

量子力学 II レポート問題 (5)
(出題 2007/06/18、〆切 2007/07/02 の授業まで)

Report 15. (調和振動子)

演算子 $\hat{a}, \hat{a}^\dagger, \hat{N}$ を次のように定義する。また、 $\hat{N}$ の規格化された固有状態を $|n\rangle$ とする。

$$\hat{a} = \sqrt{\nu}\hat{x} + \frac{i}{2\hbar\sqrt{\nu}}\hat{p}, \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\nu}\hat{x} - \frac{i}{2\hbar\sqrt{\nu}}\hat{p}, \quad \hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}, \quad \hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad \langle n|n\rangle = 1.$$

1. 次の交換関係を示せ。 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$, $[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}$, $[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$
2. 次の関係式を示せ。 $\hat{N}\hat{a}|n\rangle = (n-1)\hat{a}|n\rangle$, $\hat{N}\hat{a}^\dagger|n\rangle = (n+1)\hat{a}^\dagger|n\rangle$.

前問から、 $\hat{a}^\dagger, \hat{a}$ は $\hat{N}$ の固有値を昇降する演算子であることが分かる。 $\hat{N}$ の固有値は 0 または自然数である。(正または 0 であることは、 $n = \langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle \hat{a}n|\hat{a}n\rangle \geq 0$ から示せる。次に $\hat{a}|n\rangle = 0$ となるのは $n = 0$ のときのみであることを利用すると、 n が整数でなければいくらでも小さな固有値が存在することから矛盾を示せる。) これより、 $\hat{N}$ を個数演算子、 $\hat{a}^\dagger, \hat{a}$ を (個数 n の) 生成・消滅演算子と解釈できる。 $n = 0$ の固有状態 $|0\rangle$ は、 $\hat{a}|0\rangle = 0$ を満たす。また、 $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ を座標表示すると、 $\hat{a} = \sqrt{\nu}x + \frac{1}{2\sqrt{\nu}}\frac{d}{dx}$, $\hat{a}^\dagger = \sqrt{\nu}x - \frac{1}{2\sqrt{\nu}}\frac{d}{dx}$ である。

3. 個数演算子 $\hat{N}$ を座標表示せよ。
4. 調和振動子 Hamiltonian $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$ が、 $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + 1/2)$ と表せることを示し、 ν を $m, \omega, \hbar$ で表せ。
5. 基底状態 (エネルギー最小の固有状態) $|0\rangle$ の波動関数 $\varphi_0(x)$ を求めよ。
(ヒント: 座標表示で $\hat{a}\varphi_0(x) = 0$ を解けばよい。)

以上より、調和振動子のエネルギー固有状態は個数演算子 $\hat{N}$ の固有状態であり、 $|0\rangle$ の状態は 1 種類しかないのので全ての固有状態 $|n\rangle$ は $|0\rangle$ に $\hat{a}^\dagger$ を繰り返し作用して得られることが分かった。(位相の違いは観測に影響を与えず、同じ状態を表すので無視できる。)

$$\varphi_n(x) = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\varphi_0(x), \quad E_n = \hbar\omega(n + 1/2) \quad (n = 0, 1, 2, \dots).$$

6. 調和振動子の第 1 励起状態、第 2 励起状態 (エネルギーが基底状態から数えて 1 番目、2 番目の状態) の規格化された波動関数を求め、グラフに表せ。

Report 16. (中心力ポテンシャルにおける変数分離と動径方程式)

3 次元中心力ポテンシャル中を運動する質量 m の粒子のハミルトニアンが次のように与えられている。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r), \quad \hat{L} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}.$$

軌道角運動量演算子 $\hat{L}$ は θ, ϕ 座標にのみ作用する演算子であり、 $\hat{L}^2$ の固有値は、 $\hbar^2\ell(\ell+1)$ ($\ell = 0, 1, 2, \dots$) であることが知られている。

1. 波動関数を $\varphi(\mathbf{r}) = \chi(r)Y(\theta, \phi)/r$ とおいて変数分離を実行し、 $\chi(r)$ の従う方程式 (動径方程式) を導出せよ。
2. 中心力ポテンシャルが原点付近で発散しない、あるいは発散の度が小さい ($r^2V(r) \rightarrow 0$ ($r \rightarrow 0$)) という条件を満たす) とする。原点付近で動径波動関数が $\chi_\ell \propto r^{\ell+1}$ となることを示せ。

量子力学 II レポート問題略解 (Report 11-14)

Report 11. (束縛状態)

$\varphi_I(x) = A \sin(kx)$ ($0 \leq x < a$) , $\varphi_{II}(x) = B \exp(-\rho(x-a))$ ($x \geq a$) とおいて、 $x = a$ において対数微分 φ'/φ が連続の条件から $\xi \cot \xi = -\eta$ ($\xi = ka, \eta = \rho a$)。

これと $E = \hbar^2 k^2/2m - V_0 = -\hbar^2 \rho^2/2m$ から得られる条件、 $\xi^2 + \eta^2 = 2mV_0 a^2/\hbar^2$ より、束縛状態が一つ以上存在する条件は、 $R = \sqrt{2mV_0} a^2/\hbar > \pi/2$ 、すなわち、 $V_0 > \pi^2 \hbar^2/8ma^2$ 。

Report 12. (エルミート演算子)

1. $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ の両辺に $\langle a|$ をかけて、 $\langle a|\hat{A}|a\rangle = a\langle a|a\rangle$ 。 $\hat{A}$ のエルミート性より左辺は実数、またノルムの自乗 $\langle a|a\rangle$ は実数であるから、固有値 a は実数。
2. 2つの固有状態 $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ 、 $\hat{A}|b\rangle = b|b\rangle$ において、 $a \neq b$ とする。第1式に $\langle b|$ をかけ、第2式に $\langle a|$ をかけて複素共役をとると、 $\langle b|\hat{A}|a\rangle = a\langle b|a\rangle$ 、 $\langle b|\hat{A}|a\rangle = b\langle b|a\rangle$ 。辺々引くと、 $(a-b)\langle b|a\rangle = 0$ 。 $a \neq b$ より $\langle b|a\rangle = 0$ 。
3. $\langle \hat{p}\psi|\varphi\rangle = \int dx \left(-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x}\right)^* \varphi = i\hbar \int dx \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \varphi = i\hbar [\psi^* \varphi]_{-\infty}^{\infty} + \int dx \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x}\right) = \langle \psi|\hat{p}\varphi\rangle$
ここで、遠方で $\psi, \varphi \rightarrow 0$ を用いている。よって任意の ψ, φ に対して $\langle \hat{p}\psi|\varphi\rangle = \langle \psi|\hat{p}\varphi\rangle$ より、 $\hat{p}$ はエルミート。

Report 13. (状態ベクトルの展開—離散スペクトル)

1. $|\psi\rangle = 1 |\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i|\psi\rangle = \sum_i c_i |\psi\rangle$ より展開でき、展開係数は $c_i = \langle u_i|\psi\rangle$ 。
2. ノルム (の2乗) は、 $\langle \psi|\psi\rangle = \sum_i |c_i|^2$ 。3. 期待値は $\langle A\rangle = \langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle / \langle \psi|\psi\rangle = \sum_i a_i |c_i|^2 / \sum_i |c_i|^2$ 。
(規格化されているときには、 $\langle A\rangle = \sum_i a_i |c_i|^2$)

Report 14. (状態ベクトルの展開—連続スペクトル)

1. $|\psi\rangle = 1 |\psi\rangle = \left[\int dx |u_x\rangle \langle u_x| \right] |\psi\rangle = \int dx |u_x\rangle \langle u_x|\psi\rangle = \int dx c(x) |u_x\rangle$, $c(x) = \langle u_x|\psi\rangle$.
2. $\langle A\rangle = \int dx x |c(x)|^2$