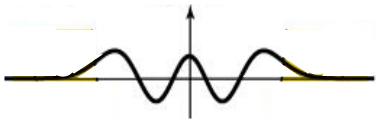
量子力学A 解答例 （演習12）v1.3.1

1. 第４励起状態の波動関数$\varphi_4(x)$がどんな形をしているかスケッチしなさい。



（解答例）n=4, 偶関数で節の数４。中心近くは波長が短く振幅も小さい
5-2-1節参照

2. 調和振動子の基底状態の波動関数を$\varphi_0(x) = N_0 e^{-cx^2}$とおいて調和振動子のSchrödinger方程式に代入し、式(5-2-6)

$\left[-\frac{2\hbar^2 c^2}{m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \right] x^2 + \left[\frac{\hbar^2 c}{m} - E_0 \right] = 0$ を導びけ。

（略解）すでに5-2-2節に解き方を示してある。$\varphi_0(x), \varphi_0''(x)$ （２階微分）を調和振動子のSchrödinger方程式に代入し、まとめると、$\left[\left(-\frac{2\hbar^2 c^2}{m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \right) x^2 + \left(\frac{\hbar^2 c}{m} - E_0 \right) \right] N_0 e^{-cx^2} = 0$

$N_0 e^{-cx^2} \neq 0$ なので上の式が恒等的に成り立つためには、$\left(-\frac{2\hbar^2 c^2}{m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \right) = 0$ 、$\left(\frac{\hbar^2 c}{m} - E_0 \right) = 0$

これより、$c = \frac{m\omega}{2\hbar}$ 、$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$

3. 調和振動子の励起状態の波動関数を$\varphi_n(x) = N_n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$、$\left(\xi \equiv \alpha x,\ \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right)$ とおいてSchrödinger方程式に代入し$H_n(\xi)$の満たすべき方程式がエルミートの微分方程式

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + (\varepsilon_n - 1) H_n(\xi) = 0、\quad (\varepsilon_n \equiv E_n / E_0)$$

になることを確かめよ。

（略解）$\xi \equiv \alpha x,\ \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ なる変数変換で、Schrödinger方程式は

$\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right) \varphi_n = \varepsilon_n \varphi_n$ となる。これに、$\varphi_n = N_n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ を代入し整理すると、

$$\left[-H_n''(\xi) + 2\xi H_n'(\xi) + H_n(\xi) \right] e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = \varepsilon_n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

これより、$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + (\varepsilon - 1) H_n(\xi) = 0$

4. エルミート多項式の母関数 $g(\xi, t) \equiv e^{-t^2 + 2t\xi}$ をマクローリン展開することによりエルミートの多項式 $H_0(\xi),\ H_1(\xi),\ H_2(\xi),\ H_3(\xi)$ を求めなさい。

（略解）$g(\xi, t) = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi) \frac{t^n}{n!}$ (1)

$$g(\xi, t) = 1 + \frac{2t\xi - t^2}{1!} + \frac{(2t\xi - t^2)^2}{2!} + \frac{(2t\xi - t^2)^3}{3!} + \dots$$

$$= 1 + 2\xi t + (-2 + 4\xi^2) \frac{t^2}{2!} + (-12\xi + 8\xi^3) \frac{t^3}{3!} + \dots \quad (2)$$

よって、(1)式と(2)式の同じべきの係数を比較すると$H_0(\xi),\ H_1(\xi),\ H_2(\xi),\ H_3(\xi)$が求まる。

5.　エルミート多項式の関数表示 $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \dfrac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$ から $H_0(\xi), H_1(\xi), H_2(\xi), H_3(\xi)$ を求めなさい。

（略解）$H_0(\xi) = e^{\xi^2} \dfrac{d^0}{d\xi^0} e^{-\xi^2} = e^{\xi^2} e^{-\xi^2} = 1$　（ただし、$\dfrac{d^0}{d\xi^0} = 1$ とした）

$$H_1(\xi) = (-1)e^{\xi^2} \frac{d}{d\xi} e^{-\xi^2} = (-1)e^{\xi^2}(-2\xi)e^{-\xi^2} = 2\xi$$

のように計算していく。以下、略

6.　調和振動子の波動関数より $< x >_n = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^*(x) x \varphi_n(x) dx$ を求めよ

（略解）$\varphi_n(x) = N_n H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$とおくと、被積分関数は以下の式のように、どのnにおいても（偶関数）×（奇関数）なので奇関数となり、０を挟んで積分範囲が対称的な積分はゼロになる。

$$< x >_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{N_n^2 H_n^2(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2}}_{\text{（偶関数）}} \underbrace{x}_{\text{（奇関数）}} dx = 0$$

7. (1) $\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}$ とした時、$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}$, $[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$ を示せ。

（解答例）$[\hat{N}, \hat{a}] = \hat{N}\hat{a} - \hat{a}\hat{N} = (\hat{a}^\dagger \hat{a})\hat{a} - \hat{a}(\hat{a}^\dagger \hat{a}) = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a} = -\hat{a}$　ここで、$[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] = -1$ を使った。

$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{N}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{N} = (\hat{a}^\dagger \hat{a})\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger \hat{a}) = \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\dagger$　ここで、$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ を使った。

(2) $\hat{N}$ はエルミート演算子であることを示せ。

（解答例）$\hat{N}^\dagger = (\hat{a}^\dagger \hat{a})^\dagger = \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger)^\dagger = \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{N}.$ ゆえに、$\hat{N}$ はエルミート演算子。

(3) $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + 1/2)$ であることを示せ。

式(5-3-2),(5-3-3)から求めた、　$\hat{x} = \sqrt{\dfrac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$、　$\hat{p} = \dfrac{1}{i}\sqrt{\dfrac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$ を$\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + \dfrac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$ に代入して

変形する。$\dfrac{\hat{p}^2}{2m} = \dfrac{-1}{2m}\dfrac{m\hbar\omega}{2}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) = -\dfrac{\hbar\omega}{4}(\hat{a}^2 - \hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger + (\hat{a}^\dagger)^2)$、

$\dfrac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = \dfrac{1}{2}m\omega^2\dfrac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) = \dfrac{\hbar\omega}{4}(\hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + (\hat{a}^\dagger)^2)$

よって、$\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + \dfrac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = \dfrac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger) = \dfrac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^\dagger\hat{a} + (1 + \hat{a}^\dagger\hat{a})) = \dfrac{\hbar\omega}{2}(2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1) = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \dfrac{1}{2}) = \hbar\omega\left(\hat{N} + \dfrac{1}{2}\right)$

ここで、$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ より$\hat{a}\hat{a}^\dagger = 1 + \hat{a}^\dagger\hat{a}$ を使った。

８. $\hat{x}, \hat{p}$ を $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$で表し、調和振動子のn番目の励起状態における$< \hat{x} >_n$, $< \hat{p} >_n$, $< \hat{x}^2 >_n$, $< \hat{p}^2 >_n$ を求めなさい。これより、n番目の励起状態における不確定性関係が

$$< (\Delta\hat{x})^2 >_n < (\Delta\hat{p})^2 >_n = \frac{\hbar^2}{4}(2n + 1)^2$$

であることを示せ。

（解答例） 式(5-3-2),(5-3-3)より　$\hat{x} = \sqrt{\dfrac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$、　$\hat{p} = \dfrac{1}{i}\sqrt{\dfrac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger).$

$< \hat{x} >_n = < n|\hat{x}|n > = \sqrt{\dfrac{\hbar}{2m\omega}} < n|\hat{a} + \hat{a}^\dagger|n > = \sqrt{\dfrac{\hbar}{2m\omega}}(< n|\hat{a}|n > + < n|\hat{a}^\dagger|n >)$

$= \sqrt{\dfrac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n} < n|n-1 > + \sqrt{n+1} < n|n+1 >) = 0$

ここで、 $<n|n'> = \delta_{nn'}$（$|n>$ は正規直交基底をなす）と、(5-3-18)式 $\hat{a}|n> = \sqrt{n}|n-1>$、(5-3-19)式 $\hat{a}^\dagger|n> = \sqrt{n+1}|n+1>$ を使った。結果は問題６と同じであるが代数的に求められたことになる。

同様にして、

$$<\hat{p}>_n = <n|\hat{p}|n> = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(<n|\hat{a}|n> - <n|\hat{a}^\dagger|n>) = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\sqrt{n}<n|n-1> - \sqrt{n+1}<n|n+1>) = 0$$

$$<\hat{x}^2>_n = <n|\hat{x}^2|n> = \frac{\hbar}{2m\omega}<n|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)^2|n> = \frac{\hbar}{2m\omega}<n|(\hat{a}^2+\hat{a}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a}+\hat{a}^{\dagger 2})|n> = \frac{\hbar}{2m\omega}<n|(\hat{a}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a})|n>$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega}<n|1+2\hat{N}|n> = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)$$

$$<\hat{p}^2>_n = <n|\hat{p}^2|n> = -\frac{m\hbar\omega}{2}<n|(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)^2|n> = -\frac{m\hbar\omega}{2}<n|(\hat{a}^2-\hat{a}\hat{a}^\dagger-\hat{a}^\dagger\hat{a}+\hat{a}^{\dagger 2})|n> = \frac{m\hbar\omega}{2}<n|(\hat{a}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a})|n>$$

$$= \frac{m\hbar\omega}{2}<n|1+2\hat{N}|n> = \frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1)$$

$$\therefore <(\Delta\hat{x})^2>_n <(\Delta\hat{p})^2>_n = \frac{\hbar^2}{4}(2n+1)^2$$

9. 調和振動子のエネルギーの固有状態 $|n>$ を基底とした場合の$\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$, $\hat{x}$, $\hat{p}$, $\hat{H}$ に対応する行列を書きなさい。

（解答例）

演算子$\hat{M}$ に対応する行列の n行m列成分$(\hat{M})_{nm}$ は、 $<n|\hat{M}|m>$ で表される（**注意：ただし、調和振動子では nもmも 0,1,2… のように０から始まる**）。ここで、基底$|n>$ は調和振動子のエネルギーの固有状態 （$\hat{H}|n> = (n+1/2)\hbar\omega|n>$）。 $<n|m> = \delta_{n,m}$（$|n>$ は正規直交基底をなす）と、(5-3-18)式 $\hat{a}|n> = \sqrt{n}|n-1>$、(5-3-19)式 $\hat{a}^\dagger|n> = \sqrt{n+1}|n+1>$ が成り立つことを使う。

（注意：以下、nもmも0,1,2… のように０から始まる）

$(\hat{a})_{nm} = <n|\hat{a}|m> = <n|\sqrt{m}|m-1> = \sqrt{m}<n|m-1> = \sqrt{m}\,\delta_{n,m-1}$

（$n=m-1$より$m=n+1$ なので、n行n+1列のところでのみ、ゼロでない 値、$\sqrt{n+1}$、を持つ）

$(\hat{a}^\dagger)_{nm} = <n|\hat{a}^\dagger|m> = <n|\sqrt{m+1}|m+1> = \sqrt{m+1}<n|m+1> = \sqrt{m+1}\,\delta_{n,m+1}$

（$n=m+1$より$m=n-1$ なので、n行n-1列のところでのみ、ゼロでない 値、$\sqrt{n}$、を持つ）

$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)$、$\hat{p} = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)$ なので、

$$(\hat{x})_{nm} = <n|\hat{x}|m> = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}<n|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|m> = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{m}\,\delta_{n,m-1} + \sqrt{m+1}\,\delta_{n,m+1})$$

$$(\hat{p})_{nm} = <n|\hat{p}|m> = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}<n|(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)|m> = \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\sqrt{m}\,\delta_{n,m-1} - \sqrt{m+1}\,\delta_{n,m+1})$$

$(\hat{H})_{n,m} = <n|\hat{H}|m> = <n|(m+1/2)\hbar\omega|m> = (m+1/2)\hbar\omega<n|m> = (n+1/2)\hbar\omega\,\delta_{n,m}$

$(\hat{H})_{n,m}$ は調和振動子のエネルギーの固有状態を基底に選んでいるので対角行列になっている。

それ以外の演算子、$\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$, $\hat{x}$, $\hat{p}$ の行列は非対角行列である。

$$\hat{a} \to \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \\ & & \vdots & & \end{pmatrix} \quad \hat{a}^\dagger \to \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ & & \vdots & & \end{pmatrix} \quad \hat{H} \to \hbar\omega \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7}{2} & \\ & & \vdots & & \end{pmatrix}$$

$$\hat{x} \to \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ & & \vdots & & \end{pmatrix} \quad \hat{p} \to \frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \\ -1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \\ & & \vdots & & \end{pmatrix}$$

10. $<\hat{x}>$ をできるだけ大きくするような $|0>$ と $|1>$ の重ね合わせ $|\alpha>=C_0|0>+C_1|1>$ の係数 C_0, C_1 を求めよ。初期状態を $|\alpha>=C_0|0>+C_1|1>$ とするとき、時刻tでの $|\alpha(t)>$ と $<\hat{x}(t)>_\alpha$ を求めよ。

（解答例）

$$<\hat{x}>_\alpha = <\alpha|\hat{x}|\alpha> = (C_0^* <0| + C_1^* <1|)\hat{x}(C_0|0> + C_1|1>)$$

$$= C_0^* C_0 <0|\hat{x}|0> + C_0^* C_1 <0|\hat{x}|1> + C_0 C_1^* <1|\hat{x}|0> + C_1^* C_1 <1|\hat{x}|1>$$

$$= C_0^* C_1 <0|\hat{x}|1> + C_0 C_1^* <1|\hat{x}|0>$$

ここで、問題８より $<0|\hat{x}|0> = <\hat{x}>_0 = 0$、 $<1|\hat{x}|1> = <\hat{x}>_1 = 0$ を使った。

$$<0|\hat{x}|1> = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} <0|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|1> = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(<0|\hat{a}|1> + <0|\hat{a}^\dagger|1>) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

ここで、 $<0|\hat{a}|1> = \sqrt{1} <0|0> = 1$ 、 $<0|\hat{a}^\dagger|1> = \sqrt{2} <0|1> = 0$.

この計算には、講義メモの(5-3-18)(5-3-19)式、$\hat{a}|n> = \sqrt{n}|n-1>, \hat{a}\dagger|n> = \sqrt{n+1}|n+1>$ を使った。

同様にして、 $<1|\hat{x}|0> = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} <1|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|0> = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(<1|\hat{a}|0> + <1|\hat{a}^\dagger|0>) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$

$\therefore <\hat{x}>_\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(C_0^* C_1 + C_0 C_1^*)$ ただし、$|C_0|^2 + |C_1|^2 = 1$

$C_0 = r_0 e^{i\theta_0}, C_1 = r_1 e^{i\theta_1},$ とおくと、 $<\hat{x}>_\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} 2r_0 r_1 \cos(\theta_0 - \theta_1)$

これが最大になる条件は $r_0 r_1 = 1/2, \cos(\theta_0 - \theta_1) = 1$ なので、$C_0 = C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$

この時、$|\alpha> = \frac{1}{\sqrt{2}}|0> + \frac{1}{\sqrt{2}}|1>$

時間変化は、$|\alpha>$ に $e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$ を作用させれば良いから（講義ノート 3-7-9節、(3-7-36）式参照）、

時刻 t での状態は $|\alpha(t)> = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}|\alpha> = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}(\frac{1}{\sqrt{2}}|0> + \frac{1}{\sqrt{2}}|1>) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{i\omega t}{2}}|0> + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{3i\omega t}{2}}|1>$

なので、その時の期待値は、

$$<\hat{x}(t)>_\alpha = <\alpha(t)|\hat{x}|\alpha(t)> = (\frac{1}{\sqrt{2}}e^{\frac{i\omega t}{2}}<0| + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{\frac{3i\omega t}{2}}<1|)\hat{x}(\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{i\omega t}{2}}|0> + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{3i\omega t}{2}}|1>)$$

$$= \frac{1}{2}(e^{-i\omega t}<0|\hat{x}|1> + e^{i\omega t}<1|\hat{x}|0>) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\cos(\omega t)$$