量子力学の演習【解答】

statistical_physics/note/qm 調和振動子 ans.doc

［1］ 調和振動子のシュレーディンガー方程式を考える。

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

① $x\to\infty$ の場合の近似解を求めよう。$x\to\infty$ とすると、次のようになる。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi\left(x\right)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi\left(x\right)\simeq 0$$

$\psi_0\left(x\right)=A\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$ がこの微分方程式の近似解になっていることを確かめよ。（ただし A は定数とする。）

＜解答＞

$\psi_0\left(x\right)$を微分すると

$$\frac{d}{dx}\psi_0=A\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)=-\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_0=A\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2x^2-\frac{m\omega}{\hbar}\right]\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)=\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2x^2-\frac{m\omega}{\hbar}\right]\psi_0$$

$x\to\infty$ として，次のように近似する：

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_0=\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2x^2-\frac{m\omega}{\hbar}\right]\psi_0\simeq\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2x^2\psi_0$$

よって

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_0+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi_0&\simeq-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^2x^2\psi_0+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi_0\\&=-\frac{1}{2}m\omega x^2\psi_0+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi_0\\&=0\end{aligned}$$

したがって題意が満たされている.

② $x=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\xi$、$E=\hbar\omega\varepsilon$ とおいてシュレーディンガー方程式を書き換えよ。

＜解答＞

シュレーディンガー方程式で上記の変数変換を行うと

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2}{d\xi^2}\psi+\frac{1}{2}m\omega^2\frac{\hbar}{m\omega}\xi^2\psi=\hbar\omega\varepsilon\psi$$

両辺を$\hbar\omega$で割って，整理すると次のように簡単な形になる：

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2}{d\xi^2}\psi+\frac{1}{2}\xi^2\psi=\varepsilon\psi$$

③　調和振動子のシュレーディンガー方程式で、$\psi(x)=f(\xi)\exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right)$とおいて、$f(\xi)$についての微分方程式を求めよ。

＜解答＞

2階微分を計算すると，

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\left(fe^{-\frac{1}{2}\xi^2}\right)=\frac{d^2f}{d\xi^2}e^{-\frac{1}{2}\xi^2}-2\xi\frac{df}{d\xi}e^{-\frac{1}{2}\xi^2}+f\left(\xi^2-1\right)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

前問で導いた微分方程式に代入すると

$$-\frac{1}{2}\left[\frac{d^2f}{d\xi^2}e^{-\frac{1}{2}\xi^2}-2\xi\frac{df}{d\xi}e^{-\frac{1}{2}\xi^2}+\left(\xi^2-1\right)fe^{-\frac{1}{2}\xi^2}\right]+\frac{1}{2}\xi^2fe^{-\frac{1}{2}\xi^2}=\varepsilon fe^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

両辺を$e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$でわって，整理すると

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{d^2f}{d\xi^2}-2\xi\frac{df}{d\xi}\right)=\left(\varepsilon-\frac{1}{2}\right)f$$

両辺に-2をかけて，整理すれば次の微分方程式を得る：

$$\frac{d^2f}{d\xi^2}-2\xi\frac{df}{d\xi}+\left(2\varepsilon-1\right)f=0$$

④　前問で求めた微分方程式は、次の Hermite 微分方程式

$$\frac{d^2y}{dx^2}-2x\frac{dy}{dx}+2ny=0$$

に等しい。ここでnは整数で、$y=H_n(x)$が解である。このことを用いて、固有状態のエネルギーと波動関数を求めよ。ただし、波動関数の規格化に際して、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-x^2\right)\left[H_n\left(x\right)\right]^2 = 2^n\sqrt{\pi}n!$$

を用いてよい。

＜解答＞

前問の結果と Hermite 微分方程式より，

$$2\varepsilon - 1 = 2n$$

したがって

$$\varepsilon = n + \frac{1}{2}$$

元々のエネルギー固有値 E で書くと

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

基底状態は $n = 0$ だが，エネルギーが有限である．このエネルギーを**零点エネルギー**と呼ぶ．

前問で導いた微分法方程式の解は，

$$f = H_n\left(\xi\right)$$

と書けるから，波動関数は

$$\psi\left(x\right) = C_n H_n\left(\xi\right)\exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right)$$

とおける．ただし，C_n は規格化定数である．規格化条件より

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \left|\psi\left(x\right)\right|^2 = C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[H_n\left(\xi\right)\right]^2 \exp\left(-\xi^2\right) = 1$$

$x = \sqrt{\dfrac{\hbar}{m\omega}}\xi$ より

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} C_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left[H_n\left(\xi\right)\right]^2 \exp\left(-\xi^2\right) = 1$$

与えられた Hermite 多項式についての積分の公式を用いると

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} C_n^2 \times 2^n \sqrt{\pi} n! = 1$$

したがって

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

以上まとめると, 調和振動子のエネルギー固有値と波動関数は

$$\boxed{\begin{aligned} E_n &= \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \\ \psi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \end{aligned}}$$

ただし$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$を用いた.

[2] 生成・消滅演算子を用いた調和振動子 Hamiltonian の対角化

次の調和振動子の Hamiltonian を考える。

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

ただし、$p = -i\hbar\frac{d}{dx}$である。

① 演算子 A および B について、交換関係を$\left[A,B\right] = AB - BA$と定義するとき、

$$\left[x,p\right] = i\hbar, \qquad \left[x^2,p\right] = 2i\hbar x, \qquad \left[x,p^2\right] = 2i\hbar p$$

がなりたつことを示せ。また、A 、B 、C を演算子とするとき、次式が成り立つことを示せ。

$$\left[A,BC\right] = B\left[A,C\right] + \left[A,B\right]C$$

＜解答＞

$p = -i\hbar\frac{d}{dx}$ より

$$\left[x,p\right] = \left[x,-i\hbar\frac{d}{dx}\right] = -i\hbar x\frac{d}{dx} + i\hbar\frac{d}{dx}x = i\hbar$$

この結果は次のように計算することもできる. 波動関数に作用することを考慮して計算すれば

$$
\left[x,p\right]\psi=\left[x,-i\hbar\frac{d}{dx}\right]\psi=-i\hbar x\frac{d}{dx}\psi+i\hbar\frac{d}{dx}\left(x\psi\right)
$$
$$
=-i\hbar x\frac{d\psi}{dx}+i\hbar\psi+i\hbar x\frac{d\psi}{dx}
$$
$$
=i\hbar\psi
$$

ψ は任意の関数としてよいから, $\left[x,p\right]=i\hbar$ が成り立つ.

次に $\left[A,BC\right]=B\left[A,C\right]+\left[A,B\right]C$ を示そう. 左辺を計算すると

$$
\begin{aligned}
\left[A,BC\right]&=ABC-BCA\\
&=ABC-BAC+BAC-BCA\\
&=\left[A,B\right]C+B\left[A,C\right]
\end{aligned}
$$

これは右辺に等しい. よって示せた.

上記の公式を用いると,

$$
\left[x^2,p\right]=x\left[x,p\right]+\left[x,p\right]x=i\hbar x+i\hbar x=2i\hbar x
$$
$$
\left[x,p^2\right]=\left[x,p\right]p+p\left[x,p\right]=2i\hbar p
$$

② ①の結果を用いて、以下の式が成り立つことを示せ。

$$
\left[x,H\right]=\frac{i\hbar}{m}p,\ \left[p,H\right]=-i\hbar m\omega^2 x
$$

＜解答＞

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

③ $a=Ax+Bp$ とおく。ただし A は正の実数で、B は複素数とする。次式が成り立つとき、A と B の間に $A=-im\omega B$ が成り立つことを示せ。

$$
\left[a,H\right]=\hbar\omega a
$$

＜解答＞

$\left[a,H\right]=\hbar\omega a$ より

$$\left[Ax+Bp,H\right]=\hbar\omega\left(Ax+Bp\right)$$

前問の結果を用いて，

$$\frac{i\hbar}{m}pA-i\hbar m\omega^2 xB=\hbar\omega\left(Ax+Bp\right)$$

両辺を比較して，

$$\frac{i\hbar}{m}A=\hbar\omega B$$
$$-i\hbar m\omega^2 B=\hbar\omega A$$

よって

$$A=-im\omega B$$

④　$a^\dagger = Ax+B^* p$ とおく。次式が成り立つとき、$A=\sqrt{\dfrac{m\omega}{2\hbar}}$ となることを示せ。

$$\left[a,a^\dagger\right]=1$$

＜解答＞

$\left[a,a^\dagger\right]=1$ より

$$\left[Ax+Bp,Ax+B^* p\right]=1$$
$$\left[Ax,Ax+B^* p\right]+\left[Bp,Ax+B^* p\right]=1$$
$$AB^*\left[x,p\right]+BA\left[p,x\right]=1$$
$$i\hbar\left(AB^*-AB\right)=1$$

前問の結果より $B=\dfrac{i}{m\omega}A$. この式を代入して

$$i\hbar\left(\frac{-2i}{m\omega}\right)A^2=1$$
$$A^2=\frac{m\omega}{2\hbar}$$

A は正の実数だから

$$A=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}$$

⑤　③、④より

$$a=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x+i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}p,\qquad a^\dagger=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x-i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}p$$

である。x および p をそれぞれ a と $a^\dagger$ を用いて表せ。また、Hamiltonian が a と $a^\dagger$ を用いて次のように表せることを示せ。

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

＜解答＞

$$a+a^\dagger=\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x$$

$$a-a^\dagger=i\sqrt{\frac{2}{\hbar m\omega}}p$$

より

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

$$p=-i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(a-a^\dagger\right)$$

Hamiltonian を a と $a^\dagger$ を用いて書き換えると

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

さらに $\left[a,a^\dagger\right]=1$ を用いると

$$H=\frac{\hbar\omega}{2}\left(aa^\dagger+a^\dagger a\right)=\frac{\hbar\omega}{2}\left(\left[a,a^\dagger\right]+2a^\dagger a\right)=\hbar\omega\left(a^\dagger a+\frac{1}{2}\right)$$

⑥　$\left[a,H\right]=\hbar\omega a$ が成り立つことを示せ。

＜解答＞
前問の結果を用いて,

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

⑦　エネルギーが E の固有状態を $\left|\psi\right\rangle$ で表すと、

$$H\left|\psi\right\rangle=E\left|\psi\right\rangle$$

である。$a\left|\psi\right\rangle$ がエネルギー $E-\hbar\omega$ の固有状態であることを示せ。また、$a^\dagger\left|\psi\right\rangle$ がエネルギー $E+\hbar\omega$ の固有状態であることを示せ。
＜解答＞
交換関係を用いて次のように計算できる:

$$Ha\left|\psi\right\rangle=\left(\left[H,a\right]+aH\right)\left|\psi\right\rangle=\left(-\hbar\omega a+aE\right)\left|\psi\right\rangle=\left(E-\hbar\omega\right)a\left|\psi\right\rangle$$

よって $a\left|\psi\right\rangle$ はエネルギー $E-\hbar\omega$ の固有状態である. また,

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

を用いると

$$Ha^\dagger\left|\psi\right\rangle=\left(\left[H,a^\dagger\right]+a^\dagger H\right)\left|\psi\right\rangle=\left(\hbar\omega a^\dagger+a^\dagger E\right)\left|\psi\right\rangle=\left(E+\hbar\omega\right)a^\dagger\left|\psi\right\rangle$$

よって $a^\dagger\left|\psi\right\rangle$ はエネルギー $E+\hbar\omega$ の固有状態である.

⑧　⑦の結果より基底状態を $\left|0\right\rangle$ と定義すると、$a\left|0\right\rangle=0$ である。x 表示では、この式は $\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x+i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}p\right)\left\langle x|0\right\rangle=0$ と表せる。基底状態の波動関数は、$\psi_0\left(x\right)=\left\langle x|0\right\rangle$ である。この方程式（微分方程式）の解を求め、$\psi_0\left(x\right)$ が次式で表されることを示せ。

$$\psi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

＜解答＞

基底状態を$|0\rangle$とするとさらにエネルギーの低い状態をつくることができないので$a|0\rangle=0$.

基底状態の波動関数を$\psi_0(x)$と書くと

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x+i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}p\right)\psi_0(x)=0$$

$p=-i\hbar\dfrac{d}{dx}$を代入して整理すると

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x+\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx}\right)\psi_0(x)=0$$

$$\frac{d}{dx}\psi_0(x)=-\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0(x)$$

この微分方程式は次のようにして解ける. まず両辺を$\psi_0(x)$でわって

$$\frac{1}{\psi_0(x)}\frac{d}{dx}\psi_0(x)=-\frac{m\omega}{\hbar}x$$

両辺を積分すると

$$\frac{d}{dx}\log\psi_0(x)=-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2+C'$$

ここでC'は積分定数である. よって

$$\psi_0(x)=C\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

ただし$C=\exp(C')$とおいた. 規格化条件より

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\left[\psi_0(x)\right]^2=C^2\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)=C^2\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}=1$$

よって$C=\left(\dfrac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$となるから

$$\psi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

⑨　励起状態は、$|n\rangle=C_n\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle$と表される。$C_n$は規格化定数である。この規格化定数を求めるために、次式を示せ。

$$\left[a,\left(a^\dagger\right)^n\right]=n\left(a^\dagger\right)^{n-1}$$

＜解答＞

$[A,BC]=B[A,C]+[A,B]C$を用いると

$$\begin{aligned}\left[a,\left(a^\dagger\right)^n\right]&=\left[a,\left(a^\dagger\right)^{n-1}a^\dagger\right]=\left(a^\dagger\right)^{n-1}\left[a,a^\dagger\right]+\left[a,\left(a^\dagger\right)^{n-1}\right]a^\dagger\\&=\left(a^\dagger\right)^{n-1}+\left[a,\left(a^\dagger\right)^{n-1}\right]a^\dagger\end{aligned}$$

よって$f_n=\left[a,\left(a^\dagger\right)^n\right]$とおくと

$$f_n=\left(a^\dagger\right)^{n-1}+f_{n-1}a^\dagger$$

この式を繰り返し用いると

$$\begin{aligned}f_n&=\left(a^\dagger\right)^{n-1}+f_{n-1}a^\dagger\\&=\left(a^\dagger\right)^{n-1}+\left[\left(a^\dagger\right)^{n-2}+f_{n-2}a^\dagger\right]a^\dagger=2\left(a^\dagger\right)^{n-1}+f_{n-2}\left(a^\dagger\right)^2\\&=2\left(a^\dagger\right)^{n-1}+\left[\left(a^\dagger\right)^{n-3}+f_{n-3}a^\dagger\right]\left(a^\dagger\right)^2=3\left(a^\dagger\right)^{n-1}+f_{n-3}\left(a^\dagger\right)^3\\&=\dots\\&=n\left(a^\dagger\right)^{n-1}+f_0\left(a^\dagger\right)^n\end{aligned}$$

$f_0=0$だから

$$f_n=n\left(a^\dagger\right)^{n-1}$$

別解として$\left[a,a^\dagger\right]=1$より$a=\dfrac{\partial}{\partial a^\dagger}$とおくことができて，

$$\left[a,\left(a^\dagger\right)^n\right]=\left[\frac{\partial}{\partial a^\dagger},\left(a^\dagger\right)^n\right]=\frac{\partial}{\partial a^\dagger}\left(a^\dagger\right)^n-\left(a^\dagger\right)^n\frac{\partial}{\partial a^\dagger}=n\left(a^\dagger\right)^{n-1}$$

⑩　⑨の結果を用いて、次式を示せ。および⑨の規格化定数が$C_n=\dfrac{1}{\sqrt{n!}}$となることを示せ。

$$\left\langle 0\middle|a^n\left(a^\dagger\right)^n\middle|0\right\rangle=n!$$

＜解答＞

前問の結果を用いると

$$\begin{aligned}\left\langle 0\middle|a^n\left(a^\dagger\right)^n\middle|0\right\rangle&=\left\langle 0\middle|a^{n-1}\left[a,\left(a^\dagger\right)^n\right]\middle|0\right\rangle=\left\langle 0\middle|a^{n-1}\left[n\left(a^\dagger\right)^{n-1}\right]\middle|0\right\rangle\\&=n\left\langle 0\middle|a^{n-1}\left(a^\dagger\right)^{n-1}\middle|0\right\rangle\end{aligned}$$

よって$A_n=\left\langle 0\middle|a^n\left(a^\dagger\right)^n\middle|0\right\rangle$とおくと$A_n=nA_{n-1}$．したがって，$A_n=n!A_0$．$A_0=1$だから$A_n=n!$. したがって，

$$\left\langle 0\middle|a^n\left(a^\dagger\right)^n\middle|0\right\rangle=n!$$

この結果を用いて，

$$\left\langle n\middle|n\right\rangle=C_n^2\left\langle 0\middle|a^n\left(a^\dagger\right)^n\middle|0\right\rangle=n!C_n^2=1$$

より

$$C_n=\frac{1}{\sqrt{n!}}$$

⑪　第一励起状態$\psi_1\left(x\right)=\left\langle x\middle|C_1a^\dagger\middle|0\right\rangle=C_1\left(\sqrt{\dfrac{m\omega}{2\hbar}}x-i\sqrt{\dfrac{1}{2\hbar m\omega}}p\right)\psi_0\left(x\right)$を求めよ。

＜解答＞

$$\psi_1(x) = C_1\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}p\right)\psi_0(x)$$
$$= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx}\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$
$$= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x\right)\right]\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$
$$= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

[3]　**Hermite 多項式**

[1]の調和振動子の固有状態は、次式で与えられる。

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

この問題では、Hermite 多項式について考察を行う。

① Hermite 多項式の母関数は次式で与えられる。

$$\exp\left(-t^2 + 2tx\right) = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x)\frac{t^n}{n!}$$

t で微分して、$t = 0$ とおくことによって、$H_1(x) = 2x$ および $H_2(x) = 4x^2 - 2$ であることを示せ。

＜解答＞

$\exp\left(-t^2 + 2tx\right) = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x)\frac{t^n}{n!}$ の両辺を t で微分して

$$\left(-2t + 2x\right)\exp\left(-t^2 + 2tx\right) = \sum_{n=1}^{\infty} H_n(x)\frac{t^{n-1}}{(n-1)!}$$

$t = 0$ とおくと

$$2x = H_1(x)$$

母関数を t で2階微分すると

$$\left[-2 + \left(-2t + 2x\right)^2\right]\exp\left(-t^2 + 2tx\right) = \sum_{n=2}^{\infty} H_n(x)\frac{t^{n-2}}{(n-2)!}$$

$t=0$とおくと

$$4x^2-2=H_2\left(x\right)$$

② 母関数をxで微分して、次の式が成り立つことを示せ。

$$\frac{dH_n\left(x\right)}{dx}=2nH_{n-1}\left(x\right)$$

＜解答＞

母関数をxで微分して

$$2t\exp\left(-t^2+2tx\right)=\sum_{n=0}^{\infty}H_n'\left(x\right)\frac{t^n}{n!}$$

左辺に母関数の表式を代入すると

$$2t\sum_{n=0}^{\infty}H_n\left(x\right)\frac{t^n}{n!}=\sum_{n=0}^{\infty}H_n'\left(x\right)\frac{t^n}{n!}$$

両辺のtのベキを比較して

$$H_n'\left(x\right)=2nH_{n-1}\left(x\right)$$

③ 次の漸化式が成り立つことを母関数をtで微分することで示せ。

$$H_{n+1}\left(x\right)=2xH_n\left(x\right)-2nH_{n-1}\left(x\right)$$

＜解答＞

母関数をtで微分した式は

$$\left(-2t+2x\right)\exp\left(-t^2+2tx\right)=\sum_{n=1}^{\infty}H_n\left(x\right)\frac{t^{n-1}}{\left(n-1\right)!}$$

左辺に母関数の表式を代入すると

$$\left(-2t+2x\right)\sum_{n=0}^{\infty}H_n\left(x\right)\frac{t^n}{n!}=\sum_{n=1}^{\infty}H_n\left(x\right)\frac{t^{n-1}}{\left(n-1\right)!}$$

$$-2\sum_{n=0}^{\infty}H_n\left(x\right)\frac{t^{n+1}}{n!}+2x\sum_{n=0}^{\infty}H_n\left(x\right)\frac{t^n}{n!}=\sum_{n=1}^{\infty}H_n\left(x\right)\frac{t^{n-1}}{\left(n-1\right)!}$$

$$-2\sum_{n=1}^{\infty}H_{n-1}\left(x\right)\frac{t^n}{\left(n-1\right)!}+2x\sum_{n=0}^{\infty}H_n\left(x\right)\frac{t^n}{n!}=\sum_{n=0}^{\infty}H_{n+1}\left(x\right)\frac{t^n}{n!}$$

両辺のtのベキを比較して

$$-2H_{n-1}(x)+\frac{2x}{n}H_n(x)=\frac{1}{n}H_{n+1}(x)$$

よって

$$H_{n+1}(x)=2xH_n(x)-2nH_{n-1}(x)$$

④　$a^\dagger=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x-i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}p$ として、②、③の結果を用いて次式が成り立つことを示せ。

$$\frac{1}{\sqrt{n+1}}a^\dagger\psi_n(x)=\psi_{n+1}(x)$$

＜解答＞

$$\begin{aligned}a^\dagger\psi_n(x)&=\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x-i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}p\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)\\&=\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x-\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx}\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)\end{aligned}$$

ここで $\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x=X$ とおくと

$$\begin{aligned}a^\dagger\psi_n(x)&=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(X-\frac{d}{dX}\right)H_n(X)\exp\left(-\frac{1}{2}X^2\right)\\&=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(2XH_n(X)-\frac{dH_n(X)}{dX}\right)\exp\left(-\frac{1}{2}X^2\right)\\&=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(H_{n+1}(X)+2nH_{n-1}(X)-2nH_{n-1}(X)\right)\exp\left(-\frac{1}{2}X^2\right)\\&=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}}\frac{1}{\sqrt{2}}H_{n+1}(X)\exp\left(-\frac{1}{2}X^2\right)\end{aligned}$$

ただし $\frac{dH_n(x)}{dx}=2nH_{n-1}(x)$ と $H_{n+1}(x)=2xH_n(x)-2nH_{n-1}(x)$ より

$$2xH_n(x)=H_{n+1}(x)+2nH_{n-1}(x)$$

であることを用いた. 係数の部分を変形して

$$a^\dagger\psi_n(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}}\frac{1}{\sqrt{2}}H_{n+1}(X)\exp\left(-\frac{1}{2}X^2\right)$$
$$=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\sqrt{2}\sqrt{n+1}\frac{1}{2^{(n+1)/2}\sqrt{(n+1)!}}\frac{1}{\sqrt{2}}H_{n+1}(X)\exp\left(-\frac{1}{2}X^2\right)$$
$$=\sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x)$$

よって

$$\frac{1}{\sqrt{n+1}}a^\dagger\psi_n(x)=\psi_{n+1}(x)$$

[4] Landau 準位の波動関数

2次元 xy 平面に閉じ込められた質量 m の電子を考える。電荷を $e(<0)$ とする。平面に垂直な磁場をかけたとき、Hamiltonian は

$$H=\frac{1}{2m}(p_x+eA_x)^2+\frac{1}{2m}(p_y+eA_y)^2$$

である。ベクトルポテンシャルを、$\mathbf{A}=(A_x,A_y,A_z)=(0,Bx,0)$ とする。

① Schrödinger 方程式を書き下すと、Hamiltonian が y に依存しないことがわかる。波動関数を $\psi(x,y)$ として、y 方向に周期的境界条件 $\psi(x,y+L)=\psi(x,y)$ を仮定し、

$$\psi(x,y)=\frac{1}{\sqrt{L}}\exp(iky)\phi(x)$$

とおく。$\phi(x)$ が満たす Schrödinger 方程式を書け。

＜解答＞

Hamiltonian は

$$H=\frac{1}{2m}p_x^2+\frac{1}{2m}(p_y+eBx)^2=-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2+\frac{1}{2m}(-i\hbar\partial_y+eBx)^2$$

Schrödinger 方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2+\frac{1}{2m}(-i\hbar\partial_y+eBx)^2\right]\psi(x,y)=E\psi(x,y)$$

$\psi(x,y)=\frac{1}{\sqrt{L}}\exp(iky)\phi(x)$ とおくと

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi+\frac{1}{2m}\left(eBx+\hbar k\right)^2\phi=E\phi$$

② ①で求めたSchrödinger方程式が、調和振動子のSchrödinger方程式と同じ形をしていることから、固有状態のエネルギーと波動関数を求めよ。([2]の調和振動子の固有状態の波動関数を用いてよい。)

＜解答＞

$X=x+\dfrac{\hbar k}{eB}$ とおくと

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dX^2}\phi+\frac{1}{2}m\left(\frac{eB}{m}\right)^2X^2\phi=E\phi$$

よって，このSchrödinger方程式は $\omega=\dfrac{eB}{m}$ の調和振動子のSchrödinger方程式である．[3]の調和振動子の固有状態の波動関数より

$$\begin{aligned}\phi_n\left(x\right)&=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}X^2\right)\\&=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{2^{n/2}\sqrt{n!}}H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\left(x+\frac{\hbar k}{eB}\right)\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x+\frac{\hbar k}{eB}\right)^2\right)\end{aligned}$$

これがLandau準位の波動関数である.

エネルギー固有値は，$n=0,1,2,3,...$ として

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

それぞれのエネルギー準位をLandau準位とよぶ.