一次元調和振動子の固有状態（生成消滅演算子編）

(1) ハミルトニアン

一次元調和振動子にたいするシュレディンガー方程式は

$$\frac{{p_x}^2}{2m}\varphi(x)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\varphi(x)=E\varphi(x)$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\varphi(x)=E\varphi(x)$$

となる。この方程式は補遺集3で考えた微分方程式$\frac{d^2f(x)}{dx^2}-a^2f(x)=0$と比較すると$a^2$の部分を$-x^2$に置き換わり右辺が零ではなくなっている。補遺集3では

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2}-a^2f(x)=\left(\frac{d^2}{dx^2}-a^2\right)f(x)=\left(\frac{d}{dx}-a\right)\left(\frac{d}{dx}+a\right)f(x)=0$$

のように置き換えて計算を行ったが、これは微分演算子$\frac{d}{dx}$と定数aが可換であるからできたのであって、一次元調和振動子にたいするシュレディンガー方程式では、p_xとxは可換ではないので同じ手順を踏むわけにはいかない。そこで次のように考えよう。

まず、$\hbar\omega$でちょうどエネルギーの次元をもつのでハミルトニアン$H=\frac{{p_x}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ から$\hbar\omega$を括り出すと

$$H=\frac{{p_x}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=\hbar\omega\left(\frac{{p_x}^2}{2m\hbar\omega}+\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)=\hbar\omega\left(\frac{1}{2}\left(\frac{p_x}{\sqrt{m\hbar\omega}}\right)^2+\frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)^2\right)$$

もし、p_xとxが可換であれば、これは

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x+i\frac{p_x}{\sqrt{m\hbar\omega}}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x-i\frac{p_x}{\sqrt{m\hbar\omega}}\right)$$

のように因数分解できるのだが、p_xとxは可換ではないので演算子の因数分解できない。そこで、新たな演算子aを

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

と定義する。この演算子とエルミート共役な演算子$a^\dagger$は

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

となる。

まず、この二つの演算子の交換関係を調べてみることにすると

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

すなわち、

$$\begin{aligned}
&\left[a, a^{\dagger}\right] = 1 \\
&aa^{\dagger} - a^{\dagger}a = 1 \\
&aa^{\dagger} = a^{\dagger}a + 1 \\
&a^{\dagger}a = a^{\dagger}a - 1
\end{aligned}$$

演算子の和と定数倍はどのような順番でおこなってもよいから、

$$\begin{aligned}
a + a^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + i\frac{p_x}{\sqrt{m\hbar\omega}}\right) + \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - i\frac{p_x}{\sqrt{m\hbar\omega}}\right) = \frac{2}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \\
&\Rightarrow x = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\left(a + a^{\dagger}\right) \\
a - a^{\dagger} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + i\frac{p_x}{\sqrt{m\hbar\omega}}\right) - \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - i\frac{p_x}{\sqrt{m\hbar\omega}}\right) = i\frac{2}{\sqrt{2}}\frac{p_x}{\sqrt{m\hbar\omega}} \\
&\Rightarrow p_x = \frac{1}{i\sqrt{2}}\sqrt{m\hbar\omega}\left(a - a^{\dagger}\right)
\end{aligned}$$

これをハミルトニアンに代入すると

$$H = \hbar\omega\left(\frac{1}{2}\left(\frac{1}{i\sqrt{2}}\left(a - a^{\dagger}\right)\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(a + a^{\dagger}\right)\right)^2\right) = \hbar\omega\frac{1}{4}\left(-\left(a - a^{\dagger}\right)^2 + \left(a + a^{\dagger}\right)^2\right)$$

これを演算子の積の順番を入れ替えてはいけないことに注意しながら展開すると

$$\begin{aligned} H &= \hbar\omega\frac{1}{4}\left(-\left(a-a^\dagger\right)\left(a-a^\dagger\right)+\left(a+a^\dagger\right)\left(a+a^\dagger\right)\right) \\ &= \hbar\omega\frac{1}{4}\left(-\left(a^2-a^\dagger a-aa^\dagger+\left(a^\dagger\right)^2\right)+a^2+a^\dagger a+aa^\dagger+\left(a^\dagger\right)^2\right) \\ &= \hbar\omega\frac{1}{4}\left(-a^2+a^\dagger a+aa^\dagger-\left(a^\dagger\right)^2+a^2+a^\dagger a+aa^\dagger+\left(a^\dagger\right)^2\right) \\ &= \hbar\omega\frac{1}{4}\left(2a^\dagger a+2aa^\dagger\right) \\ &= \hbar\omega\frac{1}{4}\left(2a^\dagger a+2\left(1+a^\dagger a\right)\right)=\frac{1}{2}\hbar\omega+\hbar\omega a^\dagger a \end{aligned}$$

すなわち

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

とおくと

$$H=\frac{1}{2}\hbar\omega+\hbar\omega a^\dagger a$$

と表され、

$$\left[a,a^\dagger\right]=1$$

の関係がある。

また、$a,\ a^\dagger$とHの交換関係は

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

すなわち

$$Ha-aH=-\hbar\omega a$$

また、

$$\begin{aligned} \left(Ha-aH\right)^\dagger=\left(-\hbar\omega a\right)^\dagger &\Rightarrow \left(Ha\right)^\dagger-\left(aH\right)^\dagger=\left(-\hbar\omega\right)^* a^\dagger \\ &\Rightarrow a^\dagger H^\dagger-H^\dagger a^\dagger=-\hbar\omega a^\dagger \Rightarrow a^\dagger H-Ha^\dagger=-\hbar\omega a^\dagger \\ &\Rightarrow \left[a^\dagger,H\right]=-\hbar\omega a^\dagger \Rightarrow \left[H,a^\dagger\right]=\hbar\omega a^\dagger \end{aligned}$$

であるから、まとめると

$$\begin{aligned} \left[H,a\right]=Ha-aH=-\hbar\omega a &\Rightarrow Ha=aH-\hbar\omega a \\ \left[H,a^\dagger\right]=Ha^\dagger-a^\dagger H=\hbar\omega a^\dagger &\Rightarrow Ha^\dagger=a^\dagger H+\hbar\omega a^\dagger \end{aligned}$$

(2) 基底状態

一次元調和振動子の基底状態の波動関数を$|0\rangle$、基底状態のエネルギー固有値をE_0とおくと$H|0\rangle = E_0|0\rangle$、ただし$E_0$は基底状態のエネルギー固有値であるから他のどのような固有値よりも小さくなければならない。すなわち$H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$をみたすどんな$E$にたいしても$E_0 \le E$が成立しなければならない。

そこで、基底状態の波動関数$|0\rangle$にaを作用させた関数を考えよう。この関数にハミルトニアンを作用させると$Ha = aH - \hbar\omega a$であるから

$$Ha|0\rangle = (aH - \hbar\omega a)|0\rangle = aH|0\rangle - \hbar\omega a|0\rangle$$

ここで$H|0\rangle = E_0|0\rangle$を使うと

$$Ha|0\rangle = aH|0\rangle - \hbar\omega a|0\rangle = aE_0|0\rangle - \hbar\omega a|0\rangle$$

いま$E_0, \hbar\omega$は単なる定数であるから演算子との積の順序を入れ替えてもかまわないので

$$Ha|0\rangle = aE_0|0\rangle - \hbar\omega a|0\rangle = (E_0 - \hbar\omega)a|0\rangle$$

この式は基底状態の波動関数$|0\rangle$にaを作用させた関数$a|0\rangle$がエネルギー固有値$(E_0 - \hbar\omega)$の固有関数になっていることを示している。ところが$\hbar\omega > 0$であるから$E_0 - \hbar\omega < E_0$である。このことは「E_0は基底状態のエネルギー固有値であるから他のどのような固有値よりも小さくなければならない。すなわち$H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$をみたすどんな$E$にたいしても$E_0 \le E$が成立しなければならない。」ことと矛盾する。よって$a|0\rangle$は意味のない固有関数、すなわち$a|0\rangle = 0$でなけでばならない。この条件を$H|0\rangle = E_0|0\rangle$に代入すると、

$$\begin{aligned} H|0\rangle &= \left(\frac{1}{2}\hbar\omega + \hbar\omega a^\dagger a\right)|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle + \hbar\omega a^\dagger a|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle + \hbar\omega a^\dagger\left(a|0\rangle\right) \\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle \end{aligned}$$

となり、基底状態のエネルギー固有値をE_0は

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

と決定できる。基底状態の波動関数$|0\rangle$は$a|0\rangle = 0$より、

$$a|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + i\frac{p_x}{\sqrt{m\hbar\omega}}\right)|0\rangle = 0$$

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + i\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)|0\rangle = 0 \Rightarrow \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)|0\rangle = 0$$

より、$|0\rangle = \varphi_0(x)$と書くことにすると

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x+\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_0(x)=0\Rightarrow\frac{\partial\varphi_0(x)}{\partial x}=-\frac{m\omega}{\hbar}x\varphi_0(x)$$

$$\frac{1}{\varphi_0(x)}\frac{\partial\varphi_0(x)}{\partial x}=-\frac{m\omega}{\hbar}x\Rightarrow\int\frac{1}{\varphi_0(x)}\frac{\partial\varphi_0(x)}{\partial x}dx=\int\frac{1}{\varphi_0}d\varphi_0=-\frac{m\omega}{\hbar}\int xdx$$

$$\ln\varphi_0(x)=-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2+C'\Rightarrow\varphi_0(x)=\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2+C'}=\mathrm{e}^{C'}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}=C\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

のように求めることができる。ただし、C', Cは適当な定数であり、規格化条件から決定される。規格化条件は$\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi_0(x)|^2dx=1$であるから

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|C\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\right|^2dx=|C|^2\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}dx=|C|^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)^2}d\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)=|C|^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-z^2}dz$$

$$=|C|^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{\pi}=1$$

より$|C|^2=\left(\sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}}\right)^{-1}$、よって$C=\left(\frac{\hbar\pi}{m\omega}\right)^{-\frac{1}{4}}$ととっておけばよい。ここで$z=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$とおき、ガウス関数の積分公式$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-z^2}dz=\sqrt{\pi}$（量子力学のための基礎数学を参照）を使った。

以上まとめておくと、調和振動子の基底状態のエネルギー固有値E_0と規格化された波動関数$|0\rangle$は

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$|0\rangle=\left(\frac{\hbar\pi}{m\omega}\right)^{-\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

(3) 励起状態

次に、基底状態の波動関数$|0\rangle$に$a^\dagger$を作用させた関数を考えよう。この関数にハミルトニアンを作用させると$Ha^\dagger=a^\dagger H+\hbar\omega a^\dagger$であるから

$$Ha^\dagger|0\rangle=\left(a^\dagger H+\hbar\omega a^\dagger\right)|0\rangle=a^\dagger H|0\rangle+\hbar\omega a^\dagger|0\rangle$$

ここで$H|0\rangle=\frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle$を使うと

$$Ha^\dagger|0\rangle=a^\dagger H|0\rangle+\hbar\omega a^\dagger|0\rangle=\frac{1}{2}\hbar\omega a^\dagger|0\rangle+\hbar\omega a^\dagger|0\rangle=\frac{3}{2}\hbar\omega a^\dagger|0\rangle$$

この式は基底状態の波動関数$|0\rangle$に$a^\dagger$を作用させた関数$a^\dagger|0\rangle$がエネルギー固有値$\dfrac{3}{2}\hbar\omega$の固有関数になっていることを示している。

一般の励起状態を計算するために、以下の交換関係を使うので証明しておこう。

(a) $\left[a,\left(a^\dagger\right)^n\right]=n\left(a^\dagger\right)^{n-1}$

証明

$n=1$のとき$\left[a,a^\dagger\right]=1\left(a^\dagger\right)^0=1$であるから成立する。

$n=k$のとき成立を仮定すると

$$\left[a,\left(a^\dagger\right)^{k+1}\right]=\left[a,a^\dagger\left(a^\dagger\right)^k\right]=a^\dagger\left[a,\left(a^\dagger\right)^k\right]+\left[a,a^\dagger\right]\left(a^\dagger\right)^k=a^\dagger k\left(a^\dagger\right)^{k-1}+\left(a^\dagger\right)^k$$
$$=(k+1)\left(a^\dagger\right)^k$$

これは$n=k+1$のときにも成立することを示している。

(b) $\left[H,\left(a^\dagger\right)^n\right]=n\hbar\omega\left(a^\dagger\right)^n$

証明

$$\left[H,\left(a^\dagger\right)^n\right]=\left[\frac{1}{2}\hbar\omega+\hbar\omega a^\dagger a,\left(a^\dagger\right)^n\right]=\hbar\omega\left[a^\dagger a,\left(a^\dagger\right)^n\right]=\hbar\omega\left(a^\dagger\left[a,\left(a^\dagger\right)^n\right]+\left[a^\dagger,\left(a^\dagger\right)^n\right]a\right)$$
$$=\hbar\omega\left(a^\dagger n\left(a^\dagger\right)^{n-1}\right)=n\hbar\omega\left(a^\dagger\right)^n$$

これより$H\left(a^\dagger\right)^n-\left(a^\dagger\right)^nH=n\hbar\omega\left(a^\dagger\right)^n\Rightarrow H\left(a^\dagger\right)^n=\left(a^\dagger\right)^nH+n\hbar\omega\left(a^\dagger\right)^n$

基底状態の波動関数$|0\rangle$に$\left(a^\dagger\right)^n$を作用させた関数$\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle$にハミルトニアンを作用させると

$$H\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle=\left(a^\dagger\right)^nH|0\rangle+n\hbar\omega\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle=\left(a^\dagger\right)^n\frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle+n\hbar\omega\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle=\left(\frac{1}{2}+n\right)\hbar\omega\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle$$

であるから、$\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle$はエネルギー固有値$\left(\dfrac{1}{2}+n\right)\hbar\omega$の固有関数になっている。

基底状態は規格化されている（$\langle 0|0\rangle=1$）が、$\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle$はまだ規格化されていないので規格化しよう。エネルギー固有値$\left(\dfrac{1}{2}+n\right)\hbar\omega$の規格化された固有関数を$|n\rangle=C_n\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle$とおくと$\langle n|=C_n{}^*\langle 0|a^n$より規格化条件は$\langle n|n\rangle=|C_n|^2\langle 0|a^n\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle=1$。そこで一般に$\langle n|m\rangle$を計算しておこう。$\langle m|n\rangle^*=\langle n|m\rangle$であるから$n\geq m$と仮定しても一般性を失わないので$n\geq m$と仮定しよう。$\langle n|m\rangle=C_n{}^*C_m\langle 0|a^n\left(a^\dagger\right)^m|0\rangle$であるから、まず$\langle 0|a^n\left(a^\dagger\right)^m|0\rangle$を計算しよう。

$\left[a,\left(a^\dagger\right)^n\right]=n\left(a^\dagger\right)^{n-1}$より$a\left(a^\dagger\right)^n=\left(a^\dagger\right)^n a+n\left(a^\dagger\right)^{n-1}$をもちいると、

$$\begin{aligned}\langle 0|a^n\left(a^\dagger\right)^m|0\rangle &= \langle 0|a^{n-1}a\left(a^\dagger\right)^m|0\rangle \\ &= \langle 0|a^{n-1}\left(\left(a^\dagger\right)^m a+m\left(a^\dagger\right)^{m-1}\right)|0\rangle = \langle 0|a^{n-1}\left(a^\dagger\right)^m a|0\rangle + m\langle 0|a^{n-1}\left(a^\dagger\right)^{m-1}|0\rangle\end{aligned}$$

$a|0\rangle=0$であるから$\langle 0|a^n\left(a^\dagger\right)^m|0\rangle=m\langle 0|a^{n-1}\left(a^\dagger\right)^{m-1}|0\rangle$。これを繰り返すと

$$\begin{aligned}\langle 0|a^n\left(a^\dagger\right)^m|0\rangle &= m\langle 0|a^{n-1}\left(a^\dagger\right)^{m-1}|0\rangle = m(m-1)\langle 0|a^{n-2}\left(a^\dagger\right)^{m-2}|0\rangle = m(m-1)\cdots 1\langle 0|a^{n-m}|0\rangle \\ &= m!\langle 0|a^{n-m}|0\rangle = \begin{cases} m! & (n=m) \\ 0 & (n>m)\end{cases}\end{aligned}$$

よって、$\langle n|n\rangle=C_n^{\ *}C_n\langle 0|a^n\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle=|C_n|^2 n!=1$より$C_n=\dfrac{1}{\sqrt{n!}}$ととっておけばよい。

また、$n\neq m$のときは$\langle n|m\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{n!}}\dfrac{1}{\sqrt{m!}}\langle 0|a^n\left(a^\dagger\right)^m|0\rangle=0$である。

ここまでのことをまとめると、調和振動子のエネルギー固有値E_nと規格化された波動関数$|n\rangle$は

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

$$|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle \quad \left(|0\rangle=\left(\frac{\hbar\pi}{m\omega}\right)^{-\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\right)$$

(4) 生成・消滅演算子、数演算子

次に、$a,\ a^\dagger$の性質を調べておこう。$a,\ a^\dagger$を波動関数$|n\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle$にを作用させると、

ふたたび$a\left(a^\dagger\right)^n=\left(a^\dagger\right)^n a+n\left(a^\dagger\right)^{n-1}$をもちいて、

$$\begin{aligned}a|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}a\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\left(a^\dagger\right)^n a+n\left(a^\dagger\right)^{n-1}\right)|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n a|0\rangle+\frac{1}{\sqrt{n!}}n\left(a^\dagger\right)^{n-1}|0\rangle \\ &= \frac{n}{\sqrt{n}\sqrt{(n-1)!}}\left(a^\dagger\right)^{n-1}|0\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle\end{aligned}$$

$$a^\dagger|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}a^\dagger\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle=\frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{n+1}\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^{n+1}|0\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

となる。すなわちaは量子数nを1減らし、$a^\dagger$は量子数nを1増やす働きがあることがわかる。基底状態では量子数nが$n=0$で最小になっており、これ以上減らすことができないの

で $a|0\rangle = 0$ となるわけである。$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle,\ a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ であるから

$$a^\dagger a|n\rangle = \sqrt{n}a^\dagger|n-1\rangle = \sqrt{n}\sqrt{(n-1)+1}|(n-1)+1\rangle = n|n\rangle$$

また、

$$aa^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}a|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\sqrt{n+1}|n\rangle = (n+1)|n\rangle$$

である。よって $a^\dagger a$ は量子数を固有値とする演算子になっている。これらの性質から a を消滅演算子、$a^\dagger$ を生成演算子、$a^\dagger a$ を数演算子とよぶ。

以上全体をまとめると

消滅演算子 $$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + i\frac{p_x}{\sqrt{m\hbar\omega}}\right)$$

生成演算子 $$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - i\frac{p_x}{\sqrt{m\hbar\omega}}\right),$$

交換関係 $\left[a, a^\dagger\right] = 1$

ハミルトニアン $H = \frac{1}{2}\hbar\omega + \hbar\omega a^\dagger a$

シュレディンガー方程式 $H|n\rangle = E_n|n\rangle$

エネルギー固有値 $E_n = \left(\frac{1}{2} + n\right)\hbar\omega$

固有関数 $$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n|0\rangle \quad \left(|0\rangle = \left(\frac{\hbar\pi}{m\omega}\right)^{-\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\right)$$

正規直交性 $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$

消滅演算子 $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$

生成演算子 $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$

数演算子 $a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle$

(5) 物理量の平均値

座標 x と運動量 p_x は、消滅演算子 a と生成演算子 $a^\dagger$ をもちいて、それぞれ

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\left(a + a^\dagger\right),\ p_x = \frac{1}{i\sqrt{2}}\sqrt{m\hbar\omega}\left(a - a^\dagger\right)$$

と表される。そこで計算したい物理量を座標と運動量で表した後、生成消滅演算子に書き直し、$\langle n|m\rangle=\delta_{n,m}$, $a|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle$, $a^\dagger|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle$などを使用することにより平均値を計算することができる。

(a) $\langle x\rangle$

$$\langle x\rangle=\langle n|x|n\rangle=\langle n|\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\left(a+a^\dagger\right)|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\left(\langle n|a|n\rangle+\langle n|a^\dagger|n\rangle\right)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\left(\langle n|\sqrt{n}|n-1\rangle+\langle n|\sqrt{n+1}|n+1\rangle\right)=0$$

(b) $\langle x^2\rangle$

$$\langle x^2\rangle=\langle n|x^2|n\rangle=\langle n|\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\left(a+a^\dagger\right)\right)^2|n\rangle=\frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}\langle n|\left(a+a^\dagger\right)^2|n\rangle$$

$$=\frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}\langle n|a^2+a^\dagger a+aa^\dagger+\left(a^\dagger\right)^2|n\rangle=\frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}\langle n|a^\dagger a+aa^\dagger|n\rangle$$

$$=\frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}\langle n|a^\dagger a|n\rangle+\frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}\langle n|aa^\dagger|n\rangle=\frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}n+\frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}\left(n+1\right)$$

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

(c) $\langle p_x\rangle$

$$\langle p_x\rangle=\langle n|p_x|n\rangle=\langle n|\frac{1}{i\sqrt{2}}\sqrt{m\hbar\omega}\left(a-a^\dagger\right)|n\rangle=\frac{1}{i\sqrt{2}}\sqrt{m\hbar\omega}\left(\langle n|a|n\rangle-\langle n|a^\dagger|n\rangle\right)$$

$$=0$$

(d) $\langle {p_x}^2\rangle$

$$\langle {p_x}^2\rangle=\langle n|{p_x}^2|n\rangle=\langle n|\left(\frac{1}{i\sqrt{2}}\sqrt{m\hbar\omega}\left(a-a^\dagger\right)\right)^2|n\rangle=-\frac{1}{2}m\hbar\omega\langle n|\left(a-a^\dagger\right)^2|n\rangle$$

$$=-\frac{1}{2}m\hbar\omega\langle n|a^2-a^\dagger a-aa^\dagger+\left(a^\dagger\right)^2|n\rangle=\frac{1}{2}m\hbar\omega\langle n|a^\dagger a+aa^\dagger|n\rangle$$

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