No.73, pp. 189 − 198, 2023

量子力学における昇降演算子

― 無限に深い井戸型ポテンシャルの粒子を例に ―

水　上　善　博*

アブストラクト邦訳

量子力学の固有方程式を解いて固有値を求める方法として昇降演算子を紹介する。一次元でシンプルな系として、無限に深い井戸型ポテンシャルの粒子を取り上げ、まず、シュレディンガー方程式を解析的に解く方法を説明し、その後、昇降演算子（上昇演算子と下降演算子）を用いて固有方程式を解いて固有値（エネルギー）を導出する方法を説明する。シュレディンガー方程式を解くというスタンダードな方法以外の方法を知ることは量子力学の別の一面を知ることができて意義深い。

Ladder operator in quantum mechanics

An example of a particle in an infinitely deep well potential

Yoshihiro MIZUKAMI

Abstract

We introduce the ladder operators as a method for solving the eigenequations of quantum mechanics to obtain eigenvalues. Taking a particle with an infinitely deep well potential as a one-dimensional and simple system, we first explain how to solve the Schrodinger equation analytically, and then how to derive eigenvalues (energy) by solving eigenequations using ladder operators (raising or lowering operators). It is significant to know another aspect of quantum mechanics other than the standard method of solving the Schrodinger equation.

キーワード：量子力学、はしご演算子、井戸型ポテンシャル、固有方程式

1. はじめに

近未来における量子コンピュータの実用化が見えてきた。量子コンピュータは量子力学の原理に基づいて設計されたコンピュータである。そう遠くない未来に情報リテラシーの中に量子リテラシーが含まれることになるかもしれない。量子コンピュータを動かすためのプログラムの作成には必ずしも量子力学の深い知識が必要なわけではないが、量子コンピュータをより深く研究するためには量子力学の基本的な原理を知っておくことは重要である。

量子力学では、ハミルトニアンに代表される演算子と状態関数（ベクトル）の固有方程式を解いて固有値と固有関数（状態ベクトル）を求める。量子力学の固有方程式は、形式的に

$$H|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle \tag{1.1}$$

---

*　滋賀大学教育学部

と表せる。ここで、H はハミルトニアン、$|n\rangle$ は n 番目の状態の固有関数、ε_n は n 番目の状態の固有値（エネルギーの値）である。

量子力学における固有方程式を解いて固有値を求めるには主に3つの方法がある［1］。1つ目は数値的に固有値を探す方法である。量子力学の固有方程式は非線形な場合が多く、固有値の解が解析的に求まる場合は限られている。近年、コンピュータ（量子コンピュータに比して、古典コンピュータと呼ぶ場合がある）の急速な進歩にともない、高速で数値計算を行うことができるようになった。そこで、解析解を求める苦労を避けて、コンピュータに膨大な計算を託して固有方程式を解くのが普通になってきている。特に、量子化学の分野では威力を発揮している。

2つ目は解析的に固有値を求める方法である。1次元の系などでは解析解が求まる場合があり、量子力学を学ぶ入門者のための練習問題として多くの例が見られる（例えば、文献［2］）。

3つ目は代数的に固有値を出す方法である。この方法は、昇降演算子の方法と呼ばれ、どの場合でも使えるわけではないが、量子力学に現れるいくつかの方程式に適用できる。特に、調和振動子を昇降演算子で解く方法はスタンダードになっていて、ほとんどすべての量子力学の教科書で紹介されている［3］。また、昇降演算子の方法は角運動量の計算でも用いられている。ただし、物体の運動については、調和振動子以外の系では昇降演算子の方法を紹介している教科書はほとんど見られない。そこで、本稿では、量子力学における昇降演算子の方法を簡単な例で紹介する。

本稿では、解析的に解ける量子力学の初歩的な例として、無限に深い井戸型ポテンシャルの中の粒子をとりあげその固有方程式を解析的に解く方法と昇降演算子で解く方法を順番に説明し、2つの方法を比較することによって、昇降演算子の方法の特徴を示す。

2．無限に深い井戸型ポテンシャルの粒子　シュレディンガー方程式の解析解

無限に深い井戸型ポテンシャルの粒子のふるまいについては量子力学に関する数多くの教科書で説明されている。ここではそのうちの1つを引用しておく［2］。無限に深い井戸の例を図1に示す。この中を質量 m の粒子が x 軸方向に一次元的に運動する。縦軸 V は井戸の深さを表し、ポテンシャルという。井戸の底を0とし、$x=0,L$ で立ち上がっている井戸の壁は無限大の高さまで続いているとする。このようなシステムを無限に深い井戸型ポテンシャルといい、その中での粒子の量子力学的なふるまいを考える。

量子力学における粒子の状態は（1.1）で示した固有方程式 $H|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle$ で表される。これを解いて、固有値としてエネルギー ε_n、固有関数として状態関数 $|n\rangle$ が求まる。

ハミルトニアン H を運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの項で表し、状態関数 $|n\rangle$ を波動関数 $\varphi(x)$、エネルギーを E で表してシュレディンガー方程式を書き下す。

$$H\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{2.1}$$

ここで、H は $H = T(x) + V(x)$ で $T(x)$ は運動エネルギー、$V(x)$ はポテンシャルエネルギーであり、粒子の質量を m、x 方向の運動量を p_x とすると（量子力学では運動量は演算子なので $\widehat{p_x}$ のようにハット＾などをつけて古典力学の運動量と区別する場合があるが、本稿では簡単のため演算子にハットなどはつけずに、運動量演算子を p_x と表記する）

$$T = \frac{p_x^2}{2m}$$

$$V = \begin{cases} 0 & (0 < x < L) \\ \infty & (x < 0,\ L < x) \end{cases}$$

量子力学では運動量演算子p_xは$p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$であり、

$$T = \frac{p_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{2.2}$$

粒子は$0 < x < L$の範囲で運動するので、

$V = 0$

となる。

よって、$H = \frac{p_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$となり、シュレディンガー方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{2.3}$$

となる。この方程式の詳しい解き方は例えば［2］を参照していただき、ここでは簡単に説明する。（2.3）から$\varphi(x)$を 2 回微分したものが$\varphi(x)$になることが分かるので、A，B を定数として、

$$\varphi(x) = A\sin kx + B\cos kx \tag{2.4}$$

と書ける。これを（2.3）に代入して整理すると、

$$k^2\varphi(x) = \frac{2mE}{\hbar^2}\varphi(x)$$

となり、E は、

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{2.5}$$

と求まる。

ここで、境界条件$\varphi(0) = \varphi(L) = 0$を用いる。これは、粒子は無限の高さをもつ井戸の外へは出られないので、$x < 0$，$L < x$で粒子を見出す確率は 0 であり、井戸の外と接している$x = 0$，Lにおいても連続性から粒子を見出す確率が 0 でなければいけないことから得られる条件である。

$\varphi(0) = 0$より、$B = 0$

となり、

$\varphi(L) = 0$より、$A\sin kL = 0 \quad \therefore\ kL = n\pi$となる。よって、

$$k = \frac{n\pi}{L} \tag{2.6}$$

$\varphi(x)$を n に依存する$\varphi_n(x)$として、（2.4）に$B = 0$と（2.6）を代入して、

$$\varphi_n(x) = A\sin\frac{n\pi}{L}x \tag{2.7}$$

となる。規格化条件$\int\varphi_n(x)^2 = 1$より、$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$が求まり、無限に深い井戸型ポテンシャルの粒子の波動関数は、

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi}{L}x \tag{2.8}$$

と求まる。一方、エネルギーは（2.5）に（2.6）を代入し、E を n に依存するエネルギーϵ_nにすると

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2 \tag{2.9}$$

となる。

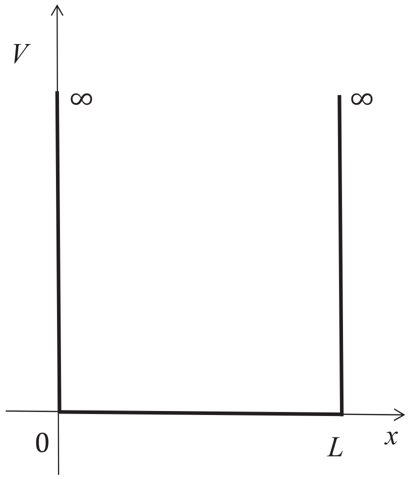

図１　無限に深い井戸型ポテンシャル

３．無限に深い井戸型ポテンシャルの粒子　昇降演算子による方法

文献［4］の説明に従って、昇降演算子の方法を用いて、無限に深い井戸の粒子の固有値問題を解いてみよう。昇降演算子は、上昇演算子M^{+}と下降演算子M^{-}から構成される。

上昇演算子がn番目の状態に作用すると$n+1$番目の状態が得られる。

$$M^{+}|n\rangle = |n+1\rangle \tag{3.1}$$

同様に下降演算子がn番目の状態に作用すると$n-1$番目の状態が得られる。

$$M^{-}|n\rangle = |n-1\rangle \tag{3.2}$$

ここで、２節の結果を利用して無限に深い井戸型ポテンシャルの粒子の上昇演算子と下降演算子を求めてみよう。シュレディンガー方程式を解くと無限に深い井戸型ポテンシャルの粒子のn番目の状態の固有関数は（2.8）より $\varphi_n(x) = |n\rangle = \left(\frac{2}{L}\right)\sin\frac{n\pi x}{L}$ である。

（3.1）のように、上昇演算子M^{+}を$|n\rangle$に作用すると、$|n+1\rangle$が得られるので、M^{+}によって$\left(\frac{2}{L}\right)\sin\frac{n\pi x}{L}$は$\left(\frac{2}{L}\right)\sin\frac{(n+1)\pi x}{L}$になる。sin 関数の加法定理は、

$$\sin(a+b) = \sin a\cos b + \cos a \sin b \tag{3.3}$$

であり、

$a = \frac{n\pi x}{L}, b = \frac{\pi x}{L}$とすると、

$$\sin\frac{(n+1)\pi x}{L} = \sin\frac{n\pi x}{L}\cos\frac{\pi x}{L} + \cos\frac{n\pi x}{L}\sin\frac{\pi x}{L} \tag{3.4}$$

$\cos\frac{n\pi x}{L} = \left(\frac{L}{n\pi}\right)\frac{\partial}{\partial x}\sin\frac{n\pi x}{L}$を用いて整理すると、

$$\sin\frac{(n+1)\pi x}{L} = \cos\frac{\pi x}{L}\sin\frac{n\pi x}{L} + \left(\frac{L}{n\pi}\right)\left(\sin\frac{\pi x}{L}\right)\frac{\partial}{\partial x}\sin\frac{n\pi x}{L} \tag{3.5}$$

両辺に $\frac{2}{L}$ を掛けて、右辺をまとめると、

$$\left(\frac{2}{L}\right)\sin\frac{(n+1)\pi x}{L} = \left\{\cos\frac{\pi x}{L} + \left(\frac{L}{n\pi}\right)\left(\sin\frac{\pi x}{L}\right)\frac{\partial}{\partial x}\right\}\left(\frac{2}{L}\right)\sin\frac{n\pi x}{L} \tag{3.6}$$

$\left(\frac{2}{L}\right)\sin\frac{(n+1)\pi x}{L} = |n+1\rangle$, $\left(\frac{2}{L}\right)\sin\frac{n\pi x}{L} = |n\rangle$ で置き換えて、左辺と右辺を入れ替えて、

$$\left\{\cos\frac{\pi x}{L} + \left(\frac{L}{n\pi}\right)\left(\sin\frac{\pi x}{L}\right)\frac{\partial}{\partial x}\right\}|n\rangle = |n+1\rangle \tag{3.7}$$

$M^+|n\rangle = |n+1\rangle$ と比較して、上昇演算子 M^+ は、

$$M^+ = \cos\frac{\pi x}{L} + \left(\frac{L}{n\pi}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\frac{\partial}{\partial x} \tag{3.8}$$

と求まる。

（3.2）に示す通り、下降演算子が M^- に $|n\rangle$ 作用すると、$|n-1\rangle$ が得られるので、M^- によって $\left(\frac{2}{L}\right)\sin\frac{n\pi x}{L}$ は $\left(\frac{2}{L}\right)\sin\frac{(n-1)\pi x}{L}$ になる。sin 関数の加法定理（3.3）において、$a = \frac{n\pi x}{L}, b = -\frac{\pi x}{L}$ を代入し、

$$\sin\frac{(n-1)\pi x}{L} = \sin\frac{n\pi x}{L}\cos\frac{\pi x}{L} - \cos\frac{n\pi x}{L}\sin\frac{\pi x}{L} \tag{3.9}$$

以下、M^+ と同様の手順で計算し、$M^-|n\rangle = |n-1\rangle$ と比較して、

$$M^- = \cos\frac{\pi x}{L} - \left(\frac{L}{n\pi}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\frac{\partial}{\partial x} \tag{3.10}$$

と求まる。

なお、運動量演算子 $p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ を用いて、M^+ と M^- は、

$$M^+ = \cos\frac{\pi x}{L} - \left(\frac{L}{i\hbar n\pi}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x \tag{3.11}$$

$$M^- = \cos\frac{\pi x}{L} + \left(\frac{L}{i\hbar n\pi}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x \tag{3.12}$$

と表される。

昇降演算子 M^+ を用いて、無限に深い井戸型ポテンシャルの粒子の固有値（エネルギーの値）を求めてみよう。

（1.1）に示す固有方程式 $H|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle$ の左から M^+ を作用すると、

$$M^+H|n\rangle = M^+\varepsilon_n|n\rangle \tag{3.13}$$

$$M^+H|n\rangle = \varepsilon_n M^+|n\rangle \tag{3.14}$$

$M^+|n\rangle = |n+1\rangle$ より、

$$M^+H|n\rangle = \varepsilon_n|n+1\rangle \tag{3.15}$$

ここで、交換関係を用いる。

A と B の交換関係とは、$AB - BA$ のことで、記号では、$[A, B]$ と書く。
例えば、位置 x と運動量 p の交換関係は、
古典力学では、$[x, p] = xp - px = 0$
となるが、量子力学では、いずれも演算子となるので、
古典と量子を区別するために、位置演算子を $\hat{x}$ 運動量演算子を $\hat{p}$ と表記すると、

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar \tag{3.16}$$

となり 0 にはならない。補遺 1 を参照。
今、ハミルトニアン H と上昇演算子 M^+ の交換関係を考える。

$[H, M^+] = HM^+ - M^+H$ より、

$$M^+H = HM^+ - [H, M^+] \tag{3.17}$$

（3.17）を（3.15）に代入して、

$$(HM^+ - [H, M^+])|n\rangle = \varepsilon_n|n+1\rangle \tag{3.18}$$

$$HM^+|n\rangle - [H, M^+]|n\rangle = \varepsilon_n|n+1\rangle \tag{3.19}$$

$$H|n+1\rangle - [H, M^+]|n\rangle = \varepsilon_n|n+1\rangle \tag{3.20}$$

補遺２に示すように、

$$[H, M^+] = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (2n+1)M^+ + 2n\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \cos\frac{\pi x}{L}\right) + \frac{2}{n}\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)H \tag{3.21}$$

これを（3.20）に代入して、計算すると（補遺３参照）、

$$H|n+1\rangle + \frac{\hbar^2}{2m}\left[2n\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 - \frac{4m}{n\hbar^2}\epsilon_n\right]\cos\frac{\pi x}{L}|n\rangle = \epsilon_n|n+1\rangle + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (2n+1)\right)|n+1\rangle \tag{3.22}$$

（文献［4］では左辺の$\frac{\hbar^2}{2m}$が記載されていないので注意）

この式の［　］の中がゼロ、つまり$\left[2n\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 - \frac{4m}{n\hbar^2}\epsilon_n\right] = 0$すなわち、

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2 \tag{3.23}$$

の場合、（3.22）は固有方程式、

$$H|n+1\rangle = \epsilon_n|n+1\rangle + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (2n+1)|n+1\rangle$$

$$H|n+1\rangle = \left(\epsilon_n + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (2n+1)\right)|n+1\rangle \tag{3.24}$$

となる。

（3.24）のϵ_nに（3.23）を代入すると、

$$H|n+1\rangle = \left(\frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2mL^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (2n+1)\right)|n+1\rangle$$

$$H|n+1\rangle = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n^2+2n+1)|n+1\rangle$$

$$H|n+1\rangle = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n+1)^2|n+1\rangle$$

$$H|n+1\rangle = \epsilon_{n+1}|n+1\rangle \tag{3.25}$$

n番目の状態の固有方程式に上昇演算子M^+を作用した（3.13）式は、長い計算の後、$n+1$番目の状態の固有方程式となり、$n+1$番目の固有値（エネルギーの値）を得ることができた。我々が求めた（3.8）式の上昇演算子M^+は正しくその機能を果たしていることが分かった。なお、上昇演算子を用いて固有方程式を導出する際の条件として得られたエネルギーの式（3.23）はシュレディンガー方程式を解いて得られたエネルギーの式（2.9）と一致している。

文献［4］では言及されていないが、n番目の状態の固有方程式に下降演算子M^-を作用した場合について簡単に導出する。

$$M^-H|n\rangle = M^-\varepsilon_n|n\rangle \tag{3.26}$$

からスタートして、（3.14）～（3.19）でM^+をM^-に$|n+1\rangle$を$|n-1\rangle$に置き換えて、結局、

$$H|n-1\rangle - [H, M^-]|n\rangle = \varepsilon_n|n-1\rangle \tag{3.27}$$

となる。

$$[H, M^-] = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (-2n+1)M^+ + 2n\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \cos\frac{\pi x}{L}\right) - \frac{2}{n}\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)H \tag{3.28}$$

を用いて長い計算を行うと、

$$H|n-1\rangle + \frac{\hbar^2}{2m}\left[2n\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 - \frac{4m}{n\hbar^2}\epsilon_n\right]\cos\frac{\pi x}{L}|n\rangle = \epsilon_n|n-1\rangle + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (-2n+1)\right)|n-1\rangle \tag{3.29}$$

となり、M^+の場合と同様にして、

$$H|n-1\rangle = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n-1)^2|n-1\rangle$$

$$H|n-1\rangle = \epsilon_{n-1}|n-1\rangle \tag{3.30}$$

となり、$n-1$番目の状態の固有方程式と固有値を得ることができる。

4. おわりに

量子力学における昇降演算子の方法を無限に深い井戸型ポテンシャルの粒子を例に解説した。量子力学の固有値問題は波動方程式であるシュレディンガー方程式を解く方法（解析的あるいは数値的に）がスタンダードであるが、量子力学の特徴の一つである交換関係を用いて固有値を求める昇降演算子の方法はオルタナティブな方法として重要であり今後の発展が期待できる。昇降演算子は英語では ”Ladder operator” であり訳すと「はしご演算子」である。はしごを昇る（あるいは下りる）と次のエネルギー状態が求まると想像すると量子力学の別の一面が見えて興味深いと思われる。

補遺

1.（3.16）式の導出

運動量演算子$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$と表示し、位置演算子$\hat{x} = x$と表示する。

ある関数$f(x)$に交換関係$[\hat{x},\hat{p}]$を作用すると、

$$[\hat{x},\hat{p}]f(x) = (\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x})f(x) = \hat{x}\hat{p}f(x) - \hat{p}\hat{x}f(x)$$

$$= x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)f(x) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(xf(x)\right) = -i\hbar x\frac{\partial f(x)}{\partial x} + i\hbar\left\{f(x)\frac{\partial x}{\partial x} + x\frac{\partial f(x)}{\partial x}\right\}$$

$$= i\hbar f(x) - i\hbar x\frac{\partial f(x)}{\partial x} + i\hbar x\frac{\partial f(x)}{\partial x} = i\hbar f(x)$$

$$\therefore \quad [\hat{x},\ \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$$

2.（3.21）式の導出

まず、$p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$を用いて、以下の 4 つの交換関係の値を導出する。

$$\left[p_x,\ \cos\frac{\pi x}{L}\ \right],\ \left[p_x,\ \sin\frac{\pi x}{L}\ \right],\ \left[p_x^2,\ \cos\frac{\pi x}{L}\ \right],\ \left[p_x^2,\ \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\right]$$

$$\left[p_x,\ \cos\frac{\pi x}{L}\ \right]f(x) = p_x\left(\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)f(x)\right) - \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x f(x)$$

$$= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)f(x)\right) - \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x}\right)$$

$$= -i\hbar\left\{\left(-\left(\frac{\pi}{L}\right)\sin\frac{\pi x}{L}\right)f(x) + \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)\frac{\partial f(x)}{\partial x}\right\} + i\hbar\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)\frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

$$= i\hbar\left(\frac{\pi}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)f(x)$$

$$\therefore \quad \left[p_x,\ \cos\frac{\pi x}{L}\ \right] = i\hbar\left(\frac{\pi}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

$\left[p_x,\ \sin\frac{\pi x}{L}\ \right]$も同様に計算して、

$\left[p_x,\ \sin\frac{\pi x}{L}\ \right] = -i\hbar\left(\frac{\pi}{L}\right)\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)$

$\left[p_x^2,\ \cos\frac{\pi x}{L}\ \right]$は、$[AB,\ C\ ]$の形をした交換関係である。

公式より、$[AB, C\ ] = A[B,\ C\ ] + [A,\ C]B$

公式に、$A = p_x,\ B = \ p_x,\ C = \cos\frac{\pi x}{L}$を代入して、

$\left[p_x^2,\ \cos\frac{\pi x}{L}\ \right] = p_x\left[p_x,\ \cos\frac{\pi x}{L}\right] + \left[p_x,\ \cos\frac{\pi x}{L}\right]p_x$

$\left[p_x^2,\ \cos\frac{\pi x}{L}\ \right]f(x) = p_x\left[p_x,\ \cos\frac{\pi x}{L}\right]f(x) + \left[p_x,\ \cos\frac{\pi x}{L}\right]p_x f(x)$

$\left[p_x,\ \cos\frac{\pi x}{L}\ \right] = i\hbar\left(\frac{\pi}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$を代入して、$p_x$が演算子であることを考慮して、

$\left[p_x^2,\ \cos\frac{\pi x}{L}\right]f(x) = i\hbar\left(\frac{\pi}{L}\right)p_x\left(\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)f(x)\right) + \ i\hbar\left(\frac{\pi}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x f(x)$

$= i\hbar\left(\frac{\pi}{L}\right)\left(p_x\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)f(x) + \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x f(x)\right) + \ i\hbar\left(\frac{\pi}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x f(x)$

$p_x = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)$を用いて第1項を微分して整理すると、

$\left[p_x^2,\ \cos\frac{\pi x}{L}\right]f(x) = \hbar^2\left(\frac{\pi}{L}\right)^2\cos\frac{\pi x}{L}f(x) + 2\ i\hbar\left(\frac{\pi}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x f(x)$

よって、

$$\left[p_x^2,\ \cos\frac{\pi x}{L}\right] = \hbar^2\left(\frac{\pi}{L}\right)^2\cos\frac{\pi x}{L} + 2\ i\hbar\left(\frac{\pi}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x \qquad \text{(A2.1)}$$

同様に計算して、

$$\left[p_x^2,\ \sin\frac{\pi x}{L}\right] = \hbar^2\left(\frac{\pi}{L}\right)^2\sin\frac{\pi x}{L} - 2\ i\hbar\left(\frac{\pi}{L}\right)\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x \qquad \text{(A2.2)}$$

$H = \frac{p_x^2}{2m},\quad M^+ = \cos\frac{\pi x}{L} - \left(\frac{L}{i\hbar n\pi}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x$

$[H, M^+] = \left[\frac{p_x^2}{2m},\ \cos\frac{\pi x}{L} - \left(\frac{L}{i\hbar n\pi}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x\ \right]$

$= \frac{1}{2m}\left[p_x^2,\ \cos\frac{\pi x}{L}\ \right] - \frac{L}{2mi\hbar n\pi}\left[p_x^2,\ \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x\right]$

第2項は、$[A,\ BC\ ]$の形をした交換関係である。

公式より、$[A,\ BC\ ] = B[A,\ C\ ] + [A,\ B]C$

公式に、$A = p_x^2,\ B = \ \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right),\ C = p_x$を代入して、

$\left[p_x^2,\ \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x\right] = \ \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)[p_x^2,\ p_x\ ] + \left[p_x^2,\ \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\right]p_x$

$[p_x^2,\ p_x\ ] = 0$より、

$\left[p_x^2,\ \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x\right] = \left[p_x^2,\ \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\right]p_x$

よって、

$[H, M^+] = \frac{1}{2m}\left[p_x^2,\ \cos\frac{\pi x}{L}\ \right] - \frac{L}{2mi\hbar n\pi}\left[p_x^2,\ \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\right]p_x$

(A2.1)と(A2.2)を代入して、

$$[H, M^+] = \frac{1}{2m}\left(\hbar^2\left(\frac{\pi}{L}\right)^2\cos\frac{\pi x}{L} + 2\ i\hbar\left(\frac{\pi}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x\right)$$
$$- \frac{L}{2mi\hbar n\pi}\left(\hbar^2\left(\frac{\pi}{L}\right)^2\sin\frac{\pi x}{L} - 2\ i\hbar\left(\frac{\pi}{L}\right)\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x\right)p_x$$

ここで、第1項と第3項の和S_{13}を求めると、

$S_{13}=\frac{1}{2m}\hbar^2\left(\frac{\pi}{L}\right)^2\cos\frac{\pi x}{L}-\frac{L}{2mi\hbar n\pi}\hbar^2\left(\frac{\pi}{L}\right)^2\sin\frac{\pi x}{L}p_x$

$=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2\left(\cos\frac{\pi x}{L}-\left(\frac{L}{i\hbar n\pi}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x\right)$

$M^+=\cos\frac{\pi x}{L}-\left(\frac{L}{i\hbar n\pi}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x$を用いて

$S_{13}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2M^+$

第4項をS_4とすると、

$S_4=\frac{L}{2mi\hbar n\pi}2\,i\hbar\left(\frac{\pi}{L}\right)\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x^2=\frac{2}{n}\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)\frac{p_x^2}{2m}$

$H=\frac{p_x^2}{2m}$を考慮して、

$S_4=\frac{2}{n}\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)H$

第2項をS_2とすると、

$S_2=\frac{i\hbar}{m}\left(\frac{\pi}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x$

ここで、$X=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 2n\left(M^+-\cos\frac{\pi x}{L}\right)$を計算すると、

$X=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 2n\left(\frac{L}{i\hbar n\pi}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x$

$\frac{1}{i}=-i$などを用いて整理すると、

$X=S_2=\frac{i\hbar}{m}\left(\frac{\pi}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)p_x$

よって、

$[H,M^+]=S_{13}+S_4+S_2=S_{13}+X+S_4$

$=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2M^++\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 2n\left(M^+-\cos\frac{\pi x}{L}\right)+\frac{2}{n}\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)H$

$=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2\left((2n+1)M^+-2n\cos\frac{\pi x}{L}\right)+\frac{2}{n}\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)H$

$[H,M^+]=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\left(\frac{\pi}{L}\right)^2(2n+1)M^++2n\left(\frac{\pi}{L}\right)^2\cos\frac{\pi x}{L}\right)+\frac{2}{n}\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)H$

3.（3.22）式の導出

（3.20）式$H|n+1\rangle-[H,M^+]|n\rangle=\varepsilon_n|n+1\rangle$に（3.21）式

$[H,M^+]=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\left(\frac{\pi}{L}\right)^2(2n+1)M^++2n\left(\frac{\pi}{L}\right)^2\cos\frac{\pi x}{L}\right)+\frac{2}{n}\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)H$

を代入する。

$H|n+1\rangle+\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\left(\frac{\pi}{L}\right)^2(2n+1)M^++2n\left(\frac{\pi}{L}\right)^2\cos\frac{\pi x}{L}\right)|n\rangle-\frac{2}{n}\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)H\left|n\right\rangle=\varepsilon_n|n+1\rangle$

$M^+|n\rangle=|n+1\rangle \qquad H|n\rangle=\varepsilon_n|n\rangle$を用いて、

$H|n+1\rangle+\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\left(\frac{\pi}{L}\right)^2(2n+1)|n+1\rangle+2n\left(\frac{\pi}{L}\right)^2\cos\frac{\pi x}{L}|n\rangle\right)-\frac{2}{n}\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)\varepsilon_n\left|n\right\rangle=\varepsilon_n|n+1\rangle$

$H|n+1\rangle+\frac{\hbar^2}{2m}\left[2n\left(\frac{\pi}{L}\right)^2-\frac{4m}{n\hbar^2}\varepsilon_n\right]\cos\frac{\pi x}{L}|n\rangle=\varepsilon_n|n+1\rangle+\frac{\hbar^2}{2m}\left(\left(\frac{\pi}{L}\right)^2(2n+1)\right)|n+1\rangle$

文献

[1] 田邊行人，量子力学における固有値，数学セミナー，29 巻（2 月号），p32-36（1990）
[2] 牟田淳，身につくシュレディンガー方程式，技術評論社（2015）
[3] レオナルド・サスキンド，アート・フリードマン，スタンフォード物理学再入門　量子力学（2015）
[4] David, Carl W., “Ladder Operator Solution to the Particle in a Box Problem”（2006）.
Chemistry Education Materials. 25. https://opencommons.uconn.edu/chem_educ/25