量子力学2　レポート (2011.11.4) 解答

2011/11/14

1

(i)

$$
\begin{aligned}
\hat{P}_i^2 &= (|i\rangle\langle i|)|i\rangle\langle i| \\
&= |i\rangle(\langle i|i\rangle)\langle i| \\
&= |i\rangle\langle i| \\
&= \hat{P}_i.
\end{aligned}
$$

(ii) $i = j$ ならば自明。$i \neq j$ の場合、

$$
\begin{aligned}
[\hat{P}_i, \hat{P}_j] &= \hat{P}_i\hat{P}_j - \hat{P}_j\hat{P}_i \\
&= (|i\rangle\langle i|)|j\rangle\langle j| - (|j\rangle\langle j|)|i\rangle\langle i| \\
&= |i\rangle(\langle i|j\rangle)\langle j| - |j\rangle(\langle j|i\rangle)\langle i| \\
&= \delta_{ij}|i\rangle\langle j| - \delta_{ji}|j\rangle\langle i| \\
&= 0 \qquad\qquad (\because\ \delta_{ij} = 0).
\end{aligned}
$$

2

(A)

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

より、量子力学的ハミルトニアン $\hat{H}$ は

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

$$
\begin{aligned}
&= \hbar\omega\Big(\frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega}\Big) \\
&= \hbar\omega\Big(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\Big).
\end{aligned}
$$

(B)

(1)

$$
\begin{aligned}
[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \left[\Big(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\Big), \Big(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\Big)\right] \\
&= \frac{m\omega}{2\hbar}[\hat{x}, \hat{x}] + \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}, \frac{-i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right] + \left[\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}\right] + \frac{1}{2m\hbar\omega}[\hat{p}, \hat{p}] \\
&= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\Big(-[\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{p}, \hat{x}]\Big) \\
&\quad (\because\ [\hat{x}, \hat{x}] = 0,\ [\hat{p}, \hat{p}] = 0) \\
&= i\frac{1}{2\hbar} \times (-2)[\hat{x}, \hat{p}] \\
&= i\frac{1}{2\hbar} \times (-2)i\hbar \\
&\quad (\because\ [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar) \\
&= 1.
\end{aligned}
$$

(2) $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ より、

$$
\begin{aligned}
[\hat{N}, \hat{a}] &= [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] \\
&= \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a} \\
&= \hat{a}^\dagger \times 0 + (-1) \times \hat{a} \qquad (\because\ [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1) \\
&= -\hat{a}.
\end{aligned}
$$

または次のように計算してもよい；

$$
\begin{aligned}
[\hat{N}, \hat{a}] &= [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] \\
&= (\hat{a}^\dagger\hat{a})\hat{a} - \hat{a}(\hat{a}^\dagger\hat{a}) \\
&= \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} - (\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)\hat{a} \qquad (\because\ [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1) \\
&= -\hat{a}.
\end{aligned}
$$

(3) $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ より、

$$
\begin{aligned}
[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] &= [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \\
&= \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger]\hat{a} \\
&= \hat{a}^\dagger \times 1 + 0 \times \hat{a} \qquad (\because\ [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1) \\
&= \hat{a}^\dagger.
\end{aligned}
$$

または次のように計算してもよい；

$$
[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger]
$$

$$
\begin{aligned}
&= (\hat{a}^\dagger\hat{a})\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a}) \\
&= \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a}+1) - \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} \qquad (\because\ [\hat{a},\hat{a}^\dagger]=1) \\
&= \hat{a}^\dagger.
\end{aligned}
$$

(C)

演算子 $\hat{N}$ の固有値 n に属する規格化された固有ベクトルを $|n\rangle$ と表す。すなわち

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad \langle l|n\rangle = \delta_{l,n}.$$

(1)

$$
\begin{aligned}
\hat{N}|\psi\rangle &= \hat{N}\hat{a}|n\rangle \\
&= (\hat{a}\hat{N} - \hat{a})|n\rangle \qquad (\because\ [\hat{N},\hat{a}] = -\hat{a}) \\
&= \hat{a}(\hat{N}-1)|n\rangle \\
&= \hat{a}(n-1)|n\rangle \\
&= (n-1)\hat{a}|n\rangle \\
&= (n-1)|\psi\rangle.
\end{aligned}
$$

(2)

(1) の結果から、$\hat{a}|n\rangle = c_n|n-1\rangle$ と表すことができる。このベクトルのノルムを計算すると、

$$||\hat{a}|n\rangle||^2 = ||c_n|n-1\rangle||^2 = c_n^2,$$

$||\hat{a}|n\rangle||^2$ は、

$$
\begin{aligned}
||\hat{a}|n\rangle||^2 &= \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle \\
&= \langle n|\hat{N}|n\rangle \\
&= \langle n|n|n\rangle \\
&= n
\end{aligned}
$$

なので、位相を正の実にとることで $c_n = \sqrt{n}$ とできる。

(3) (1),(2) と全く同様の計算をする；

$$
\begin{aligned}
\hat{N}\hat{a}^\dagger|n\rangle &= (\hat{a}^\dagger\hat{N} + \hat{a}^\dagger)|n\rangle \qquad (\because\ [\hat{N},\hat{a}^\dagger] = +\hat{a}^\dagger) \\
&= \hat{a}^\dagger(\hat{N}+1)|n\rangle \\
&= \hat{a}^\dagger(n+1)|n\rangle \\
&= (n+1)\hat{a}^\dagger|n\rangle
\end{aligned}
$$

より $\hat{a}^\dagger|n\rangle = d_n|n+1\rangle$ と表すことができる。このベクトルのノルムを計算すると、$||\hat{a}^\dagger|n\rangle||^2 = ||d_n|n+1\rangle||^2 = d_n^2$、$||\hat{a}^\dagger|n\rangle||^2$ は、

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

$$\begin{aligned} &= \langle n|(\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1)|n\rangle \qquad (\because\ [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1) \\ &= \langle n|(\hat{N} + 1)|n\rangle \\ &= \langle n|(n+1)|n\rangle \\ &= n + 1. \end{aligned}$$

よって、位相を適当に選ぶことにより $d_n = \sqrt{n+1}$、すなわち、

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

であることが確認できた。

補足：固有ベクトル $|n\rangle$ について

(3) の結果から、規格化された固有ベクトル $|n\rangle$ は、基底状態 $|0\rangle$ を用いて $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$ と書けることを示すことができる；

(3) の結果を用いると、$(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$ $(n \in N)$ は

$$\begin{aligned} (\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle &= (\hat{a}^\dagger)^{n-1}\sqrt{1}\,|1\rangle \\ &= (\hat{a}^\dagger)^{n-2}\sqrt{1\cdot 2}\,|2\rangle \\ &= ... \\ &= \sqrt{n!}\,|n\rangle \end{aligned}$$

なので、

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

である。$n = 0$ のときもこの表式は成立する。ゆえに、演算子 $\hat{N}$ の固有値 n に属する規格化された固有ベクトル $|n\rangle$（$n = 0, 1, 2, ...$）は $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$ と書ける。

(D)

(C) の結果をまとめると、

$$\begin{cases} \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \end{cases}$$

である。$\hat{x}$ を $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ で表すと

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

なので、

(1)

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

(2)

$$\begin{aligned}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)^2 &= \hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2 \\ &= \hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger\hat{a}+1) + \hat{a}^\dagger\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^2 \\ &= \hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1 \\ &= \hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + 2\hat{N} + 1 \qquad (1)\end{aligned}$$

より、

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

ここで、$\hat{a}^2|n\rangle = \mathrm{Const.}\times|n-2\rangle$, $(\hat{a}^\dagger)^2|n\rangle = \mathrm{Const.}\times|n+2\rangle$ より、これらの項は $\langle n|$ との内積をとると 0 になるので、

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{x}^2|n\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|(2\hat{N}+1)|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|(2n+1)|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1).\end{aligned}$$

<u>確認</u>：$\hat{a}^2|n\rangle = \mathrm{Const.}\times|n-2\rangle,\ (\hat{a}^\dagger)^2|n\rangle = \mathrm{Const.}\times|n+2\rangle$

$$\begin{aligned}\hat{a}^2|n\rangle &= \hat{a}(\sqrt{n}|n-1\rangle) \\ &= \sqrt{n}\,\hat{a}|n-1\rangle \\ &= \sqrt{n(n-1)}\,|n-2\rangle,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(\hat{a}^\dagger)^2|n\rangle &= \hat{a}^\dagger(\sqrt{n+1}|n+1\rangle) \\ &= \sqrt{n+1}\,\hat{a}^\dagger|n+1\rangle \\ &= \sqrt{(n+1)(n+2)}\,|n+2\rangle.\end{aligned}$$

(3) ハミルトニアンより、$\hat{p}^2$ は $\hat{x}, \hat{N}$ を用いて次のように書ける；

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2}) \\
\Longrightarrow \hat{p}^2 &= 2m\Big\{\hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2}) - \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2\Big\} \\
&= m\hbar\omega(2\hat{N} + 1) - (m\omega)^2\hat{x}^2.
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{aligned}
\langle n|\hat{p}^2|n\rangle &= \langle n|\Big\{m\hbar\omega(2\hat{N} + 1) - (m\omega)^2\hat{x}^2\Big\}|n\rangle \\
&= m\hbar\omega\langle n|(2\hat{N} + 1)|n\rangle - (m\omega)^2\langle n|\hat{x}^2|n\rangle \\
&= m\hbar\omega(2n + 1) - (m\omega)^2 \times \frac{\hbar}{2m\omega}(2n + 1) \\
&= \frac{1}{2}m\hbar\omega(2n + 1).
\end{aligned}
$$

<u>別解</u> (2) と全く同様の計算をする；

$$
\hat{p} = \frac{1}{2i} \times \Big(\frac{1}{2m\hbar\omega}\Big)^{-1/2}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger),
$$

$$
\begin{aligned}
(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 &= \hat{a}^2 - (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) + (\hat{a}^\dagger)^2 \\
&= \hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 - (2\hat{N} + 1)
\end{aligned}
$$

より、

$$
\begin{aligned}
\langle n|\hat{p}^2|n\rangle &= \langle n| - \frac{1}{2}m\hbar\omega(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2|n\rangle \\
&= -\frac{1}{2}m\hbar\omega\langle n|\Big(\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 - (2\hat{N} + 1)\Big)|n\rangle \\
&= +\frac{1}{2}m\hbar\omega\langle n|(2\hat{N} + 1)|n\rangle \\
&= \frac{1}{2}m\hbar\omega(2n + 1).
\end{aligned}
$$