調和振動子

ここでは生成、消滅演算子を使って 1 次元調和振動子のシュレーディンガー方程式の解を求めます。
後半でエルミート方程式の話をしていますが、飛ばして平気です。

　1 次元調和振動子に対するシュレーディンガー方程式を作ります。調和振動子は単振動のことなので、ハミルトニアンは

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

ω は角振動数です。これを演算子化して、1 次元調和振動子のシュレーディンガー方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2)\psi(x,t)$$

これはポテンシャル $V(x)$ でのシュレーディンガー方程式なので、$\psi(x,y) = \phi(t)\chi(x)$ として、時間独立なシュレーディンガー方程式

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2)\chi(x) = E\chi(x) \tag{1}$$

を解けばいいです。しかし、ここでは微分方程式を直接解かずに、ハミルトニアン演算子を見ていくことで固有値 E と固有関数 $\chi(x)$ を求めます。(1) については最後に触れています。
　そのために、$[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = 1$ となる演算子があるときの固有値と固有ベクトルを見ておきます。ブラケットよりベクトルで書いた方が見やすいので、ベクトルを $\boldsymbol{u}$ と書きます。ある演算子 $\hat{T}$ があり、固有値を λ、その固有ベクトルを $\boldsymbol{u}$ とします。そして、$\hat{T}$ との交換関係が

$$[\hat{T}, \hat{B}] = \alpha\hat{B}$$

となる演算子 $\hat{B}$ があるとします。α は定数です。このとき

$$\hat{T}\hat{B}\boldsymbol{u} = \hat{B}\hat{T}\boldsymbol{u} + [\hat{T}, \hat{B}]\boldsymbol{u} = \lambda\hat{B}u + \alpha\hat{B}\boldsymbol{u} = (\lambda+\alpha)\hat{B}\boldsymbol{u}$$

として、固有値が $\lambda+\alpha$ となる $\hat{T}$ の固有ベクトル $\hat{B}\boldsymbol{u}$ が求まります。さらに、$[\hat{A}, \hat{B}] = \alpha$ となる演算子 $\hat{A}$ があるなら

$$[\hat{B}\hat{A}, \hat{B}] = \hat{B}\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{B}\hat{A} = \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}] = \alpha\hat{B}$$

$$[\hat{B}\hat{A}, \hat{A}] = [\hat{B}, \hat{A}]\hat{A} = -\alpha\hat{B}$$

なので、$\hat{T} = \hat{B}\hat{A}$ とすれば

$$\hat{B}\hat{A}(\hat{B}\boldsymbol{u}) = (\lambda+\alpha)(\hat{B}\boldsymbol{u})$$

$$\hat{B}\hat{A}(\hat{A}\boldsymbol{u}) = \hat{A}\hat{B}\hat{A}\boldsymbol{u} + [\hat{B}\hat{A}, \hat{A}]\boldsymbol{u} = (\lambda-\alpha)\hat{A}\boldsymbol{u}$$

として、固有値 $\lambda \pm \alpha$ となる $\hat{T} = \hat{B}\hat{A}$ の固有ベクトル $\hat{B}\boldsymbol{u}, \hat{A}\boldsymbol{u}$ が作れます。

$\hat{T}$ の固有値を実数に制限するにはエルミート演算子にすればよく、$\hat{B} = \hat{A}^\dagger$ とすることで

$$\hat{T} = \hat{A}^\dagger \hat{A}\ ,\ \hat{T}^\dagger = \hat{A}^\dagger \hat{A}$$

として、エルミート演算子にできます。

まとめると、演算子 $\hat{A}$ が

$$[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = 1 \quad (\alpha = 1)$$

であるとき、エルミート演算子 $\hat{T} = \hat{A}^\dagger \hat{A}$ の固有値 λ の固有ベクトル $\boldsymbol{u}$ に対して

$$\begin{aligned}
&\hat{T}\boldsymbol{u} = \lambda \boldsymbol{u} \\
&\hat{T}(\hat{A}^\dagger \boldsymbol{u}) = (\lambda + 1)(\hat{A}^\dagger \boldsymbol{u}) \\
&\hat{T}(\hat{A}\boldsymbol{u}) = (\lambda - 1)(\hat{A}\boldsymbol{u})
\end{aligned}$$

となります。$\hat{A}, \hat{A}^\dagger$ を n 回作用させれば、$\lambda \pm n$ になりますが、これは後で見ます。

適当に定数倍し、適当な定数が加わった $c_1\hat{T} + c_2$ がハミルトニアン演算子になるなら (これによって交換関係は変更されない)、ハミルトニアン演算子の固有値を E、対応する固有状態を $|E\rangle$ として

$$\begin{aligned}
&\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle \\
&\hat{H}(\hat{A}^\dagger|E\rangle) = (E + \epsilon)(\hat{A}^\dagger|E\rangle) \\
&\hat{H}(\hat{A}|E\rangle) = (E - \epsilon)(\hat{A}|E\rangle)
\end{aligned}$$

となるので、エネルギーを離散的に上下させた固有状態が作れます。調和振動子のハミルトニアン演算子はこの状況を作れるので、これを利用します。

古典的なハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
H &= \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + \frac{p^2}{m^2\omega^2}) \\
&= \frac{m\omega^2}{2}(x - i\frac{p}{m\omega})(x + i\frac{p}{m\omega}) \\
&= \hbar\omega\frac{m\omega}{2\hbar}(x - i\frac{p}{m\omega})(x + i\frac{p}{m\omega}) \\
&= \hbar\omega\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x - i\frac{p}{m\omega})\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x + i\frac{p}{m\omega}) \\
&= \hbar\omega a^* a
\end{aligned} \tag{2}$$

と変形できます。a とその複素共役は

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x + i\frac{p}{m\omega})\ ,\ a^* = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x - i\frac{p}{m\omega})$$

これらを演算子化すると、$\hat{x},\hat{p}$ はエルミート演算子なので

$$\hat{a}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x}+i\frac{\hat{p}}{m\omega})\ ,\ \hat{a}^\dagger=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\hat{x}-i\frac{\hat{p}}{m\omega})$$

演算子化した $\hat{a}$ を消滅演算子 (annihilation operator)、$\hat{a}^\dagger$ を生成演算子 (creation operator) と言います。

　ここから演算子のハットを外して書いていきます。(2) は演算子として変形したものでないので、ハミルトニアン演算子を求めます。$a^\dagger,a$ を演算子扱いすることに注意して変形し、$[x,p]=i\hbar$ を使えば

$$\begin{aligned}
\hbar\omega a^\dagger a&=\hbar\omega\frac{m\omega}{2\hbar}(x-i\frac{p}{m\omega})(x+i\frac{p}{m\omega})\\
&=\hbar\omega\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+i\frac{xp}{m\omega}-i\frac{px}{m\omega}+\frac{p^2}{m^2\omega^2})\\
&=\hbar\omega\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+\frac{i}{m\omega}[x,p]+\frac{p^2}{m^2\omega^2})\\
&=\hbar\omega\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2-\frac{\hbar}{m\omega}+\frac{p^2}{m^2\omega^2})\\
&=\hbar\omega\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+\frac{p^2}{m^2\omega^2})-\frac{1}{2}\hbar\omega\\
&=(\frac{m\omega^2x^2}{2}+\frac{p^2}{2m})-\frac{1}{2}\hbar\omega\\
&=H-\frac{1}{2}\hbar\omega
\end{aligned}$$

これからハミルトニアン演算子は

$$\begin{aligned}
\hbar\omega a^\dagger a&=H-\frac{1}{2}\hbar\omega\\
H&=\hbar\omega(a^\dagger a+\frac{1}{2})
\end{aligned}$$

と求まります。後は $a,a^\dagger$ の交換関係が () になっていれば、() と同じ状況になり、生成、消滅演算子 $a^\dagger,a$ は固有状態のエネルギーを上下させる演算子になります。実際に、交換関係は

$$\begin{aligned}
[a,a^\dagger]=aa^\dagger-a^\dagger a&=\frac{m\omega}{2\hbar}(x+i\frac{p}{m\omega})(x-i\frac{p}{m\omega})-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-i\frac{p}{m\omega})(x+i\frac{p}{m\omega})\\
&=\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+\frac{\hbar}{m\omega}+\frac{p^2}{m^2\omega^2})-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2-\frac{\hbar}{m\omega}+\frac{p^2}{m^2\omega^2})\\
&=\frac{m\omega}{2\hbar}\frac{2\hbar}{m\omega}\\
&=1
\end{aligned}$$

となっていて、$|E'\rangle=a|E\rangle$ にハミルトニアン演算子を作用させてみると

$$
\begin{aligned}
H|E'\rangle &= Ha|E\rangle \quad (H|E\rangle = E|E\rangle) \\
&= \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})a|E\rangle \\
&= \hbar\omega(a^\dagger aa + \frac{1}{2}a)|E\rangle \\
&= \hbar\omega([a^\dagger, a]a + aa^\dagger a + \frac{1}{2}a)|E\rangle \\
&= \hbar\omega(-a + aa^\dagger a + \frac{1}{2}a)|E\rangle \\
&= \hbar\omega a(a^\dagger a + \frac{1}{2} - 1)|E\rangle \\
&= a(H - \hbar\omega)|E\rangle \\
&= (E - \hbar\omega)(a|E\rangle) \\
&= (E - \hbar\omega)|E'\rangle
\end{aligned}
$$

として、a は固有値を $E - \hbar\omega$ に下げます。

複数回作用させたときにどうなるかを求めます。交換関係に $a^\dagger$ を右側からかけると

$$
\begin{aligned}
1 &= aa^\dagger - a^\dagger a \\
a^\dagger &= aa^\dagger a^\dagger - a^\dagger aa^\dagger \\
&= a(a^\dagger)^2 - a^\dagger([a, a^\dagger] + a^\dagger a) \\
&= a(a^\dagger)^2 - a^\dagger(1 + a^\dagger a) \\
2a^\dagger &= a(a^\dagger)^2 - (a^\dagger)^2 a \\
&= [a, (a^\dagger)^2]
\end{aligned}
$$

同じことを繰り返すことで

$$
[a, (a^\dagger)^n] = n(a^\dagger)^{n-1} \tag{3a}
$$

同様に

$$
[a^n, a^\dagger] = na^{n-1} \tag{3b}
$$

となります。$a^m|E\rangle$ では、(3b) を使って

$$
\begin{aligned}
H(a^m|E\rangle) &= \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})a^m|E\rangle \\
&= \hbar\omega(a^\dagger a a^m + \frac{1}{2}a^m)|E\rangle \\
&= \hbar\omega([a^\dagger, a^m]a + a^m a^\dagger a + \frac{1}{2}a^m)|E\rangle \\
&= \hbar\omega(-ma^{m-1}a + a^m a^\dagger a + \frac{1}{2}a^m)|E\rangle \\
&= \hbar\omega a^m(a^\dagger a + \frac{1}{2} - m)|E\rangle \\
&= a^m(H - m\hbar\omega)|E\rangle \\
&= (E - m\hbar\omega))(a^m|E\rangle)
\end{aligned}
$$

よって、固有状態 $a^m|E\rangle$ は、固有値 $E - m\hbar\omega$ を持ちます。同様に (3a) を使って $a^\dagger$ で行えば

$$
\begin{aligned}
H((a^\dagger)^m|E\rangle) &= \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})(a^\dagger)^m|E\rangle \\
&= \hbar\omega(a^\dagger[a, (a^\dagger)^m] + a^\dagger(a^\dagger)^m a + \frac{1}{2}(a^\dagger)^m)|E\rangle \\
&= \hbar\omega(ma^\dagger(a^\dagger)^{m-1} + a^\dagger(a^\dagger)^m a + \frac{1}{2}(a^\dagger)^m)|E\rangle \\
&= \hbar\omega(a^\dagger)^m(m + a^\dagger a + \frac{1}{2})|E\rangle \\
&= (E + m\hbar\omega))((a^\dagger)^m|E\rangle) \qquad (4)
\end{aligned}
$$

となり、固有状態 $(a^\dagger)^m|E\rangle$ では固有値 $E + m\hbar\omega$ を持ちます。このように、量子的な調和振動子は $\hbar\omega$ による離散的なエネルギーを持つことが分かります。

これらから、a はエネルギーを $\hbar\omega$ 減らし、$a^\dagger$ は $\hbar\omega$ 増やす演算子と分かります。これが、生成、消滅演算子と呼ばれる理由です（離散化されたエネルギー $\hbar\omega$ を生成、消滅させる）。別の言い方として、上昇演算子、下降演算子というのもあり、これらは数学よりの話のときに使われています。

後は固有値 E の最低値とその固有状態が分かれば、そこから生成演算子 $a^\dagger$ によって固有値、固有状態を求めていけます。これは簡単に分かります。適当なエネルギーの固有状態 $|E\rangle$ に a を作用させた $a|E\rangle$ の 2 乗ノルムを求めてみると

$$
\langle E|a^\dagger a|E\rangle = \langle E|(\frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2})|E\rangle = \langle E|(\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2})|E\rangle
$$

ノルムは 0 以上なので

$$
E - \frac{1}{2}\hbar\omega \geq 0
$$

となり、調和振動子のエネルギー E は $\hbar\omega/2$ より大きい必要があり、0 にならないことが分かります。よりはっきりさせます。最低値を E_0 として、ある $|E\rangle$ に a を m 回作用させることでその固有状態 $|E_0\rangle$ になるなら、$|E_0\rangle = a^m|E\rangle$ です。$a^{m+1}|E\rangle$ では最低値を超えるために固有値はないので

$$H(a|E_0\rangle) = H(a^{m+1}|E\rangle) = 0$$

となり、$a|E_0\rangle = 0$ が言えます。そうすると、最低値 E_0 は、$H|E_0\rangle = E_0|E_0\rangle$ から

$$E_0 = \langle E_0|H|E_0\rangle = \hbar\omega\langle E_0|a^\dagger a + \frac{1}{2}|E_0\rangle = \hbar\omega\langle E_0|a^\dagger a|E_0\rangle + \frac{1}{2}\hbar\omega\langle E_0|E_0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

と求まります。この E_0 を零点エネルギー (zero-point energy) と言います。また、エネルギーの最低値を持つ状態を基底状態と言います。これは特徴的な結果で、古典的な調和振動子のエネルギーの最低値は 0 ですが、量子的な調和振動子では 0 になっていません。

これでハミルトニアン演算子の固有値と固有状態が求まります。E_0 が最低エネルギーであるために、(4) から、ハミルトニアン演算子の固有状態は $|E_0\rangle$ に $a^\dagger$ を作用させれば作っていけて、その固有値は E_0 に $\hbar\omega$ を足していったものです。よって、ハミルトニアン演算子の固有値、固有状態は

$$\begin{aligned}
&H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle \\
&E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})\ ,\ a|E_0\rangle = 0 \quad (n = 0, 1, 2, \ldots)
\end{aligned}$$

期待値の形で書けば

$$\langle E_m|H|E_n\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})\delta_{mn}$$

となります。δ_{mn} はクロネッカーデルタです。

E_n とハミルトニアン演算子を比較すると

$$H = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})\ \Leftrightarrow\ E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

から、$a^\dagger a|E_n\rangle = n|E_n\rangle$ となり、$a^\dagger a$ の固有値が n です。このことから

$$N = a^\dagger a$$

という演算子が作れて、N は個数演算子 (number operator) や数演算子と呼ばれます。今の場合では、$\hbar\omega$ の個数に対応します。N は

$$N^\dagger = (a^\dagger a)^\dagger = a^\dagger(a^\dagger)^\dagger = a^\dagger a = N$$

から、エルミート演算子です。定義から予想できるように、a を作用させた $a|E_n\rangle$ に N を作用させてみると

$$
\begin{aligned}
N(a|E_n\rangle) = a^\dagger a a|E_n\rangle = (aa^\dagger - 1)a|E_n\rangle = (aa^\dagger a - a)|E_n\rangle &= (aN - a)|E_n\rangle \\
&= aN|E_n\rangle - a|E_n\rangle \\
&= an|E_n\rangle - a|E_n\rangle \\
&= (n-1)(a|E_n\rangle)
\end{aligned}
$$

となって、$a|E_n\rangle$ の N の固有値は $n-1$ になります。同様に

$$
N(a^\dagger|E_n\rangle) = a^\dagger a a^\dagger|E_n\rangle = a^\dagger(a^\dagger a + 1)|E_n\rangle = a^\dagger(N+1)|E_n\rangle = (n+1)(a^\dagger|E_n\rangle)
$$

となって、$a^\dagger|E_n\rangle$ の固有値は $n+1$ です。このように固有値を取り出すので粒子数演算子も重要になっています。

$|E_n\rangle$ は $|E_0\rangle$ に生成演算子 $a^\dagger$ を作用させていけば作れますが、$(a^\dagger)^n|E_0\rangle$ はまだ規格化されていないので、規格化します。$|E'_n\rangle$ は規格化されているとし、C を複素数として $(a^\dagger)^n|E_0\rangle = C|E'_n\rangle$ とおきます。ノルムは

$$
\langle E_0|a^n(a^\dagger)^n|E_0\rangle = \langle E'_n|C^*C|E'_n\rangle = |C|^2
$$

左辺は

$$
\begin{aligned}
a^n(a^\dagger)^n|E_0\rangle = a^{n-1}a(a^\dagger)^n|E_0\rangle &= a^{n-1}([a,(a^\dagger)^n] + (a^\dagger)^n a)|E_0\rangle \\
&= a^{n-1}[a,(a^\dagger)^n]|E_0\rangle \\
&= na^{n-1}(a^\dagger)^{n-1}|E_0\rangle \\
&= na^{n-2}a(a^\dagger)^{n-1}|E_0\rangle \\
&= n(n-1)a^{n-2}(a^\dagger)^{n-2}|E_0\rangle
\end{aligned}
$$

これは $a, a^\dagger$ がなくなるまで続いていくので

$$
a^n(a^\dagger)^n|E_0\rangle = n!|E_0\rangle
$$

よって

$$
|C|^2 = \langle E_0|a^n(a^\dagger)^n|E_0\rangle = n!
$$

から、$C = \sqrt{n!}$ となり

$$
|E'_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|E_0\rangle \tag{5}
$$

として規格化されます。

また、$a^\dagger|E_n\rangle = C'|E'_{n+1}\rangle$ とすれば、粒子数演算子から

$$\begin{aligned}\langle E_n|aa^\dagger|E_n\rangle &= \langle E_{n+1}|C'^*C'|E_{n+1}\rangle \\ \langle E_n|(1+a^\dagger a)|E_n\rangle &= |C'|^2 \\ (n+1) &= C'^2 \\ C' &= \sqrt{n+1}\end{aligned} \tag{6}$$

となります。同様に、$a|E_n\rangle = C''|E'_{n-1}\rangle$ では

$$|C''|^2 = \langle E_n|a^\dagger a|E_n\rangle = n\langle E_n|E_n\rangle = n$$

なので、$C'' = \sqrt{n}$ です。

異なるエネルギー固有状態が直交していることも確かめます。$\langle E_m|E_n\rangle$ $(m \neq n)$ は

$$\begin{aligned}a^m(a^\dagger)^n|E_0\rangle = a^{m-1}a(a^\dagger)^n|E_0\rangle &= a^{m-1}([a,(a^\dagger)^n] + (a^\dagger)^n a)|E_0\rangle \\ &= a^{m-1}[a,(a^\dagger)^n]|E_0\rangle \\ &= na^{m-1}(a^\dagger)^{n-1}|E_0\rangle \\ &= n(n-1)a^{m-2}(a^\dagger)^{n-2}|E_0\rangle\end{aligned}$$

から、$m > n$ なら $a|E_0\rangle = 0$、$m < n$ なら $\langle E_0|a^\dagger = 0$ によって直交しているのが分かります。

固有状態を固有関数 (波動関数) に変えます。まず

$$a = \sqrt{\frac{1}{2}}(y + \frac{d}{dy})\ ,\ a^\dagger = \sqrt{\frac{1}{2}}(y - \frac{d}{dy}) \quad (x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}y)$$

と x を置き換えます。$|E_0\rangle$ と $|y\rangle$ の内積を $\chi_0(y)$ とします。$\chi_0(y)$ に消滅演算子を作用させれば $a\chi_0(y) = 0$ なので

$$(y + \frac{\partial}{\partial y})\chi_0(y) = 0$$

これは単純に解けて

$$\chi_0(y) = A\exp[-\frac{1}{2}y^2]$$

任意定数 A は規格化から

$$
\begin{aligned}
1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \chi_0^*(y)\chi_0(y) = &\int_{-\infty}^{\infty} dx\ |A|^2 \exp[-y^2] \\
&= |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \exp[-\frac{m\omega}{\hbar}x^2] \\
&= |A|^2 \sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}} \\
&A = (\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}}
\end{aligned}
$$

となります。積分はガウス積分です。

$\chi_0(y)$ に生成演算子を作用させていけば、(5)（もしくは (6)）から

$$
\begin{aligned}
a^\dagger \chi_0(y) &= \sqrt{0+1}\chi_1(y) = \sqrt{1}\chi_1(y) \\
a^\dagger \chi_1(y) &= \sqrt{1+1}\chi_2(y) = \sqrt{2}\chi_2(y) \\
&\vdots \\
(a^\dagger)^n \chi_0(y) &= \sqrt{n!}\chi_n(y)
\end{aligned}
$$

となるので、n で区別される固有関数 $\chi_n(y)$ は

$$
\begin{aligned}
\chi_n(y) &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n \chi_0(y) \\
&= \frac{A}{\sqrt{n!}}(\sqrt{\frac{1}{2}}(y - \frac{d}{dy}))^n \exp[-\frac{1}{2}y^2] \\
&= \frac{A}{\sqrt{n!2^n}}(y - \frac{d}{dy})^n \exp[-\frac{1}{2}y^2]
\end{aligned} \tag{7}
$$

と求まります。これはエルミート関数 (Hermite function) と呼ばれます。このことについては最後に触れます。

古典的な調和振動子との違いを見ておきます。古典的な調和振動子において、あるエネルギー E が与えられたとき

$$
E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2
$$

から、振動する範囲には

$$
\begin{aligned}
E &\geq \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \\
x^2 &\leq \frac{2E}{2m\omega^2}
\end{aligned}
$$

という制限がかかります。この式自体は量子的でも同じで、E_0 では

$$\frac{1}{2}\hbar\omega \geq \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$
$$x^2 \leq \frac{\hbar}{m\omega}$$

という制限がかかります。しかし、量子力学での位置の確率分布は波動関数 $\psi(x)$ から $|\psi(x)|^2$ で与えられており、今の場合では

$$\chi_0(y) = A\exp[-\frac{1}{2}y^2] \ \Rightarrow \ |\chi(y)|^2 = A^2e^{-y^2} \qquad (x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}y)$$

このため、$x = \pm\infty$ 付近まで振動できる確率があるので、制限を超えた位置に行けます。

生成、消滅演算子は入門的な量子力学の範囲ではほとんど出てこないですが、場の量子論では基本的な演算子です。これは、生成、消滅演算子は多体系 (多粒子系) を記述する方法として便利だからです (多体系の量子力学は面倒な構造を持っている)。

また、場の量子論では、消滅演算子の性質 $a|E_0\rangle = 0$ は重要な意味を持っています。ここでの消滅演算子で 0 になる状態 $n = 0$ は零点エネルギーを持つ基底状態です。場の量子論ではこれを拡張させて真空を定義し、消滅演算子を作用させることで 0 となる真空状態 $|0\rangle$ が存在することを要求します。

調和振動子の零点エネルギーが不確定性関係から求められることを示します。位置と運動量の不確定性関係は

$$< \Delta x^2 >< \Delta p^2 >\geq \frac{\hbar^2}{4} \qquad (< \Delta x^2 >=< x^2 > - < x >^2,\ < \Delta p^2 >=< p^2 > - < p >^2)$$

$< x >, < p >$ はそれぞれの期待値です。量子力学では、古典的なエネルギーは期待値として求まるので

$$< E >= \frac{< p^2 >}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} < x^2 >$$

ここで、原点に止まっていると考え (古典的には原点で止まっていればエネルギーは 0)、位置と運動量そのものの期待値 $< x >, < p >$ は 0 として

$$< \Delta p^2 >=< p^2 > ,\ < \Delta x^2 >=< x^2 >$$

これらから

$$< E >= \frac{< \Delta p^2 >}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} < \Delta x^2 >$$

相加平均と相乗平均の関係

$$\frac{a+b}{2} \geq \sqrt{ab}$$

と、最小の不確定性関係

$$< \Delta x^2 >< \Delta p^2 >= \frac{\hbar^2}{4}$$

を使うと

$$< E >= \frac{< \Delta p^2 >}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} < \Delta x^2 > \geq 2\sqrt{\frac{m\omega^2 < \Delta p^2 >< \Delta x^2 >}{4m}} = \omega\sqrt{< \Delta p^2 >< \Delta x^2 >} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

として、零点エネルギーが出てきます。

ここから数学よりの話をしていきます。見ていくのは　調和振動子の波動関数 χ_n とエルミート多項式の対応についてです。エルミート多項式については数学の「エルミート多項式」を見てください。

エルミート多項式は

$$H_{(n)}(s) = (-1)^n e^{s^2} \frac{d^n}{ds^n} e^{-s^2} \qquad (n = 1, 2, \ldots)$$

と定義されます。これはエルミート多項式のロドリゲスの公式と呼ばれます。ハミルトニアン H と紛らわしいですが、$H_{(n)}$ で書く慣習に従っています。まず、微分として

$$\begin{aligned}(s - \frac{d}{ds})\exp[\frac{1}{2}s^2]f(s) &= (s - s)\exp[\frac{1}{2}s^2]f(s) - \exp[\frac{1}{2}s^2]\frac{d}{ds}f(s) \\ &= -e^{s^2/2}\frac{d}{ds}f(s) \\ e^{-s^2/2}(s - \frac{d}{ds})e^{s^2/2}f(s) &= -\frac{d}{ds}f(s)\end{aligned}$$

$s - d/ds$ を 2 乗にしてみると

$$\begin{aligned}e^{-s^2/2}(s - \frac{d}{ds})^2 e^{s^2/2}f(s) &= e^{-s^2/2}(s - \frac{d}{ds})(s - \frac{d}{ds})e^{s^2/2}f(s) \\ &= -e^{-s^2/2}(s - \frac{d}{ds})\big(e^{s^2/2}\frac{d}{ds}f(s)\big) \\ &= -e^{-s^2/2}(s - \frac{d}{ds})\big(e^{s^2/2}f'(s)\big) \\ &= (-1)^2 e^{-s^2/2}e^{s^2/2}\frac{d}{ds}f'(s) \\ &= (-1)^2\frac{d^2}{ds^2}f(s)\end{aligned}$$

これから規則性が分かり

$$e^{-s^2/2}(s - \frac{d}{ds})^n e^{s^2/2}f(s) = (-1)^n\frac{d^n}{ds^n}f(s)$$

ここで、$f(s)=e^{-s^2}$ とすれば

$$
\begin{aligned}
e^{-s^2/2}(s-\frac{d}{ds})^n e^{-s^2/2} &= (-1)^n \frac{d^n}{ds^n} e^{-s^2} \\
(s-\frac{d}{ds})^n e^{-s^2/2} &= (-1)^n e^{s^2/2} \frac{d^n}{ds^n} e^{-s^2} \\
&= e^{-s^2/2} H_{(n)}(s)
\end{aligned}
$$

よって、(7) はエルミート多項式によって

$$
\chi_n(y) = \frac{A}{\sqrt{n!2^n}} e^{-y^2/2} H_{(n)}(y) \tag{8}
$$

となります。

ついでなので、調和振動子のシュレーディンガー方程式にも触れておきます。面倒な話をしていきますが、結論は同じです。

(1) での x を y に置き換えれば

$$
\frac{d^2\chi}{dy^2} - y^2\chi + \frac{2E}{\hbar\omega}\chi = 0 \quad (x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} y) \tag{9}
$$

y が十分大きいなら近似的な式として

$$
\frac{d^2\chi'}{dy^2} - y^2\chi' = 0
$$

これの解は

$$
(\frac{d}{dy} - y)(\frac{d}{dy} + y)\chi' = 0
$$

から

$$
\chi'(y) = \exp[\pm\frac{1}{2}y^2]
$$

と分かります。定数は省いてます。波動関数 χ' は y の無限大で 0 にならないといけないので、マイナスのほうが解です。このことから、(9) の解として

$$
\chi(y) = F(y) e^{-y^2/2}
$$

という形を仮定すると

$$\frac{d^2\chi}{dy^2}=\frac{d}{dy}(\frac{dF}{dy}e^{-y^2/2}-yFe^{-y^2/2})=\frac{d^2F}{dy^2}e^{-y^2/2}-2y\frac{dF}{dy}-Fe^{-y^2/2}+y^2Fe^{-y^2/2}$$

から

$$\begin{aligned}0&=\frac{d^2F}{dy^2}e^{-y^2/2}-2y\frac{dF}{dy}-Fe^{-y^2/2}+y^2Fe^{-y^2/2}-y^2Fe^{-y^2/2}+\frac{2E}{\hbar\omega}Fe^{-y^2/2}\\&=\frac{d^2F}{dy^2}-2y\frac{dF}{dy}-F+\frac{2E}{\hbar\omega}F\\&=\frac{d^2F}{dy^2}-2y\frac{dF}{dy}+\beta F\quad(\beta=\frac{2E}{\hbar\omega}-1)\end{aligned}\tag{10}$$

この形の微分方程式をエルミート方程式と言います。解は級数解として求められますが、ここでは具体的な形は必要ないので省きます (数学の「級数解」参照)。

ここで問題なのは、$Fe^{-y^2/2}$ は y の無限大で 0 になるのかです。それを見ていきます。エルミート方程式の 2 つの独立な解 F_1,F_2 は偶数と奇数のべき級数として与えられて

$$F_1(y)=\sum_{k=0}^{\infty}a_{2k}y^{2k}\ ,\ F_2(y)=\sum_{k=0}^{\infty}a_{2k+1}y^{2k+1}$$

a_k は定数で、a_k の漸化式は

$$a_{k+2}=-\frac{2(\beta-k)}{(k+2)(k+1)}a_k$$

となっています。今は級数の先でどうなっているのかが知りたいので、k が十分大きいとして β を無視すれば

$$a_{k+2}\simeq\frac{2k}{k^2}a_k=\frac{2}{k}a_k$$

これから

$$a_k=\frac{2}{k-2}a_{k-2}$$

これは

$$a_k=\frac{2}{k-2}a_{k-2}=\frac{2}{k-2}\frac{2}{k-4}a_{k-4}=\frac{2}{k-2}\frac{2}{k-4}\frac{2}{k-6}a_{k-6}=\cdots$$

と続くので

$$a_k = \frac{2^m}{(k-2)(k-4)\cdots(k-2m)} a_{k-2m}$$

N を十分大きいとして、$k = N + 2m$ に置き換えれば

$$a_{N+2m} = \frac{2^m}{(N+2m-2)(N+2m-4)\cdots N} a_N \tag{11}$$

となります。これを使います。

F_1 を十分大きな L で分けて

$$F_1 = \sum_{k=0}^{L} a_{2k} y^{2k} + \sum_{k=L+1}^{\infty} a_{2k} y^{2k} = \sum_{k=0}^{L} a_{2k} y^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k+2L+2} y^{2k+2L+2}$$

$L+1$ からになっている第 2 項に今の近似を使うことにして、(11) の m を k に置き換えて、$N = 2L+2$ として

$$a_{2k+2L+2} = \frac{2^k}{(2L+2k)(2L+2k-2)\cdots(2L+2)} a_{2L+2} = \frac{2^k}{2(L+k)2(L+k-1)\cdots 2(L+1)} a_{2L+2}$$

k から 1 までの個数は k 個なので

$$a_{2k+2L+2} = \frac{1}{(L+k)(L+k-1)\cdots(L+1)} a_{2L+2} = \frac{L!}{(L+k)!} a_{2L+2}$$

となります。

F_2 でも同様に分離させて

$$F_2 = \sum_{k=0}^{L} a_{2k+1} y^{2k+1} + \sum_{k=L+1}^{\infty} a_{2k+1} y^{2k+1} = \sum_{k=0}^{L} a_{2k+1} y^{2k+1} + \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k+2L+3} y^{2k+2L+3}$$

(11) で m を k にし、$N = 2L+3$ として

$$\begin{aligned} a_{2k+2L+3} &= \frac{2^k}{(2L+2k+1)(2L+2k-1)\cdots(2L+3)} a_{2L+3} \\ &= 2^k \frac{(2L+1)!!}{(2L+2k+1)!!} a_{2L+3} \qquad (n!! = n(n-2)(n-4)\cdots) \end{aligned}$$

二重階乗部分は

$$\frac{(2L+3)!!}{(2L+2k+3)!!} = \frac{2L+3}{2L+2k+3}\frac{(2L+1)!!}{(2L+2k+1)!!}$$

$$\frac{(2L+1)!!}{(2L+2k+1)!!} > \frac{(2L+2)!!}{(2L+2k+2)!!} > \frac{(2L+3)!!}{(2L+2k+3)!!}$$

から、L が十分大きければ 1 ずらしてもほとんど影響しなくなります (大小関係は差を計算すればいいだけ)。このため

$$\frac{(2L+2)!!}{(2L+2k+2)!!} = \frac{2^{L+1}(L+1)!}{2^{L+k+1}(L+k+1)!} = 2^{-k}\frac{(L+1)!}{(L+k+1)!}$$

としたものを近似として使って (下の補足 2 も参照)

$$a_{2k+2L+3} \simeq \frac{(L+1)!}{(L+k+1)!}a_{2L+3} \tag{12}$$

となります。

今の近似によって

$$F_1(y) \simeq \sum_{k=0}^{L} a_{2n}y^{2n} + \sum_{k=0}^{\infty}\frac{L!}{(L+k)!}a_{2L+2}y^{2k+2L+2}$$

$$F_2(y) \simeq \sum_{k=0}^{L} a_{2k+1}y^{2k+1} + \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(L+1)!}{(L+k+1)!}a_{2L+3}y^{2k+2L+3}$$

第 2 項は、F_1 では

$$\begin{aligned}
\sum_{k=0}^{\infty}\frac{L!}{(L+k)!}a_{2L+2}y^{2k+2L+2} &= a_{2L+2}L!y^2\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{(L+k)!}y^{2(L+k)} \\
&= a_{2L+2}L!y^2\sum_{j=L}^{\infty}\frac{1}{j!}y^{2j} \quad (j=L+k) \\
&= a_{2L+2}L!y^2(\sum_{j=0}^{\infty}\frac{1}{j!}y^{2j} - \sum_{j=0}^{L-1}\frac{1}{j!}y^{2j}) \\
&= a_{2L+2}L!y^2e^{y^2} - a_{2L+2}L!y^2\sum_{j=0}^{L-1}\frac{1}{j!}y^{2j}
\end{aligned}$$

F_2 も同様に

$$\begin{aligned}
\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(L+1)!}{(L+k+1)!}a_{2L+3}y^{2k+2L+3} &= a_{2L+3}(L+1)!y\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{(L+k+1)!}y^{2(L+k+1)} \\
&= a_{2L+3}(L+1)!y\sum_{j=L+1}^{\infty}\frac{1}{j!}y^{2j} \\
&= a_{2L+3}(L+1)!ye^{y^2} - a_{2L+3}(L+1)!y\sum_{j=0}^{L}\frac{1}{j!}y^{2j}
\end{aligned}$$

そうすると

$$\begin{aligned}
F_1(y)e^{-y^2/2} &\simeq \big(\sum_{k=0}^{L}a_{2k}y^{2k} + a_{2L+2}L!y^2e^{y^2} - a_{2L+2}L!y^2\sum_{j=0}^{L-1}\frac{1}{j!}y^{2j}\big)e^{-y^2/2} \\
F_2(y)e^{-y^2/2} &\simeq \big(\sum_{k=0}^{L}a_{2k+1}y^{2k+1} + a_{2L+3}(L+1)!ye^{y^2} - a_{2L+3}(L+1)!y\sum_{j=0}^{L}\frac{1}{j!}y^{2k}\big)e^{-y^2/2}
\end{aligned}$$

となり、$y \to \pm\infty$ で

$$\begin{aligned}
F_1(y)e^{-y^2/2} &\ \Rightarrow\ a_{2L+2}L!y^2e^{y^2/2} \\
F_2(y)e^{-y^2/2} &\ \Rightarrow\ a_{2L+3}(L+1)!ye^{y^2/2}
\end{aligned}$$

というわけで、無限大で 0 になっていません。このため、波動関数として使えません。

しかし、級数の先の方の寄与のために 0 にならなくなっているので、F_1, F_2 の級数が有限の項で終わっていれば、この問題は回避できます。そのためには、a_k の漸化式

$$a_{k+2} = -\frac{\beta-2k}{(k+2)(k+1)}a_k$$

において、どこかで $a_{k+2}=0$ になって a_k で終わる必要があります。なので、ある k で $2k=\beta$ となることが要求されます。

このように、量子力学の要求を入れると、無限に続く級数を有限の項で止めることになります。有限で止まるために多項式となり、その多項式がエルミート多項式 $H_{(n)}$ です。そして、漸化式の分子が 0 になるためには $\beta = 2n$ $(n=0,1,2,\ldots)$ でなければいけないので、エルミート方程式 (10) は

$$\frac{d^2F}{dy^2} - 2y\frac{dF}{dy} + 2nF = 0 \qquad (\beta = \frac{2E}{\hbar\omega} - 1 = 2n) \tag{13}$$

となり、エルミート多項式はこれの解として出てきます (数学の「エルミート多項式」参照)。つまり、解を $F(y)e^{-y^2/2}$ と仮定したとき、量子力学の要求を満たす $F(y)$ の方程式は (13) で、その解は

$$F_1(y) = H_{(2n)}(y)$$

$$F_2(y) = H_{(2n+1)}(y)$$

ということです。偶数と奇数の場合で分けて書いているだけなので解は $H_{(n)}$ そのものです (漸化式から、F_1 が有限の項で止まるときは F_2 は級数のまま。逆も同様。)。そして、β への要求から

$$2n = \frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \ \Rightarrow \ E = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

として、調和振動子のエネルギーが求まります。このため、すでにエネルギーが離散的と分かっているなら (ここでの最初の導出や実験結果から)、今してきたような話なしで (13) に辿り着きます。

調和振動子の波動関数 $\chi(y)$ まで戻ると、もとのシュレーディンガー方程式 (9) は

$$\frac{d^2\chi}{dy^2} + (\frac{2E}{\hbar\omega} - y^2)\chi = 0 \quad (\frac{2E}{\hbar\omega} = 2n + 1)$$

となり、これの解は

$$\chi(y) = F(y)e^{-y^2/2} = H_{(n)}(y)e^{-y^2/2}$$

定数をつければ (8) になります。

・補足 1

調和振動子の古典的な解を $a^\dagger, a$(演算子でない) を使った形で与えます。ハミルトニアンは

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

$a, a^\dagger$ は

$$a(t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x + i\frac{p}{m\omega}) \ , \ a^\dagger(t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x - i\frac{p}{m\omega})$$

として、上での話と同じ形にします。このとき、$a + a^\dagger$ と $a - a^\dagger$ から x, p を

$$x(t) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}(a(t) + a^\dagger(t))$$

$$p(t) = \frac{1}{2i}m\omega\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}(a(t) - a^\dagger(t))$$

と与えられます。なので、$a(t), a^\dagger(t)$ を求めればいいです。ハミルトニアンが分かっているので、これらを正準方程式

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}\ ,\ \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}$$

に入れます。それぞれの微分は

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}(\frac{d}{dt}a(t) + \frac{d}{dt}a^\dagger(t))$$
$$\frac{dp}{dt} = \frac{1}{2i}m\omega\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}(\frac{d}{dt}a(t) - \frac{d}{dt}a^\dagger(t))$$
$$\frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}$$
$$\frac{\partial H}{\partial x} = m\omega^2 x$$

となっていて、$dx/dt = \partial H/\partial p$ から

$$(\frac{d}{dt}a(t) + \frac{d}{dt}a^\dagger(t)) = -i\omega(a(t) - a^\dagger(t))$$

$dp/dt = -\partial H/\partial x$ から

$$(\frac{d}{dt}a(t) - \frac{d}{dt}a^\dagger(t)) = -i\omega(a(t) + a^\dagger(t))$$

となっているので、

$$\frac{d}{dt}a(t) = -i\omega a(t)\ ,\ \frac{d}{dt}a^\dagger(t) = i\omega a^\dagger(t)$$

これの解は単純に

$$a(t) = a(0)e^{-i\omega t}\ ,\ a^\dagger(t) = a^\dagger(0)e^{i\omega t}$$

$t = 0$ で $a(0), a^\dagger(0)$ としています。これらを x, p に入れることで、運動方程式の解として

$$x(t) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}(a(0)e^{-i\omega t} + a^\dagger(0)e^{i\omega t})$$
$$p(t) = \frac{1}{2i}m\omega\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}(a(0)e^{-i\omega t} - a^\dagger(0)e^{i\omega t})$$

三角関数に直せばよく見る単振動の解の形になります。この形を場の量子論では利用します。

・補足 2

(12) を示します。階乗と二重階乗の関係

$$(2n)!! = 2n(2n-2)(2n-4)\cdots = 2n \times 2(n-1) \times 2(n-2)\cdots = 2^n n!$$

$$\frac{(2n)!}{(2n)!!} = \frac{2n(2n-1)(2n-2)\cdots}{2n(2n-2)(2n-4)} = (2n-1)(2n-3)\cdots = (2n-1)!!$$

から

$$(2n-1)!! = \frac{(2n)!}{2^n n!}$$

となるのを使えば

$$2^k \frac{(2L+1)!!}{(2L+2k+1)!!} = 2^k \frac{(2L+2)!}{2^{L+1}(L+1)!} \frac{2^{L+k+1}(L+n+1)!}{(2L+2k+2)!} = 2^{2k} \frac{(2L+2)!}{(L+1)!} \frac{(L+k+1)!}{(2L+2k+2)!}$$

スターリングの公式

$$n! \simeq n^n e^{-n} \qquad (\log n! \simeq n \log n - n)$$

を使って

$$\frac{(2(L+1))!}{(L+1)!} = \frac{(2X)!}{X!} \simeq \frac{(2X)^{2X} e^{-2X}}{x^X e^{-X}} = 2^{2X} X^X e^{-X} = 2^{2X} X!$$

$$\frac{(L+n+1)!}{(2(L+n+1))!} = \frac{Y!}{(2Y)!} \simeq \frac{Y^Y e^{-Y}}{(2Y)^{2Y} e^{-2Y}} = 2^{-2Y} \frac{1}{Y^Y e^{-Y}} = 2^{-2Y} \frac{1}{Y!}$$

と近似すれば

$$2^k \frac{(2L+1)!!}{(2L+2n+1)!!} = 2^{2k} \frac{(2L+2)!}{(L+1)!} \frac{(L+n+1)!}{(2L+2n+2)!} \simeq 2^{2k} 2^{2X-2Y} \frac{X!}{Y!} = \frac{(L+1)!}{(L+n+1)!}$$