量子力学　第１１回　演習解答

問題１.

以下のハミルトニアンで表される１次元調和振動子

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

に対して $\hat{H}' = g\hat{x}$ という摂動が働いたとする．g は実定数であり，無摂動ハミルトニアン $\hat{H}_0$ に対する固有ベクトル $|n\rangle$ $(n = 0,1,2\cdots)$（$|n\rangle$ は完全規格直交系）及びエネルギー固有値 $\varepsilon_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$ は既に求められているものとする．以下の問に答えよ．答えだけでなく，導出過程も明記すること．なお生成演算子 $\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}$，消滅演算子 $\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}$，個数演算子 $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ とし，$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$，$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$，$\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle$ 等の関係式は証明せずに用いても良い．

（1）　基底状態 $|0\rangle$ に対する１次の摂動エネルギー $\varepsilon_0^{(1)}$ 及び２次の摂動エネルギー $\varepsilon_0^{(2)}$ を求めよ．

【解答】

１次の摂動エネルギー：

$$\begin{aligned}\varepsilon_0^{(1)} &= \langle 0|g\hat{x}|0\rangle \\ &= g\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle 0|\hat{a}+\hat{a}^\dagger|0\rangle \\ &= 0 \\ &\left(\because \langle 0|\hat{a}|0\rangle = 0, \langle 0|\hat{a}^\dagger|0\rangle = \langle 0|1\rangle = 0\right)\end{aligned}$$

２次の摂動エネルギー：

$$\varepsilon_0^{(2)} = \sum_{n\neq 0}^{\infty}\frac{\left|\langle n|g\hat{x}|0\rangle\right|^2}{\varepsilon_0^{(0)} - \varepsilon_n^{(0)}}$$

ここで

$$
\begin{aligned}
\langle n | g\hat{x} | 0 \rangle &= g\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | 0 \rangle \\
&= g\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n | 1 \rangle \qquad \left(\because \hat{a} | 0 \rangle = 0, \hat{a}^\dagger | 0 \rangle = | 1 \rangle \right) \\
&= g\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \delta_{n1}
\end{aligned}
$$

であることから，

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_0^{(2)} &= \frac{g^2\hbar}{2m\omega} \cdot \frac{1}{(1/2 - 3/2)\hbar\omega} \\
&= -\frac{g^2}{2m\omega^2}
\end{aligned}
$$

となることがわかる．

　これより，２次の摂動エネルギーまで取り込んだエネルギー固有値の近似解は，

$$
\varepsilon_0 = \varepsilon_0^{(0)} + \varepsilon_0^{(1)} + \varepsilon_0^{(2)} = \frac{1}{2}\hbar\omega - \frac{g^2}{2m\omega^2}
$$

となる．

（補足）基底状態に対しては全ての n に対して $\varepsilon_0^{(0)} - \varepsilon_0^{(n)} < 0$ となるので，2 次の摂動エネルギー $\varepsilon_0^{(2)}$ は必ず負となる．

(2)　　$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ に対するエネルギー固有値 ε_n を“摂動近似を用いずに”厳密に求めよ．（ヒント：$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ を式変形し，x 座標を平行移動（$x \to x'$）する．$\hat{H}_0' = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}'^2$）の $|n\rangle$ に対するエネルギー固有値が $\varepsilon_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ であることを用いても良い）．

【解答】

　ハミルトニアンは次のように変形できる．

$$
\begin{aligned}
\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}' \\
&= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + g\hat{x} \\
&= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(\hat{x} + \frac{g}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{g^2}{2m\omega^2}
\end{aligned}
$$

ここで $\hat{x}'=\hat{x}+\dfrac{g}{m\omega^2}$ とおくと，

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

である．

$\hat{H}_0'=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}+\dfrac{1}{2}m\omega^2\hat{x}'^2$ の $|n\rangle$ に対するエネルギー固有値が $\hbar\omega\left(n+\dfrac{1}{2}\right)$ であることを用いると，

$$\begin{aligned}\hat{H}|n\rangle&=\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}'^2-\frac{g^2}{2m\omega^2}\right)|n\rangle\\&=\left\{\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{g^2}{2m\omega^2}\right\}|n\rangle\qquad(n=0,1,2\cdots)\end{aligned}$$

となる．すなわち，$|n\rangle$ に対するエネルギー固有値は $\varepsilon_n=\hbar\omega\left(n+\dfrac{1}{2}\right)-\dfrac{g^2}{2m\omega^2}(n=0,1,2\cdots)$ であり，全ての $|n\rangle$ において $-\dfrac{g^2}{2m\omega^2}$ だけエネルギーが低くなることがわかる．

(3)　（１）と（２）の結果を比較し，３次以上の摂動エネルギーがどのような値を取るか議論せよ．

【解答】

（２）の結果から，基底状態 $|0\rangle$ に対するエネルギーの厳密解は $\varepsilon_0=\dfrac{1}{2}\hbar\omega-\dfrac{g^2}{2m\omega^2}$ となる．一方（１）の結果から，２次の摂動項まで取りこんだエネルギーは $\varepsilon_0=\varepsilon_0^{(0)}+\varepsilon_0^{(1)}+\varepsilon_0^{(2)}=\dfrac{1}{2}\hbar\omega-\dfrac{g^2}{2m\omega^2}$ となり，（２）で求めた厳密解と一致する．これより３次以上の摂動エネルギーは０となることがわかる．