(量子調和振動子の昇降演算子による波動関数の推定)harmonic-oscillator-updown-operator-wavefucntion-qa20200603A.tex

調和振動子系のハミルトニアン $\hat{H}$ は，座標演算子 $\hat{x}$ と運動量演算子 $\hat{p}_x$ を用いて次のように表される．

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \tag{1}$$

ただし，量子的粒子の質量を m, 角振動数を ω，ディラック定数を $\hbar$ とする．次式で定義される無次元の演算子 $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ を導入する．

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

1. 基底状態の波動関数 $\psi_0(x)$ に対して，下降演算子をエネルギー最低状態としての基底状態に演算させると状態は存在しない，すなわち $\hat{a}\psi_0(x) = 0$ という条件から，定数係数を除いて，$\psi_0(x)$ の関数形を推定せよ．
2. 第一励起状態の波動関数 $\psi_1(x)$ は基底状態の波動関数 $\psi_0(x)$ から上昇演算子 $\hat{a}^\dagger$ により生成される，すなわち $\psi_1(x) \propto \hat{a}^\dagger\psi_0(x)$ という条件を用いて，定数係数を除いた $\psi_1(x)$ の関数形を推定せよ．($A \propto B$ は A は B に比例するという意味．)
3. 前問までの結果を用いて，$\psi_0(x)$ と $\psi_1(x)$ が直交するかどうかを調べよ．

(解答例)

1. 題意より

$$\begin{aligned}
0 &= \hat{a}\psi_0(x) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\left(\alpha^2 x + \frac{d}{dx}\right)\psi_0(x) \\
\to \frac{d\psi_0}{dx} &= -\alpha^2 x \cdot \psi_0 \\
\to \frac{d\psi_0}{\psi_0} &= -\alpha^2 x dx \to \int \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\alpha^2 \int x dx \\
\to \ln\psi_0 &= -\frac{1}{2}\alpha^2 x^2 + C,\ (C:\text{積分定数}) \\
\to \psi_0(x) &\propto \exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right).
\end{aligned} \tag{3}$$

2. 同様にして

$$\hat{a}^\dagger\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\left(\alpha^2 x - \frac{d}{dx}\right)\psi_0(x)$$

$$\begin{aligned} &\propto -\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\left(-\alpha^2 x - \alpha^2 x\right)\exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right) \\ &= \sqrt{2}\alpha \cdot x \cdot \exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right). \end{aligned} \tag{4}$$

3. 題意より

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right)\cdot x \cdot \exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right)\right] dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot \exp\left(-\alpha^2 x^2\right) dx \\ &= 0 \ (\text{被積分関数が奇関数であるため}). \end{aligned} \tag{5}$$

故に，$\psi_0(x)$ と $\psi_1(x)$ は直交する．