量子力学Ⅰ中間試験　平成 22 年 5 月 21 日　　　　　　　　　　　　主専攻　学籍番号　　　　　　　　　　　氏名

問題Ⅰ　長さ a の 1 次元空間に完全に閉じ込められた質量 m の粒子の運動について考える。プランク定数を 2π で割った数を $\hbar \sim 1\times10^{-34}$[J･s]とする。

(1)　この運動に対するシュレディンガー方程式を具体的に記せ。

(2)　固有関数及びエネルギー固有値を求めよ（何故そのようにするのかの説明や導出過程を全く示さない場合は大幅減点）。

(3)　ポテンシャルの位置変化の様子を示した図を描き、粒子のエネルギーが極めて大きいときに対する粒子の存在確率の位置変化の概略を書き加えよ。その図をもとに、エネルギーが大きくなると古典力学における描像に近づいていくことを説明せよ。

問題Ⅱ　バネ定数 k のバネと質量 m の粒子からなる一次元振動系を考える。ここで、$\omega=\sqrt{k/m}$ 、ε を系のエネルギーとする。

(1)　$\xi=\sqrt{m\omega/\hbar}x$、$\lambda=2\varepsilon/(\hbar\omega)$ の変数変換によりシュレディンガー方程式は $\left(-\dfrac{d^2}{d\xi^2}+\xi^2\right)u(\xi)=\lambda u(\xi)$ の微分方程式となることを示せ。

(2)　ξ は無次元量であることを示せ。

(3)　(1) の微分方程式の解として $u_n(\xi)=C_n H_n(\xi)e^{-\xi^2/2}$ (n は零以上の整数) の形を考える。このとき、λ と n の間に成り立たなければいけない関係を答えよ。ここで $H_n(\xi)$ はエルミート多項式であり、微分方程式 $H_n''(\xi)=2\xi H_n'(\xi)-2nH_n(\xi)$ や漸化式 $H_{n+1}(\xi)=2\xi H_n(\xi)-2nH_{n-1}(\xi)$ を満たす。

(4)　$u_1(\xi)$ の概形を図示し、そのときのエネルギー固有値を答えよ。さらに、その図から古典力学からは予測できない事象について述べよ。 ヒント：$H_0(\xi)=1$

(5)　$u_n(\xi)$ の運動状態にあるときの ξ^2 に対する期待値 $<\xi^2>$ を求めよ。ヒント：規格直交化された $u_n(\xi)$ では $au_n(\xi)=\sqrt{n}u_{n-1}(\xi)$、$a^*u_n(\xi)=\sqrt{(n+1)}u_{n+1}(\xi)$ となる。ここで、a 及び a^* はそれぞれ $a=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\frac{d}{d\xi}\right)$ 及び $a^*=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi-\frac{d}{d\xi}\right)$ で表される演算子である。

問題Ⅲ.

①	②	③	④	⑤
⑥	⑦	⑧	⑨	⑩
⑪	⑫	⑬	⑭	⑮
⑯	⑰	⑱	⑲	⑳

問題Ⅲ．下記の文章における空欄に対して適切な語句や式を答えよ。

原子に属する電子は運動はしているが長時間的に渡ってその形態に変化が見られず、また原子核付近に主に存在して無限遠方では存在しない。運動が長時間に渡って安定的に存続するとき、運動は［　①　］にあると言う。また、運動する空間がある領域に限られている場合、運動は［　②　］にあると言う。原子では属する電子の運動の状態変化を反映して、ある特有の周波数を持つ電磁波においてのみ強い吸収・放出が観測される。このことから、原子の電子運動状態にはいくつかの異なった［　①　］が存在し、異なる［　①　］の間に対するエネルギー差$\Delta\varepsilon$は吸収・放出される電磁波の周波数νとプランク定数hを用いて［　③　］の関係式で表されるとボーアは考えた。この考えは、［　①　］かつ［　②　］にある場合に粒子のエネルギーは［　④　］ことを意味する。量子力学によると原子に属する電子の運動状態及びエネルギーは整数を用いて記述でき、この整数を特に［　⑤　］と呼んでいる。

粒子と考えられていた電子を加速してビーム状にした電子線を結晶に照射することでも電磁波であるX線の場合と同様に回折現象が観測される。この説明のために、ド・ブロイは運動量pを持つ粒子に対して関係式［　⑥　］で表される波長λを持つド・ブロイ波（物質波）を対応させた。一方、ポテンシャル$V(\vec{r})$のもとでの質量mの粒子に対する非相対論的な運動の様子を記述する新しい方程式として、シュレディンガーは時間を含むシュレディンガー方程式$\mathcal{H}\psi(\vec{r},t)=i\dfrac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)$を提唱した。ここで、エネルギー$\varepsilon$にて［　①　］で運動している場合では、時間を含まないシュレディンガー方程式$\mathcal{H}\varphi(\vec{r})=$［　⑦　］の解$\varphi(\vec{r})$及び$\varepsilon$を用いて、$\psi(\vec{r},t)=$［　⑧　］と表すことができる。$\mathcal{H}$は［　⑨　］と呼ばれており、古典解析力学における［　⑨　］において運動量$\vec{p}$を［　⑩　］と書き換えることで得ることが出来る。シュレディンガー方程式の解は一般に［　⑪　］と呼ばれているが、$\mathcal{H}\varphi(\vec{r})=$［　⑦　］の解である$\varphi(\vec{r})$は特に固有関数と呼ばれている。$\psi(\vec{r},t)$や$\varphi(\vec{r})$自身は粒子の運動状態を直接的に表すものでなく、［　⑫　］が位置$\vec{r}$における粒子の存在確率を表すと一般的には解釈されている。

量子力学では最低のエネルギーにある運動状態を［　⑬　］、その次にエネルギーの低い状態を［　⑭　］と呼んでいる。ここで、$\psi(\vec{r},t)$（あるいは$\varphi(\vec{r})$）の形は異なるにもかかわらずエネルギーの値が等しくなるような場合、これらの運動状態は［　⑮　］していると呼ばれる。量子力学的には箱の中に閉じ込めた電子における［　⑬　］のエネルギーは古典力学と異なって零とはなりえず、有限の値となる。このときのエネルギーは特に［　⑯　］と呼ばれており、［　⑰　］場合ほど大きくなる。さらに量子力学からは、粒子の位置と運動量を［　⑱　］程度以上の精度で同時に測定できないと言う［　⑲　］が導き出される。日常的に我々が目にする現象では量子力学的な効果はほとんど見られないが、［　⑳　］場合にはその効果が顕著に現れてくる。