§10 一次元ポテンシャル問題 (II) — 調和振動子

[1] 演算子 $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ が交換関係 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] \equiv \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1$ を満たすものとする。

(a) $[\hat{a}, (\hat{a}^\dagger)^n] = n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}$ を証明せよ。

(b) $f(x)$ を $x = 0$ で解析的な (Taylor 展開可能な) 関数とする。このとき、$[\hat{a}, f(\hat{a}^\dagger)] = f'(\hat{a}^\dagger)$ を証明せよ。

(c) 一般に、二つの演算子 $\hat{a}$ と $\hat{b}$ の交換関係 $[\hat{a}, \hat{b}]$ が定数の場合を考える。このとき、$[\hat{a}, f(\hat{b})] = [\hat{a}, \hat{b}]f'(\hat{b})$ が成立することを証明せよ。

[2] 一次元調和振動子の Hamiltonian は次式で与えられる。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{\hat{p}^2 + (m\omega x)^2}{2m}\,, \tag{1a}$$

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}\,. \tag{1b}$$

(a) $\hat{p}$ と x の間に交換関係 $[x, \hat{p}] = i\hbar$ が成り立つことを証明せよ。

(b) p が単なる数の場合、$p^2 + (m\omega x)^2 = (\mp ip + m\omega x)(\pm ip + m\omega x)$ と因数分解できる。しかし、$\hat{p}$ が (1b) 式で与えられる演算子の場合には、

$$\hat{p}^2 + (m\omega x)^2 = (\mp i\hat{p} + m\omega x)(\pm i\hat{p} + m\omega x) + C$$

と、おつりの定数項 C が出る。C が正の数となるように複号の一方を選び、C の値を求めよ。

(c) (b) の “因数分解” に現れる因子 $\mp i\hat{p} + m\omega x$ を用いて、交換関係 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ を満たす演算子 $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ を構成せよ。

(d) (1a) 式が (c) で求めた演算子 $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ を用いて以下のように書けることを示せ。

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

(e) $\phi(x)$ と $\psi(x)$ を $x \to \infty$ で十分速く 0 に近づく (例えば指数関数的に) 関数とし、その内積を

$$\langle\phi|\psi\rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x)\psi(x)dx, \tag{2}$$

で定義する。この内積の定義を用いて、$\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ が Hermite 共役演算子であること、すなわち、$\langle\phi|\hat{a}\psi\rangle = \langle\hat{a}^\dagger\phi|\psi\rangle$ を示せ。

(f) (e) で述べた性質を持つ任意の波動関数 $\psi(x)$ について、$\hat{a}^\dagger\hat{a}$ の期待値が負の値を取りえないこと、すなわち、$\langle\psi|\hat{a}^\dagger\hat{a}\psi\rangle \geq 0$ を示せ。

(g) 基底状態の波動関数 ψ_0 を決める式が、$\hat{a}\psi_0(x) = 0$ で与えられることを示せ。

(h) $\hat{H}$ のある固有値 E_n に対する固有関数を ψ_n とするとき、$\hat{a}^\dagger\psi_n$ も $\hat{H}$ の固有関数となることを示し、その固有値を求めよ。

(i) (g) と (h) の結果を用いて、$\hat{H}$ の固有値 E_n と規格化された固有関数 ψ_n が次のように書けることを示せ。

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_{\mathrm{c}}\,, \qquad \psi_n(x) = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\psi_0(x) \quad (n=0,1,2,\cdots)\,.$$

ここで ψ_0 は、$\langle\psi_0|\psi_0\rangle = 1$ と規格化された基底状態の波動関数である。

[3] 演算子 $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ を次式で定義する。

$$\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{d\xi}+\xi\right), \qquad \hat{a}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{d}{d\xi}+\xi\right).$$

(a) 交換関係 $[\hat{a},\hat{a}^\dagger] = 1$ を示せ。

(b) $\hat{a}\psi_0(\xi) = 0$ を満たす関数 $\psi_0(\xi)$ を求め、

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_0(\xi)|^2 dx = 1, \qquad x \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,\xi$$

となるように規格化せよ。

(c) 演算子 $\hat{a}^\dagger$ が次のように書けることを示せ。

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\,\mathrm{e}^{\xi^2/2}\left(-\frac{d}{d\xi}\right)\mathrm{e}^{-\xi^2/2}.$$

(d) 関数 $\psi_n(\xi)$ を次式で定義する。

$$\psi_n(\xi) \equiv \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\psi_0(\xi).$$

$\psi_n(\xi)$ の具体形を、Hermite 多項式

$$H_n(\xi) \equiv (-1)^n\,\mathrm{e}^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}\mathrm{e}^{-\xi^2}$$

を用いて表せ。

(e) $\hat{a}^\dagger\psi_n(\xi) = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(\xi)$ および $\hat{a}\psi_n(\xi) = \sqrt{n}\psi_{n-1}(\xi)$ を証明せよ。

[4] Hermite 多項式 H_n は次式で定義される。

$$H_n(\xi) \equiv (-1)^n\,\mathrm{e}^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}\mathrm{e}^{-\xi^2}, \qquad n=0,1,2,\cdots.$$

(a) 次の恒等式を証明せよ。

$$e^{-t^2+2\xi t} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(\xi)}{n!}t^n. \tag{3}$$

（左辺を Hermite 多項式の母関数と呼ぶ。また、このような展開は、母関数展開と名づけられている。）

(b) (3) 式より、次の漸化式を導け。

$$H_{n+1}(\xi) - 2\xi H_n(\xi) + 2nH_{n-1}(\xi) = 0 \tag{4a}$$

$$\frac{dH_n(\xi)}{d\xi} = 2nH_{n-1}(\xi) \tag{4b}$$

(c) (4a) 式と (4b) 式を用いて、H_n が次の微分方程式を満たすことを示せ。

$$\frac{d^2H_n}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0.$$

（この微分方程式を Hermite の微分方程式と呼ぶ。）

(d) $n \leq 4$ に対して、$H_n(\xi)$ を具体的に書き下せ。

[5] 演算子 $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ を次式で定義する。

$$\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right), \qquad \hat{a}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{d}{d\xi} + \xi\right), \qquad \xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x.$$

また、

$$\hat{a}\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}, \qquad \hat{a}^\dagger\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}$$

を満たす関数 ψ_n $(n = 0, 1, 2, \cdots)$ を導入する。ψ_n は (2) 式で定義された内積を用いて $\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1$ と規格化されているものとする。

(a) $(\hat{a}^\dagger\hat{a})^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ を用いて、$n' \neq n$ のとき $\langle\psi_{n'}|\psi_n\rangle = 0$ を証明せよ。

(b) 状態 $\psi_n(x)$ における x と $\hat{p} \equiv -i\hbar d/dx$ の期待値、すなわち、$\langle x\rangle \equiv \langle\psi_n|x|\psi_n\rangle$ および $\langle\hat{p}\rangle \equiv \langle\psi_n|\hat{p}|\psi_n\rangle$ を求めよ。

(c) 状態 $\psi_n(x)$ における $(\Delta x)^2 \equiv (x-\langle x\rangle)^2$ と $(\Delta\hat{p})^2 \equiv (\hat{p}-\langle\hat{p}\rangle)^2$ の期待値 $\langle(\Delta x)^2\rangle$ および $\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle$ を求めよ。また、不等式 $\sqrt{\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle} \geq \frac{\hbar}{2}$ が成立していることを確かめよ。

[6] 一次元調和振動子の Hamiltonian は次式で与えられる。

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2.$$

以下、この Hamiltonian に対する固有関数を、二階微分方程式を直接解くことにより求める。

(a) 無次元の長さとエネルギーを、それぞれ $\xi \equiv x\sqrt{m\omega/\hbar}$ および $\varepsilon \equiv E/\hbar\omega$ で定義する。これらを用いると、Schrödinger 方程式が以下のように書けることを示せ。

$$\left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\right)\psi = 2\varepsilon\psi. \tag{5}$$

(b) $|\xi| \to \infty$ での解の振る舞いが、$\psi \sim \mathrm{e}^{\pm\xi^2/2}$ となることを示せ。

(c) $|\xi| \to \infty$ での波動関数の正則性を考慮して、(5) 式の解を $\psi = \mathrm{e}^{-\xi^2/2} y$ と置く。関数 y が次の方程式を満たすことを示せ。

$$\frac{d^2y}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dy}{d\xi} + 2ny = 0, \qquad n \equiv \varepsilon - \frac{1}{2}. \tag{6}$$

(d) $\xi = 0$ は方程式 (6) の正則点である。従って、解を

$$y(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \xi^k$$

と Taylor 展開して方程式を解くことができる。c_k についての漸化式を書き下せ。

(e) 方程式が多項式解を持つことを要請すると、n が非負整数となることを示せ。

(f) n が非負整数の場合について、解が次式で与えられることを示せ。

$$y(\xi) = H_n(\xi) \equiv \sum_{k=0}^{[n/2]} \frac{(-1)^k n!}{(n-2k)!k!} (2\xi)^{n-2k}.$$

ただし、記号 $[n/2]$ は、$n/2$ を超えない最大の整数を表す。

(g) n が非負整数以外の場合には、(6) 式の解は物理的な波動関数として不適である。この理由を簡単に説明せよ。