

量子力学 第8回 演習解答

量子力学的 1次元調和振動子について考える。ハミルトニアンは、

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

と表される。ここで、生成演算子 $\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}$ 、消滅演算子

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p},$$

個数演算子 $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ とし、個数演算子 $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ に対する固有ベクトルを $|n\rangle$,

固有値を n とする ($\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle$)。 $|n\rangle$ は完全規格直交系をなすことがわかっている。以下の問に答えよ。

1. 交換関係を計算し、 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ となることを示せ。またその結果から、 \hat{a} と \hat{a}^\dagger が同時固有ベクトルをもつか否か議論せよ。

【解答】

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

であるから、

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = \frac{i}{\hbar}[\hat{p}, \hat{x}] = 1$$

したがって、 \hat{a} と \hat{a}^\dagger は交換不可であり、同時固有ベクトルを持たない。

2. 問1の結果を用いて、 $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ および $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ であることを示せ。

【解答】

状態ベクトル $\hat{a}|n\rangle$ に $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ を左から作用させると、

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}|n\rangle = (\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} - \hat{a})|n\rangle = (\hat{a}n - \hat{a})|n\rangle = (n-1)\hat{a}|n\rangle$$

となる。これは状態ベクトル $\hat{a}|n\rangle$ が $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ の固有ベクトルとなっており、その固有値が $n-1$

であることを示している。固有値が $n-1$ である固有ベクトルは $|n-1\rangle$ と表されるので、 $\hat{a}|n\rangle$ と $|n-1\rangle$ は同じ状態を表していることになる。すなわち $\hat{a}|n\rangle = c_n^- |n-1\rangle$ という関係を満たす (状態ベクトルは定数倍しても同じ状態を表す)。ここで c_n^- は規格化定数である。

$\hat{a}|n\rangle = c_n^- |n-1\rangle$ のノルムの 2 乗を計算すると、

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle &= \langle n-1|c_n^{-*}c_n^-|n-1\rangle \\ n\langle n|n\rangle &= |c_n^-|^2 \langle n-1|n-1\rangle\end{aligned}$$

となる。 $|n\rangle$ が完全規格直交系をなす ($\langle n|n\rangle = \langle n-1|n-1\rangle = 1$) ことから、

$$\begin{aligned}|c_n^-|^2 &= n \\ \therefore c_n^- &= e^{i\delta} \sqrt{n}\end{aligned}$$

不定の位相 δ は 0 としても良いので、 $c_n^- = \sqrt{n}$ とすることができる。よって、 $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ が示される。

同様に、状態ベクトル $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ に $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ を左から作用させると、

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a}+1)|n\rangle = \hat{a}^\dagger(n+1)|n\rangle = (n+1)\hat{a}^\dagger|n\rangle$$

となる。これは状態ベクトル $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ が $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ の固有ベクトルとなっており、その固有値が $n+1$ であることを示している。固有値が $n+1$ である固有ベクトルは $|n+1\rangle$ と表されるので、 $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ と $|n+1\rangle$ は同じ状態を表していることになる。すなわち $\hat{a}^\dagger|n\rangle = c_n^+ |n+1\rangle$ という関係を満たす (状態ベクトルは定数倍しても同じ状態を表す)。ここで c_n^+ は規格化定数である。

$\hat{a}^\dagger|n\rangle = c_n^+ |n+1\rangle$ のノルムの 2 乗を計算すると、

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle &= \langle n+1|c_n^{+*}c_n^+|n+1\rangle \\ \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}+1|n\rangle &= |c_n^+|^2 \langle n+1|n+1\rangle \\ (n+1)\langle n|n\rangle &= |c_n^+|^2 \langle n+1|n+1\rangle\end{aligned}$$

となる。 $|n\rangle$ が完全規格直交系をなす ($\langle n|n\rangle = \langle n+1|n+1\rangle = 1$) ことから、

$$|c_n^+|^2 = n+1$$

$$\therefore c_n^+ = \sqrt{n+1}$$

よって、 $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ が示される。

3. 以下の手順に従って、 n が非負の整数であることを示せ。

A) n が非負の実数であることを示す。

B) 問 2 の結果と、B)の結果を用いて、 n が非負の整数であることを言葉で説明する。

【解答】

$$n = \langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle$$

$$= (\langle n | \hat{a}^\dagger) \cdot (\hat{a} | n \rangle)$$

$$= |\hat{a} | n \rangle|^2 \geq 0$$

であることから、 n は非負の実数でなければならないことがわかる。

さらに問 2 の結果から $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ であり、 \hat{a} は固有値 n が 1 つだけ小さい固有ベクトルを作る演算子 (消滅演算子) であることがわかる。したがって、 \hat{a} を繰り返し作用させることによって、 n のより小さな固有ベクトル $|n-1\rangle, |n-2\rangle, |n-3\rangle \dots$ を作り出すことができる。もし n が整数でないと、この繰り返しは無限に続き、いつか n が負になってしまう。これは $n \geq 0$ でなければならない条件と矛盾する。このようなことが起こらないためには、 n は非負の整数でなければならない。 n が非負の整数であれば、 \hat{a} を n 回繰り返し作用させることによって、固有値 n が 0 である状態 $|0\rangle$ を作り出すことができる。 $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ の関係から $\hat{a}|0\rangle = 0$ となるので、 $|0\rangle$ にさらに \hat{a} を作用させても n が負である固有ベクトルは作られない。したがって、 n は非負の整数でなければならない。

4. $\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)$ と表されることを示せ。この結果から、 $|n\rangle$ が \hat{H} の固有ベクトルにな

っていることを示し、 $|n\rangle$ に対するエネルギー固有値 ε_n を求めよ。

【解答】

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

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

であるから,

$$\frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{m\hbar\omega}\hat{p}^2\right) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

となり, ハミルトニアン演算子 \hat{H} と等しくなる. $[\hat{a},\hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1$ であることを用いると,

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

と表されることがわかる. $\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle$ であることから,

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

となる. すなわち, $|n\rangle$ は \hat{H} の固有ベクトルになっており, エネルギー固有値 ε_n は

$$\varepsilon_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

であることが示される. ここで問3の結果から, n は非負の整数 ($n=0,1,2,\dots$) しか取り得ない.

5. 問4の結果から, 量子力学的調和振動子のエネルギー ε_n の取り得る値が, 古典的調和振動子のエネルギーの取り得る値と比較して異なる点を2つ挙げよ.

【解答】

問4の結果から, エネルギー固有値 ε_n は

$$\varepsilon_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (n=0,1,2,\dots)$$

となる. ε_n の取り得る値が, 古典的調和振動子の取り得るエネルギーと比較して異なる点は以下の2点である.

・古典的調和振動子のエネルギーは連続的な値を取り得るのに対し、 ε_n は $\hbar\omega$ ごとにとびとびの値しか取り得ない（量子化）。

・古典的調和振動子の最低エネルギーは 0 であるのに対し、 ε_n の最小値は $\varepsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ であり有限の値（ゼロ点エネルギー）をもつ。これは量子力学における位置と運動量の不確定性に由来するものである。

6. 状態ベクトル $|0\rangle$ の座標表示（波動関数）を $\Psi_0(x)$ とする。 $\hat{a}\Psi_0(x)=0$ であることから、

$$\Psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \exp\left(-\frac{\alpha}{2}x^2\right) \text{ となることを示せ。ここで } \alpha = \frac{m\omega}{\hbar} \text{ である。この結果を用いて、}$$

存在確率 $|\Psi_0(x)|^2$ を計算し、 x の関数としてグラフに書け。グラフ中に、古典的転回点

における x 座標 x_{\max} と存在確率 $|\Psi_0(x_{\max})|^2$ を明記せよ。（ヒント：古典的転回点では、

$$\varepsilon_n = \frac{1}{2}m\omega^2 x_{\max}^2 \text{ の関係が成り立つ。古典的調和振動子では、 } x \leq x_{\max} \text{ が成り立つ）}$$

【解答】

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}, \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \text{ であることから、}$$

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \Psi_0(x) = 0$$

である。これより、 $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$ として、

$$\Psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \exp\left(-\frac{\alpha}{2}x^2\right)$$

と求められる。

存在確率密度 $|\Psi_0(x)|^2$ は、

$$|\Psi_0(x)|^2 = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \exp(-\alpha x^2)$$

である。ここで古典的転回点における x 座標 x_{\max} を求めると、

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\hbar\omega &= \frac{1}{2}m\omega^2 x_{\max}^2 \\ \therefore x_{\max} &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \sqrt{\frac{1}{\alpha}}\end{aligned}$$

となり、古典的転回点における存在確率密度は $|\Psi_0(x_{\max})|^2 = \frac{|\Psi_0(0)|^2}{e}$ である。（グラフは講義スライドを参照のこと）

7. 問7の結果から、位置 x の取り得る値について、量子力学的調和振動子と古典的調和振動子を比較して異なる点を、思いつく限り挙げよ。

【解答】

・位置と運動量を同時に正確に定めることはできない（不確定性原理）。

・古典的調和振動子では、取り得る位置 x の最大値は $\epsilon_n = \frac{1}{2}m\omega^2 x_{\max}^2$ の関係を満たす x_{\max} により決められている（古典的転回点）。量子化された調和振動子では、古典的転回点を超えても粒子の存在確率は0にならない。量子化された調和振動子では、位置（ポテンシャルエネルギー）と運動量（運動エネルギー）が同時に定まらない（不確定性原理）ので、このようなことが許される。

・古典的転回点 x_{\max} よりも x の小さい領域では、粒子の存在確率が波となって広がっており、進む方向の異なる波同士が干渉し合って定在波となっている。このように、粒子の位置 x が確率的にしか定まらないことや、それが波同士の干渉によって強めあったり弱めあったりすることは、古典的調和振動子と異なる点である。