No.

Date

4-3 生成・消滅演算子

[調和振動子に有効な手法]

- 生成 a^+, 消滅 a 演算子

$$\begin{cases} a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,\hat{p} & (\text{生成}) \\ a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\,\hat{p} & (\text{消滅}) \end{cases}$$

を導入する

ここで $\boxed{[x, \hat{p}] = i\hbar}$ が成立する

- この時：

$$[a, a^+] \equiv aa^+ - a^+a$$

$$= \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\,\hat{p},\ \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\,\hat{p}\right]$$

$$= \frac{(-i)}{2\hbar}[x, \hat{p}] + \frac{i}{2\hbar}[\hat{p}, x] = 1$$

$$\therefore \quad \boxed{[a, a^+] = 1}$$ が成立する

この時

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

$$= \frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \frac{\hat{p}^2}{2\hbar m\omega} - \frac{1}{2}$$

よって $\underline{\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 = \hbar\omega\left(a^+a + \frac{1}{2}\right)}$

【代数的手法】

- $[a, a^{+}] = 1$ を使い、調和振動子のハミルトニアンの固有値，固有関数を求める

$\Updownarrow$

解析的で計算は簡単

[次のステップで求める]

1. $\hat{N} \equiv a^{+}a$ を定義する。

数演算子という

このとき

$$\boxed{\begin{aligned}[\hat{N}, a] &= -a \\ [\hat{N}, a^{+}] &= a^{+}\end{aligned}}$$

が成立つ。

計算は簡単。但し

$$\boxed{[AB, C] = [A, C]B + A[B, C]}$$

を用いるとよい。

この式自体はバラせばすぐわかる。覚えた方がよい！

2. $\hat{N}$ の固有関数を ϕ_n、固有値を n とする

$$\boxed{\hat{N}\phi_n = n\phi_n}$$

このとき $\hat{N}a - a\hat{N} = -a$ より

$$(\hat{N}a - a\hat{N})\phi_n = -a\phi_n$$

ところが $\hat{N}\phi_n = n\phi_n$ を使うと

$$\boxed{\hat{N}\,a\phi_n = (n-1)\,a\phi_n}$$ が示される。

この式より $a\phi_n$ は $\hat{N}$ の固有関数である。固有値は $(n-1)$

⇓

$$\hat{N}\phi_{n-1} = (n-1)\phi_{n-1}$$ と

$$\hat{N}(a\phi_n) = (n-1)(a\phi_n)$$ とを比較して

$$\boxed{a\phi_n \propto \phi_{n-1}}$$ がわかる。

同様にして

$$\hat{N}a^{+} - a^{+}\hat{N} = a^{+}$$ より

$$\boxed{\hat{N}\,\underline{a^{+}\phi_n} = (n+1)\,\underline{a^{+}\phi_n}}$$ が示される。

↓ これより

$$\boxed{a^{+}\phi_n \propto \phi_{n+1}}$$

まとめると

$$\begin{cases} a\phi_n = k_-\phi_{n-1} \\ a^{+}\phi_n = k_+\phi_{n+1} \end{cases}$$

k_-, k_+ は比例定数

a は 量子数 n を 1 減らす演算子
a^{+} は 量子数 n を 1 増やす演算子

である。

3. $\hat{N}$ の固有値 n への制限

$\hat{N}\phi_n = n\phi_n$ この『n が正かゼロの整数』を示す.

$\langle \phi_n | \phi_n \rangle = 1$ より

$$n = \langle \phi_n | \hat{N} | \phi_n \rangle = \langle \phi_n | a^{+} a | \phi_n \rangle$$

$$= \langle a\phi_n | a\phi_n \rangle = |a\phi_n|^2 \geqq 0$$

よって n の最小値はゼロ

$$\boxed{n \geqq 0}$$

- $n=0$ の固有関数 ϕ_0 :

$$\boxed{\hat{N}\phi_0 = 0}$$ ($n=0$ より)

この式の意味: $\boxed{a\phi_0 = 0}$ に対応する.

a は量子数 n を1減らす.
しかし ϕ_0 の n は $n=0$ だから
これ以上減らせない. ($n \geqq 0$ より)
よって $\underline{a\phi_0 = 0}$ となる

- $n=1$ の場合：

$$\hat{N}\, a^{+}\phi_n = (n+1)\, a^{+}\phi_n$$ の式で

$n=0$ とすると

$$\boxed{\hat{N}\, a^{+}\phi_0 = a^{+}\phi_0}$$

$a^{+}\phi_0$ の固有値は $\boxed{n=1}$ である.

$$a^{+}\phi_0 = k_{+}\phi_1$$

従って，これより

$(a^{+})^{n}\phi_0$ の固有値は n（整数）

となる.

$$\boxed{n = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots \infty}$$

4. ハミルトニアン($\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$) を a, a^+ で表わす.

$$\begin{cases} a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\,\hat{p} \\ a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\,\hat{p} \end{cases}$$

よって $\boxed{a^+ a = \frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \frac{1}{2\hbar m\omega}\hat{p}^2 - \frac{1}{2}}$ となる.

これより

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

$\therefore$ $\boxed{\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right), \quad \hat{N} = a^+a}$ である.

$$\hat{H}\phi_n = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)\phi_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\phi_n$$
$$= E_n\phi_n \qquad \text{だから}$$

$$\underline{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \cdots}$$

と求められる.

5. 波動関数

(a) 基底状態 : ϕ_0

$\boxed{a\phi_0 = 0}$ であるから

(但し, $a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hat{p}$ である)

よって

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\,\hat{p}\right)\phi_0 = 0$$

ここで $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ を代入すると

$$\boxed{\left(m\omega x + \hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\phi_0(x) = 0}$$

この微分方程式は直ぐに解けて

$$\phi_0(x) = A\,e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} = A\,e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

$$\left(\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)$$

規格化 $\int_{-\infty}^{\infty}|\phi_0(x)|^2 dx = 1$ より

$$\boxed{\phi_0(x) = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}}$$

となり, 前に求めたものと一致する

(b) 励起状態 : ϕ_n

$$\boxed{\phi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n \phi_0}$$

である.

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

これより, ϕ_n が具体的に求められる.

(注: $\phi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n \phi_0$ の証明

$$\hat{N}\phi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^+ a (a^+)^n \phi_0$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left\{ [a^+ a, (a^+)^n] + (a^+)^n a^+ a \right\}\phi_0$$

$a\phi_0 = 0$ より

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}}[a^+ a, (a^+)^n]\phi_0$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}} a^+ [a, (a^+)^n]\phi_0$$

ところが $\underline{[a, (a^+)^n] = n(a^+)^{n-1}}$ より

$$\underline{\hat{N}\phi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} n (a^+)^n \phi_0 = n\phi_n}$$

よって示された.

No.

Date

波動関数 $\phi_n(x)$:

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\, x - \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} \right)^n \phi_0(x)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{-1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \right)^n \left(\frac{\partial}{\partial x} - m\omega x \right)^n \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

これを具体的に求めると

$$\begin{cases} \phi_n(x) = N_n H_n(\alpha x)\, e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \\ N_n = \left(\dfrac{\alpha}{\sqrt{\pi}\; 2^n n!} \right)^{\frac{1}{2}} \\ H_n(\xi) = (-)^n e^{\xi^2} \dfrac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \end{cases}$$

と一致することが示される

[ϕ_n の直交関係]

・ $\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm}$ を示す.

$$\phi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n \phi_0$$

(但し, $\langle \phi_0 | \phi_0 \rangle = 1$ とする)

(証) (i) $n \neq m$ のとき

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}\sqrt{m!}} \langle \phi_0 | a^n (a^+)^m | \phi_0 \rangle$$

$n \neq m$ なので 最後に必ず
a か a^+ が残る.

このとき $\langle \phi_0 | a | \phi_0 \rangle = 0$
$\langle \phi_0 | a^+ | \phi_0 \rangle = 0$

よって
$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = 0 \quad (n \neq m)$$

(ii) $n = m$ のとき

$$\langle \phi_n | \phi_n \rangle = \frac{1}{n!} \langle \phi_0 | a^n (a^+)^n | \phi_0 \rangle$$

$$= \frac{1}{n!} \langle \phi_0 | a^{n-1} \{ [a, (a^+)^n] + \underbrace{(a^+)^n a}_{=0} \} | \phi_0 \rangle$$

$$= \frac{1}{n!} \cdot n \langle \phi_0 | a^{n-1} \cdot (a^+)^{n-1} | \phi_0 \rangle$$

$$= \frac{1}{n!} n \cdot (n-1) \cdots \cdot 1 \langle \phi_0 | \phi_0 \rangle = 1$$

//

● $[a, (a^+)^n] = n(a^+)^{n-1}$ の証明

帰納法で行う.

$n=1$ のとき $[a, a^+] = 1$ より明らか

$n=k$ で成立すると仮定する

$$[a, (a^+)^k] = k(a^+)^{k-1}$$

$n=k+1$ では

$$[a, (a^+)^{k+1}] = (k+1)(a^+)^k$$

が成立することを示したい.

ここで $[a, (a^+)^{k+1}] = [a, (a^+)^k a^+]$

$= [a, (a^+)^k] a^+ + (a^+)^k [a, a^+]$

$= k(a^+)^{k-1} \cdot a^+ + (a^+)^k$

$= (k+1)(a^+)^k$ で成立している.

よって上式が示された.