$\boxed{1}$ 次の文章を読み, 以下の問いに答えよ.

空間 3 次元において実ポテンシャル $V$ を伴うハミルトニアン $H = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)$ によって記述される系を考える. 但し, $x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$ とする. 対応する Schrödinger 方程式は以下で与えられる. また, 以下では全て束縛状態を考える.

$$\text{(Sc)} \qquad \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t,x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)\right)\Psi(t,x), \qquad t \in \mathbb{R},\ x \in \mathbb{R}^3 \qquad (\mathrm{i} = \sqrt{-1}).$$

ここで, $\Psi : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ は波動関数であり, $\hbar$ はディラック定数 (換算プランク定数), $m$ は粒子の質量である. 時刻 $t = 0$ で $\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(0,x)|^2 \mathrm{d}x = 1$ と規格化されているとき, (Sc) に従って時間発展した波動関数は $_{\text{(A)}}$<u>任意の時刻 $t$ において $\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(t,x)|^2 \mathrm{d}x = 1$ を満たす</u>. また, ポテンシャルが $V(x) = V_1(x_1) + V_2(x_2) + V_3(x_3)$ の形で与えられたとき, (Sc) は $_{\text{(B)}}$<u>空間 1 次元系の問題に帰着される</u>.

調和振動子の量子力学は場の量子論などの応用も含め非常に重要な系であるため, その基礎を学ぶ. ここでは, 下線部 (B) を考慮し次の 1 次元の固有値問題 (定常 Schrödinger 方程式) を考察する.

$$\text{(S-E)} \qquad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi(x) = E\psi(x), \qquad x \in \mathbb{R}.$$

無次元変数 $\xi = \sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}x$ を導入すると (S-E) は

$$\text{(S-E2)} \qquad \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\psi + (\epsilon - \xi^2)\psi = 0 \qquad \left(\epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}\right).$$

となる. ここで, $e^{\pm\frac{1}{2}\xi^2}$ は $|\xi| \to \infty$ で漸近的に (高々定数のずれを無視して) 上記の無次元化した常微分方程式を満たす. ここでは $|\xi| \to \infty$ での $\psi$ の漸近形として $_{\text{(C)}}$<u>$e^{\pm\frac{1}{2}\xi^2}$ のうち $e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ を考えるのが妥当</u>である. 一般の解を求めるために $\psi = C\phi(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ ($C$: 規格化定数) とおくと, $\phi$ は次を満たす.

$$\text{(Her)} \qquad \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\phi(\xi) - 2\xi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\phi(\xi) + (\epsilon - 1)\phi(\xi) = 0.$$

この微分方程式を級数解法で解くことを考える. 即ち, 解を $\phi(\xi) = \displaystyle\sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$ とすると, 次の式を得る.

$$(*) \qquad a_{n+2} = \frac{2n + 1 - \epsilon}{(n+1)(n+2)}a_n$$

明らかに $(*)$ の右辺の分子が如何なる $n$ に対しても 0 にならなければ $\phi$ は無限級数となる. 従って, $_{\text{(D)}}$<u>ある非負整数 $n$ に対して $2n = \epsilon - 1$ となり $a_k = 0$ $(k > n)$ とならなければならない</u>. 以上より $\psi$ が量子力学的に意味を持つのは

$$\epsilon = 2n + 1, \qquad \text{i.e.,} \qquad E = E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad (n = 0, 1, 2, 3, \cdots),$$

でありエネルギー固有値が離散的な値を取ることが確認された. さらに, $\epsilon - 1 = 2n$ のとき (Her) の解は Hermite 多項式 $H_n(\xi)$ である. 従って, このときの固有関数 $\psi_n$ ($n$ 番目に対応する $\psi$ を $\psi_n$ と書くことにする) は $_{\text{(E)}}$<u>次で与えられる</u>.

$$(**) \qquad \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right),$$

但し, 規格化において Hermite 多項式の直行関係 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) \mathrm{d}\xi = \sqrt{\pi}2^n n!\delta_{nm}$ を用いた.

さて, 調和振動子のエネルギー固有値及び固有関数を微分方程式を通じて解析的に求めたがここでは生成消滅作用素を導入し, ある種代数的に考察を行う. 1 次元調和振動子のハミルトニアンは正準交換関係 $[\hat{x},\hat{p}]=\mathrm{i}\hbar$ を満たす位置作用素 $\hat{x}$ と運動量作用素 $\hat{p}$ をもって $\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$ と書けるのであった. ここで次の作用素を導入する.

$$\hat{a}:=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}+\mathrm{i}\frac{\hat{p}}{m\omega}\right),\qquad \hat{a}^\dagger:=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}-\mathrm{i}\frac{\hat{p}}{m\omega}\right),\qquad \hat{n}:=\hat{a}^\dagger\hat{a}.$$

当然 $\hat{x}$ と $\hat{p}$ は $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ の線形結合で書けるので, $\hat{x}$ と $\hat{p}$ を基本変数として記述されていたこの系の物理量は $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ を用いて記述できることになる. (F)幾つかの交換関係や基本的な性質を以下にまとめる.

$$(***)\qquad [\hat{a},\hat{a}^\dagger]=1,\qquad [\hat{n},\hat{a}]=-\hat{a},\qquad [\hat{n},\hat{a}^\dagger]=\hat{a}^\dagger,\qquad \hat{n}^\dagger=\hat{n}.$$

この系のハミルトニアンを $\hat{n}$ (即ち $\hat{a}$ 及び $\hat{a}^\dagger$) で表すと $\hat{H}=\hbar\omega(\hat{n}+\frac{1}{2})$ となる. 従って $\hat{H}$ の固有値問題を調べる代わりに $\hat{n}$ について考察すればよい. $\hat{n}$ の固有値を $n$, 対応する固有ベクトルを $|n\rangle$ とする (規格化されているものとする). このとき, $(***)$ より直ちに

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

が導かれ適当に規格化することで (G)次の関係式が得られる.

$$(\sharp)\qquad \hat{a}\,|n\rangle=\sqrt{n}\,|n-1\rangle\,,\qquad \hat{a}^\dagger\,|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\,.$$

以上の準備の下, 代数的な操作のみで $\hat{n}$ に対する固有値と固有状態を構成する. まず,

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

より固有値 $n$ は非負である. また, 上述の様に消滅作用素 $\hat{a}$ は $\hat{n}$ の固有値が 1 だけ小さい状態を作ることが出来るので, これらの事から最小固有値に対応する状態 (基底状態) が存在することが分かる. その状態を $|0\rangle$ と表すことにすれば $\hat{a}\,|0\rangle=0$ より $\hat{n}\,|0\rangle=0=0\,|0\rangle$. 即ち最小固有値は 0 に他ならない. 従って, (H)$\hat{n}$ の固有値は非負の整数になる. 以上により

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

となるので調和振動子の固有エネルギーが $E=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$ $(n=0,1,\cdots)$ となることが確認された. 続いてこの固有エネルギーに対応する座標表示の規格化された固有関数 $\psi_n(x)=\langle x|n\rangle$ を考える. (I)一般の固有状態 $|n\rangle$ は基底状態と生成作用素を用いて表すことが出来るので, これを用いると基底状態の固有関数 $\psi_0$ を用いて $\psi_n$ を記述できる. (J)基底状態の固有関数 $\psi_0(x)=\langle x|0\rangle$ は $\hat{a}\,|0\rangle=0$ より求められ, 規格化した $\psi_0(x)$ は $(**)$ において $n=0$ としたものに一致する.

最後に不確定性関係に関する注意を述べる. まず $(***)$ より (K)$\langle m|n\rangle=\delta_{mn}$ が成り立つ. また,

$$\hat{x}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger),\qquad \hat{p}=-\mathrm{i}\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)$$

だから $\hat{x}$, $\hat{p}$, $\hat{x}^2$, $\hat{p}^2$ の行列要素は簡単に計算でき, 次の不確定性関係が導かれる.

$$(\Delta x)_n(\Delta p)_n=\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)\geq\frac{\hbar}{2}.$$

(L)基底状態では不確定性原理で許される最小のものを実現することが分かる.

(1) 下線部 (A) を示せ.

(2) 下線部 (B) を示せ.

(3) 下線部 (C) の様に考えるのは何故か. 20 文字以内で簡潔に述べよ.

(4) 下線部 (D) について説明せよ. (Hint: $\phi$ が無限級数となるとき遠方での振る舞いは?)

(5) 下線部 (E) について, $\psi$ の規格化定数を求め $(**)$ が成り立つことを確認せよ.

(6) 下線部 (F) について $(***)$ 中の $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ を示せ.

(7) 下線部 (G) について, 関係式 $(\sharp)$ を示せ.

(8) 下線部 (H) の様になるのは何故か. 説明せよ.

(9) 下線部 (I) について, $|n\rangle$ を $|0\rangle$ と $\hat{a}^\dagger$ を用いて表せ.

(10) 下線部 (J) について, $\psi_0(x)$ が満たす微分方程式を導け.

(11) 下線部 (K) を示せ.

(12) 下線部 (L) について, 基底状態のときの不確定性関係を導け.

$\boxed{\text{略解}}$

(1) 波動函数 $\Psi$ 及びその複素共役 $\Psi^*$ は次を満たす.

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\Psi,$$
$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^* = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\Psi^*.$$

第一式に $\Psi^*$, 第二式に $\Psi$ を掛けて辺々引くと

$$\Psi^*\frac{\partial}{\partial t}\Psi + \Psi\frac{\partial}{\partial t}\Psi^* = -\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left(\Psi^*\Delta\Psi - \Psi\Delta\Psi^*\right).$$

よって

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = -\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\nabla\cdot\left(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*\right).$$

ここで $\Psi$ が無限遠で 0 となることに注意して上式を全空間で積分すると次を得る.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\mathbb{R}^3}|\Psi(t,x)|^2\mathrm{d}x = 0.$$

故に

$$\int_{\mathbb{R}^3}|\Psi(t,x)|^2\mathrm{d}x = \int_{\mathbb{R}^3}|\Psi(0,x)|^2\mathrm{d}x = 1.$$

(2) 波動関数を $\Psi(t,x) = \varphi(t)\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)\psi_3(x_3)$ とする. これを Schrödinger 方程式に代入して整理すると,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial_t\varphi(t)}{\varphi(t)} = \sum_{j=1}^{3}\frac{-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_{x_j}^2\psi_j(x_j) + V_j(x_j)\psi_j(x_j)}{\psi_j(x_j)}.$$

左辺は $t$ のみ, 右辺は $x_1$, $x_2$, $x_3$ のみの函数なので適当な定数 $E = E_1 + E_2 + E_3$ を用いて

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\varphi(t) = E\varphi(t),$$
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x_j^2} + V_j(x_j)\right)\psi_j(x_j) = E_j\psi_j(x_j) \qquad (j = 1,2,3)$$

と書ける. 時間変数について $\varphi$ は解けて $\varphi(t) = \varphi(0)e^{-\mathrm{i}\frac{E}{\hbar}t}$ となるので, 各空間変数に関しての 1 次元の固有値問題 (定常 Schrödinger 方程式) を考えればよい.

(3) 束縛状態を考えているから. (注: $\psi$ が遠方で減衰することに触れていること.)

(4) いかなる $n \in \mathbb{N}$ に対しても $2n + 1 - \epsilon = 0$ とならないとする. このとき, $n$ が十分大きければ

$$(\star) \qquad \frac{a_{n+2}}{a_n} \simeq \frac{2}{n} \qquad (n \gg 0)$$

である. 従って, $\phi$ の漸近的な振る舞いは上式を満たす級数が支配的になる. ここで,

$$e^{\xi^2} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\xi^2\right)^n$$

であり, この級数の係数が $(\star)$ を満たすことに注意すれば $\phi(\xi)$ の $\xi \to \infty$ における漸近形が $e^{\xi^2}$ となることが分かる. ところが $\psi = C\phi(\xi)e^{-\xi^2/2}$ なので, このとき $\psi$ が遠方で減衰しない. よって, このような $\phi$ は不適切であり少なくともある $n \in \mathbb{N}\cup\{0\}$ で $2n + 1 - \epsilon = 0$ とならなければならない. また, この $n$ が奇数のときは $a_0 = 0$, 偶数のときは $a_1 = 0$ とすればよい.

(5) $\psi_n(x) = Ce^{-\frac{1}{2}\xi}H_n(\xi)$ $(\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)$ であるから,

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 \mathrm{d}x = 1 \\ \iff \quad & |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi)H_n(\xi)\mathrm{d}x = 1 \\ \iff \quad & |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi)H_n(\xi)\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\mathrm{d}\xi = 1 \\ \iff \quad & |C|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{\pi}2^n n! = 1. \end{aligned}$$

よって,

$$C = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$$

となり $(**)$ が導かれる.

(6) $[\hat{x}, \hat{p}] = \mathrm{i}\hbar$, $[\hat{x}, \hat{x}] = [\hat{p}, \hat{p}] = 0$ に注意して,

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

(7) $\hat{n}\hat{a}\left|n\right\rangle = (n-1)\hat{a}\left|n\right\rangle$ より, 規格化定数を $c$ とすると, $\hat{a}\left|n\right\rangle = c\left|n-1\right\rangle$ であり,

$$n = \langle n|\hat{n}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \langle n-1|c^* c|n-1\rangle = |c|^2.$$

よって (定数位相は不定のまま残るので) 符号を正として $c = \sqrt{n}$ を得る. 同様に, $\hat{n}\hat{a}^\dagger\left|n\right\rangle = (n+1)\hat{a}^\dagger\left|n\right\rangle$ より $\hat{a}^\dagger\left|n\right\rangle = c\left|n+1\right\rangle$ として

$$|c|^2 = \langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1|n\rangle = n + 1$$

より, $c = n + 1$ を得る.

(8) 最小固有値が 0 であり, $\hat{a}^\dagger$ は固有値を 1 だけ上げるので非負の整数を固有値に持つことが分かる. また, 正の整数以外の固有値を持つとすると $\hat{a}$ を何度も作用させるといずれ負の固有値を持つ状態が表れ矛盾が生じる.

(9) $\hat{a}^\dagger\left|n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle$ より

$$\left|n\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^n\left|0\right\rangle.$$

(10) $\hat{a}\left|0\right\rangle = 0$ より,

$$\left\langle x \middle| \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p} \middle| 0 \right\rangle = 0,$$

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{\sqrt{\hbar}}{\sqrt{2m\omega}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\langle x|0\rangle = 0,$$

$$\therefore \qquad \left(x + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_0(x) = 0.$$

(11) $|n\rangle$ は規格化されているとしているので $m \neq n$ のとき $\langle m|n\rangle = 0$ を示せばよい．$(***)$ より $\hat{n}$ はエルミートだから

$$n\langle m|n\rangle = \langle m|\hat{n}|n\rangle = \langle m|\hat{n}^\dagger|n\rangle = (\hat{n}\,|m\rangle)^\dagger\,|n\rangle = m\langle m|n\rangle\,.$$

$$\Rightarrow \qquad (m-n)\langle m|n\rangle = 0.$$

従って, $m \neq n$ のとき $\langle n|m\rangle = 0$. 故に $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$.

(12) $\hat{x}$ 及び $\hat{p}$ は $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ を用いて表される．よって,

$$\begin{aligned}\hat{x}\,|n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}+\hat{a}^\dagger\right)|n\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\,|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\right).\end{aligned}$$

従って,

$$\langle m\,|\,\hat{x}\,|\,n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\right).$$

また, ここで

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

に注意すれば

$$\left\langle m\,\middle|\,\hat{x}^2\,\middle|\,n\right\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\left\{(2n+1)\delta_{mn} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2} + \sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2}\right\}.$$

よって,

$$\langle n\,|\,\hat{x}\,|\,n\rangle = 0, \qquad \left\langle n\,\middle|\,\hat{x}^2\,\middle|\,n\right\rangle = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

同様にして $\hat{p}$ についても計算すると次を得る.

$$\langle n\,|\,\hat{p}\,|\,n\rangle = 0, \qquad \left\langle n\,\middle|\,\hat{p}^2\,\middle|\,n\right\rangle = m\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

以上より,

$$\begin{aligned}(\Delta x)_n^2 &= \left\langle n\,\middle|\,\hat{x}^2\,\middle|\,n\right\rangle - \langle n\,|\,\hat{x}\,|\,n\rangle^2 = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right),\\ (\Delta p)_n^2 &= \left\langle n\,\middle|\,\hat{p}^2\,\middle|\,n\right\rangle - \langle n\,|\,\hat{p}\,|\,n\rangle^2 = m\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right).\end{aligned}$$

故に

$$(\Delta x)_n(\Delta p)_n = \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

基底状態, 即ち $n=0$ のとき, $(\Delta x)_0(\Delta p)_0 = \dfrac{\hbar}{2}$ を実現する.