統計力学演習問題 (12)

[1] 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 $\varphi(x)$ 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

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

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

(f) (e) で述べた性質を持つ任意の波動関数 $\varphi(x)$ 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、$\langle\varphi|\hat{a}^\dagger\hat{a}\varphi\rangle \geq 0$ を示せ。

(g) 基底状態の波動関数 φ_0 を決める式が、$\hat{a}\varphi_0(x) = 0$ 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 φ_n とするとき、$\hat{a}^\dagger\varphi_n$ 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 φ_n が次のように書けることを示せ。

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_{\mathrm{c}}\,, \qquad \varphi_n(x) = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\varphi_0(x) \quad (n = 0, 1, 2, \cdots)\,.$$

ここで φ_0 は、$\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1$ と規格化された基底状態の波動関数である。