

生成消滅演算子(a, a^*)の由来について

2001.8.10

by KENZOU

表題を見ただけでは何のことか分からないと思いますが、いわゆる生成消滅演算子は次のように定義されて導入されますね。

$$a = c(p - i\omega q)$$

$$a^* = c(p + i\omega q)$$

$$c = 1/\sqrt{2\hbar\omega}$$

これを使うと調和振動子(質量 $m=1$ とする)のHamiltonian H は

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega(aa^* + a^*a) = \hbar\omega aa^* - \frac{1}{2}\hbar\omega = \hbar\omega \left(a^*a + \frac{1}{2} \right)$$

と書かれます。

ところで表題の意味は、生成消滅演算子がどうして、式の表式で書くことができるのか、言い換えると、どうしてこのような表式を思い付くことができたのか、という点を解明することにあります。まあ、そんなことにナンに興味もなければ本稿は全く無用の長物となりますが、多少ともその辺りに興味があれば少しは何かのお役に立つのではないかと思います。普通のテキストにはこの辺の事情は全く書かれていませんものね。。。(^ ^)

さあ、それでは本論に入ります。その前に本論の流れを概説しておきます。

1次元調和振動子のSchrodinger Equationを立てる

↓

$\partial/\partial x, x$ についての2次式となるので、因数分解的手法で次数を下げる

(Diracが相対論的波動方程式を導入した場合のやり方に似ている)

↓

固有値をアップダウンさせる「階段演算子」が定義できる

↓

この「階段演算子」が生成消滅演算子に該当する

1次元調和振動子

Hamiltonian

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (1)$$

Schrodinger Equation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{Y}(x, t) = H \mathbf{Y}(x, t) \\ = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \mathbf{Y}(x, t) \quad (2)$$

ここで、 $i\hbar\partial/\partial t \rightarrow E$, $k=m\omega^2$ と置きかえると、(2)式は

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + E \right) \mathbf{Y}(x, t) = 0 \quad (3)$$

また、 $x = \sqrt{\hbar/m\omega} X$, $E = \hbar\omega e/2$ と置くと、(3)式は

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} - X^2 \right) \mathbf{Y}(X, t) = -e \mathbf{Y}(X, t) \quad (4)$$

さて、(4)式をこれから解くわけであるが、ここで次のことに留意する

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial X} - X \right) \left(\frac{\partial}{\partial X} + X \right) \mathbf{Y} &= \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial}{\partial X} + X \right) \mathbf{Y} - X \left(\frac{\partial}{\partial X} + X \right) \mathbf{Y} \\ &= \frac{\partial^2}{\partial X^2} \mathbf{Y} + \mathbf{Y} + X \frac{\partial}{\partial X} \mathbf{Y} - X \frac{\partial}{\partial X} \mathbf{Y} - X^2 \mathbf{Y} \end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial X} - X \right) \left(\frac{\partial}{\partial X} + X \right) \mathbf{Y} &= \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} - X^2 + 1 \right) \mathbf{Y} \\ &= -(e-1) \mathbf{Y} \end{aligned} \quad (5)$$

同様にして

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial X} + X \right) \left(\frac{\partial}{\partial X} - X \right) \mathbf{Y} &= \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} - X^2 - 1 \right) \mathbf{Y} \\ &= -(e+1) \mathbf{Y} \end{aligned} \quad (6)$$

(5)式より、(4)式を使って

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial X} - X \right) \left(\frac{\partial}{\partial X} + X \right) \mathbf{Y} &= \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} - X^2 + 1 \right) \mathbf{Y} \\ &= -(e-1) \mathbf{Y} \end{aligned} \quad (7)$$

続けて(7)式の左から $(\partial/\partial X + X)$ を掛けると、(6)式を使って

$$\left(\frac{\partial}{\partial X} + X \right) \left(\frac{\partial}{\partial X} - X \right) \left(\frac{\partial}{\partial X} + X \right) \mathbf{Y} = \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} - X^2 - 1 \right) \left(\frac{\partial}{\partial X} + X \right) \mathbf{Y} \quad (8)$$

ところで(8)式の左辺で2番目と3番目の括弧を先に掛けると、(7)式を使って

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial X} + X \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} - X^2 + 1 \right) \mathbf{Y} &= \left(\frac{\partial}{\partial X} + X \right) \{ -(e-1) \} \mathbf{Y} \\ &= \{ -(e-1) \} \left(\frac{\partial}{\partial X} + X \right) \mathbf{Y} \end{aligned} \quad (9)$$

(8)式と(9)式は等しいから

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} - X^2 - 1\right)\left(\frac{\partial}{\partial X} + X\right)Y = \{-(e-1)\}\left(\frac{\partial}{\partial X} + X\right)Y$$

これを整理して

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} - X^2\right)\left(\frac{\partial}{\partial X} + X\right)Y = \{-(e-2)\}\left(\frac{\partial}{\partial X} + X\right)Y \quad (10)$$

ここで(4)式を思い出すと、 $(\partial/\partial X + X)Y$ を新しい波動関数 F と考えることができる。

すると(10)式は

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} - X^2\right)F = -(e-2)F \quad (11)$$

となり、波動関数 F は固有値 $(e-2)$ を持つということになる。

つまり、方程式に左から $(\partial/\partial X + X)$ を掛けてやると、固有値が2つ下がることになるのである。すると $(\partial/\partial X - X)$ を掛けてやると固有値が2つ上がるのかということになる訳だが、これは各自で試していただきたい。このように固有値をアップダウンさせる演算子を「階段演算子」と呼んでいる。

ところで、階段演算子 $(\partial/\partial X + X)$ を掛けてやると、固有値が2つ下がると言ったが、エネルギーはプラスでないと困るから、 $(\partial/\partial X + X)$ を何回か掛けた時点でそれ以上固有値は下げられなくなる。つまり、どこかで波動関数 $(\partial/\partial X + X)Y$ はゼロにならなければならない。

$$(\partial/\partial X + X)Y = 0 \quad (12)$$

これに $(\partial/\partial X - X)$ を掛けると

$$(\partial/\partial X - X)(\partial/\partial X + X)Y = \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} - X^2 + 1\right)Y = -(e-1)Y = 0 \quad (13)$$

つまり、最低のエネルギー固有値は $e = 1$ であることが判明する。そこで

$$e - 2n = 1, \quad e = 2n + 1$$

元のエネルギーは $E = \hbar \omega e / 2$ であるから、最終的に

$$E = (n + 1/2) \hbar \omega$$

となる。

さて、いよいよ第4コーナーに差しかかった(^^)。

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{\partial}{\partial X} \quad \text{よ} \text{り} \quad \frac{\partial}{\partial X} = i \sqrt{\frac{1}{\hbar m \omega}} p_x \quad (14)$$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} X \quad \text{よ} \text{り} \quad X = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (15)$$

ここで「階段演算子」を p, x を使って書きなおすと

$$\begin{aligned}\partial/\partial X - X &= i\sqrt{\frac{1}{\hbar m \omega}} p_x - \sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} x \\ &= \frac{i}{\sqrt{m \hbar \omega}} (p_x + im \omega x) \approx a^*\end{aligned}\tag{16}$$

$$\begin{aligned}\partial/\partial X + X &= i\sqrt{\frac{1}{\hbar m \omega}} p_x + \sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} x \\ &= \frac{i}{\sqrt{m \hbar \omega}} (p_x - im \omega x) \approx a\end{aligned}\tag{17}$$

この(16), (17)式はまさに生成消滅演算子に該当している。

(以上)