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 $\hat{p}$ を用いて次のように表される．

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

ここで，$\hat{x}$ と $\hat{p}$ は正準交換関係 $[\hat{x},\hat{p}] = \mathrm{i}\hbar, [\hat{x},\hat{x}] = 0 = [\hat{p},\hat{p}] = 0$ を満たす．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．

1. ハミルトニアン $\hat{H}$ の両辺をエネルギーの次元を持つ $\hbar\omega$ で割って，無次元化し，右辺を 2 乗の和の形に書き直せ．

2. 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。

$$\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \mathrm{i}\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p},\ \hat{a}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \mathrm{i}\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}. \tag{2}$$

ここで，正準交換関係 $[\hat{a},\hat{a}^\dagger]$, $[\hat{a},\hat{a}], [\hat{a}^\dagger,\hat{a}^\dagger]$ を計算せよ．ただし，任意の演算子 $\hat{A},\hat{B},\hat{C},\hat{D}$ に対して $[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}+\hat{D}] = [\hat{A},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{D}] + [\hat{B},\hat{C}] + [\hat{B},\hat{D}]$ である．

3. $\hat{x},\hat{p}$ を $\hat{a},\hat{a}^\dagger$ と $\hbar, m, \omega$ を用いて表せ．

4. 前問の結果を用いて，$\hat{H}$ を $\hat{a},\hat{a}^\dagger$ と $\hbar,\omega$ を用いて表せ．ただし、$\hat{a},\hat{a}^\dagger$ の順は $\hat{a}^\dagger$ を左側に，$\hat{a}$ を右側になるように，求める式を変形せよ (正規順の積，normal-ordered product)．

(解答例)

1. 題意より

$$\frac{\hat{H}}{\hbar\omega} = \left(\frac{\hat{p}_x}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\right)^2 + \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}\right)^2. \tag{3}$$

2. まず

$$\begin{aligned}
[\hat{a},\hat{a}^\dagger] &= \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \mathrm{i}\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \mathrm{i}\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}\right] \\
&= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \times \frac{(-\mathrm{i})}{\sqrt{2m\omega\hbar}}[\hat{x},\hat{p}] + \frac{(\mathrm{i})}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \times \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}[\hat{p},\hat{x}] \\
&= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \\
&= 1
\end{aligned} \tag{4}$$

が得られる．ここで，演算子の組（正準共役演算子）$\hat{x},\hat{p}_x$ は交換関係

$$[\hat{x},\hat{p}] = \mathrm{i}\hbar,\ [\hat{x},\hat{x}] = [\hat{p},\hat{p}] = 0. \tag{5}$$

が成立することを用いた．次に，$[\hat{a},\hat{a}] = [\hat{a}^\dagger,\hat{a}^\dagger] = 0$ であることは自明であろう．

3. 題意より

$$
\begin{aligned}
&\hat{a}^\dagger + \hat{a} = 2\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} \to \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}),\\
&\hat{a}^\dagger - \hat{a} = (-\mathrm{i})\sqrt{\frac{2}{m\omega\hbar}}\hat{p} \to \hat{p} = \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}). \qquad (6)
\end{aligned}
$$

4. 前問の結果をハミルトニアンに代入して，交換関係から得られる式，$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1$ を用いて，式変形すれば

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{-1}{2m}\frac{m\omega\hbar}{2}(\hat{a}^\dagger - \hat{a})^2 + \frac{m\omega^2}{2}\frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2\\
&= \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\right)\\
&= \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}) \qquad (7)
\end{aligned}
$$

が得られる．