量子力学 I 中間レポート

提出期限 : 2024 年 6 月 9 日 / 提出先 : 理学研究科 Y 棟 B230 レポートボックス or jinno@phys.sci.kobe-u.ac.jp

学籍番号 ＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿ 氏名 ＿＿＿＿＿＿＿＿＿＿

以下の問いに答えよ。計算過程を適宜記述すること。100 点以上を得た場合、得点は 100 点に調整される。

本講義では、まず量子論の発見に至るまでの過程を説明した。粒子のエネルギー E および運動量 p が波の角振動数 ω および波数 k と

$$\text{粒子に関連する量}\quad \left\{\begin{array}{c} E = \hbar\omega \\ \\ p = \hbar k \end{array}\right\}\quad \text{波に関連する量}$$

によって関連付いているという示唆、および粒子のエネルギーと運動量についての関係式 $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ から、$e^{i(kx-\omega t)}$ に成り立つ方程式の一般化として時間に依存する Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t,x) = H\Psi(t,x), \qquad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x),$$

を推測した。ここで $\hbar$ は換算 Planck 定数 $\hbar := \frac{h}{2\pi}$ であり、Planck 定数は $h \simeq 6.63\times10^{-34}\,\mathrm{kg\,m^2/s}$ である。これについて以下の問いに答えよ。

[問 1] (配点 : 5 + 5 + 5)

(1) $\lambda = \frac{h}{p}$ を de Broglie 波長と言う。速度 $v = 1.00\times10^6$ m/s で動いている金属中の電子の de Broglie 波長を有効数字 2 桁で求めよ。電子の質量は $m \simeq 9.11\times10^{-31}$ kg である。

(2) 宇宙空間は温度 $T \simeq 2.73$ K の分布を持つ光子で満たされていることが知られている[a](宇宙背景放射 = Cosmic Microwave Background)。温度 T の分布を持つ光子の単位周波数あたりのエネルギー密度 $U(\nu,T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\Big/(e^{\frac{h\nu}{k_BT}}-1)$ が $h\nu \simeq 2.82k_BT$ でピークを取ることを用いて、このピークに対応する周波数 ν、波長 λ、およびエネルギー E を有効数字 2 桁で求めよ。光速は $c \simeq 3.00\times10^8\,\mathrm{m\,s^{-1}}$、ボルツマン定数は $k_B \simeq 1.38\times10^{-23}\,\mathrm{J\,K^{-1}}$ である。

(3) 原子核の大きさ a は $a \simeq 1\,\mathrm{fm} = 10^{-15}\,\mathrm{m}$ 程度である。原子核の構造を光子を用いて調べるには、光子の波長が原子核の大きさ程度かそれ以下でないといけない。光子にどの程度のエネルギーが必要か、オーダー評価で求めよ。

[解 1]

(1)

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \simeq 7.3\times10^{-10}\,\mathrm{m}.$$

(2)

$$\nu = \frac{2.82k_BT}{h} \simeq 1.6\times10^{11}\,\mathrm{s^{-1}},$$
$$\lambda = \frac{c}{\nu} \simeq 1.9\times10^{-3}\,\mathrm{m},$$
$$E = h\nu \simeq 1.1\times10^{-22}\,\mathrm{J}\ (\simeq 6.6\times10^{-4}\,\mathrm{eV}).$$

(3)

$$E = pc = \frac{hc}{a} = 2.0 \times 10^{-10}\,\mathrm{J}\ (\simeq 1.2\,\mathrm{GeV}).$$

[a] Planck 衛星による宇宙背景放射の精密測定により、インフレーション理論の性質が絞り込まれている [1]。

[問 2] (配点 : 5 + 5 + 5 + 5)
時刻 $t = 0$ における波動関数が

$$\Psi(t=0,x) = A e^{\frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{x^2}{2a^2}},$$

で与えられているとする。ただし A, a は正の定数であり、p_0 は実数の定数である。

(1) 規格化条件 $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\Psi(t,x)|^2 = 1$ より、A を他の定数で表せ。

(2) この時刻における $\langle x \rangle, \langle x^2 \rangle, \sigma_x := \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}$ を求めよ。ただし、x の任意の関数 $f(x)$ の時刻 t における期待値は $\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Psi^*(t,x) f(x) \Psi(t,x)$ で与えられる。

(3) この時刻における $\langle p \rangle, \langle p^2 \rangle, \sigma_p := \sqrt{\langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle}$ を求めよ。ただし、p の任意の関数 $f(p)$ の時刻 t における期待値は $\langle f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Psi^*(t,x) f\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi(t,x)$ で与えられる。

(4) この時刻において不確定性関係 $\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$ が満たされていることを示せ。

[解 2]

(1)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\Psi(t=0,x)|^2 = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{x^2}{a^2}} = \sqrt{\pi} a A^2 = 1 \qquad \Longrightarrow \qquad A = \left(\frac{1}{\pi a^2}\right)^{\frac{1}{4}}.$$

(2)

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Psi^*(t=0,x)\, x\, \Psi(t=0,x) = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x e^{-\frac{x^2}{a^2}} = 0, \\
\langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Psi^*(t=0,x)\, x^2\, \Psi(t=0,x) = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}} = \frac{1}{\sqrt{\pi} a} \frac{\sqrt{\pi} a^3}{2} = \frac{a^2}{2}, \\
\sigma_x &= \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle} = \frac{a}{\sqrt{2}}.
\end{aligned}$$

(3)

$$\begin{aligned}
\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Psi^*(t=0,x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi(t=0,x) = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, (-i\hbar) \left(\frac{ip_0}{\hbar} - \frac{x}{a^2}\right) e^{-\frac{x^2}{a^2}} = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, p_0 e^{-\frac{x^2}{a^2}} = p_0, \\
\langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \Psi^*(t=0,x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \Psi(t=0,x) = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, (-i\hbar)^2 \left[-\frac{1}{a^2} + \left(\frac{ip_0}{\hbar} - \frac{x}{a^2}\right)^2\right] e^{-\frac{x^2}{a^2}} \\
&= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, (-i\hbar)^2 \left[-\frac{1}{a^2} - \frac{p_0^2}{\hbar^2} + \frac{x^2}{a^4}\right] e^{-\frac{x^2}{a^2}} = \frac{1}{\sqrt{\pi} a} (-\hbar^2) \left[\left(-\frac{1}{a^2} - \frac{p_0^2}{\hbar^2}\right) \sqrt{\pi} a + \frac{1}{a^4} \frac{\sqrt{\pi} a^3}{2}\right] = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{2a^2}, \\
\sigma_p &= \sqrt{\langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2} a}.
\end{aligned}$$

(4)

$$\sigma_x \sigma_p = \frac{a}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{\sqrt{2}a} = \frac{\hbar}{2} \geq \frac{\hbar}{2}.$$

本講義では次に、時間に依存しない Schrödinger 方程式を導入した。上記の時間に依存する Schrödinger 方程式の解は、変数分離型の解 $\Psi(t,x) = \psi(x)\varphi(t)$ の満たす方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\varphi(t) = E\varphi(t), \qquad H\psi(x) = E\psi(x),$$

の解 $\varphi(t) = \varphi_n(t) = e^{-iE_n t/\hbar}$ および $\psi(x) = \psi_n(x)$ の重ね合わせとして $\Psi(t,x) = \sum_n c_n \psi_n(x)\varphi_n(t)$ と書かれる。このうち $H\psi(x) = E\psi(x)$ を時間に依存しない Schrödinger 方程式と呼ぶ。これについて、以下の問いに答えよ。

[問 3]　(配点 : 5 + 5 + 3 + 4 + 3 + 10)

無限井戸型ポテンシャルを考える。解くべき方程式は以下である。

$$H\psi(x) = E\psi(x), \qquad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x), \qquad V(x) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x \leq a), \\ \infty & (x < 0 \ \text{ or } \ a < x). \end{cases}$$

(1)　n 番目 $(n = 1, 2, 3, \cdots)$ の波動関数 $\psi_n(x)$ およびエネルギー固有値 E_n を求めよ。$\psi_n(x)$ は実数の範囲で考えれば十分である。波動関数は $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi_n(x)|^2 = 1$ で規格化すること。

(2)　$\psi_n(x)$ $(n = 1, 2, 3)$ の概形を描け。

有限井戸型ポテンシャルを考える。ただし V_0 は正の定数とする。解くべき方程式は以下である。

$$H\psi(x) = E\psi(x), \qquad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x), \qquad V(x) = \begin{cases} -V_0 & (-a \leq x \leq a), \\ 0 & (x < -a \ \text{ or } \ a < x). \end{cases}$$

(3)　この系に現れるエネルギー固有状態は (a) 束縛状態のみ、(b) 散乱状態のみ、(c) 束縛状態および散乱状態、のいずれであるか。

(4)　$-V_0 < E < 0$ の場合について考える。解を

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} & (x < -a), \\ C\sin(lx) + D\cos(lx) & (-a < x < a), \\ Fe^{-\kappa x} + Ge^{\kappa x} & (a < x), \end{cases}$$

と置こう。ただし κ, l は正とする。それぞれの領域で $\psi(x)$ が Schrödinger 方程式の解であるという条件から、κ, l を V_0 および E で表せ。

(5)　本問のようにポテンシャルが偶関数 $V(-x) = V(x)$ である場合、$\psi(x)$ は偶関数 $\psi(-x) = \psi(x)$ または奇関数 $\psi(-x) = -\psi(x)$ の範囲で考えれば十分である。偶関数の $\psi(x)$ を考える場合、$\psi(x)$ が $x \to \pm\infty$ で発散しないという条件も合わせて考慮すると、A, B, C, D, F, G のうち 0 となるものはどれか。

(6)　引き続き偶関数の $\psi(x)$ を考える。波動関数の接続条件から κ と l の間に成り立つ関係式を求めよ。その結

果を元に、$a=\sqrt{\frac{8\hbar^2}{mV_0}}$ の場合に、偶関数の束縛状態の個数を答えよ。

[解 3]

(1) 波動関数および対応するエネルギー固有値は

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right),\qquad E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}.$$

(2) 略。

(3) (c) 束縛状態および散乱状態。

(4)

$$\kappa=\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar},\qquad l=\frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}.$$

(5) $A=C=G=0.$

(6) $x=a$ での $\psi(x)$ および $\frac{d}{dx}\psi(x)$ に関する境界条件は

$$D\cos(la)=Fe^{-\kappa a},\qquad -Dl\sin(la)=-F\kappa e^{-\kappa a},$$

となり、両辺の比を取ると

$$\kappa=l\tan(la),$$

が得られる。κ を消去すると

$$\sqrt{-l^2+\frac{2mV_0}{\hbar^2}}=l\tan(la),$$

であるから、これを満たす l の個数を求める。$a=\sqrt{\frac{8\hbar^2}{mV_0}}$ の場合

$$\sqrt{-(la)^2+16}=la\tan(la),$$

となるが、これを満たす $l>0$ の個数は 2 個であり、いずれの場合も対応する κ が存在する。よって偶関数の束縛状態は 2 個である。

本講義では次に、Schrödinger 方程式を複素 Hilbert 空間 (= 内積が定義され、極限も適切に存在する複素ベクトル空間) の元 $|\Psi(t)\rangle$ に対する方程式として一般化した。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle=\hat{H}|\Psi(t)\rangle.$$

$|\Psi(t)\rangle$ は「系の状態」と呼ばれる。この一般化により、例えば Hamiltonian を $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{x})$ とすれば以前の 1 次元空間中の粒子に対する Schrödinger 方程式が得られ、また別の Hamiltonian を考えれば別の系も記述可能であるため、理論の適用範囲が広がった。これについて以下の問いに答えよ。

[問 4]　(配点 : 5 + 5 + 10)

2 準位系と呼ばれる、系の状態 $|\Psi(t)\rangle$ が 2 成分ベクトルを取る系を考える。2 つの正規直交基底を

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

とし、Hamiltonian は

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon \\ \epsilon & 0 \end{pmatrix},$$

で与えられるとする。ここで ϵ は正の実数である。時刻 $t = 0$ において系の初期状態は $|\Psi(t=0)\rangle = |1\rangle$ である。この系が Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle,$$

に従って発展するとき、任意の時刻 t における状態 $|\Psi(t)\rangle$ を求めたい。

(1)　$|\Psi(t)\rangle$ を $\hat{H}$ の固有状態の重ね合わせで表そう。$\hat{H}$ の固有状態を求める式、すなわち時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$\hat{H} |s\rangle = E |s\rangle,$$

を解くことで、2 つの固有値 E_+, E_- および正規化されたエネルギー固有状態 $|s_+\rangle, |s_-\rangle$ を求めよ。

(2)　Schrödinger 方程式に左から $\langle s_\pm|$ を掛けることで、$|s_\pm\rangle$ 表示の波動関数 $\langle s_\pm|\Psi(t)\rangle$ に対する Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle s_\pm|\Psi(t)\rangle = E_\pm \langle s_\pm|\Psi(t)\rangle,$$

が得られる。この微分方程式を解くことで、$\langle s_\pm|\Psi(t)\rangle$ を初期値 $\langle s_\pm|\Psi(t=0)\rangle$ を用いて表せ。

(3)　任意の時刻 t における状態 $|\Psi(t)\rangle$ を ϵ を用いて表せ。

[解 4]

(1)　$\hat{H}$ の固有値は

$$\det \begin{pmatrix} -E & \epsilon \\ \epsilon & -E \end{pmatrix} = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad E = E_\pm := \pm\epsilon,$$

であり、対応するエネルギー固有状態は

$$|s\rangle = |s_\pm\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle \pm |2\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix},$$

である。

(2)　Schrödinger 方程式に左から $\langle s_\pm|$ を掛け、$\langle s_\pm|\hat{H} = E_\pm \langle s_\pm|$ を用いると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle s_\pm|\Psi(t)\rangle = E_\pm \langle s_\pm|\Psi(t)\rangle,$$

を得る。これを解くと

$$\langle s_\pm | \Psi(t) \rangle = \langle s_\pm | \Psi(t=0) \rangle \, e^{-iE_\pm t/\hbar},$$

となる。

(3)　完全性関係 $|\Psi(t)\rangle = |s_+\rangle\langle s_+|\Psi(t)\rangle + |s_-\rangle\langle s_-|\Psi(t)\rangle$ および (2) の結果を用いて

$$\begin{aligned}
|\Psi(t)\rangle &\overset{\text{完全性関係}}{=} |s_+\rangle\langle s_+|\Psi(t)\rangle + |s_-\rangle\langle s_-|\Psi(t)\rangle \\
&\overset{\text{(4) の結果}}{=} |s_+\rangle\langle s_+|\Psi(t=0)\rangle e^{-iE_+ t/\hbar} + |s_-\rangle\langle s_-|\Psi(t=0)\rangle e^{-iE_- t/\hbar} \\
&\overset{\langle s_\pm|\Psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}}{=} \frac{1}{\sqrt{2}}|s_+\rangle e^{-iE_+ t/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{2}}|s_-\rangle e^{-iE_- t/\hbar} \\
&= \frac{1}{2}e^{-i\epsilon t/\hbar}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}e^{i\epsilon t/\hbar}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos(\epsilon t/\hbar) \\ -i\sin(\epsilon t/\hbar) \end{pmatrix},
\end{aligned}$$

となる。

本講義では次に、調和振動子の演算子法を取り扱った。これについて以下の問いに答えよ。

[問 5]　(配点 : 5 + 5 + 5)

調和振動子に対する時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}), \qquad V(\hat{x}) = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2,$$

を考える。消滅演算子 $\hat{a}$ および生成演算子 $\hat{a}^\dagger$ は

$$\hat{a} := \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(i\hat{p} + m\omega\hat{x}), \qquad \hat{a}^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-i\hat{p} + m\omega\hat{x}),$$

で定義される。

(1)　$\hat{x}$ と $\hat{p}$ の間に成り立つ正準交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ を用いて $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]$ を求め、また $\hat{H}$ を $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ を用いて表せ。交換子は $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ で定義される。

(2)　調和振動子の基底状態 (= エネルギー固有値が最低の状態) $|\psi_0\rangle$ は、

$$\hat{a}|\psi_0\rangle = 0,$$

で与えられる。これを $|x\rangle$ 表示することで $\psi_0(x) = \langle x|\psi_0\rangle$ に対する微分方程式を導き、

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2},$$

が得られることを示せ。ただし解は $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi_0(x)|^2 = 1$ により規格化し、規格化定数は正の実数とした。

(3)　$|\psi_0\rangle$ に生成演算子を作用させることで、第 1 励起状態 $|\psi_1\rangle$ および第 2 励起状態 $|\psi_2\rangle$ の $|x\rangle$ 表示の波動関数

$\psi_1(x), \psi_2(x)$ を求めよ。ただし解は $\int_{-\infty}^{\infty} dx\,|\psi_n(x)|^2 = 1$ により規格化すること。

[解 5]

(1)　$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]$ は正準交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ を用いて

$$
\begin{aligned}
[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \left[\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(i\hat{p} + m\omega\hat{x}), \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-i\hat{p} + m\omega\hat{x})\right] \\
&= \frac{1}{2\hbar m\omega}[i\hat{p} + m\omega\hat{x}, -i\hat{p} + m\omega\hat{x}] \\
&= \frac{1}{2\hbar m\omega}([i\hat{p}, -i\hat{p}] + [i\hat{p}, m\omega\hat{x}] + [m\omega\hat{x}, -i\hat{p}] + [m\omega\hat{x}, m\omega\hat{x}]) \\
&= 1,
\end{aligned}
$$

となる。また、Hamiltonian は

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \\
&= \frac{1}{2m}\left[i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\hat{a} - \hat{a}^\dagger\right)\right]^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\left[\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)\right]^2 \\
&= -\frac{\hbar\omega}{4}\left(\hat{a} - \hat{a}^\dagger\right)^2 + \frac{\hbar\omega}{4}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)^2 \\
&= -\frac{\hbar\omega}{4}\left(\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\right) + \frac{\hbar\omega}{4}\left(\hat{a}\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\right) \\
&= \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right) \\
&= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right),
\end{aligned}
$$

となる。

(2)　$|\psi_0\rangle$ の定義式より

$$
\begin{aligned}
\langle x|\hat{a}|\psi_0\rangle = 0 \quad &\Longrightarrow \quad \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\langle x|(i\hat{p} + m\omega\hat{x})|\psi_0\rangle = 0 \\
&\overset{\langle x|\hat{p}|\cdots\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\langle x|\cdots\rangle}{\Longrightarrow} \quad \left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\langle x|\psi_0\rangle = 0 \\
&\overset{\psi_0(x) := \langle x|\psi_0\rangle}{\Longrightarrow} \quad \left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\psi_0(x) = 0,
\end{aligned}
$$

となる。この微分方程式を解くと

$$
\begin{aligned}
\left(\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\psi_0(x) = 0 \quad &\Longrightarrow \quad \frac{d}{dx}\ln\psi_0(x) = -\frac{m\omega}{\hbar}x \\
&\Longrightarrow \quad \ln\psi_0(x) = -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 \\
&\Longrightarrow \quad \ln\psi_0(x) = -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \text{定数} \\
&\Longrightarrow \quad \psi_0(x) = a_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2},
\end{aligned}
$$

となる。ただし a_0 は正の実数に取る。規格化条件より

$$
\int_{-\infty}^{\infty} dx\,|\psi_0(x)|^2 = a_0^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} = a_0^2\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = 1 \qquad \Longrightarrow \qquad a_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}},
$$

であるから、

$$\psi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2},$$

となる。

(3)　第 1 励起状態は

$$|\psi_1\rangle=\frac{1}{\sqrt{1}}\hat{a}^\dagger|\psi_0\rangle,$$

より

$$\begin{aligned}\psi_1(x)=\langle x|\psi_1\rangle=\langle x|\hat{a}^\dagger|\psi_0\rangle&=\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\langle x|(-i\hat{p}+m\omega x)|\psi_0\rangle\\&=\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-\hbar\frac{d}{dx}+m\omega x\right)\psi_0(x)=\left(\frac{4m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\,e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2},\end{aligned}$$

となる。第 2 励起状態は

$$|\psi_2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^\dagger|\psi_1\rangle,$$

より

$$\begin{aligned}\psi_2(x)=\langle x|\psi_2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\langle x|\hat{a}^\dagger|\psi_1\rangle&=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\langle x|(-i\hat{p}+m\omega x)|\psi_1\rangle\\&=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-\hbar\frac{d}{dx}+m\omega x\right)\psi_1(x)=-\left(\frac{m\omega}{4\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\left(1-\frac{2m\omega}{\hbar}x^2\right)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2},\end{aligned}$$

となる。

以下は発展的内容である。

[問 6]　(配点 : 4 + 4 + 4 + 4 + 4 + 4)

調和振動子の議論を一般化することで、超対称量子力学 (supersymmetric quantum mechanics = SUSY QM) について学ぼう (文献 [2] 第 2 節)。演算子 $\hat{A},\hat{A}^\dagger$ を

$$\hat{A}=i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}}+W(\hat{x}),\qquad \hat{A}^\dagger=-i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}}+W(\hat{x}),$$

で定義し、2 種類の Hamiltonian を

$$\hat{H}_1:=\hat{A}^\dagger\hat{A}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V_1(\hat{x}),\qquad \hat{H}_2:=\hat{A}\hat{A}^\dagger=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V_2(\hat{x}),$$

で定義する。$W(\hat{x})$ は superpotential と呼ばれ、$(W(\hat{x}))^\dagger=W(\hat{x})$ を満たしているとする。

(1)　$V_1(\hat{x}),V_2(\hat{x})$ を $W(\hat{x})$ で表せ。任意の $f(\hat{x})$ に対し $[f(\hat{x}),\hat{p}]=i\hbar f'(\hat{x})$ であることに注意せよ (第 5 回演習)。

(2)　$\hat{H}_1|\psi_n^{(1)}\rangle=E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle$ のとき $\hat{H}_2\hat{A}|\psi_n^{(1)}\rangle=E_n^{(1)}\hat{A}|\psi_n^{(1)}\rangle$ であること、および $\hat{H}_2|\psi_n^{(2)}\rangle=E_n^{(2)}|\psi_n^{(2)}\rangle$ のとき $\hat{H}_1\hat{A}^\dagger|\psi_n^{(2)}\rangle=E_n^{(2)}\hat{A}^\dagger|\psi_n^{(2)}\rangle$ であることを示せ。

この結果は $\hat{H}_1$ に対する $|\psi_n^{(1)}\rangle$ と $\hat{H}_2$ に対する $\hat{A}|\psi_n^{(1)}\rangle$ が (0 ベクトルでない限り) 同じ固有値の固有状態として対

応し、$\hat{H}_2$ に対する $|\psi_n^{(2)}\rangle$ と $\hat{H}_1$ に対する $\hat{A}^\dagger|\psi_n^{(2)}\rangle$ も同様に (0 ベクトルでない限り) 対応することを示している。つまり Hamiltonian $\hat{H}_1, \hat{H}_2$ は、異なるポテンシャルを持つにも関わらず同じエネルギー固有値を持つ。ただし、$\hat{A}|\psi_n^{(1)}\rangle$ や $\hat{A}^\dagger|\psi_n^{(2)}\rangle$ が 0 ベクトルとなってしまう場合は固有ベクトルとして不適格なので、そのような場合は対応する状態がないこともある。

(3)　$\hat{H}_1$ の基底状態 (= エネルギー固有値が最低の状態) を $|\psi_0\rangle$ とする。仮に $\hat{A}|\psi_0'\rangle = 0$ を満たす 0 ベクトルでない状態 $|\psi_0'\rangle$ が存在するとしたら、この $|\psi_0'\rangle$ こそが基底状態 $|\psi_0\rangle$ である。なぜなら、任意の状態 $|\psi\rangle$ に対して $\langle\psi|\hat{H}_1|\psi\rangle = \left|\hat{A}|\psi\rangle\right|^2 \geq 0$ であるために $\hat{H}_1$ の固有値は全て 0 以上である一方、$\hat{H}_1|\psi_0'\rangle = \hat{A}^\dagger\hat{A}|\psi_0'\rangle = 0|\psi_0'\rangle$ より $|\psi_0'\rangle$ は $\hat{H}_1$ の固有値 $E_0^{(1)} = 0$ の状態であるからである。さて、基底状態が $\hat{A}|\psi_0\rangle = 0$ を満たすとして、この式を $|x\rangle$ 表示することで、$W(x)$ を $\psi_0(x)$ を用いて表せ。

(4)　$V_1(\hat{x})$ に対する $V_2(\hat{x})$、あるいはその逆を、SUSY partner potential と言う。無限井戸型ポテンシャルの SUSY partner potential を求めよう。[問 3](1) で求めた $\psi_1(x)$ が本問の基底状態 $\psi_0(x)$ に相当することに注意して、(3) の結果を使うことによりまず $W(x)$ を求めよ。[問 3](1) で求めた $\psi_1(x)$ は、井戸の深さを定数分だけずらした

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & (0 \leq x \leq a), \\ \infty & (x < 0 \ \text{ or } \ a < x). \end{cases}$$

に対しても Schrödinger 方程式の解になっていることに注意して、$W(x)$ から求めた $V_1(x)$ が上記のポテンシャル形となることを確認し、SUSY partner potential $V_2(x)$ を求めよ。$0 \leq x \leq a$ の範囲だけ考察すれば十分である。

(5)　Hamiltonian $\hat{H}_1, \hat{H}_2$ および演算子 $\hat{A}, \hat{A}^\dagger$ を 2×2 行列に配置した

$$\hat{H} := \begin{pmatrix} \hat{H}_1 & 0 \\ 0 & \hat{H}_2 \end{pmatrix}, \qquad \hat{Q} := \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hat{A} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{Q}^\dagger := \begin{pmatrix} 0 & \hat{A}^\dagger \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

を考える。交換関係および反交換関係

$$[\hat{H}, \hat{Q}] = [\hat{H}, \hat{Q}^\dagger] = 0, \qquad \{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\} = \hat{H}, \qquad \{\hat{Q}, \hat{Q}\} = \{\hat{Q}^\dagger, \hat{Q}^\dagger\} = 0,$$

を示せ。交換関係は $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$、反交換関係は $\{\hat{A}, \hat{B}\} := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ で定義される。

(6)　superpotential $W(\hat{x})$ によっては、基底状態 $|\psi_0\rangle$ が $\hat{A}|\psi_0\rangle = 0$ を満たさないこともある。実際、$W(\hat{x}) = g\hat{x}^2 + \hat{x}$ (g は実数) とすると、$\hat{A}|\psi_0\rangle = 0$ となるような $|\psi_0\rangle$ は存在せず、Hamiltonian $\hat{H}_1$ の最低エネルギーは $0 < g \ll 1$ に対して $E_0 \simeq \frac{1}{\sqrt{2}\pi} e^{-\frac{\sqrt{2}}{3g^2}}$ 程度の値を持つ。$W(\hat{x}) = g\hat{x}^2 + \hat{x}$ について $\hat{A}|\psi_0\rangle = 0$ を満たす状態が存在しない理由を考察せよ (文献 [3] 第 6 節)。このように、$\hat{A}|\psi_0\rangle = 0$ を満たさない基底状態 (言い換えると、$\hat{Q}\begin{pmatrix} |\psi_0\rangle \\ 0 \end{pmatrix} \neq 0$ となる基底状態) $|\psi_0\rangle$ を SUSY が破れた状態と言う。

[解 6]

(1)

$$\hat{A}^\dagger\hat{A} = \left(-i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x})\right)\left(i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x})\right) = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{i}{\sqrt{2m}}[\hat{p}, W(\hat{x})] + W^2(\hat{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + W^2(\hat{x}) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(\hat{x}),$$

$$\hat{A}\hat{A}^\dagger = \left(i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x})\right)\left(-i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x})\right) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{i}{\sqrt{2m}}[\hat{p}, W(\hat{x})] + W^2(\hat{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + W^2(\hat{x}) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(\hat{x}),$$

であるから、

$$V_1(\hat{x}) = W^2(\hat{x}) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(\hat{x}), \qquad V_2(\hat{x}) = W^2(\hat{x}) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(\hat{x}).$$

(2)

$$\begin{aligned}
\hat{H}_1|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle \quad &\Longrightarrow \quad \hat{H}_2\hat{A}|\psi_n^{(1)}\rangle = \hat{A}\hat{A}^\dagger\hat{A}|\psi_n^{(1)}\rangle = \hat{A}\hat{H}_1|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)}\hat{A}|\psi_n^{(1)}\rangle, \\
\hat{H}_2|\psi_n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)}|\psi_n^{(2)}\rangle \quad &\Longrightarrow \quad \hat{H}_1\hat{A}^\dagger|\psi_n^{(2)}\rangle = \hat{A}^\dagger\hat{A}\hat{A}^\dagger|\psi_n^{(2)}\rangle = \hat{A}^\dagger\hat{H}_2|\psi_n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)}\hat{A}^\dagger|\psi_n^{(2)}\rangle.
\end{aligned}$$

(3)

$$\begin{aligned}
\hat{A}|\psi_0\rangle = 0 \quad &\Longrightarrow \quad \langle x|\left(i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}} + W(\hat{x})\right)|\psi_0\rangle = 0 \\
&\Longrightarrow \quad \frac{\hat{\hbar}}{\sqrt{2m}}\psi_0'(x) + W(x)\psi_0(x) = 0 \quad \Longrightarrow \quad W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)}.
\end{aligned}$$

(4) [問 3] の結果より、本問の $\psi_0(x)$ は $0 \le x \le a$ で

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right),$$

であるから、(3) の結果に代入して

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{\pi}{a}\frac{1}{\tan\left(\frac{\pi x}{a}\right)},$$

となる。この $W(x)$ から $V_1(x)$ を求めると

$$V_1(x) = W^2(x) - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2},$$

より、確かに [問 3] の井戸の深さを定数分だけずらしたものになっている。対応する SUSY partner potential は

$$V_2(x) = W^2(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}\frac{\cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + 1}{\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)},$$

である。

(5)

$$[\hat{H},\hat{Q}] = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \hat{H}_2\hat{A} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \hat{A}\hat{H}_1 \end{pmatrix} = 0, \qquad [\hat{H},\hat{Q}^\dagger] = \begin{pmatrix} \hat{H}_1\hat{A}^\dagger & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \hat{A}\hat{H}_2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = 0,$$

$$\{\hat{Q},\hat{Q}^\dagger\} = \hat{Q}\hat{Q}^\dagger + \hat{Q}^\dagger\hat{Q} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \hat{A}\hat{A}^\dagger \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \hat{A}^\dagger\hat{A} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \hat{H}, \qquad \{\hat{Q},\hat{Q}\} = 2\hat{Q}\hat{Q} = 0, \qquad \{\hat{Q}^\dagger,\hat{Q}^\dagger\} = 2\hat{Q}^\dagger\hat{Q}^\dagger = 0.$$

(6) $W(\hat{x}) = g\hat{x}^2 + \hat{x}$ について、(3) の結果より

$$W(x) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{\psi_0'(x)}{\psi_0(x)} \qquad \Longrightarrow \qquad \ln\psi_0(x) = -\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int_0^x dx'\, W(x') + (\text{定数}) = -\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\left(\frac{gx^3}{3} + \frac{x^2}{2}\right) + (\text{定数}),$$

となる。$\psi_0(x)$ が規格化可能な解となるためには $\psi_0(x \to \pm\infty) \to 0$ である必要があるが、$x \to \pm\infty$ で主要となる $\frac{gx^3}{3}$ 項が $x \to \pm\infty$ で異なる符号に発散し、$\psi_0(x \to \pm\infty) \to 0$ を実現することが不可能なため、この場合の基底状態は $\hat{A}|\psi_0\rangle = 0$ では与えられなくなっている。

参考文献

[1] **Planck** Collaboration, Y. Akrami *et al.*, “Planck 2018 results. X. Constraints on inflation,” *Astron. Astrophys.* **641** (2020) A10, arXiv:1807.06211 [astro-ph.CO].

[2] F. Cooper, A. Khare, and U. Sukhatme, “Supersymmetry and quantum mechanics,” *Phys. Rept.* **251** (1995) 267–385, arXiv:hep-th/9405029.

[3] E. Witten, “Dynamical Breaking of Supersymmetry,” *Nucl. Phys. B* **188** (1981) 513.