2　一次元調和振動子の代数的方法

時間に依存しないシュレディンガー方程式 (13) で調和振動子ポテンシャルの問題を考える。

2.1　ハミルトニアンと解析的解法の復習

調和振動子のハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \tag{46}$$

座標表示（式 (2) の量子化）の時間に依存しないシュレディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\phi(x) = E\phi(x) \tag{47}$$

これは $\phi(x)$ に対する 2 階微分方程式。
この方程式の解（無限遠で消える境界条件）は、非負整数 $n = 0, 1, 2, 3, \cdots$ に対しエルミート多項式 H_n を用いて

$$\phi_n(x) \propto H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \tag{48}$$

とかけ、エネルギー固有値は

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{49}$$

となる。以下ではこの結果を微分方程式を使わずに**交換関係のみで導出**する。

2.2　生成消滅演算子

消滅演算子（こう定義する、名前の意味は少し後で説明、HP の補足も参照）：

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\hat{x} + i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right) \tag{50}$$

生成演算子：消滅演算子のエルミート共役（$\hat{p}^\dagger = \hat{p}$ に注意）

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\hat{x} - i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right) \tag{51}$$

数演算子：

$$\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a} \tag{52}$$

数演算子は**エルミート**（$\dagger$ をとると自分に戻る）

$$\hat{n}^\dagger = (\hat{a}^\dagger\hat{a})^\dagger = (\hat{a})^\dagger(\hat{a}^\dagger)^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{n} \tag{53}$$

ハミルトニアンとの対応を見るために、数演算子を具体的に計算

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

演算子の順番は入れ替えないことに注意。ハミルトニアンの表式 (46) と量子化 (2) を用いると

$$
\begin{aligned}
\hat{n} &= \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} + \frac{i}{2\hbar}i\hbar \\
\hat{n} &= \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{1}{2} \\
\frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} &= \hat{n} + \frac{1}{2} \\
\hat{H} &= \hbar\omega\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right) \qquad (54)
\end{aligned}
$$

- **ハミルトニアンは数演算子を用いて表現**できる。
  $\Rightarrow$ 数演算子の固有状態がわかればハミルトニアンの固有状態がわかる。
- $\hat{n}$ がエルミート $\Leftrightarrow$ ハミルトニアンがエルミート
- すでに (49) に近い形をしているが、まだ固有状態（〜波動関数）や固有値を調べていないことに注意。もし $\hat{n}$ の固有値が非負整数 n であれば (49) の結果と一致する。
  $\Rightarrow$ 以下でこれを示すのが目的

2.3 演算子の交換関係

以下の計算の準備として、演算子同士の交換関係を計算する。前回の演習問題の結果より、

$$
\begin{aligned}
[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C} + \hat{D}] &= [\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A} + \hat{B}, \hat{D}] \\
&= [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{D}] + [\hat{B}, \hat{D}]
\end{aligned}
$$

生成消滅演算子の交換関係：

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

ここで $[\hat{x},\hat{x}]=0,[\hat{p},\hat{p}]=0$ より、交換しないところだけを残した。これより

$$
\begin{aligned}
[\hat{a},\hat{a}^\dagger] &= -i\frac{1}{2\hbar}[\hat{x},\hat{p}]+i\frac{1}{2\hbar}[\hat{p},\hat{x}] \\
&= -i\frac{1}{2\hbar}[\hat{x},\hat{p}]-i\frac{1}{2\hbar}[\hat{x},\hat{p}] \\
&= -i\frac{1}{\hbar}i\hbar = 1
\end{aligned}
$$

この 1 は恒等演算子。同じ演算子の交換関係は交換することも確かめられる

$$
\begin{aligned}
[\hat{a},\hat{a}] &= \left[\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\hat{x}+i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right),\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\hat{x}+i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right)\right] \\
&= \left[\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\sqrt{m\omega}\hat{x},i\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right]+\left[\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p},\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\sqrt{m\omega}\hat{x}\right] \\
&= i\frac{1}{2\hbar}[\hat{x},\hat{p}]+i\frac{1}{2\hbar}[\hat{p},\hat{x}] \\
&= i\frac{1}{2\hbar}[\hat{x},\hat{p}]-i\frac{1}{2\hbar}[\hat{x},\hat{p}]=0 \\
[\hat{a}^\dagger,\hat{a}^\dagger] &= ([\hat{a},\hat{a}])^\dagger=0
\end{aligned}
$$

数演算子との交換関係

$$
[\hat{n},\hat{a}]=[\hat{a}^\dagger\hat{a},\hat{a}]=[\hat{a}^\dagger,\hat{a}]\hat{a}+\hat{a}^\dagger[\hat{a},\hat{a}]=(-1)\hat{a}=-\hat{a} \tag{55}
$$

$$
[\hat{n},\hat{a}^\dagger]=[\hat{a}^\dagger\hat{a},\hat{a}^\dagger]=[\hat{a}^\dagger,\hat{a}^\dagger]\hat{a}+\hat{a}^\dagger[\hat{a},\hat{a}^\dagger]=\hat{a}^\dagger \tag{56}
$$

2.4 数演算子の固有状態

代数関係のみを用いて $\hat{n}$ に対する固有値と固有状態を構成する。
固有値 λ の固有状態を $|\,\lambda\,\rangle$ とする。

$$
\hat{n}|\,\lambda\,\rangle=\lambda|\,\lambda\,\rangle \tag{57}
$$

状態は規格化されているとする。

$$
\langle\,\lambda\,|\,\lambda\,\rangle=1 \tag{58}
$$

この λ は**非負の実数**。

$$
\begin{aligned}
\because\quad \langle\,\lambda\,|\hat{n}|\,\lambda\,\rangle &= \langle\,\lambda\,|\lambda|\,\lambda\,\rangle=\lambda\langle\,\lambda\,|\,\lambda\,\rangle=\lambda \\
&= \langle\,\lambda\,|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\,\lambda\,\rangle=(\hat{a}|\,\lambda\,\rangle)^\dagger(\hat{a}|\,\lambda\,\rangle)=\|\hat{a}|\,\lambda\,\rangle\|^2\geq 0
\end{aligned}
$$

消滅演算子 $\hat{a}$ を $|\,\lambda\,\rangle$ に作用させると、$\hat{n}$ の**固有値を１小さくする**。

$$\because\quad [\hat{n},\hat{a}]=-\hat{a}\qquad\leftarrow(55)$$
$$\hat{n}\hat{a}-\hat{a}\hat{n}=-\hat{a}$$
$$\hat{n}\hat{a}=\hat{a}\hat{n}-\hat{a}$$
$$=\hat{a}(\hat{n}-1)$$

よって状態 $(\hat{a}|\,\lambda\,\rangle)$ の固有値は

$$\hat{n}(\hat{a}|\,\lambda\,\rangle)=\hat{a}(\hat{n}-1)|\,\lambda\,\rangle$$
$$=\hat{a}(\lambda-1)|\,\lambda\,\rangle\qquad\leftarrow(57)$$
$$=(\lambda-1)(\hat{a}|\,\lambda\,\rangle)$$

となり、元の状態 $|\,\lambda\,\rangle$ より固有値が 1 小さい。

生成演算子 $\hat{a}^\dagger$ を $|\,\lambda\,\rangle$ に作用させると、$\hat{n}$ の**固有値を１大きくする**。

$$\because\quad [\hat{n},\hat{a}^\dagger]=\hat{a}^\dagger\qquad\leftarrow(56)$$
$$\hat{n}\hat{a}^\dagger-\hat{a}^\dagger\hat{n}=\hat{a}^\dagger$$
$$\hat{n}\hat{a}^\dagger=\hat{a}^\dagger\hat{n}+\hat{a}^\dagger$$
$$=\hat{a}^\dagger(\hat{n}+1)$$

よって状態 $(\hat{a}^\dagger|\,\lambda\,\rangle)$ の固有値は

$$\hat{n}(\hat{a}^\dagger|\,\lambda\,\rangle)=\hat{a}^\dagger(\hat{n}+1)|\,\lambda\,\rangle$$
$$=\hat{a}^\dagger(\lambda+1)|\,\lambda\,\rangle\qquad\leftarrow(57)$$
$$=(\lambda+1)(\hat{a}^\dagger|\,\lambda\,\rangle)$$

となり、元の状態 $|\,\lambda\,\rangle$ より固有値が 1 大きい。

生成消滅演算子を作用させた状態の規格化：$\hat{a}|\,\lambda\,\rangle=N_\lambda|\,\lambda-1\,\rangle$、$\hat{a}^\dagger|\,\lambda\,\rangle=N'_\lambda|\,\lambda+1\,\rangle$ としてノルムを計算すると（厳密には $\sqrt{x^2}=|x|$ なので符号の不定性があるが結果を変えないので正にとる）

$$\|\hat{a}|\,\lambda\,\rangle\|=\sqrt{(\hat{a}|\,\lambda\,\rangle)^\dagger(\hat{a}|\,\lambda\,\rangle)}=\sqrt{\langle\,\lambda\,|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\,\lambda\,\rangle}=\sqrt{\langle\,\lambda\,|\hat{n}|\,\lambda\,\rangle}=\sqrt{\lambda\langle\,\lambda\,|\,\lambda\,\rangle}=\sqrt{\lambda}$$
$$\|N_\lambda|\,\lambda-1\,\rangle\|=\sqrt{(N_\lambda|\,\lambda-1\,\rangle)^\dagger(N_\lambda|\,\lambda-1\,\rangle)}=\sqrt{N_\lambda^2\langle\,\lambda-1\,|\,\lambda-1\,\rangle}=N_\lambda$$
$$\therefore\quad \hat{a}|\,\lambda\,\rangle=\sqrt{\lambda}|\,\lambda-1\,\rangle\tag{59}$$
$$\|\hat{a}^\dagger|\,\lambda\,\rangle\|=\sqrt{(\hat{a}^\dagger|\,\lambda\,\rangle)^\dagger(\hat{a}^\dagger|\,\lambda\,\rangle)}$$
$$=\sqrt{\langle\,\lambda\,|\hat{a}\hat{a}^\dagger|\,\lambda\,\rangle}$$
$$=\sqrt{\langle\,\lambda\,|(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^\dagger-\hat{a}^\dagger\hat{a})|\,\lambda\,\rangle}$$
$$=\sqrt{\langle\,\lambda\,|(\hat{a}^\dagger\hat{a}+[\hat{a},\hat{a}^\dagger])|\,\lambda\,\rangle}$$
$$=\sqrt{\langle\,\lambda\,|(\hat{n}+1)|\,\lambda\,\rangle}$$
$$=\sqrt{(\lambda+1)\langle\,\lambda\,|\,\lambda\,\rangle}$$

$$
\begin{aligned}
&= \sqrt{\lambda+1} \\
\|N'_\lambda|\,\lambda+1\,\rangle\| &= \sqrt{(N'_\lambda|\,\lambda+1\,\rangle)^\dagger(N'_\lambda|\,\lambda+1\,\rangle)} = \sqrt{(N'_\lambda)^2\langle\,\lambda+1\,|\,\lambda+1\,\rangle} = N'_\lambda \\
\therefore \quad \hat{a}^\dagger|\,\lambda\,\rangle &= \sqrt{\lambda+1}|\,\lambda+1\,\rangle
\end{aligned} \tag{60}
$$

状態空間の性質

- 消滅演算子 $\hat{a}$ を作用させると固有値 λ が 1 小さい状態を作ることができる。
- 固有値 λ は非負である。

両者を満たすためには、固有値がそれ以上下げられない**最小固有値の状態 $|\,\Omega\,\rangle$ が存在**しなければならない。このとき

- $\hat{a}|\,\Omega\,\rangle = \mathbf{0}$ （零ベクトル、$|\,\Omega\,\rangle$ が最小固有値の状態なので）
- $\hat{n}|\,\Omega\,\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{a}|\,\Omega\,\rangle = \mathbf{0} = 0|\,\Omega\,\rangle$ （状態 Ω の $\hat{n}$ の**固有値は 0**）
- $|\,\Omega\,\rangle$ に $\hat{a}^\dagger$ を作用させると、（0 から 1 ずつ増えていくので）固有値が（$1, 2, \cdots$）の状態ができる。つまり **$\hat{n}$ の固有値は非負の整数**。
- 固有値 0 の状態なので $|\,\Omega\,\rangle = |\,0\,\rangle$ と表記し、$(\hat{a}^\dagger)^n$ を作用させた状態を $|\,n\,\rangle$ と表記する。

例）もし固有値 $\lambda = 1.5$ という状態 $|\,1.5\,\rangle$ があったら矛盾

$$
\hat{a}|\,1.5\,\rangle = \sqrt{1.5}|\,0.5\,\rangle, \quad \hat{a}|\,0.5\,\rangle = \sqrt{0.5}\underbrace{|\,-0.5\,\rangle}_{\lambda\text{ が負！}}
$$

固有値 λ が整数なら OK

$$
\hat{a}|\,2\,\rangle = \sqrt{2}|\,1\,\rangle, \quad \hat{a}|\,1\,\rangle = \sqrt{1}|\,0\,\rangle, \quad \hat{a}|\,0\,\rangle = \sqrt{0}|\,-1\,\rangle = \mathbf{0}
$$

2.5 ハミルトニアンの固有状態と固有エネルギー

$\hat{n}$ の固有状態 $|\,n\,\rangle$（$\hat{n}|\,n\,\rangle = n|\,n\,\rangle$）は $\hat{H}$ の固有状態でもある。固有値は

$$
\hat{H}|\,n\,\rangle = \hbar\omega\left(\hat{n}+\frac{1}{2}\right)|\,n\,\rangle = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)|\,n\,\rangle
$$

ハミルトニアンの固有値は固有エネルギーなので、調和振動子の固有エネルギーは

$$
E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \quad (n\text{ は非負整数 }0,\ 1,\ 2,...) \tag{61}
$$

となり、(49) と一致！

今日のポイント

- 生成消滅演算子の交換関係と $\hat{n}$ の固有値の非負性から基底状態 $|\,0\,\rangle$ の存在が示される。
- 調和振動子の固有エネルギーは交換関係から導出できる。