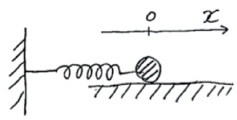
基礎物理化学 A レポート問題

量子力学の仮設を使って、実際に計算をしてみる。

質量 μ の粒子がバネで壁に繋がれており、x 方向に振動している。



バネ定数を k とし、バネの力がゼロになる位置を $x=0$ とすると、粒子が感じるポテンシャル・エネルギーは $V(x)=\frac{1}{2}kx^2$ である。よって、ハミルトニアンは、

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{T}+\hat{V}\\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}kx^2\end{aligned}$$

となる。以下の問に答えよ。

なお、次の公式を使って良い（$a>0$ とする）。

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}dx=\sqrt{\frac{\pi}{a}} \qquad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2}dx=\frac{1}{2a}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

問 A　$\alpha=\pm\frac{\sqrt{k\mu}}{2\hbar}$ の時に、関数 $\psi_0(x)=A_0\exp(-\alpha x^2)$、$\psi_1(x)=A_1 x\exp(-\alpha x^2)$ がハミルトニアン $\hat{H}$ の固有関数になることを示せ。また、各々に対するエネルギー固有値 E_0、E_1 を求めよ。

（$\hat{H}\psi(x)$ を計算して、定数 $\times\psi(x)$ となることを示せばよい。その「定数」がエネルギー固有値。）

問 B　$\alpha=-\frac{\sqrt{k\mu}}{2\hbar}$ とすることは物理的な理由により許されない。その物理的理由とは何か？

（以下の問では、$\alpha=\frac{\sqrt{k\mu}}{2\hbar}$ とする。）

問 C　波動関数 $\psi_0(x)$ を規格化せよ。

（「規格化」とは、$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0^*\psi_0 dx=1$ を満たすように A_0 を定めることを言う。）

問 D　関数 $\psi_0(x)$ は、運動エネルギー演算子 $\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}$、ポテンシャル・エネルギー演算子 $\hat{V}=\frac{1}{2}kx^2$ の固有関数ではないことを示せ。

（運動エネルギーやポテンシャル・エネルギーを測定しても一定値は得られないことがわかる。）

問 E　粒子の運動エネルギーの期待値 $\langle\hat{T}\rangle$ を求めよ。（問 C の計算により、$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0^*\psi_0 dx=1$ となっていることに注意せよ。）

問 F　粒子のポテンシャル・エネルギーの期待値 $\langle\hat{V}\rangle$ を求めよ。また、問 E の答えを使って、$E=\langle\hat{T}\rangle+\langle\hat{V}\rangle$ が成り立っていることを示せ。