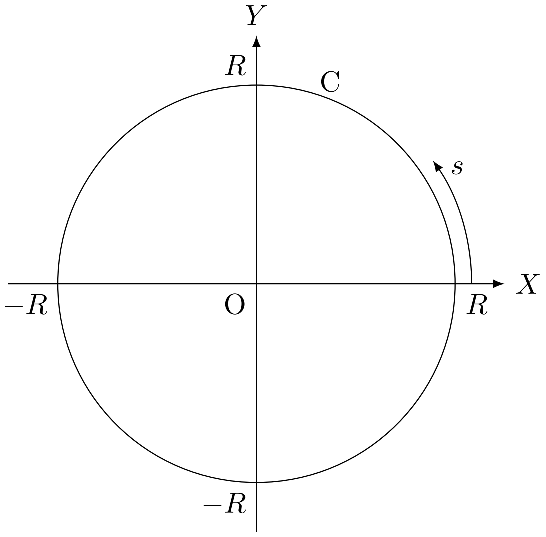
1 $X-Y$ 平面上の原点 O を中心とする半径 R の円 C 上を運動する質量 M の粒子について，量子力学的に考える．C に沿った座標 s を次のように定義する．

$$X = R\cos\frac{s}{R}\,,\quad Y = R\sin\frac{s}{R}\,.$$



粒子の波動関数 $\psi(s)$ は周期境界条件 $\psi(s+2\pi R) = \psi(s)$ を満足するものとする．プランク定数の $\dfrac{1}{2\pi}$ 倍を $\hbar$ として，以下の問いに答えよ．(5) と (8) については導出過程を示せ．それ以外については答のみでよい．

[A] 粒子に力が加わらず，ポテンシャルが 0 である場合について考える．

(1) C に沿った運動量 $p = -i\hbar\dfrac{d}{ds}$ の固有状態の波動関数 $\psi_n(s)$（n は整数），およびその固有値 p_n を求めよ．ただし，$\cdots < p_{-2} < p_{-1} < p_0 = 0 < p_1 < p_2 < \cdots$ となるように番号をつける．波動関数は規格化すること．

(2) $\psi_n(s)$ はハミルトニアン $H = \dfrac{p^2}{2M}$ の固有状態である．そのエネルギー固有値 E_n を求めよ．

(3) 行列要素 $\langle m|X|n\rangle$ を求めよ．ただし，波動関数 $\psi_n(s)$ に対応する状態のブラベクトル，ケットベクトルをそれぞれ $\langle n|$，$|n\rangle$ とする．

[B]　粒子に対して X 軸正の向きに一定の大きさ F の外力を加えた．これにより，ポテンシャル $V=-FX$ が生じた．F が小さい摂動として扱えるものとする．

(4)　ハミルトニアン $H'=H+V$ の基底状態のエネルギー固有値 E_0' を $F=0$ のまわりの展開として次のように書く．

$$E_0' = E_0 + \alpha_1 F + \alpha_2 F^2 + \cdots$$

係数 α_1 と α_2 を M，R，$\hbar$ のうち必要なものを用いて表せ．

(5)　ハミルトニアン H' の基底状態にある粒子が，外力を瞬間的に取り除いたあと $|0\rangle$ 以外の状態にある確率は

$$P = \beta F^2 + \cdots$$

である．ただし，$\cdots$ は F についての高次の項を表す．係数 β を M，R，$\hbar$ のうち必要なものを用いて表せ．

[C]　粒子に対して X 軸正の向きに一定の大きさ F の外力を加えた．これにより，ポテンシャル $V=-FX$ が生じた．今度は F が大きい場合を考える．必要であれば，積分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-as^2}\, ds = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (a>0)$$

を用いてよい．

(6)　古典的には，エネルギーが小さいとき，粒子は $s=0$ の近傍で周期的運動を行う．$|s| \ll R$ を仮定し，ポテンシャルを s の関数として表せ．s について 3 次以上の項は無視する近似を行うこと．

(7)　(6) で求めたポテンシャルを用い，ハミルトニアン $H'=H+V$ の基底状態のエネルギー固有値 E_0' を F，M，R，$\hbar$ のうち必要なものを用いて表せ．

(8)　ハミルトニアン H' の基底状態にある粒子が，外力を瞬間的に取り除いたあと状態 $|0\rangle$ にある確率 P' を F，M，R，$\hbar$ のうち必要なものを用いて表せ．引き続き (6) で求めたポテンシャルを用いる近似を行ってよい．

【メモ】

2022 年東工大院試（午後）第 1 問より．間違いがあれば教えてください．

【解答】

[A] (1) 固有値を p_n，固有関数を $\psi_n(s)$ とする．固有値方程式は，

$$-i\hbar\frac{d}{ds}\psi_n(s)=p_n\psi_n(s)\,.$$

ここで，$\psi_n(s)=Ce^{ias}$ と仮定して，

$$-i\hbar\frac{d}{ds}\psi_n(s)=-i\hbar\frac{d}{ds}\left(Ce^{ias}\right)=-i\hbar\cdot ia\psi_n(s)\,,\qquad \therefore a=i\frac{p_n}{\hbar}\,.$$

ここで，周期境界条件 $\psi(s+2\pi R)=\psi(s)$ より，n を整数として，

$$Ce^{i\frac{p_n}{\hbar}(s+2\pi R)}=Ce^{i\frac{p_n}{\hbar}s}\,,\qquad \therefore p_n=\frac{\hbar}{R}n\,.$$

また，規格化条件より，

$$\int_{-\pi R}^{+\pi R}ds\,\left|Ce^{i\frac{n}{R}s}\right|^2=1\,,\qquad \therefore C=\frac{1}{\sqrt{2\pi R}}\,,\ \ \therefore \psi_n(s)=\frac{1}{\sqrt{2\pi R}}e^{i\frac{n}{R}s}\,.$$

(2) 波動関数にハミルトニアンを作用させて，

$$\frac{1}{2M}\left(-i\hbar\frac{d}{ds}\right)^2\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi R}}e^{i\frac{n}{R}s}\right)=\frac{\hbar^2}{2MR^2}n^2\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi R}}e^{i\frac{n}{R}s}\,,\qquad \therefore E_n=\frac{\hbar^2}{2MR^2}n^2\,.$$

(3) $X=R\cos\left(\dfrac{s}{R}\right)=\dfrac{R}{2}\left(e^{i\frac{s}{R}}+e^{-i\frac{s}{R}}\right)$ より[*1]，

$$\begin{aligned}\langle m|X|n\rangle&=\int_{-\pi R}^{+\pi R}ds\,\psi_m^*(s)X\psi_n(s)\\&=\frac{1}{4\pi}\int_{-\pi R}^{+\pi R}ds\,\left(e^{i\frac{s}{R}(n-m+1)}+e^{i\frac{s}{R}(n-m-1)}\right)\\&=\frac{R}{2}(\delta_{n-m,-1}+\delta_{n-m,1})\,.\end{aligned}$$

[*1] $\ell\neq 0$（ℓ は整数）では，

$$\int_{-\pi R}^{+\pi R}ds\,e^{i\frac{\ell}{R}s}=\left[\frac{-i}{\ell}e^{i\frac{\ell}{R}s}\right]_{-\pi R}^{+\pi R}=\sin(\pi\ell)=0\,.$$

[B] (4) 固有値方程式の摂動を加えた解は,

$$|n\rangle = |n\rangle^{(0)} + F|n\rangle^{(1)} + F^2|n\rangle^{(2)} + \cdots .$$

このとき，摂動を加えた固有値方程式を F の次数ごとに整理して[*2],

$$\begin{aligned}
&(H - FX)\left(|n\rangle^{(0)} + F|n\rangle^{(1)} + F^2|n\rangle^{(2)} + \cdots\right) \\
&\quad = (E_n + \alpha_{n,1}F + \alpha_{n,2}F^2 + \cdots)\left(|n\rangle^{(0)} + F|n\rangle^{(1)} + F^2|n\rangle^{(2)} + \cdots\right) \\
&\left(H|n\rangle^{(1)} - X|n\rangle^{(0)}\right)F + \left(H|n\rangle^{(2)} - X|n\rangle^{(1)}\right)F^2 \\
&\quad = \left(E_n|n\rangle^{(1)} + \alpha_{n,1}|n\rangle^{(0)}\right)F + \left(E_0|n\rangle^{(2)} + \alpha_{n,1}|n\rangle^{(1)} + \alpha_2|n\rangle^{(0)}\right)F^2 ,
\end{aligned}$$

$$\therefore \begin{cases} F^1\colon H|n\rangle^{(1)} - X|n\rangle^{(0)} = E_n|n\rangle^{(1)} + \alpha_{n,1}|n\rangle^{(0)} , \\ F^2\colon H|n\rangle^{(2)} - X|n\rangle^{(1)} = E_0|n\rangle^{(2)} + \alpha_{n,1}|n\rangle^{(1)} + \alpha_{n,2}|n\rangle^{(0)} . \end{cases} \tag{1}$$

ここで，$n = 0$ の場合を考え，(1) 式の F の 1 次の式に左から $\langle 0|^{(0)}$ をかけて,

$$\underbrace{\langle 0|^{(0)} H}_{=E_0\langle 0|^{(0)}} |0\rangle^{(1)} - \underbrace{\langle 0|^{(0)} X |0\rangle^{(0)}}_{=\frac{R}{2}(\delta_{0,-1}+\delta_{0,1})} = E_0 \langle 0|^{(0)}|0\rangle^{(1)} + \alpha_1 \underbrace{\langle 0|^{(0)}|0\rangle^{(0)}}_{=1}, \qquad \therefore \alpha_1 = \underset{\sim}{0}.$$

続いて，$n = 0$ の場合を考え，(1) 式の F の 2 次の式に左から $\langle 0|^{(0)}$ をかけて,

$$\underbrace{\langle 0|^{(0)} H}_{=E_0\langle 0|^{(0)}} |0\rangle^{(2)} - \langle 0|^{(0)} X |0\rangle^{(1)} = E_0 \langle 0|^{(0)}|0\rangle^{(2)} + \alpha_2 \underbrace{\langle 0|^{(0)}|0\rangle^{(0)}}_{=1},$$

$$\therefore \alpha_2 = -\langle 0|^{(0)} X |0\rangle^{(1)} .$$

ここで，$\left\{|n\rangle^{(0)}\right\}$ は CONS をなすため[*3]，$|0\rangle^{(1)}$ を $|n\rangle^{(0)}$ で展開して[*4],

$$|0\rangle^{(1)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |n\rangle^{(0)} \langle n|^{(0)}|0\rangle^{(1)} = \sum_n \langle n|^{(0)}|0\rangle^{(1)} |n\rangle^{(0)}$$

と表すことができるので,

$$\begin{aligned}
\langle 0|^{(0)} X |0\rangle^{(1)} &= \sum_n \langle n|^{(0)}|0\rangle^{(1)} \langle 0|^{(0)} X |n\rangle^{(0)} = \sum_n \langle n|^{(0)}|0\rangle^{(1)} \frac{R}{2}(\delta_{n,1} + \delta_{n,-1}) \\
&= \frac{R}{2}\left(\langle 1|^{(0)}|0\rangle^{(1)} + \langle -1|^{(0)}|0\rangle^{(1)}\right) ,
\end{aligned}$$

[*2] $\alpha_{n,i}\,(i = 1, 2, \cdots)$ は，以下のように定めた.

$$E_n = E_n + \alpha_{n,1}F + \alpha_{n,1}F + \alpha_{n,2}F^2 + \cdots .$$

なお，$\alpha_{0,1} = \alpha_1$，$\alpha_{0,2} = \alpha_2$ である.

[*3] $\langle n|^{(0)}|m\rangle^{(0)} = \dfrac{1}{2\pi R}\displaystyle\int_{-\pi R}^{+\pi R} ds\, e^{i\frac{s}{R}(n-m)} = \delta_{n,m} .$

[*4] 以降の n に関する和について，$-\infty$ から ∞ までの和は $\sum_n$ と省略する.

と求まり，各項は (1) 式の F の 1 次の式において，$n=\pm 1$ として左から $\langle 0|^{(0)}$ をかけて，

$$\underbrace{\langle 0|^{(0)} H}_{=E_0\langle 0|^{(0)}} |\pm 1\rangle^{(1)} - \underbrace{\langle 0|^{(0)} X |\pm 1\rangle^{(0)}}_{=\frac{R}{2}(\delta_{\pm 1,-1}+\delta_{\pm 1,1})} = E_1 \langle 0|^{(0)} |\pm 1\rangle^{(1)}$$

$$\therefore \langle 1|^{(0)} |0\rangle^{(1)} = \frac{1}{E_0 - E_1}\frac{R}{2} = \frac{1}{0-\hbar^2/2MR^2}\frac{R}{2} = -\frac{MR^3}{\hbar^2}\,,$$

$$\therefore \langle -1|^{(0)} |0\rangle^{(1)} = \frac{1}{E_0 - E_{-1}}\frac{R}{2} = \frac{1}{0-\hbar^2/2MR^2}\frac{R}{2} = -\frac{MR^3}{\hbar^2}\,.$$

よって[*5]，

$$\alpha_2 = -\frac{R}{2}\left(\langle 1|^{(0)} |0\rangle^{(1)} + \langle -1|^{(0)} |0\rangle^{(1)}\right) = \frac{MR^4}{\hbar^2}\,.$$

(5)　状態 $|0\rangle$ から状態 $|n\rangle^{(0)}$ $(n\neq 0)$ への遷移確率の総和を求めればよいので，

$$\begin{aligned}
P &= \sum_{n\neq 0}\left|\langle n|^{(0)} |0\rangle\right|^2 \\
&= \sum_{n\neq 0}\left|\langle n|^{(0)} \left(|0\rangle^{(0)} + F|0\rangle^{(1)} + O(F^2)\right)\right|^2 \\
&= \sum_{n\neq 0}\left|\langle n|^{(0)} |0\rangle^{(0)} + F\langle n|^{(0)} |0\rangle^{(1)} + O(F^2)\right|^2 \\
&= F^2\sum_{n\neq 0}\left|\langle n|^{(0)} |0\rangle^{(1)}\right|^2 + O(F^4)\,.
\end{aligned}$$

ここで，(1) 式の F の 1 次の式において，$n=0$ として左から $\langle n|^{(0)}$ をかけて，

$$\underbrace{\langle n|^{(0)} H}_{=E_n\langle n|^{(0)}} |0\rangle^{(1)} - \underbrace{\langle n|^{(0)} X |0\rangle^{(0)}}_{=\frac{R}{2}(\delta_{-n,-1}+\delta_{-n,1})} = E_0 \langle n|^{(0)} |0\rangle^{(1)}$$

$$\therefore \langle n|^{(0)} |0\rangle^{(1)} = \frac{\delta_{-n,-1}+\delta_{-n,1}}{E_n - E_0}\frac{R}{2} = (\delta_{-n,-1}+\delta_{-n,1})\frac{MR^3}{\hbar^2}n^2\,,$$

より，

$$\begin{aligned}
P &= F^2\sum_{n\neq 0}\left|(\delta_{-n,-1}+\delta_{-n,1})\frac{MR^3}{\hbar^2}n^2\right|^2 + O(F^4) \\
&= 2\left(\frac{MR^3}{\hbar^2}\right)^2 F^2 + O(F^4)\,, \qquad \therefore \beta = 2\left(\frac{MR^3}{\hbar^2}\right)^2.
\end{aligned}$$

[*5] $\langle 0|^{(1)} |\pm 1\rangle^{(0)} = \left(\langle \pm 1|^{(0)} |0\rangle^{(1)}\right)^* = -\dfrac{MR^3}{\hbar^2}\,.$

[C] (6) $x = R\cos\left(\dfrac{s}{R}\right)$，$|s| \ll R$ より，

$$V = -FR\cos\left(\frac{s}{R}\right) = -FR\left\{1 - \frac{1}{2}\left(\frac{s}{R}\right)^2 + O(s^4)\right\} \simeq -FR + \frac{F}{2R}s^2 .$$

(7) 系のハミルトニアンは，

$$H' = \frac{p^2}{2M} + \frac{F}{2R}s^2 - FR .$$

すなわち，この系は，角振動数 $\omega = \sqrt{\dfrac{F}{MR}}$ の調和振動子の零点エネルギーを $-FR$ だけシフトしたものと見なせる．よって，

$$E_0' = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{F}{MR}} - FR .$$

(8) F が作用している状態における基底状態を $|0\rangle'$，それに対応する波動関数を $\psi_0'(s)$ とする．このとき，状態 $|0\rangle$ から状態 $|n\rangle^{(0)}$ $(n \neq 0)$ への遷移確率を求めればよいので，

$$P = \left|\langle 0|^{(0)}\,|0\rangle'\right|^2 = \left|\int_{-\pi R}^{+\pi R} ds\,\psi_0^*(s)\psi_0'(s)\right|^2 \simeq \left|\int_{-\infty}^{+\infty} ds\,\psi_0^*(s)\psi_0'(s)\right|^2 .$$

ここで，$|s| \ll R$ の範囲に局在していることから積分区間を $(-\infty, +\infty)$ とした．

さて，F を取り除いた後の波動関数は [A](1) より，

$$\psi_0(s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi R}}e^{i\frac{0}{R}s} = \frac{1}{\sqrt{2\pi R}} .$$

また，F が作用している間の波動関数は，Schrödinger 方程式より，$\psi_0'(s) = Ce^{-as^2}$ と仮定して[*6][*7]，

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{ds^2} + \frac{F}{2R}s^2 - FR\right)\psi_0' s = E_0'\psi_0' s$$

$$\left\{\left(-\frac{\hbar^2 a^2}{M} + \frac{F}{2R}\right)s^2 + \frac{\hbar^2 a}{M} - \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{F}{MR}}\right\}Ce^{-as^2} = 0 , \qquad \therefore a = \frac{1}{2\hbar}\sqrt{\frac{MF}{R}} .$$

規格化条件より，

$$\int_{-\pi R}^{+\pi R} ds\,\left|Ce^{-as^2}\right|^2 \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} ds\,\left|Ce^{-as^2}\right|^2 = 1 ,$$

$$\therefore |C|^2 = \sqrt{\frac{2a}{\pi}}\left(= \sqrt{\frac{1}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{MF}{R}}}\right) , \quad \therefore \psi_0'(s) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-as^2} .$$

[*6] 本来は，エネルギー固有値は固有値方程式を解くことで求まるが，今は，アナロジーから求めたエネルギー固有値を密輸入して逆算的に波動関数のパラメータを決定している．基底状態での波動関数の関数形は常識とする．

[*7] 任意の s で成立するように a を決定．

以上より，

$$P = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} ds\, \psi_0^*(s) \psi_0'(s) \right|^2 = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} ds\, \frac{1}{\sqrt{2\pi R}} \left(\frac{2a}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-as^2} \right|^2 = \underset{\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim\sim}{\left(\frac{\hbar^2}{4\pi R^3 MF} \right)^{\frac{1}{4}}}.$$