演習問題

2024 年 5 月 23 日　　　学籍番号 ＿＿＿＿＿＿＿＿　　　氏名 ＿＿＿＿＿＿＿＿

[問 1]　調和振動子に対する時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$H\psi(x) = E\psi(x), \qquad H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2,$$

について、以下の問いに答えよ。

(1)　変数変換

$$\xi := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \qquad K := \frac{2E}{\hbar\omega},$$

を行うと、

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} + (K - \xi^2)\right]\psi(\xi) = 0,$$

が得られることを示せ。ただし、$\psi(\xi)$ は $\psi(x)$ に $x = x(\xi)$ を代入した $\psi(x(\xi))$ の略記である。

(2)　解を

$$\psi(\xi) = \left(a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \cdots\right)e^{-\xi^2/2} = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j e^{-\xi^2/2},$$

と書いたとき、

$$\sum_{j=0}^{\infty}\left[(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j\right]\xi^j = 0,$$

が得られることを示せ。

(3)　(2) より

$$a_{j+2} = \frac{2j+1-K}{(j+1)(j+2)}a_j \quad (j = 0, 1, \cdots),$$

が得られる。これと $\psi(\xi)$ が発散しないための条件

$$K = 2n + 1 \quad (n \text{ は 0 以上の整数}),$$

より、具体的に $n = 2$ について

$$\psi_2(\xi) \propto (1 - 2\xi^2)e^{-\xi^2/2},$$

が得られることを示せ。規格化定数は求めなくてよい。

[解 1]

(1)　調和振動子に対する時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right]\psi(x) = E\psi(x),$$

に

$$\xi := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \qquad K := \frac{2E}{\hbar\omega},$$

を代入すると

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\frac{\hbar}{m\omega}\xi^2\right]\psi(\xi) = \frac{\hbar\omega K}{2}\psi(\xi) \qquad \Longrightarrow \qquad \left[\frac{d^2}{d\xi^2} + (K-\xi^2)\right]\psi(\xi) = 0,$$

となる。

(2) (1) の結果に

$$\psi(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j e^{-\xi^2/2},$$

を代入すると、

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\xi}\psi(\xi) &= \sum_{j=0}^{\infty}\left(ja_j\xi^{j-1} - a_j\xi^{j+1}\right)e^{-\xi^2/2}, \\
\frac{d^2}{d\xi^2}\psi(\xi) &= \frac{d}{d\xi}\left(\frac{d}{d\xi}\psi(\xi)\right) \\
&= \sum_{j=0}^{\infty}\left[(j-1)ja_j\xi^{j-2} - (j+1)a_j\xi^j - ja_j\xi^j + a_j\xi^{j+2}\right]e^{-\xi^2/2}, \\
&= \sum_{j=0}^{\infty}\left[(j+1)(j+2)a_{j+2}\xi^j - (2j+1)a_j\xi^j + a_j\xi^{j+2}\right]e^{-\xi^2/2},
\end{aligned}$$

および

$$(K-\xi^2)\psi(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty}\left(Ka_j\xi^j - a_j\xi^{j+2}\right)e^{-\xi^2/2},$$

より、

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} + (K-\xi^2)\right]\psi(\xi) = \sum_{j=0}^{\infty}\left[(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j\right]\xi^j = 0,$$

となる。

(4) $K = 5$ である。

$$a_{j+2} = \frac{2j+1-K}{(j+1)(j+2)}a_j \quad (j = 0, 1, \cdots),$$

を用いて、偶数系列に対し

$$a_2 = -2a_0, \qquad a_4 = a_6 = \cdots = 0,$$

となる。一方、奇数系列に対しては漸化式の分子は 0 になり得ないから、$a_1 = a_3 = a_5 = \cdots = 0$ でなければならな

い。よって

$$\psi(\xi)=\sum_{j=0}^{\infty}a_j\xi^j e^{-\xi^2/2}=(a_0+a_2\xi^2)e^{-\xi^2/2}\propto(1-2\xi^2)e^{-\xi^2/2},$$

となる。

[問 2]

(1) 生成消滅演算子は、位置演算子 $\hat{x}$ と運動量演算子 $\hat{p}$ を用いて

$$\text{消滅演算子 } \hat{a}:=\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(i\hat{p}+m\omega\hat{x}),\qquad \text{生成演算子 } \hat{a}^\dagger:=\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-i\hat{p}+m\omega\hat{x}),$$

と定義される。$\hat{x}$ と $\hat{p}$ に成り立つ正準交換関係 $[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$ を用いて

$$[\hat{a},\hat{a}^\dagger]=1,$$

を示せ。ただし、任意の演算子 $\hat{A},\hat{B}$ に対して交換子は $[\hat{A},\hat{B}]:=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$ で定義される。

(2) 調和振動子の Hamiltonian

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2,$$

が

$$\hat{H}=\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right),$$

と表されることを示せ。

(3) 状態 $|\psi\rangle$ が時間に依存しない Schrödinger 方程式 $\hat{H}|\psi\rangle=E|\psi\rangle$ を満たしているとする。このとき、(1)(2) の結果を使うことにより

$$\hat{H}(\hat{a}|\psi\rangle)=(E-\hbar\omega)(\hat{a}|\psi\rangle),$$
$$\hat{H}(\hat{a}^\dagger|\psi\rangle)=(E+\hbar\omega)(\hat{a}^\dagger|\psi\rangle),$$

となることを示せ。これは、

- $\hat{a}|\psi\rangle$ も Schrödinger 方程式の解であり、エネルギー固有値 $E-\hbar\omega$ の固有ベクトルである
- $\hat{a}^\dagger|\psi\rangle$ も Schrödinger 方程式の解であり、エネルギー固有値 $E+\hbar\omega$ の固有ベクトルである

ことを意味している。ただし、$\hat{a}|\psi\rangle$ も $\hat{a}^\dagger|\psi\rangle$ も 0 ベクトルではないとする。

[解 2]

(1)　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。

(2)　生成消滅演算子を用いて Hamiltonian を書き直すと

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

となる。

(3)　まず $\hat{a}|\psi\rangle$ について、

$$
\begin{aligned}
\hat{H}(\hat{a}|\psi\rangle) &= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)(\hat{a}|\psi\rangle) \\
&= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{a}\right)|\psi\rangle \\
&\overset{[\hat{a},\hat{a}^\dagger]=1}{=} \hbar\omega\left[\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1\right)\hat{a} + \frac{1}{2}\hat{a}\right]|\psi\rangle \\
&= \hat{a}\left[\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega\right]|\psi\rangle \\
&= \hat{a}\left(\hat{H} - \hbar\omega\right)|\psi\rangle \\
&\overset{|\psi\rangle\text{ の定義}}{=} \hat{a}(E - \hbar\omega)|\psi\rangle \\
&\overset{\hat{a}\text{ と数は交換する}}{=} (E - \hbar\omega)(\hat{a}|\psi\rangle).
\end{aligned}
$$

同様に、$\hat{a}^\dagger|\psi\rangle$ について、

$$\begin{aligned}
\hat{H}(\hat{a}^\dagger|\psi\rangle) &= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right)(\hat{a}^\dagger|\psi\rangle) \\
&= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger+\frac{1}{2}\hat{a}^\dagger\right)|\psi\rangle \\
&\overset{[\hat{a},\hat{a}^\dagger]=1}{=} \hbar\omega\left[\hat{a}^\dagger\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+1\right)+\frac{1}{2}\hat{a}^\dagger\right]|\psi\rangle \\
&= \hat{a}^\dagger\left[\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right)+\hbar\omega\right]|\psi\rangle \\
&= \hat{a}^\dagger\left(\hat{H}+\hbar\omega\right)|\psi\rangle \\
&\overset{|\psi\rangle\ \text{の定義}}{=} \hat{a}^\dagger(E+\hbar\omega)|\psi\rangle \\
&\overset{\hat{a}^\dagger\text{と数は交換する}}{=} (E+\hbar\omega)(\hat{a}^\dagger|\psi\rangle).
\end{aligned}$$

[問 3]　調和振動子の基底状態 $|\psi_0\rangle$ は、

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

で定義される。

(1)　基底状態 $|\psi_0\rangle$ の定義式 $\hat{a}|\psi_0\rangle = 0$ に左から $\langle x|$ を掛け、$\langle x|\hat{x}|\cdots\rangle = x\langle x|\cdots\rangle$ および $\langle x|\hat{p}|\cdots\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\langle x|\cdots\rangle$ を用いることにより、$\psi_0(x) = \langle x|\psi_0\rangle$ に対する微分方程式

$$\left(\hbar\frac{d}{dx}+m\omega x\right)\psi_0(x) = 0,$$

を導け。

(2)　(1) の微分方程式を解くことで、

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

が得られることを示せ。

[解 3]

(1)　$|\psi_0\rangle$ 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。

(2) (1) の微分方程式を解くと

$$\begin{aligned}
\left(\hbar\frac{d}{dx}+m\omega x\right)\psi_0(x)=0 \qquad &\Longrightarrow \qquad \frac{d}{dx}\ln\psi_0(x)=-\frac{m\omega}{\hbar}x \\
&\Longrightarrow \qquad \ln\psi_0(x)=-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 \\
&\Longrightarrow \qquad \ln\psi_0(x)=-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2+\text{定数} \\
&\Longrightarrow \qquad \psi_0(x)=a_0e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2},
\end{aligned}$$

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。