

5. 調和振動子

調和振動子(harmonic oscillator)はポテンシャル問題の一つではあるが、古典力学の場合と同様、基礎的に重要な系であるばかりでなく応用範囲も広い。調和振動子の固有関数とエネルギー固有値を求めるには、Schrödinger方程式を解く「解析的な方法」と、交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ から始める「代数的な方法」がある。この章では両方の方法を見てみることにする。

5-1. 古典力学での取り扱い（復習）

最初に、古典力学の復習をしておく。粒子の質量 m を、時刻での粒子の平衡点 ($x = 0$) からの変位を x とする。また、ばね定数を K とすると調和振動子のポテンシャルは $V(x) = 1/2 Kx^2$ と表され、粒子に働く復元力は $F = -\frac{\partial V(x)}{\partial x} = -Kx$ となる。Newtonの運動方程式は

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = -Kx(t) \quad (5-1-1)$$

で与えられる。 $\omega \equiv \sqrt{k/m}$ とおくと、一般解は、

$$x(t) = C_1 e^{i\omega t} + C_2 e^{-i\omega t} \quad (5-1-2)$$

$$= a \cos \omega t + b \sin \omega t \quad (5-1-3)$$

$$= A \cos(\omega t + \delta), \quad (A = \sqrt{a^2 + b^2}, \tan \delta = b/a) \quad (5-1-4)$$

のように書ける。 $V(x)$ は K の代わりに ω を使って、

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (5-1-5)$$

のようにも書ける。

5-2. 量子力学による解析的取り扱い

5-2-1. 定性的な考察

ポテンシャル $V(x) = 1/2 kx^2$ の場合の固有値や波動関数の形を前章の4-3-3（有限井戸）、4-3-4（深さの変わる井戸）や演習11の2（三角ポテンシャル）などに習って定性的に予想してみる。

まず、束縛状態なので、エネルギー固有値は離散的になる（ただし、エネルギー間隔については、すぐには分からない）。また、基底状態のエネルギーは上げ底になっていてゼロではないエネルギー（ゼロ点エネルギー）を持つだろう。これはすでに井戸型のところで述べたが、不確定性原理による。

古典的な粒子であれば、基底状態では平衡の位置に静止しているが、それでは、粒子の位置も運動量もゼロと確定してしまうので両者の物理量の不確定性関係に反してしまう。そのため、平衡点（位置座標の期待値）の周りに量子揺らぎが起こり、有限のゼロ点エネルギーが生じる。「ゼロ点エネルギー」は「ゼロ点振動のエネルギー」と呼ばれることもあるが、平衡点の周りで古典的な意味での振動をしているわけではない。実際、後で示すように基底状態の位置の期待値は $\langle x \rangle_n = 0$ となり時間変化はしない。

次に波動関数の形について考察する。

$V(x)$ は偶関数 ($x=0$ 軸で鏡映対称性) なので、固有関数 $\varphi_n(x)$ は必ず偶関数か奇関数となる。これまで見てきたように、基底状態は偶関数で、励起状態は順番に奇関数、偶関数、奇関数、・・・と並ぶ。エネルギーが高くなると波動関数の空間変化も激しくなる¹ので、その節の数も増えていく。基底状態では $\varphi_0(x)$ は偶関数なので節の数はゼロであるが、励起状態では1, 2, 3・・・となる。

なお、量子数 n の番号の付け方はこれまでと異なるので注意が必要である。これまでは $n=1,2,3,\dots$ と付けていたが、調和振動子では基底状態を $n=0$ とおき、励起状態は $n=1,2,3,\dots$ とつける慣習になっている。この番号の付け方では、 $\varphi_n(x)$ の節の数は n 個となる。

古典力学では全力的エネルギー E と式(5-1-5)のポテンシャル $V(x)$ が等しいところが粒子の転回点となり、運動エネルギー $E - V(x) > 0$ の範囲内で運動が起こる(単振動する)。

しかし、前章の有限井戸で見てきたように、量子力学では $E - V(x) < 0$ の領域にも波動関数は浸み出す。有限井戸では $E < V(x) = V_0$ の領域で $\varphi(x) \sim e^{-\alpha x}$ ($x > 0$) のように指数関数的に減衰した。ここで、 $\alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$ である。

調和振動子の場合 $V(x)$ は定数ではなく x とともに増加するので α も定数ではなく x とともに増加することになる²。すなわち、 $\alpha(x) = \sqrt{2m(\frac{1}{2}Kx^2 - E)/\hbar^2}$ 。従って、 $\varphi(x) \sim e^{-\alpha(x)x}$ ($x > 0$) となるから、 x が増加すると $\varphi(x)$ は **指数関数より早く減衰する**であろう。

今、 $x \rightarrow \infty$ を考えると、

$$\alpha(x) = \sqrt{\frac{2m(\frac{1}{2}Kx^2 - E)}{\hbar^2}} \rightarrow \sqrt{\frac{mK}{\hbar^2}}x = cx \quad (5-2-1)$$

となり³、 $\alpha(x)$ は x に比例する。比例定数を c とおいて、

$$\varphi(x) \sim e^{-(cx)x} = e^{-cx^2} \quad (5-2-2)$$

こうして、 x の大きなところでは式(5-2-2)のガウス形の波動関数が予想されるが、基底状態においては「節のない偶関数」になるはずであるから、ポテンシャル外部のみならず内部においてもガウス形で、「全体が一つのガウス形波動関数」となる可能性がある。一方、励起状態では $E > V(x)$ の領域で n 個の節を持たなければならないから、

$$\varphi_n(x) \sim (\text{n 次の多項式}) \times e^{-cx^2} \quad (5-2-3)$$

が予想される。

¹ 運動量演算子は(波動関数の)空間微分の形をしていたことを思い出そう。空間変化が激しければ運動量が大きくなり、また、運動エネルギーも大きくなる。

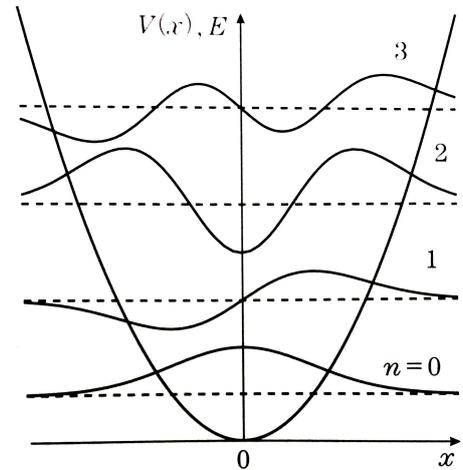
² 演習11の問題の三角ポテンシャルでも同じことが起きた。

³ 平方根の分子において、 x が充分大きいところでは $1/2 K x^2 \gg E$ であるから E は無視できる

ここで、ガウス関数に「 n 次の多項式」がかかっているのは、 n 次の多項式が x 軸と n 回交わるから n 個の節を表現できるからである。また、 $x \rightarrow \pm\infty$ の場合、ガウス関数の方が多項式より早くゼロに収束するので、式(5-2-3)は $x \rightarrow \pm\infty$ で $\varphi_n(x) \rightarrow 0$ なる境界条件を満たしている。

次に固有関数の波長や大きさの空間変化について述べておく(4-3-4節での議論参照)。今、運動エネルギー $E - V(x) > 0$ は平衡点 ($x = 0$) で一番大きく、平衡点から離れると小さくなる。従って、平衡点の付近では一番、波長が短く、また、波動関数の大きさも小さい。平衡点から離れるにつれ、波長は長くなり、波動関数の大きさも増していくはずである。

これらを考慮して、右図に予想される波動関数の形⁴を示す。



5-2-2. 調和振動子の解析解

解くべき調和振動子のSchrödinger方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (5-2-4)$$

となる。ポテンシャルは(5-1-5)の形を使った。

・基底状態

5-2-1の定性的考察より、基底状態の固有関数として(5-2-2)のガウス型の関数を仮定する。規格化定数を N_0 とおいて、

$$\varphi_0(x) = N_0 e^{-cx^2} \quad (5-2-5)$$

式(5-2-5)を式(5-2-4)に代入すると、 x^2 と x^0 の項の和 = 0 という形にまとめることができる(演習)。

$$\left[-\frac{2\hbar^2 c^2}{m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \right] x^2 + \left[\frac{\hbar^2 c}{m} - E_0 \right] = 0 \quad (5-2-6)$$

式(5-2-5)が式(5-2-4)の解であるためには式(5-2-6)が恒等的に成り立たなければならない。この条件は式(5-2-6)の x^2 と x^0 の係数が0となる事である。すなわち、 $c = \frac{m\omega}{2\hbar}$ 、 $\frac{\hbar^2 c}{m} = E_0$ がそれぞれ得られる。

$\alpha \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ とおくと、 $c = \frac{1}{2} \alpha^2$ なので、基底状態 ($n = 0$) の固有関数 $\varphi_0(x)$ とエネルギー固有値 E_0

は、
$$\varphi_0(x) = N_0 e^{-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2}, \quad E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (5-2-7)$$

となり、基底状態のエネルギー E_0 はゼロでない値を持つ(前節で議論したゼロ点エネルギー)。

⁴実際は、この図には予想ではなく、「正確な固有関数」を書いてある。(図は 勝本 著、「量子の匠」(丸善) 5.3節より)

・励起状態

5-2-1の定性的考察より、第n励起状態の固有関数として(5-2-3)の「(n次の多項式) × ガウス型の関数」を仮定する。

$$\varphi_n(x) = N_n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}, \quad (\xi \equiv \alpha x) \quad (5-2-8)$$

ここで、 N_n はn励起状態の固有関数の規格化定数、 $H_n(\xi)$ はn次の多項式で $H_n(\xi) \equiv \sum_{l=1}^n a_l \xi^l$.

$\varphi_n(x)$ と E_n を求める手順を簡略化して述べる。

まず、式(5-2-8)を調和振動子のSchrödinger方程式(5-2-4)に代入し、 $H_n(\xi)$ の満たすべき方程式、

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + (\varepsilon - 1)H_n(\xi) = 0, \quad (\varepsilon \equiv E_n/E_0) \quad (5-2-9)$$

を得る⁵。これは、「**エルミート (Hermite) の微分方程式**」と呼ばれている。

次に、エルミートの微分方程式を解くため、 $H_n(\xi) = \sum_{l=1}^n a_l \xi^l$ を代入すると、展開係数 a_l の間

の漸化式
$$a_{l+2} = -\frac{\varepsilon - 1 - 2l}{(l+2)(l+1)} a_l \quad (5-2-10)$$

を得る。(5-2-10)で a_0 を与えれば、 a_2, a_4, a_6, \dots のように偶数次の係数が求まり、 a_1 を与えれば、 a_3, a_5, a_7, \dots のように奇数次の係数が求まる。これは、それぞれ、偶パリティ、奇パリティを持った関数(偶関数、奇関数)に対応する。 $H_n(\xi)$ は有限級数でn次の多項式としているから、漸化式(5-2-10)の右辺が $l = n$ でゼロになる必要がある⁶。このためには、(5-2-10)の右辺の分子がゼロになれば良いから、 $\varepsilon = E_n/E_0 = E_n/(\frac{1}{2}\hbar\omega) = 2n + 1$ より、

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (5-2-11)$$

となり、第n励起状態のエネルギー固有値が得られる。**ゼロ点振動のエネルギーの底上げ分を除くと、エネルギーは $\hbar\omega$ の間隔で、等間隔に並んでいることがわかる。**

(5-2-10)、(5-2-11)で決まる多項式 $H_n(\xi)$ は「エルミートの多項式」と呼ばれる。具体的な形を最初の $n = 0 \sim 4$ について書くと、

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1 \\ H_1(\xi) &= 2\xi \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2 \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi \\ H_4(\xi) &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12 \end{aligned} \quad (5-2-12)$$

となる。

⁵ $H''(\xi)$ 、 $H'(\xi)$ の「''」と「'」は、 $H(\xi)$ の ξ による2階微分、1階微分の意味である。

⁶ そうでなければ $n+2$ の係数も存在してしまい n 次の多項式という前提に反してしまう。

式(5-2-8)より、これに $e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ (偶関数) をかけたものが、量子数 n の固有関数 $\varphi_n(x)$ であるから、確かに、固有関数は基底状態から偶関数、奇関数、偶関数、・・・のように並んでいることがわかる⁷。

エルミートの多項式は、次のような「**エルミートの多項式の母関数**」と呼ばれる関数 $g(\xi, t)$ のマクローリン展開からも得られる(これをエルミートの多項式の定義とする場合がある)(演習)。

$$g(\xi, t) \equiv e^{-t^2+2t\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\xi) \frac{t^n}{n!} \tag{5-2-13}$$

また、**エルミートの多項式の「関数表示**」と呼ばれる

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \tag{5-2-14}$$

で定義されることもある(演習)。式(5-2-13) (5-2-14)は数学的に同等⁸であるので、どちらかでエルミートの多項式を定義すれば良い⁹。

式(5-2-8)の規格化定数は $N_n = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}}$ となる事が示せる(証明略)ので、

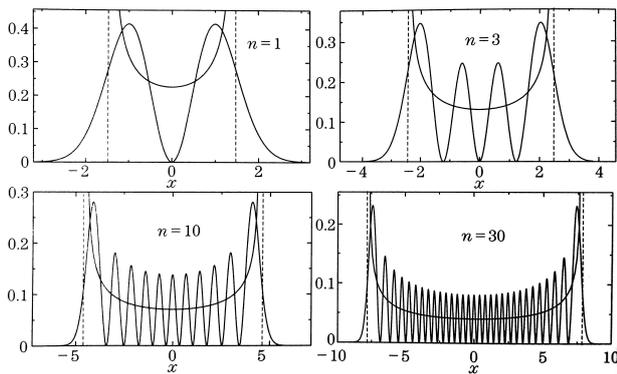
結局、調和振動子の波動関数とエネルギー固有値は、

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \tag{5-2-15}$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \tag{5-2-16}$$

となる($\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$)。

$\varphi_n(x)$ と E_n の様子は5-2-1節末(p.21)の図に示しておいた。 $|\varphi_n(x)|^2$ は左下の図¹⁰に示す。



縦の破線は $E = V(x)$ の点で、古典的な粒子の転回点である。図には、量子力学的な確率密度 $|\varphi_n(x)|^2$ (振動している曲線) の他に、古典力学で得た確率密度も描いてある¹¹。

転回点に近づくとき古典的な粒子の速度も落ちるので滞在時間が長くなり確率密度が増える。転回点では古典的粒子は静止するので、確率密度は無限大になる。

一方、量子力学的な確率密度は古典的な存在確率に沿って干渉縞を生じていることがわかる。

⁷ 偶関数 × 偶関数 = 偶関数、偶関数 × 奇関数 = 奇関数

⁸ 例えば、前野著「よくわかる量子力学」第11章の演習問題

⁹ 式(5-2-12)のようにすると、すべての n について列記しなければならない。

¹⁰ 図は 勝本 著、「量子の匠」(丸善) 5.3節より

¹¹ ある微小領域に滞在する時間、として計算

ただし、無限井戸の場合と同様に、どの固有状態でも粒子を見出す位置の期待値 $\langle x \rangle_n$ はゼロになり、時間変化はしないので、粒子が振動しているという古典的な描像はでてこない。粒子の往復運動をする状態は、無限井戸の場合と同様に、いくつかの固有状態を重ね合わせる必要がある。これについては、後で議論する（演習参照）。

また、図より、量子的調和振動では $E < V(x)$ の領域（縦線より外側）でも、波動関数の浸み出しに対応して、粒子を見出す確率があることがわかる。

5-3. 調和振動子の代数的解法

この節では、交換関係から出発して調和振動子のハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \quad (5-3-1)$$

の固有値と固有ケット（及び、位置表示の固有関数）を代数的に求める。

5-3-1. 準備

最初に、新しい演算子をいくつか定義し、それらの交換関係を調べる。

- 消滅演算子(annihilation operator)

$$\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right) \quad (5-3-2)$$

- 生成演算子(creation operator)

$$\hat{a}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right) \quad (5-3-3)$$

\hat{a} と \hat{a}^\dagger はエルミート共役の関係にあるが、明らかにエルミート演算子ではない ($\hat{a} \neq \hat{a}^\dagger$)。

- \hat{a} と \hat{a}^\dagger の交換関係

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (5-3-4)$$

(証明) (5-3-2)、(5-3-3)を代入して

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right), \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right) \right] \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar} \left[[\hat{x}, \hat{x}] + \frac{i}{m\omega} [\hat{p}, \hat{x}] - \frac{i}{m\omega} [\hat{x}, \hat{p}] - \frac{i^2}{m^2\omega^2} [\hat{p}, \hat{p}] \right] = 1 \end{aligned} \quad (5-3-5)$$

ここで、交換関係、 $[\hat{x}, \hat{x}] = [\hat{p}, \hat{p}] = 0$ 、 $[\hat{x}, \hat{p}] = -[\hat{p}, \hat{x}] = i\hbar$ を使った。

・個数演算子

$$\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (5-3-6)$$

個数演算子 \hat{N} は $\hat{N}^\dagger = \hat{N}$ なのでエルミート演算子である。 ($(\hat{X}\hat{Y})^\dagger = \hat{Y}^\dagger \hat{X}^\dagger$ を使う (演習))。調和振動子のハミルトニアン (式(5-3-1))は \hat{N} を使って、

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) \quad (5-3-7)$$

と書ける¹²。

今、 \hat{N} の固有状態を $|n\rangle$ 、固有値を n とすると、

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle. \quad (5-3-8)$$

\hat{H} を $|n\rangle$ に作用させると、

$$\begin{aligned} \hat{H}|n\rangle &= \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) |n\rangle \\ &= \hbar\omega \hat{N}|n\rangle + \frac{1}{2}\hbar\omega |n\rangle \\ &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega |n\rangle \end{aligned} \quad (5-3-9)$$

これより、 \hat{N} の固有状態 $|n\rangle$ は \hat{H} の固有状態でもあり (同時固有状態¹³)、そのエネルギー固有値 E_n は $\left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$ であることがわかる。 解析的に求めた固有状態のエネルギー (5-2-16)式と同じ式が得られたが、この段階では n が $n = 0, 1, 2, \dots$ であることは、まだわからない¹⁴。

n について調べる前に、いくつかのことを準備する。

・ \hat{N} と \hat{a} あるいは \hat{a}^\dagger との交換関係

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a} \quad (5-3-10)$$

$$[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \quad (5-3-11)$$

これらの関係は容易に求められる¹⁵。

¹² これを導け (演習) 手順: 式(5-3-2)、(5-3-3)を (5-3-6) に代入して変形。

¹³ これは \hat{N} と \hat{H} の演算子の交換関係がゼロ、 $[\hat{N}, \hat{H}] = 0$ 、であることから確かめられる。同時固有状態に関しては3-6-3節をみよ。

¹⁴ 演算子 \hat{N} がエルミートなので、固有値 n は少なくとも実数である (複素数でない) ことはわかる。

¹⁵ 演習

・ $\hat{a}^\dagger |n\rangle$ 、 $\hat{a} |n\rangle$

\hat{a}^\dagger と \hat{a} が何かを知るために、 \hat{N} を左から $\hat{a}^\dagger |n\rangle$ 、 $\hat{a} |n\rangle$ に作用させて見る。

まず、 $\hat{N}(\hat{a}^\dagger |n\rangle)$ を調べる。

$$\begin{aligned}\hat{N}(\hat{a}^\dagger |n\rangle) &= (\hat{N}\hat{a}^\dagger + (-\hat{a}^\dagger\hat{N} + \hat{a}^\dagger\hat{N}))|n\rangle = ([\hat{N}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger\hat{N})|n\rangle \\ &= \hat{a}^\dagger |n\rangle + \hat{a}^\dagger |n\rangle \\ &= (n+1)(\hat{a}^\dagger |n\rangle)\end{aligned}\quad (5-3-12)$$

ここで、式(5-3-8) $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$ と交換関係 (5-3-11) $[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$ を使った。

(5-3-12)の最初と最後の式を見ると、 $\hat{a}^\dagger |n\rangle$ は \hat{N} の固有状態になっていて、その固有値は $n+1$ であることがわかる。

すなわち、

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = c' |n+1\rangle \quad (5-3-13)$$

とおける。 c' は後で決める。 \hat{a}^\dagger を $|n\rangle$ に作用させると、状態が $|n+1\rangle$ に変化し、 n が $n+1$ に1つ増える。これが \hat{a}^\dagger が「生成演算子」と呼ばれる理由である。

次に、同様にして、 $\hat{N}(\hat{a} |n\rangle)$ を調べる。

$$\begin{aligned}\hat{N}(\hat{a} |n\rangle) &= (\hat{N}\hat{a} + (-\hat{a}\hat{N} + \hat{a}\hat{N}))|n\rangle = ([\hat{N}, \hat{a}] + \hat{a}\hat{N})|n\rangle \\ &= -\hat{a} |n\rangle + \hat{a} |n\rangle \\ &= (n-1)(\hat{a} |n\rangle)\end{aligned}\quad (5-3-14)$$

ここで、交換関係 (5-3-10) $[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}$ を使った。

(5-3-14)の最初と最後の式を見ると、 $\hat{a} |n\rangle$ は \hat{N} の固有状態になっていて、その固有値は $n-1$ であることがわかる。

すなわち、

$$\hat{a} |n\rangle = c |n-1\rangle \quad (5-3-15)$$

とおける。 c は後で決める。 \hat{a} を $|n\rangle$ に作用させると、状態が $|n-1\rangle$ に変化し、 n が $n-1$ に1つ減る。このため \hat{a} は「消滅演算子」と呼ばれる。

続いて、(5-3-13)、(5-3-15)の係数 c' と c を決める。

ケット空間での $\hat{a} |n\rangle = c |n-1\rangle$ はブラ空間では $\langle n | \hat{a}^\dagger = \langle n-1 | c^*$ であることに注意すると¹⁶、

$$\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = \langle n | \hat{N} |n\rangle = n \langle n |n\rangle = n, \quad ^{17} \quad (5-3-16)$$

は一方で、

$$\langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} |n\rangle = \langle n-1 | c^* c |n-1\rangle = |c|^2 \quad (5-3-17)$$

となるので、 $|c|^2 = n$ 、より $c = \sqrt{n}$ が得られる。

¹⁶ 3-4-3節、(3-4-16)式参照。 ~~$\langle n | \hat{a}^\dagger = \langle n+1 | c^*$ (これは間違っている式) としてはいけない。~~

¹⁷ $|n\rangle$ は規格化されているとする。 $\langle n |n\rangle = 1$

同様に、 $c' = \sqrt{n+1}$ が得られる¹⁸ので、

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (5-3-18)$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (5-3-19)$$

となる。

5-3-2. 調和振動子の固有値とケット版固有状態

この節では、 n の取りえる範囲を決めて、調和振動子のエネルギー固有値を求めるとともに、固有ケットを求める。

$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ に \hat{a} を次々と作用させていくと、

$$\begin{aligned} \hat{a}|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle \\ \hat{a}^2|n\rangle &= \sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle \\ \hat{a}^3|n\rangle &= \sqrt{n(n-1)(n-2)}|n-3\rangle \end{aligned} \quad (5-3-20)$$

.....

を得るが、この系列はどこまで続くのだろうか。

式(5-3-16)より、 $\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \langle n|\hat{N}|n\rangle = n$ であるが、この式は、 $\hat{a}|n\rangle$ なるベクトルの内積とみなせるので、 n は負になることはなく、必ず0か正の値となる（ベクトルのノルム ≥ 0 ）。また、 n は0, 1, 2, 3, ... のように**0と正の整数しかとらない**。なぜなら、もし、2.5のように中途の n があれば、何回か \hat{a} を作用させると n の負の状態が作れてしまうからである。これは n が非負である事に反する。式(5-3-9)で、 \hat{N} の固有状態 $|n\rangle$ は \hat{H} の固有状態でもあり、そのエネルギー固有値は $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ となることまではわかっていたので、基底状態（エネルギーの最小の状態）は n の取り得る値の最小値、すなわち、 $n = 0$ に対応した $|0\rangle$ となる。（基底状態より下の状態はないので、 $\hat{a}|0\rangle = 0$ である事に注意）

なんども述べたように、 \hat{N} の固有状態 $|n\rangle$ は \hat{H} の固有状態でもあるので、励起状態は $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle, \dots$ となる（式(5-3-9)より、 n が大きいほどエネルギーが大きくなることに対応）。

次に、この励起状態のケット $|n\rangle$ を基底状態のケット $|0\rangle$ を使って表す。

$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ だったので、

$$\begin{aligned} |1\rangle &= \hat{a}^\dagger|0\rangle \\ |2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^\dagger|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}}(\hat{a}^\dagger)^2|0\rangle \\ |3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}\hat{a}^\dagger|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3!}}(\hat{a}^\dagger)^3|0\rangle \end{aligned} \quad (5-3-21)$$

のように続けると、

¹⁸ 確かめよ

励起状態のケット

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \quad (5-3-22)$$

が得られる。こうして、代数的な方法により、調和振動子の固有ケット (5-3-22) とエネルギー固有値、

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (5-3-23)$$

が得られた。

5-3-3. 位置表示でのエネルギー固有関数

この節では、式(5-3-22)で表された固有ケットの位置表示(x-表示)を求め、Schrödinger方程式より解析的に解いた固有関数と同じになることを示す。

\hat{x} の固有ケット $|x\rangle$ は正規直交基底ケットとして無限次元の複素ベクトル空間を張るので、任意の状態ケット、ここでは調和振動子の固有ケット $|n\rangle$ は以下のように書ける¹⁹。

$$|n\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n(x) |x\rangle dx \quad (5-3-24)$$

$$\varphi_n(x) = \langle x | n \rangle \quad (5-3-25)$$

$\varphi_n(x)$ は $|x\rangle$ を基底にとったときの位置表示(x-表示)の波動関数 (n 励起状態の固有関数) である。解析的な方法で求めた固有関数は(5-3-25)に対応する。従って、 $\varphi_n(x)$ を求めるには、 $|n\rangle$ の左からブラ $\langle x |$ をかければ良い。

・基底状態の固有関数

$\hat{a}|0\rangle = 0$ から出発する。この式は、基底状態よりnの小さい状態 ($n < 0$) は無いので、消滅演算子 \hat{a} を基底状態 $|0\rangle$ に作用させてもゼロ (状態が無い)、という意味である。

$\hat{a}|0\rangle$ の左から、 $\langle x |$ をかけても $\langle x | \hat{a}|0\rangle = 0$ なので、

$$\begin{aligned} \langle x | \hat{a}|0\rangle &= \langle x | \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) |0\rangle \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \langle x | \hat{x}|0\rangle + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \cdot \frac{i}{m\omega} \langle x | \hat{p}|0\rangle \quad (*) \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \langle x | 0\rangle + \frac{\hbar}{\sqrt{2\hbar m \omega}} \frac{\partial}{\partial x} \langle x | 0\rangle = 0 \quad (5-3-26) \end{aligned}$$

となる。(*) の式の中の下線部は、(3-8-9)、(3-8-46)式より

$$\langle x | \hat{x} = \langle x | x, \quad \langle x | \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x | \quad (5-3-27) \quad \text{で置き換えた}^{20}。$$

¹⁹ この辺のことを忘れた人は 3-8-1節、3-8-2節、4-1節を復習しなさい

²⁰ 4-1節も参照。(4-1-6)式でも登場

式(5-3-26)式の $\langle x|0\rangle$ は(5-3-25)より基底状態の固有関数 $\varphi_0(x)$ を表しているの、 $\varphi_0(x)$ を求める方程式、

$$x\varphi_0(x) + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{\partial}{\partial x}\varphi_0(x) = 0 \quad (5-3-28)$$

とみなせる。変形すると、

$$\frac{d}{dx}\varphi_0(x) = -\alpha^2 x\varphi_0(x) \quad (5-3-29)$$

となる。ただし、(5-2-7)式に合わせて、 $\alpha^2 = \frac{m\omega}{\hbar}$ と置いた。これを解いて、基底状態の固有関数、

$$\varphi_0(x) = N_0 e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \quad (5-3-30)$$

が得られる。これは、解析解(5-2-7)式と同じ結果になる。規格化定数は $N_0 = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}$ である²¹。

・励起状態の固有関数

第1励起状態 (n=1)の固有関数は、

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= \langle x|1\rangle = \langle x|\hat{a}^\dagger|0\rangle \\ &= \langle x|\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega}\right)|0\rangle \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{\partial}{\partial x}\right)\langle x|0\rangle \\ &= \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\left(x - \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_0(x) \end{aligned} \quad (5-3-31)$$

のようになるので、 $\varphi_0(x)$ を微分することで得られる。同様に、第 n 励起状態の固有関数 $\varphi_n(x)$ は、(5-3-22)式を使い、 $\varphi_0(x)$ から次の式で得られる。

$$\begin{aligned} \varphi_n(x) &= \langle x|n\rangle = \langle x|\hat{a}^\dagger^n|0\rangle \\ &= \langle x|\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{\alpha}{\sqrt{2}}\right)^n\left(x - \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial}{\partial x}\right)^n \varphi_0(x) \end{aligned} \quad (5-3-32)$$

結局、励起状態の波動関数は

$$\varphi_n(x) = \frac{\alpha^{n+1/2}}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}}\left(x - \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial}{\partial x}\right)^n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \quad (5-3-33)$$

より求まる。ここでは省略するが、(5-3-33)式をエルミートの多項式の「関数表示」(5-2-14)式を使えるように変形すると、解析解である「エルミートの多項式」 x 「ガウス関数」の形(5-2-15)式、

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \quad (5-3-34)$$

になることを示せる²²。あるいは、実際にnを決めて(5-3-33)を計算しても確かめることができる。

²¹ 確かめよ。

²² 例えば、松居著「量子力学基礎」第6章の章末問題「37」

5-4. 不確定性関係

調和振動子の固有状態(量子数 n)における不確定性関係を調べる。

位置と運動量の間不確定性関係は(3-6-15)式より、一般に、

$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (5-4-1)$$

とかける。

調和振動子の n に対して、 $\langle \hat{x} \rangle_n, \langle \hat{p} \rangle_n, \langle \hat{x}^2 \rangle_n, \langle \hat{p}^2 \rangle_n$ を計算することにより、 n の状態での不確定性関係を求めることができる。ここで、 $\langle \hat{M} \rangle_n \equiv \langle n | \hat{M} | n \rangle$ である。

計算は解析解の固有関数を使って積分で求めるより、 \hat{x}, \hat{p} を式(5-3-2)(5-3-3)から \hat{a}, \hat{a}^\dagger で表し、 $|n\rangle$ の正規直交性と $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ を使って求める方が楽である。(実際に値を求めるのは演習とする)

計算すると、 $\langle \hat{x} \rangle_n = 0, \langle \hat{p} \rangle_n = 0, \langle \hat{x}^2 \rangle_n = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1), \langle \hat{p}^2 \rangle_n = \frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1)$ となるので、

$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle_n = \langle \hat{x}^2 \rangle_n - \langle \hat{x} \rangle_n^2 \quad (5-4-2)$$

$$\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle_n = \langle \hat{p}^2 \rangle_n - \langle \hat{p} \rangle_n^2 \quad (5-4-3)$$

から、

$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle_n \langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle_n = \frac{\hbar^2}{4}(2n+1)^2 \quad (5-4-4)$$

となり、不確定性関係(5-4-1)の不等号を満たしていることがわかる。

同じことであるが、標準偏差で書くと、

$$(\delta \hat{x})_n (\delta \hat{p})_n = \frac{\hbar}{2}(2n+1) \quad (5-4-4)$$

が得られる。ただし、 $(\delta \hat{x})_n = \sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle_n}, (\delta \hat{p})_n = \sqrt{\langle (\Delta p)^2 \rangle_n}$ 。

基底状態では $\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle_0 \langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle_0 = \frac{\hbar^2}{4}$ となり、(5-4-1)の等号の場合にあっている。すなわち

基底状態は最小の不確定性状態にある。これよりガウス型波束は最小不確定性を持つことがわかる。これに対して、励起状態では、 n が増加するほど不確定性が大きくなっていく。

5-5. コヒーレント状態²³

最後に、量子的な調和振動子において「最も古典的な粒子の運動に近い状態」、と言われている「コヒーレント状態」についてふれておく。定常状態(固有状態)においては、その $\langle \hat{x} \rangle_n$ はゼロになって時間変化が起きない。すなわち、粒子が周期運動するイメージは無い。量子力学でもこのような状態を実現するためには、無限井戸の時に示したように、異なる固有状態を重ね合わせ $\sum_n f(n)|n\rangle$ のようにする必要が

ある。その際の重みの絶対値の2乗 ($|f(n)|^2$) が n に関するポアソン分布になるようにすると、波動関数は形が広がらずに左右に運動する波束(ガウス型)となり最小不確定性の波束となる。この状態をコヒーレント状態という。証明は省略するが、面白いことに、「コヒーレント状態は消滅演算子の固有状態」として現れることを示せる。ただし、消滅演算子はエルミート演算子では無いので固有値は複素数となる。

²³ 講義補足。桜井「現代の量子力学」2.3節の最後、同演習2.19、鈴木他著「演習しよう量子力学」演習問題13.3~13.7、24.4

演習12

- 第4励起状態の波動関数 $\varphi_4(x)$ がどんな形をしているかスケッチしなさい。
- 調和振動子の基底状態の波動関数を $\varphi_0(x) = N_0 e^{-cx^2}$ とて調和振動子のSchrödinger方程式に代入し、式(5-2-6) $\left[-\frac{2\hbar^2 c^2}{m} + \frac{1}{2}m\omega^2\right]x^2 + \left[\frac{\hbar^2 c}{m} - E_0\right] = 0$ を導びけ。
- 調和振動子の励起状態の波動関数を $\varphi_n(x) = N_n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ 、 $(\xi \equiv \alpha x, \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}})$ とてSchrödinger方程式に代入し $H_n(\xi)$ の満たすべき方程式がエルミートの微分方程式
$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + (\epsilon - 1)H_n(\xi) = 0, \quad (\epsilon \equiv E_n/E_0)$$
になることを確かめよ。
- エルミート多項式の母関数 $g(\xi, t) \equiv e^{-t^2 + 2t\xi}$ をマクローリン展開することによりエルミートの多項式 $H_0(\xi), H_1(\xi), H_2(\xi), H_3(\xi)$ を求めなさい。
- エルミート多項式の関数表示 $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$ から $H_0(\xi), H_1(\xi), H_2(\xi), H_3(\xi)$ を求めなさい。
- 調和振動子の波動関数より $\langle x \rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n^*(x) x \varphi_n(x) dx$ を求めよ。
(hint: 被積分関数が偶関数か奇関数か調べよ。奇関数なら積分は計算せずともゼロになることがわかる。)
- (1) $\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}$ とした時、 $[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}$, $[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$ を示せ。
(2) \hat{N} はエルミート演算子であることを示せ。
(3) $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + 1/2)$ であることを示せ。
- \hat{x}, \hat{p} を \hat{a}, \hat{a}^\dagger で表し、調和振動子のn番目の励起状態における $\langle \hat{x} \rangle_n, \langle \hat{p} \rangle_n, \langle \hat{x}^2 \rangle_n, \langle \hat{p}^2 \rangle_n$ を求めなさい。これより、n番目の励起状態における不確定性関係が
$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle_n \langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle_n = \frac{\hbar^2}{4} (2n + 1)^2$$
であることを示せ。
- 調和振動子のエネルギーの固有状態 $|n\rangle$ を基底とした場合の $\hat{a}, \hat{a}^\dagger, \hat{x}, \hat{p}, \hat{H}$ に対応する行列を書け。
- $\langle \hat{x} \rangle$ をできるだけ大きくするような調和振動子の基底状態 $|0\rangle$ と第1励起状態 $|1\rangle$ の重ね合わせ $|\alpha\rangle = C_0|0\rangle + C_1|1\rangle$ の係数 C_0, C_1 を求めよ。初期状態を $|\alpha\rangle = C_0|0\rangle + C_1|1\rangle$ とすると、時刻tでの $|\alpha(t)\rangle$ と $\langle \hat{x}(t) \rangle_\alpha$ を求めよ。