

演習問題

2025 年 6 月 12 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

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

について、以下の問いに答えよ。

(1) 変数変換

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

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

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

と書いたとき、

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

が得られることを示せ。

(3) (2) より

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

が得られる。これと $\psi(\xi)$ が発散しないための条件

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

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

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

を代入すると

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

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、

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

および

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

より、

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

となる。

(4) $K = 5$ である。

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

を用いて、偶数系列に対し

$$a_2 = -2a_0, \quad a_4 = a_6 = \dots = 0,$$

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、 $a_1 = a_3 = a_5 = \dots = 0$ 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] 調和振動子の基底状態 $|\psi_0\rangle$ は $\hat{a}|\psi_0\rangle = 0$ で与えられる。

(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 2]

(1) $|\psi_0\rangle$ の定義式より

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

となる。

(2) (1) の微分方程式を解くと

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

となる。ただし a_0 は正の実数に取る。規格化条件より

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

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。

[問 3]

(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

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

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 3]

(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

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

となる。

(3) まず $\hat{a}|\psi\rangle$ について、

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

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

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

[問 4]

以下の交換関係を満たす Hermite 演算子の組 $(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ を考えよう。

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y.$$

ただし、交換子は $[\hat{A}, \hat{B}] := \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ で定義される。

(1) $\hat{L}^2 := \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ は $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ と交換することを示せ。 $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$ を用いるとよい。 L_z について示せば他も同様なので、 $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$ を示せば十分である。

(2) 不確定性関係

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle \Psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \Psi \rangle \right)^2,$$

を $\hat{A} = \hat{L}_x, \hat{B} = \hat{L}_y$ に適用し、 $\sigma_{L_x} \sigma_{L_y}$ の下限を $\langle \Psi | \hat{L}_z | \Psi \rangle$ で表せ。ただし、 $|\Psi\rangle$ は任意の状態であり、 σ_A^2, σ_B^2 は $\Delta A := \hat{A} - \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle, \Delta B := \hat{B} - \langle \Psi | \hat{B} | \Psi \rangle$ の分散 $\sigma_A^2 := \langle \Psi | (\Delta A)^2 | \Psi \rangle, \sigma_B^2 := \langle \Psi | (\Delta B)^2 | \Psi \rangle$ である。

[解 4]

(1) L_z について示す。他は同様である。

$$\begin{aligned} [\hat{L}^2, \hat{L}_z] &= [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_z] \\ &= [\hat{L}_x^2, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y^2, \hat{L}_z] \\ &= \hat{L}_x [\hat{L}_x, \hat{L}_z] + [\hat{L}_x, \hat{L}_z] \hat{L}_x + \hat{L}_y [\hat{L}_y, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y, \hat{L}_z] \hat{L}_y \\ &= \hat{L}_x (-i\hbar \hat{L}_y) + (-i\hbar \hat{L}_y) \hat{L}_x + \hat{L}_y (i\hbar \hat{L}_x) + (i\hbar \hat{L}_x) \hat{L}_y \\ &= 0. \end{aligned}$$

(2)

$$\sigma_{L_x}^2 \sigma_{L_y}^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle \Psi | [\hat{L}_x, \hat{L}_y] | \Psi \rangle \right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \langle \Psi | \hat{L}_z | \Psi \rangle \right)^2 \implies \sigma_{L_x} \sigma_{L_y} \geq \frac{\hbar}{2} |\langle \Psi | \hat{L}_z | \Psi \rangle|.$$

[問 5] 2つの正規直交基底

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

で Hamiltonian が

$$\hat{H} = h|1\rangle\langle 1| + g|1\rangle\langle 2| + g|2\rangle\langle 1| + h|2\rangle\langle 2| = \begin{pmatrix} h & g \\ g & h \end{pmatrix},$$

と与えられる系を考える。ここで g, h は実数である。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) $\hat{H}$ が Hermite 演算子であることを確かめよ。

(2) $\hat{H}$ の固有状態の線型結合で元の方程式の解を表したい。

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

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。

(3) 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

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

が得られることを示せ。また、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。

(4) 初期状態が $|\Psi(t=0)\rangle = |1\rangle$ であることを用いて、 $\langle s_\pm|\Psi(t=0)\rangle$ を求めよ。

(5) 任意の時刻 t における状態 $|\Psi(t)\rangle$ を g, h を用いて表せ。完全性関係より

$$|\Psi(t)\rangle = |s_+\rangle \langle s_+|\Psi(t)\rangle + |s_-\rangle \langle s_-|\Psi(t)\rangle,$$

であることを用いるとよい。

[解 5]

(1) $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ より $\hat{H}$ は Hermite 演算子である。

(2) 固有値は

$$\det \begin{pmatrix} h-E & g \\ g & h-E \end{pmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \quad E = E_\pm := h \pm g,$$

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。

(3) 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。解は

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

である。

(4) $|\Psi(t=0)\rangle = |1\rangle$ より

$$\langle s_+|\Psi(t=0)\rangle = \langle s_-|\Psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

である。

(5) 完全性関係を用いて

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= |s_+\rangle \langle s_+ | \Psi(t) \rangle + |s_-\rangle \langle s_- | \Psi(t) \rangle \\ &= |s_+\rangle \langle s_+ | \Psi(t=0) \rangle e^{-iE_+t/\hbar} + |s_-\rangle \langle s_- | \Psi(t=0) \rangle e^{-iE_-t/\hbar} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} |s_+\rangle e^{-iE_+t/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{2}} |s_-\rangle e^{-iE_-t/\hbar} \\ &= \frac{1}{2} e^{-i(h+g)t/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} e^{-i(h-g)t/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\ &= e^{-iht/\hbar} \begin{pmatrix} \cos(gt/\hbar) \\ -i \sin(gt/\hbar) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

となる。