を扱い、その中の § 2.4 では確率解釈を扱った。

2-1 波動関数 $\psi(x,t)$ が式 (1) を満たすとき、$\psi(x,t)$ の複素共役 $\psi^*(x,t)$ が満たすべき式を書け。ただしポテンシャル $V(x)$ の値は実数であるとする。

2-2 式 (1) を満たす波動関数 $\psi(x,t)$ に対して、確率密度 $\rho(x,t)$ と確率流密度 $j(x,t)$ を

$$\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 \tag{2}$$

$$j(x,t) = \frac{-i\hbar}{2m}\left(\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) - \psi(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)^*\right) \tag{3}$$

で定義する。このとき以下の式が成立することを示せ。

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) + \frac{\partial}{\partial x}j(x,t) = 0. \tag{4}$$

2-3 さて、講義ではポテンシャルの値が実数であると仮定していた。ここではシュレディンガー方程式に現れるポテンシャルに虚部があったらどうなるか、考えてみよう。簡単のため、ポテンシャルの虚部は定数であるとして、以下のようなシュレディンガー方程式を考える。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + i\epsilon\right)\psi(x,t). \tag{5}$$

ここで $V(x)$ は今までどおり実数値をとる関数であり、ϵ は x によらない実数の定数であるとする。このとき、講義で考えたように

$$P_{\text{全空間}} = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx \tag{6}$$

を定義すると、この時間微分

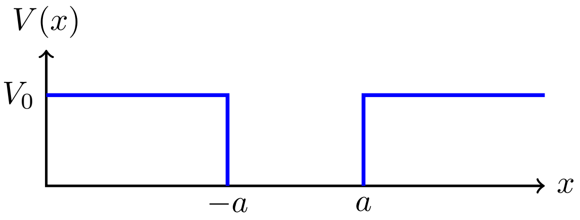
$$\frac{d}{dt}P_{\text{全空間}} \tag{7}$$

が一般にはゼロにならないことを示せ。($\psi(x,t) \xrightarrow{|x|\to\infty} 0$ は仮定して良い。)
また、$\epsilon > 0$ のときに $P_{\text{全空間}}$ が時間とともに増えるか減るかを答えよ。

3 講義の § 2.6 では時間によらないシュレディンガー方程式（定常状態／エネルギー固有状態）を扱い、§ 2.7 ではその一例として調和振動子ポテンシャルを扱った。ここでは別の典型的な例である「井戸型ポテンシャル」と呼ばれるポテンシャルを考え、そのシュレディンガー方程式の解法をいくつかのステップに分けて追ってみよう。

具体的には、以下のようなポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & (x < -a) \\ 0 & (-a \leq x \leq a) \\ V_0 & (x > a) \end{cases} \tag{8}$$



の下で、時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{9}$$

を解くことを考える。ただし、エネルギー E としては

$$0 < E < V_0 \tag{10}$$

の範囲を考えることにする。（このとき、古典論で考えると、粒子は 2 つの壁の間に閉じ込められて行ったり来たりするだけになる。）

3-1 まず、$-a \leq x \leq a$ の範囲ではポテンシャルは $V(x) = 0$ なので、シュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x) = E\varphi(x) \qquad (E > 0) \tag{11}$$

となる。この微分方程式の一般解は

$$\varphi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx) \quad (k > 0) \tag{12}$$

で与えられる。k を $E, m, \hbar$ を用いて表せ。

3-2 次に、$x < -a$ および $x > a$ の範囲ではシュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x) + V_0\varphi(x) = E\varphi(x) \qquad (0 < E < V_0) \tag{13}$$

となる。この微分方程式の一般解は

$$\varphi(x) = Ce^{\lambda x} + De^{-\lambda x} \quad (\lambda > 0) \tag{14}$$

で与えられる。λ を $E, V_0, m, \hbar$ を用いて表せ。

$\boxed{\textbf{3-3}}$ **3-1**, **3-2** の結果から、$\lambda^2 + k^2$ が E に依存しない定数になることを示せ。

$\boxed{\textbf{3-4}}$ （この 3-4 とその次の 3-5 はちょっと大変かも。時間が余ったら最後に戻ってくるのがオススメかもしれません。）

前問までの答を用いて、x の全領域での波動関数を求めてみよう。波動関数の境界条件として、以下の (i)〜(iv) の条件を課す。

(i) $\varphi(x) \xrightarrow{x\to-\infty} 0$。（したがって、$x < -a$ の解において $D = 0$。）

(ii) $\varphi(x) \xrightarrow{x\to+\infty} 0$。（したがって、$x > a$ の解において $C = 0$。）

(iii) $x = -a$ で $\varphi(x)$ とその微分 $\varphi'(x)$ が連続。つまり

$$\lim_{\epsilon>0,\epsilon\to0} \varphi(-a+\epsilon) = \lim_{\epsilon>0,\epsilon\to0} \varphi(-a-\epsilon) \tag{15}$$

$$\lim_{\epsilon>0,\epsilon\to0} \varphi'(-a+\epsilon) = \lim_{\epsilon>0,\epsilon\to0} \varphi'(-a-\epsilon) \tag{16}$$

(iv) 同様に、 $x = a$ でも $\varphi(x)$ とその微分 $\varphi'(x)$ が連続

$$\lim_{\epsilon>0,\epsilon\to0} \varphi(a+\epsilon) = \lim_{\epsilon>0,\epsilon\to0} \varphi(a-\epsilon) \tag{17}$$

$$\lim_{\epsilon>0,\epsilon\to0} \varphi'(a+\epsilon) = \lim_{\epsilon>0,\epsilon\to0} \varphi'(a-\epsilon) \tag{18}$$

(最初の 2 つの条件 (i)(ii) は波動関数が規格化できるための条件です。あとの 2 つ (iii)(iv) はシュレディンガー方程式を境界付近で積分することで得られるのですが、詳細は省きます。)

以上の (i)〜(iv) の条件を用いると、λ と k との間に関係式（**3-3** の答とは別の関係式）が得られる。関係式は

$$\lambda a = f(ka) \qquad (ka\text{ の関数}) \tag{19}$$

の形に書ける。右辺の形を求めよ。複数の可能性がある場合は全て書くこと。

$\boxed{\textbf{3-5}}$ **3-3**、**3-4** の結果を用いて、エネルギー E がとびとびの値（離散的な値）を取ることを説明せよ。

$\boxed{\mathbf{4}}$ 講義の § 3 ではブラケット表示でのシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{20}$$

を扱い、特に § 3.3 では 2 状態系（2 準位系）でのシュレディンガー方程式を解いた。そこでは、ハミルトニアンの固有状態

$$\begin{cases} |1\rangle : & \hat{H}|1\rangle = E_1|1\rangle\,, \\ |2\rangle : & \hat{H}|2\rangle = E_2|2\rangle\,, \end{cases} \quad E_1 \neq E_2. \tag{21}$$

およびその重ね合わせの状態

$$|\alpha\rangle = \cos\theta\,|1\rangle + \sin\theta\,|2\rangle \qquad (\theta \text{ は実数}) \tag{22}$$

を考え、初期状態

$$|\psi(t=0)\rangle = |\alpha\rangle \tag{23}$$

の下で、$P(\alpha\to\alpha;t) = |\langle\alpha|\psi(t)\rangle|^2$ を計算したのだった。（その際、規格化条件 $\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1$ と直交条件 $\langle 1|2\rangle = \langle 2|1\rangle = 0$ を用いた。 **((注) 講義ノートを講義後に修正しました。(168) 式のカッコの中の一つ目の式は $\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1$ です。)** ）

ここでは、$|\alpha\rangle$ とは異なる状態ベクトルを考えてみよう。

$\boxed{\mathbf{4\text{-}1}}$ 状態 $|\alpha\rangle$ の式に表れているのと同じパラメータ θ を用いて、別の状態

$$|\beta\rangle = -\sin\theta\,|1\rangle + \cos\theta\,|2\rangle \tag{24}$$

を考えてみる。この状態ベクトル $|\beta\rangle$ が規格化 $\langle\beta|\beta\rangle = 1$ を満たし、さらに状態 $|\alpha\rangle$ と直交すること（$\langle\alpha|\beta\rangle = 0$）を示せ。

$\boxed{\mathbf{4\text{-}2}}$ $|\psi(t)\rangle$ が初期条件 $|\psi(t=0)\rangle = |\alpha\rangle$ を満たすシュレディンガー方程式の解であるとき、時刻 t で観測を行って $|\beta\rangle$ が得られる確率 $P(\alpha\to\beta;t) = |\langle\beta|\psi(t)\rangle|^2$ を求めよ。

$\boxed{\mathbf{4\text{-}3}}$ 次に状態ベクトル

$$|\gamma\rangle = \cos\theta\,|1\rangle + e^{i\phi}\sin\theta\,|2\rangle \qquad (\phi \text{ は実数}) \tag{25}$$

を考える。この場合ついて、(i) 規格化（$\langle\gamma|\gamma\rangle$ はどうなるか？）、(ii) α との直交性（$\langle\gamma|\alpha\rangle$ はどうなるか？）、(iii) 時刻 t での観測確率（$P(\alpha\to\gamma;t) = |\langle\gamma|\psi(t)\rangle|^2$ はどうなるか？）について調べて説明せよ。

問題は以上です。