統計力学演習問題解答 (12)

[1]

(a) 1 変数関数 $f(x)$ に $[x,\hat{p}]$ を作用させると

$$
\begin{aligned}
[x,\hat{p}]f(x) &= (x\hat{p}-\hat{p}x)f(x) \\
&= -i\hbar x\frac{df(x)}{dx} + i\hbar\frac{d(xf(x))}{dx} \\
&= i\hbar f(x)
\end{aligned}
$$

したがって, $[x,\hat{p}] = i\hbar$ となる.（証終）

(b) (a) の交換関係を用いて計算する.

$$
\begin{aligned}
&(\mp i\hat{p} + m\omega x)(\pm i\hat{p} + m\omega x) \\
&= \hat{p}^2 + (m\omega x)^2 \pm im\omega[x,\hat{p}] \\
&= \hat{p}^2 + (m\omega x)^2 \mp m\hbar\omega
\end{aligned}
$$

複合の上の符号を選択すると,

$$
\hat{p}^2 + (m\omega x)^2 = (-i\hat{p} + m\omega x)(i\hat{p} + m\omega x) + m\hbar\omega
$$

とできる. このとき, $C = m\hbar\omega$（答）となる.

(c) 明らかに $[x,x] = [\hat{p},\hat{p}] = 0$ であるから,

$$
\begin{aligned}
&[i\hat{p} + m\omega x, -i\hat{p} + m\omega x] \\
&= [\hat{p},\hat{p}] - im\omega[x,\hat{p}] + im\omega[\hat{p},x] + (m\omega)^2[x,x] \\
&= -2im\omega[x,\hat{p}] \\
&= 2m\hbar\omega
\end{aligned}
$$

となる. したがって, この値の平方根で除すれば $[\hat{a},\hat{a}^\dagger] = 1$ なる $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ が得られる.

$$
\hat{a} \equiv \frac{i\hat{p} + m\omega x}{\sqrt{2m\hbar\omega}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p} \qquad \text{(答)}
$$

$$
\hat{a}^\dagger \equiv \frac{-i\hat{p} + m\omega x}{\sqrt{2m\hbar\omega}} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p} \qquad \text{(答)}
$$

(d) (b) の結果

$$
\hat{p}^2 + (m\omega x)^2 = (-i\hat{p} + m\omega x)(i\hat{p} + m\omega x) + m\hbar\omega
$$

の両辺を $2m$ で除すれば,

$$
\begin{aligned}
\hat{H} = \frac{1}{2m}\left[\hat{p}^2 + (m\omega x)^2\right] &= \frac{(-i\hat{p} + m\omega x)(i\hat{p} + m\omega x)}{2m} + \frac{1}{2}\hbar\omega \\
&= \hbar\omega\left[\frac{(-i\hat{p} + m\omega x)}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\frac{(i\hat{p} + m\omega x)}{\sqrt{2m\hbar\omega}} + \frac{1}{2}\right] \\
&= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \qquad \text{(証終)}
\end{aligned}
$$

(e) 簡略化のため $\hat{a} \equiv \alpha x + i\beta\hat{p}$（$\hat{a}^\dagger \equiv \alpha x - i\beta\hat{p}$）とする.

$$\begin{aligned}
\langle\phi|\hat{a}\varphi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x)(\alpha x + i\beta\hat{p})\varphi(x)dx \\
&= \alpha\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x)x\varphi(x)dx + \beta\hbar\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x)\left(\frac{d}{dx}\varphi(x)\right)dx \\
&= \alpha\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x)x\varphi(x)dx + \beta\hbar\Big[\phi^*(x)\varphi(x)\Big]_{-\infty}^{\infty} - \beta\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{d}{dx}\phi^*(x)\right)\varphi(x)dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\left\{\left(\alpha x - \beta\frac{d}{dx}\right)\phi(x)\right\}^*\varphi(x)dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\{(\alpha x - i\beta\hat{p})\phi(x)\}^*\varphi(x)dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\{\hat{a}^\dagger\phi(x)\}^*\varphi(x)dx \\
&= \langle\hat{a}^\dagger\phi|\varphi\rangle
\end{aligned}$$

(証終)

(f) (e) の性質を用いて

$$\begin{aligned}
\langle\varphi|\hat{a}^\dagger\hat{a}\varphi\rangle &= \langle\varphi|\hat{a}^\dagger(\hat{a}\varphi)\rangle \\
&= \langle(\hat{a}^\dagger)^\dagger\varphi|\hat{a}\varphi\rangle \\
&= \langle\hat{a}\varphi|\hat{a}\varphi\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx|\hat{a}\varphi(x)|^2 \geq 0
\end{aligned}$$

(証終)

(g) Hamiltonian の表式と (f) の結果から, 最低エネルギー状態は $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ の期待値が 0 である状態で実現される. つまり, 基底状態を $\varphi_0(x)$ とすると

$$\langle\varphi_0|\hat{a}^\dagger\hat{a}\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx|\hat{a}\varphi_0(x)|^2 = 0$$

となり, これを満たすのは $\hat{a}\varphi_0(x) = 0$ のときのみである.（証終）

(h) 与えられた仮定は $\hat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n$ である.

$$\begin{aligned}
\hat{H}(\hat{a}^\dagger\varphi_n) &= \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega(\hat{a}^\dagger\varphi_n) \\
&= \hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}\,\hat{a}^\dagger\varphi_n + \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{a}^\dagger\varphi_n
\end{aligned}$$

ここで,

$$\begin{aligned}
\hat{a}^\dagger\hat{a}\,\hat{a}^\dagger &= \hat{a}^\dagger\left([\hat{a},\hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right) \\
&= \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}
\end{aligned}$$

したがって,

$$\begin{aligned}
\hat{H}(\hat{a}^\dagger\varphi_n) &= \hbar\omega(\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a})\varphi_n + \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{a}^\dagger\varphi_n \\
&= \hbar\omega\hat{a}^\dagger\varphi_n + \hat{a}^\dagger\left\{\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\right\}\varphi_n \\
&= \hbar\omega\hat{a}^\dagger\varphi_n + \hat{a}^\dagger E_n\varphi_n \\
&= (E_n + \hbar\omega)(\hat{a}^\dagger\varphi_n)
\end{aligned}$$

以上より, $\hat{a}^\dagger\varphi_n$ は $\hat{H}$ の固有関数である.（証終）また, その固有値は $E_n + \hbar\omega$ (答) となる.

(i) $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ の期待値を n とすると, $\hat{H}$ の期待値 E_n は明らかに

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

このとき, (f) の結果より $n \geq 0$ である.
(h) の結果より, $\hat{a}^\dagger\varphi_{n-1}$ の $\hat{H}$ の固有値は $E_{n-1} + \hbar\omega = E_n$ であるから, φ_n は $\hat{a}^\dagger\varphi_{n-1}$ の定数倍で表すことができる。したがって, $\varphi_n = c_n\hat{a}^\dagger\varphi_{n-1}$ とすると,

$$\begin{aligned}\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle &= |c_n|^2\langle\hat{a}^\dagger\varphi_{n-1}|\,\hat{a}^\dagger\varphi_{n-1}\rangle \\ &= |c_n|^2\langle\varphi_{n-1}|\hat{a}\,\hat{a}^\dagger\varphi_{n-1}\rangle\end{aligned}$$

ここで,

$$\hat{a}\,\hat{a}^\dagger = [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1 + \hat{a}^\dagger\hat{a}$$

を用いると,

$$\begin{aligned}\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle &= |c_n|^2\langle\varphi_{n-1}|(1 + \hat{a}^\dagger\hat{a})\varphi_{n-1}\rangle \\ &= |c_n|^2\langle\varphi_{n-1}|\{1 + (n-1)\}\varphi_{n-1}\rangle \\ &= |c_n|^2 n\langle\varphi_{n-1}|\varphi_{n-1}\rangle\end{aligned}$$

各量子数について状態関数が規格化されているためには $|c_n|^2 n = 1$ である必要がある. したがって, $c_n = 1/\sqrt{n}$ となり,

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^\dagger\varphi_{n-1}(x)$$

同様に φ_n に $\hat{a}$ を作用させれば

$$\hat{a}\varphi_n(x) = \sqrt{n}\,\varphi_{n-1}(x)$$

となる.
いま n が非整数であるとすると, $N(> n)$ 回 $\hat{a}$ を作用させたとき量子数 $n - N < 0$ なる固有状態が存在することになる. これは任意の量子数 n に対して $n \geq 0$ であることに矛盾する. したがって, n は 0 以上の整数しか取り得ない.
以上より, (g) の結果である基底状態の固有関数 φ_0 を用いて,

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^\dagger\varphi_{n-1}(x) = \cdots = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n\varphi_0(x)$$

となる. ただし, $n = 0, 1, 2, \cdots$ である. (証終)