

第13回：1月20日（金）以降

## 12.2 有限変換

無限小変換を繰り返し行うことで、有限変換を実現することができる。

$\hat{G}$  によって生成される、微小パラメータ  $\epsilon$  の変換は

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = |\psi\rangle + \frac{\epsilon}{i\hbar} \hat{G} |\psi\rangle = \left(1 + \frac{\epsilon}{i\hbar} \hat{G}\right) |\psi\rangle \quad (547)$$

である。ただしここでは変換が演算子ではなく状態に作用する立場を採用した。有限なパラメータ  $a$  による変換は、この微小変換を  $a/\epsilon$  回繰り返すことで実現される。

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \left(1 + \frac{\epsilon}{i\hbar} \hat{G}\right)^{a/\epsilon} |\psi\rangle \quad (548)$$

ここで、 $\epsilon$  が微小量であることを用いれば

$$\left(1 + \frac{\epsilon}{i\hbar} \hat{G}\right)^{\frac{a}{\epsilon}} = \exp\left(\frac{a}{i\hbar} \hat{G}\right) \quad (549)$$

と変形することができる。つまり、有限パラメータ  $a$  による変換を

$$|\psi'\rangle = \hat{U} |\psi\rangle, \quad \hat{U} = \exp\left(\frac{a}{i\hbar} \hat{G}\right) \quad (550)$$

と与えることができる。演算子  $\hat{G}$  がエルミート演算子であれば、演算子  $\hat{U}$  はユニタリー演算子である。

例題 12.2 演算子

$$\hat{G} = \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (551)$$

を生成子とする有限変換を行ったとき波動関数がどのように変化するかを求めよ。

$$\begin{aligned} \psi'(x) &= \exp\left(-a \frac{d}{dx}\right) \psi(x) \\ &= \left[1 + (-a) \frac{d}{dx} + \frac{(-a)^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \dots\right] \psi(x) \\ &= \psi(x) + (-a) \psi'(x) + \frac{(-a)^2}{2} \psi''(x) + \dots \end{aligned} \quad (552)$$

これはテイラー展開の式にほかならない。すなわち

$$\psi'(x) = \psi(x - a) \quad (553)$$

であり、 $\psi'(x)$  は  $\psi(x)$  を  $x$  の正の方向に  $a$  だけ平行移動したものである。

変換が演算子に作用するという立場の場合には、任意の演算子  $\hat{A}$  が次のように変換される。

$$\hat{A} \rightarrow \hat{A}' = \hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U} \quad (554)$$

特にハミルトニアンと  $\hat{G}$  が可換であれば

$$\hat{H} = \hat{U}^{-1} \hat{H} \hat{U} \quad (555)$$

が成り立つ。あるいは生成子  $\hat{G}$  と同様に、 $\hat{U}$  も  $\hat{H}$  と可換、すなわち

$$[\hat{U}, \hat{H}] = 0 \quad (556)$$

である。

### 12.3 離散変換

無限小変換の繰り返しによって実現できない対称性も存在する。そのような対称性は離散的対称性といい、その代表的なものが鏡映対称性である。波動関数に対して次のように作用する演算子  $\hat{P}$  を導入する。

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = \hat{P}\psi(x) = \psi(-x) \quad (557)$$

この演算子は鏡映演算子、またはパリティ演算子という。定義より明らかに

$$\hat{P}^2 = \hat{1}, \quad \hat{P} = \hat{P}^{-1} \quad (558)$$

である。 $\hat{P}^2 = \hat{1}$  より、 $\hat{P}$  の固有値は  $\pm 1$  である。この値のことをパリティと呼ぶ。波動関数  $\psi(x)$  が偶関数である状態はパリティが  $+1$  であり、奇関数である状態はパリティが  $-1$  である。それぞれパリティが偶および奇であると表現する場合もある。 $\hat{P}$  が系の対称性であるためにはハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + U(\hat{x}) \quad (559)$$

が  $\hat{P}$  による変換のもとで不変であれば良い。実際にやってみると、

$$\hat{P}^{-1} \hat{H} \hat{P} = \frac{1}{2m} \hat{p} + U(-\hat{x}) \quad (560)$$

となり、これが  $\hat{H}$  に等しくなければならない。すなわち、ポテンシャル  $U(x)$  が偶関数の場合に  $\hat{P}$  は系の対称性となる。(  $\hat{P}$  は  $x$  軸の左右を入れ替えることから、当然である。)

もしパリティ変換が系の対称性である場合には、 $\hat{H}$  と  $\hat{P}$  が同時測定可能であり、定常状態の完全系として  $\hat{P}$  の固有状態でもあるような波動関数を用いることができる。このことは、§5.1 において述べた波動関数の性質 [5]、すなわちポテンシャル  $U(x)$  が偶関数であるときには波動関数を偶関数または奇関数に取ることができるということに他ならない。

離散的対称性に対応する保存量は、古典論には存在しない量子力学に特有のものである。

## 12.4 \*内部対称性

座標や運動量を変化させない対称性は内部対称性と呼ばれる。古典的な粒子の場合、その運動は座標と運動量で完全に決まるから、内部対称性は存在しないが、量子力学においてはしばしば重要な役割を果たす。

量子力学において最も単純な内部対称性は頂等演算子

$$\hat{G} = \hat{1} \quad (561)$$

を生成子とする対称性であり、これは 1 次元空間上を運動する 1 粒子系における唯一の内部対称性である。これが対称性であることは、恒等演算子が任意の演算子と交換し、当然ハミルトニアンとも可換であることから明らかである。

この変換が波動関数に作用するものとみなすと、無限小変換の変換則は

$$\psi \rightarrow \psi' = \psi + \delta\psi = \left(1 + \frac{\epsilon}{i\hbar}\right) \psi \quad (562)$$

と与えられ、有限変換は波動関数の位相回転となる。

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{\frac{\epsilon}{i\hbar}} \psi. \quad (563)$$

$\hat{G} = \hat{1}$  の期待値は

$$\langle \psi | \hat{1} | \psi \rangle = \int |\psi|^2 dx \quad (564)$$

である。つまり、 $\hat{G} = \hat{1}$  に対応する保存則は確率の保存に他ならない。

波動関数の位相は物理的に意味を持たず、任意に変化させても物理的には何も変化しないが、位相を変化させる対称性があるという事実は、確率の保存という非常に重要な物理的性質と関係しているのである。

## 13 調和振動子

### 13.1 定常状態

点  $x = x_0$  において最低値  $U_0$  を取るポテンシャル  $U(x)$  の中で運動する質点を考える。古典的にはポテンシャルの最低点  $x = x_0$  で止まっている場合がエネルギー最低である。この系に小さなエネルギーを与えると、 $x = x_0$  の周りで微小振動する。 $U(x)$  を  $x = x_0$  の周りでテーラー展開すると、

$$U(x) = U_0 + \frac{1}{2}U''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots \quad (565)$$

となる。振動の振幅が小さければ、高次の項を無視することができて

$$U(x) = U_0 + \frac{1}{2}U''(x_0)(x - x_0)^2 \quad (566)$$

と近似することができる。このポテンシャルによって表わされる系は調和振動子と呼ばれる。現実に現れる多くの系で、微小振動は近似的に調和振動子の組み合わせとして表わされる。

エネルギーと座標の原点を取り直して

$$U_0 = 0, \quad x_0 = 0 \quad (567)$$

とするのが便利である。このとき  $k = U''(x_0)$  と置けばポテンシャルは

$$U(x) = \frac{k}{2}x^2 \quad (568)$$

となる。(図 50) このポテンシャル上で古典的粒子は単振動をする。その角振動

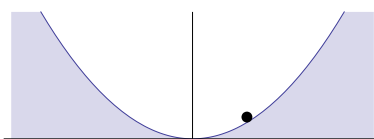


図 50: 調和振動子ポテンシャル

数は

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (569)$$

である。

この系を量子力学的に扱おう。シュレーディンガー方程式は

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (570)$$

座標  $x$ 、エネルギー  $E$ 、運動量  $p$  の代わりに、次の変数変換によって無次元化された量  $y$ ,  $\mathcal{E}$ ,  $k_y$  を用いると、計算が楽になる。

無次元化

$$y = x / \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad \mathcal{E} = E/(\hbar\omega), \quad k_y = p/\sqrt{m\hbar\omega} \quad (571)$$

この無次元化の操作は、 $\hbar = \omega = m = 1$  の単位系を用いることと同じである。新しい変数を用いるとシュレーディンガー方程式 (570) は

$$\left(-\frac{d^2}{dy^2} + y^2\right)\psi = 2\mathcal{E}\psi \quad (572)$$

となる。

この微分方程式の解を求めたい。ポテンシャルが  $y \rightarrow \pm\infty$  で発散するから全ての状態は束縛状態である。 $|y|$  が大きいところでの漸近形がどのようになるかを考えてみよう。 $y^2 \gg \mathcal{E}$  を用いればシュレーディンガー方程式は近似的に次のようになる。

$$\psi'' \sim y^2\psi \quad (573)$$

$|y|$  が大きいところでこれを近似的に満足する解として

$$\psi \sim e^{\pm\frac{y^2}{2}} \quad (574)$$

がある。実際、これを二回微分してみると

$$\psi'' = (y^2 \pm 1)e^{\pm\frac{y^2}{2}} \sim y^2\psi \quad (575)$$

となる。 $|y| \rightarrow \infty$  で発散しないためには、 $\psi \sim e^{-\frac{y^2}{2}}$  でなければならない。これは  $|y|$  が大きいところでの近似的な解である。厳密な解を求めるために、波動関数を次のように置いてみよう。

$$\psi(y) = f(y)e^{-\frac{y^2}{2}}. \quad (576)$$

$\psi$  に対して二通りの解  $e^{\pm y^2/2}$  があることに対応して、 $f(y)$  に対しても  $y$  の大きいところで  $e^{y^2}$  のように振舞う解と  $y$  が大きいところで指数関数的な発散を持たない解 (多項式的な発散はある) が存在する。物理的に許される波動関数は後者の解に対応する。

$f(y)$  を決めるために、これをシュレーディンガー方程式に代入しよう。

$$\begin{aligned} \psi' &= (f' - yf)e^{-\frac{y^2}{2}} \\ \psi'' &= (f'' - 2yf' + (y^2 - 1)f)e^{-\frac{y^2}{2}} \end{aligned} \quad (577)$$

を用いると、

$$f'' - 2yf' + (2\mathcal{E} - 1)f = 0 \quad (578)$$

が得られる。微分方程式 (578) の解を求めるために、 $f$  を次のように展開する。

$$f(y) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k y^k \quad (579)$$

これを (578) に代入すると、

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_k [k(k-1)y^{k-2} - 2ky^k + (2\mathcal{E} - 1)y^k] = 0. \quad (580)$$

となる。第 1 項で  $k \rightarrow k+2$  の置き換えを行って、 $y$  のべきをそろえると

$$\sum_{k=0}^{\infty} [c_{k+2}(k+2)(k+1) + c_k(2\mathcal{E} - 1 - 2k)] y^k = 0. \quad (581)$$

これが  $y$  によらず 0 になるようにするためには、全ての係数が 0 でなければならない。

$$c_{k+2}(k+2)(k+1) + c_k(2\mathcal{E} - 1 - 2k) = 0, \quad \forall k \quad (582)$$

これより、次の漸化式を得る。

$$c_{k+2} = \frac{2k+1-2\mathcal{E}}{(k+2)(k+1)} c_k. \quad (583)$$

(583) は  $c_k$  の添え字  $k$  が偶数のもとの奇数のもので分離している。添え字が偶数の  $c_{2l}$  は  $c_0$  を与えれば一意的に定まり、添え字が奇数の  $c_{2l+1}$  は  $c_1$  を与えれば一意的に定まる。 $c_0 \neq 0$  で  $c_1 = 0$  の場合には波動関数は偶関数、 $c_0 = 0$  で  $c_1 \neq 0$  の場合には波動関数は奇関数である。これはポテンシャルは偶関数であり、波動関数は偶関数または奇関数としてよいことと対応している。

偶関数の場合を考えてみよう。漸化式において、 $k = 2l$  と置くと、

$$c_{2l+2} = \frac{4l+1-2\mathcal{E}}{(2l+2)(2l+1)} c_{2l} \quad (584)$$

$l$  が非常に大きいところでは近似的に

$$c_{2(l+1)} = \frac{1}{l+1} c_{2l} \quad (585)$$

が成り立つ。よって、大きい  $l$  に対しては近似的に

$$c_{2l} = \frac{A}{l!} \quad (586)$$

とおける。 $A$  は定数である。このとき  $f(y)$  は

$$f(y) \sim \sum_{l=0}^{\infty} \frac{A}{l!} y^{2l} = A e^{y^2} \quad (587)$$

となるが、前にも述べたように指数関数的に発散する  $f(y)$  は物理的な波動関数を与えない。従って、定数  $A$  は 0 でなければならない。

これは波動関数が奇数である場合も同様である。よって、規格化可能な束縛状態の波動関数を得るためには、漸化式 (583) の分子  $2k+1-2\mathcal{E}$  がある  $k$  において 0 になり、そこから先の係数  $c_k$  が全て 0 になる必要がある。 $k=n$  ( $n=0,1,2,\dots$ ) のときに分子が 0 になるとすると、エネルギー固有値は

調和振動子のエネルギー固有値

$$\mathcal{E}_n = n + \frac{1}{2} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (588)$$

でなければならない。(571) によって無次元化される前のエネルギーは

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (589)$$

となる。

エネルギー固有値  $\mathcal{E}_n$  に対応する波動関数を

$$\psi_n(y) = f_n(y)e^{-\frac{y^2}{2}} \quad (590)$$

とおく。 $f_n$  は次の微分方程式を満足する。

$$f_n'' - 2yf_n' + 2nf_n = 0 \quad (591)$$

これはエルミート微分方程式と呼ばれる。漸化式より  $f_n(y)$  は  $n$  次の多項式であり、 $n$  が偶数であれば  $f_n$ 、 $\psi_n$  は偶関数、 $n$  が奇数の場合、 $f_n$ 、 $\psi_n$  は奇関数である。これらの多項式で、 $c_0$  を  $c_1$  を適当に選んだものはエルミート多項式と呼ばれ、 $H_n(y)$  と表わされる。

小さい  $n$  の値について、エルミート多項式的具体形は次のとおりである。

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1, \\ H_1(y) &= 2y, \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2, \\ H_3(y) &= 8y^3 - 12, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (592)$$

エルミート多項式は次の直交関係を満足する。

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_m(y) H_n(y) dy = \delta_{m,n} 2^m m! \sqrt{\pi}. \quad (593)$$

従って、正規直交条件を満足する波動関数は次のように与えられる。

調和振動子の定常状態の波動関数

$$\psi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \quad (594)$$

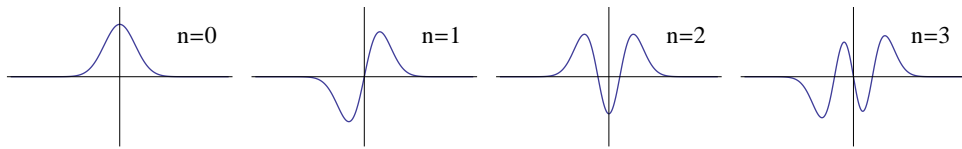


図 51: 調和振動子の定常状態の波動関数

(594) に与えた波動関数は  $y$  座標において規格化されたもの、すなわち

$$\int \psi_m(y) \psi_n(y) dy = \delta_{m,n} \quad (595)$$

を満たす波動関数である。 $x$  座標に直すと

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \int \psi_m(y) \psi_n(y) dx = \delta_{m,n} \quad (596)$$

よって、 $x$  座標において規格化された波動関数は次のように与えればよい。

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \psi_n(y) = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}. \quad (597)$$

### 13.2 \*古典極限

粒子の存在確率密度  $|\psi|^2$  をグラフにしたものを図 52 に与える。山の数  $n + 1$

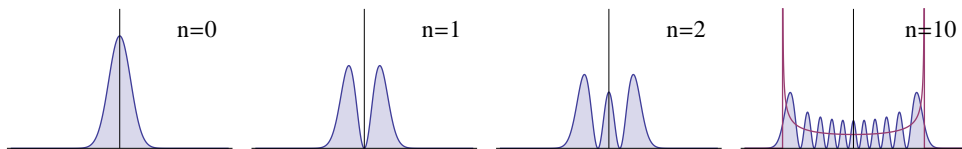


図 52: 調和振動子の定常状態における粒子の存在確率密度

に一致する。 $n$  を大きくしていくと、波動関数は激しく振動する関数になるが、その振動を均すと滑らかな曲線が現れる。これは、古典的な粒子の存在確率密度を与えると期待される。

調和振動子の古典的存在確率密度を求めてみよう。古典的には、ある微小区間を粒子が通過するのに掛かる時間はその区間の幅を粒子の速さで割ったものであ



る。従って、周期運動する粒子がその区間内に存在する確率は、この時間を運動の周期で割ったものになる。往復運動の場合には一周期の間に二回その区間を通過するのでさらに 2 を掛けなければならない。よって存在確率密度  $\rho$  は

$$\rho = \frac{2}{vT} \quad (598)$$

である。無次元化された変数を用いている場合、周期は  $T = 2\pi$  であり、速さはエネルギー保存則

$$\frac{1}{2}v^2 + \frac{1}{2}y^2 = n + \frac{1}{2} \quad (599)$$

から求めることができる。

$$v = \sqrt{2n + 1 - y^2}. \quad (600)$$

その結果、古典的存在確率密度  $\rho$  は次のように与えられる。

$$\rho = \frac{1}{\pi\sqrt{2n + 1 - y^2}} \quad (601)$$

平方根の中身が負になる領域には古典的粒子は侵入することができないから、そこでは古典的存在確率密度は 0 である。図 52 の  $n = 10$  のグラフには古典的存在確率密度のグラフも重ねて描いてある。確かに  $|\psi|$  の振動を均したものに一致しそうなことが確認できる。

波の振幅だけでなく、波の位相についても見てみよう。WKB 近似を用いると、ある二つの点  $y_1$  と  $y_2$  での位相差は次のように得ることができる。

$$\Delta\phi(y_1, y_2) = \int_{y_1}^{y_2} k_y dy \quad (602)$$

古典回帰点

$$y_* = \sqrt{2n + 1} \quad (603)$$

における跳ね返りで位相のずれ  $\delta$  が生じると仮定すると、波動関数は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} \psi(y) &\sim e^{2i\delta} \exp[i\Delta(y, y_*)] + \exp[-i\Delta(y, y_*)] \\ &\sim \cos(\Delta(y, y_*) + \delta) \end{aligned} \quad (604)$$

( $\Delta(y, y_*)$  は  $y$  の減少関数であり、一行目右辺第 1 項が反射波、第 2 項が入射波を表している。)  $y = 0$  における波動関数は

$$\Delta\phi(0, y_*) = \int_0^{y_*} \sqrt{y_*^2 - y^2} dy = \frac{\pi}{4} y_*^2 = \frac{n\pi}{2} + \frac{\pi}{4} \quad (605)$$

を用いれば

$$\psi(0) \sim \cos\left(\frac{n\pi}{2} + \frac{\pi}{4} + \delta\right) \quad (606)$$

となる。これを厳密な波動関数の  $y = 0$  での振る舞い

$$\psi(0) \sim \cos \frac{n\pi}{2} \quad (607)$$

と比較してみよう。波動関数の符号は自由に取ることができるから、位相については  $\pi$  の整数倍の不定性があることに注意すると、次の関係が得られる。

$$\frac{n\pi}{2} = \frac{n\pi}{2} + \frac{\pi}{4} + \delta \pmod{\pi} \quad (608)$$

ここから位相のずれが次のように得られる。<sup>2</sup>

$$\delta = -\frac{\pi}{4} \pmod{\pi} \quad (609)$$

### 13.3 \*古典回帰点近傍での波動関数

$E - U(x)$  の値が連続的に 0 を横切るような古典回帰点での位相のずれを調べるには、その古典回帰点の周りに注目してシュレーディンガー方程式を解き、その波動関数の形状を調べればよい。粒子のエネルギーが  $E = 0$  になるようにエネルギーの原点を選び、そのときの古典回帰点を座標の原点にとる。適当な変数変換を行えば、古典回帰点  $x = 0$  近傍のポテンシャルを次のように取ることができる。

$$U(x) = \frac{x}{2} \quad (610)$$

このときシュレーディンガー方程式は次のように与えられる。

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} - x \right) \psi(x) = 0 \quad (611)$$

この微分方程式の解はエアリー関数と呼ばれる。独立な二つの解は  $\text{Ai}(x)$  および  $\text{Bi}(x)$  と表される。ポテンシャルによって跳ね返される粒子を表す波動関数として

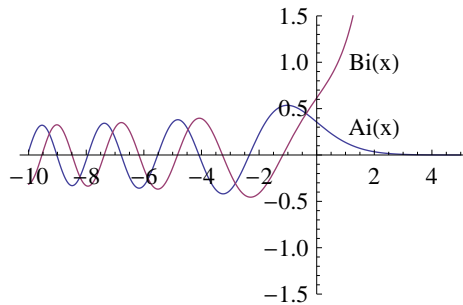


図 53: エアリー関数

は  $x \rightarrow \infty$  において 0 に漸近する  $\text{Ai}(x)$  を採用すればよい。

<sup>2</sup>これとは  $\pi/2$  だけ異なる位相のずれの定義の仕方もある。その場合には  $\delta = \pi/4$  である。

この関数の漸近形を詳しく調べることで、古典回帰点における位相のずれを計算することができるが、位相のずれはすでに前節で調和振動子の波動関数を用いて計算したので、ここでは調和振動子の波動関数とエアリー関数の関係を簡単に述べるにとどめる。次のポテンシャルを考えよう。

$$U(x) = \frac{x}{2} + \frac{x^2}{2a^4} = \frac{1}{2a^4} \left( x + \frac{a^4}{2} \right)^2 - \frac{a^4}{8} \quad (612)$$

このポテンシャルは  $x = -a^4/2$  を頂点とする下に凸な放物線であり、調和振動子を表している。角振動数は

$$\omega = \frac{1}{a^2} \quad (613)$$

である。 $a \rightarrow \infty$  の極限において (611) に一致する。このポテンシャル上の粒子の

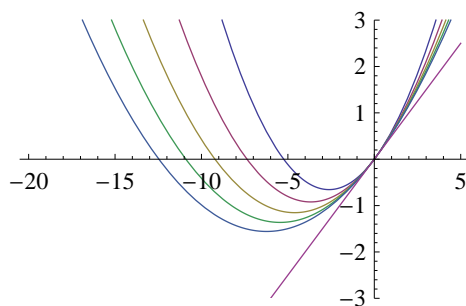


図 54:  $a \rightarrow \infty$  で  $U(x) = x/2$  に漸近するポテンシャル

シュレーディンガー方程式は

$$\left( \frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{2a^4} \left( x + \frac{a^4}{2} \right)^2 + \frac{a^4}{8} \right) \psi = 0. \quad (614)$$

である。§13.1 で扱ったものと同じ形に持っていくには次の変数変換を行えばよい。

$$x = ay - \frac{a^4}{2}, \quad a^6 = 4(2n + 1). \quad (615)$$

この結果、次の微分方程式を得る。

$$\left( \frac{d^2}{dy^2} - y^2 + 2n + 1 \right) \psi_n(y) = 0. \quad (616)$$

このシュレーディンガー方程式の解で

$$\int |\psi_n(y)|^2 dy = 1. \quad (617)$$

によって規格化したものはすでに (594) に与えられている。 $\psi_n(x)$  を  $\psi_n(y)$  に対して代入  $y = x/a + a^3/2$  をしたものと定義すれば、その規格化は次のようになる。

$$\int |\psi_n(x)|^2 dx = a. \quad (618)$$

これは、 $x$  座標では全体の粒子数が  $a$  であるような規格化になっている。古典回帰点近傍のみに注目している場合、全体の粒子数よりも粒子が古典回帰点を通過する頻度に注目するほうが良い。(618) によって規格化された波動関数に対する衝突頻度を角振動数で表したものは、(613) を用いれば  $1/a$  となる。従って、衝突頻度が角振動数 1 になるように規格化した波動関数は

$$\varphi_n(x) = \sqrt{a} \psi_n\left(\frac{x}{a} + \frac{a^3}{2}\right) \quad (619)$$

と与えられる。いくつかの  $n$  に対する波動関数の概形を図 55 に与える。波動関数

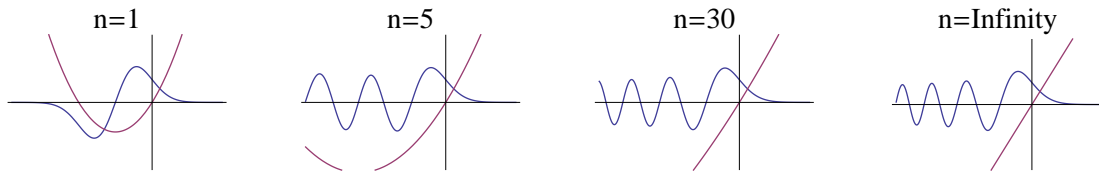


図 55: 古典回帰点近傍での波動関数

$\varphi_n(x)$  の  $n \rightarrow \infty$  の極限としてエアリ関数が得られる。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n(x) = \sqrt{2} \text{Ai}(x) \quad (620)$$

### 13.4 \*エルミート多項式

$H_n(y)$  は次の母関数を用いて定義するのが便利である。

$$G(y, s) \equiv e^{-s^2+2sy} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(y) \quad (621)$$

ここから  $H_n(y)$  が満足する微分方程式を求めよう。 $G(y, s)$  が次の式を満たすことはすぐにわかる。

$$\frac{\partial^2 G}{\partial y^2} - 2y \frac{\partial G}{\partial y} = (4s^2 - 4sy)G = -2s \frac{\partial G}{\partial s} \quad (622)$$

この左辺に (621) の展開式を代入すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \left( \frac{d^2}{dy^2} - 2y \frac{d}{dy} \right) H_n(y) \quad (623)$$

となる。一方右辺は

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} (-2n) H_n(y) \quad (624)$$

である。この二つが  $s$  によらず等しいから、 $s^n$  の係数ごとに等しいはずである。よって

$$\left( \frac{d^2}{dy^2} - 2y \frac{d}{dy} \right) H_n = -2n H_n \quad (625)$$

が成り立つ。これは  $f_n(y)$  が満足する微分方程式 (578) に一致する。

エルミート多項式の幾つかの性質について、その導出を与えておく。一般にテーラー展開

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{n!} x^n \quad (626)$$

の係数が

$$a_n = \frac{d^n}{dx^n} f(x) \Big|_{x=0} \quad (627)$$

によって得られることを用いると、

$$\begin{aligned} H_n(y) &= \frac{\partial^n}{\partial s^n} G(y, s) \Big|_{s=0} \\ &= e^{y^2} \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-(s-y)^2} \Big|_{s=0} \\ &= e^{y^2} \left( -\frac{\partial}{\partial y} \right)^n e^{-(s-y)^2} \Big|_{s=0} \\ &= e^{y^2} \left( -\frac{\partial}{\partial y} \right)^n e^{-y^2} \end{aligned} \quad (628)$$

が得られる。これは (エルミート多項式に対する) ロドリゲスの公式 (Rodrigues' formula) と呼ばれる。

波動関数の規格化に用いられた関係式 (593) を求めよう。つまり、次の  $A_{m,n}$  を計算したい。

$$A_{m,n} = \int e^{-y^2} H_m(y) H_n(y) dy \quad (629)$$

そのために母関数を用いて

$$\int e^{-y^2} G(y, s) G(y, t) dy = \sum_{m,n} \frac{s^m t^n}{m! n!} A_{m,n} \quad (630)$$

を計算すればよい。  $G(y, s) = e^{-s^2+2sy}$  を代入すると

$$\begin{aligned}
 &= \int e^{-y^2} e^{-s^2+2sy} e^{-t+2ty} dy \\
 &= \int e^{-(y-s-t)^2} e^{2st} dy \\
 &= e^{2st} \int e^{-x^2} dx \\
 &= \sqrt{\pi} e^{2st} \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{n!} \sqrt{\pi} s^n t^n \tag{631}
 \end{aligned}$$

が得られる。途中で公式

$$\int e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \tag{632}$$

を用いた。(631) を (630) の右辺と比較し、 $s$  と  $t$  の各次数の係数が等しいと置くことで

$$A_{m,n} = \delta_{m,n} 2^m m! \sqrt{\pi} \tag{633}$$

が得られる。これを (629) に代入すれば関係式 (593) が得られる。

### 13.5 昇降演算子

前節では固有状態を求めるために微分方程式を解き、具体的に波動関数  $\psi(x)$  を求めた。今度はそれとは異なる代数的な方法で固有状態を求める。

今回も無次元化された変数を用いる。

$$y = x / \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad \mathcal{E} = E / (\hbar\omega). \tag{634}$$

シュレーディンガー方程式は

$$\hat{H}|\psi\rangle = \mathcal{E}|\psi\rangle, \quad \hat{H} = \frac{1}{2} \left( -\frac{d^2}{dy^2} + y^2 \right) \tag{635}$$

これは二乗の差なので、和と差の積に因数分解できそうであるが、 $y$  と  $d/dy$  が可換ではないために余分な項が現れる。次の演算子を定義する。

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{d}{dy} + y \right), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( -\frac{d}{dy} + y \right). \tag{636}$$

この二つの演算子が互いにエルミート共役であることは簡単に確かめられる。これを用いて上記のハミルトニアンは次のように幾つかの形に書き換えることができる。

$$\hat{H} = \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} = \hat{a} \hat{a}^\dagger - \frac{1}{2} = \frac{1}{2} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) \tag{637}$$

これらが互いに等しいことは、 $\hat{a}$  と  $\hat{a}^\dagger$  が満たす交換関係

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (638)$$

を用いれば示すことができる。

$\hat{a}$  と  $\hat{a}^\dagger$  とハミルトニアン  $\hat{H}$  の交換関係は

$$[\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hat{a}^\dagger [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \quad (639)$$

これより、もし  $|\psi\rangle$  が  $\hat{H}$  の固有状態であり、

$$\hat{H}|\psi\rangle = \mathcal{E}|\psi\rangle \quad (640)$$

であれば、 $|\psi'\rangle = \hat{a}^\dagger|\psi\rangle$  に対して

$$\hat{H}|\psi'\rangle = \hat{H}\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{H}\psi + [\hat{H}, \hat{a}^\dagger]|\psi\rangle = \hat{a}^\dagger\mathcal{E}|\psi\rangle + \hat{a}^\dagger|\psi\rangle = (\mathcal{E}+1)\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = (\mathcal{E}+1)|\psi'\rangle \quad (641)$$

が成り立つことがわかる。つまり、 $\hat{a}^\dagger$  を作用させると、状態のエネルギーが 1 だけ上昇する。そのため、 $\hat{a}^\dagger$  は上昇演算子と呼ばれる。 $\hat{a}$  に対しては、

$$[\hat{H}, \hat{a}] = -\hat{a} \quad (642)$$

が成り立ち、これを用いて  $|\psi'\rangle = \hat{a}|\psi\rangle$  に対して

$$\hat{H}|\psi'\rangle = (\mathcal{E}-1)|\psi'\rangle \quad (643)$$

を示すことができる。これは  $\hat{a}$  がエネルギーを 1 だけ下降させる演算子であることを意味する。このため  $\hat{a}$  は下降演算子と呼ばれる。上昇演算子と下降演算子をまとめて昇降演算子という。

基底状態を  $|0\rangle$  と表わそう。基底状態はそれ以上エネルギーを下げるできないので、

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \quad (644)$$

が成り立つはずである。基底状態のエネルギーは、ハミルトニアンを作用させ、基底状態の性質 (644) を用いることで

$$\hat{H}|0\rangle = \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) |0\rangle = \frac{1}{2}|0\rangle \quad (645)$$

と得られる。

励起状態は基底状態に上昇演算子  $\hat{a}^\dagger$  を作用させることによって構成できる、第  $n$  励起状態を  $|n\rangle$  と表わせば、次のように与えることができる。

$$|n\rangle = c_n (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle. \quad (646)$$

$c_n$  は規格化因子である。この状態のエネルギーは

$$\hat{H}|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle \quad (647)$$

が成り立つ。

固有状態の規格化を  $n = 0$  の基底状態も含め次のように決めておこう。

$$\langle n|n\rangle = 1. \quad (648)$$

この規格化条件を満足するように (646) の規格化因子  $c_n$  を求めよう。

$$\frac{1}{c_n}|n\rangle = \frac{1}{c_{n-1}}\hat{a}^\dagger|n-1\rangle. \quad (649)$$

この両辺のノルムをとると、

$$\frac{1}{|c_n|^2}\langle n|n\rangle = \frac{1}{|c_{n-1}|^2}\langle n-1|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n-1\rangle = \frac{n}{|c_{n-1}|^2}\langle n-1|n-1\rangle \quad (650)$$

規格化条件 (648) を用いれば、 $c_n$  に対する漸化式が得られる。

$$\frac{1}{|c_n|^2} = \frac{n}{|c_{n-1}|^2} \quad (651)$$

位相は決まらないので、正の実数に取ることになれば、 $c_0$  は定義より 1 であることを用いて

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \quad (652)$$

が得られる。つまり、

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \quad (653)$$

である。

もし波動関数の具体形を知りたいければ、座標表示における昇降演算子の具体形 (636) を用いればよい。たとえば基底状態  $|0\rangle$  の波動関数を  $\psi_0(y)$  を決めるには、(644) に対応する微分方程式

$$\left(\frac{d}{dy} + y\right)\psi_0 = 0 \quad (654)$$

を解けば良い。すると、前回求めた基底状態の波動関数

$$\psi_0 = \frac{1}{\pi^{1/4}}e^{-\frac{y^2}{2}} \quad (655)$$

が得られる。



励起状態については、上昇演算子  $\hat{a}^\dagger$  が

$$\hat{a}^\dagger = e^{y^2/2} \left( -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{d}{dy} \right) e^{-y^2/2} \quad (656)$$

と表せることを用いれば

$$\begin{aligned} \psi_n(y) &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0 \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[ e^{y^2/2} \left( -\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{d}{dy} \right) e^{-y^2/2} \right]^n \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-y^2/2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^n n!}} e^{y^2/2} \left( -\frac{d}{dy} \right)^n e^{-y^2} \end{aligned} \quad (657)$$

これは波動関数 (594) に一致している。

例題 13.1 状態  $|n\rangle$  における  $y^2$  の期待値を求めよ。

$y$  を昇降演算子を用いて表わすと  $y = (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)/\sqrt{2}$  であるから、

$$y^2 = \frac{1}{2} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 = \frac{1}{2} (\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) \quad (658)$$

この演算子を  $|n\rangle$  で挟んで期待値を求めよう。右辺の括弧の中の第1項は  $\langle n|\hat{a}^2|n\rangle \sim \langle n|n-2\rangle$  であるが、異なる固有状態の内積は0であるから考える必要はない。第2項も同様である。従って、残りの二つの項のみ考慮すればよい。

$$\langle n|y^2|n\rangle = \langle n|\frac{\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}}{2}|n\rangle = n + \frac{1}{2}. \quad (659)$$

## 13.6 調和振動子とエネルギー量子

調和振動子のエネルギースペクトル

$$E = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (660)$$

はエネルギー準位が等間隔であり、その間隔は

$$\Delta E = \hbar\omega \quad (661)$$

である。このため、系のエネルギーが  $\Delta E$  を最小単位とする粒のようなものとみなすことができる。たとえば、系が第  $n$  励起状態  $|n\rangle$  にあれば、それは系が  $n$  個のエネルギー量子を含んでいるとみなすことができる。このような立場では昇降演算子はエネルギー量子を生成、消滅させるものと解釈される。このため  $\hat{a}$  と  $\hat{a}^\dagger$  はそれぞれ消滅演算子および生成演算子とも呼ばれる。系が含むエネルギー量子の数を固有値として与える次の演算子は個数演算子と呼ばれる。

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}. \quad (662)$$

は状態  $|n\rangle$  に作用させると固有値  $n$  を与える。すなわち、励起の個数を数える。 $\hat{N}$  は個数演算子と呼ばれる。

## 13.7 コヒーレント状態

古典的な調和振動子の運動は

$$x = A \cos(\omega t + \theta) \quad (663)$$

によって与えられる。この運動は、はっきりとした位相  $\omega t + \theta$  と振幅  $A$  を持っている。このような状態はコヒーレントであるといわれる。

量子力学における調和振動子の定常状態は、粒子がどこにあるのかあいまいであり、位相（波動関数の位相ではなく、振動子の位相）が定まらない。従ってコヒーレントではない。そもそも量子力学では位置と運動量を同時に確定することができないため、完全にコヒーレントな状態は存在しないが、それぞれがある程度のあいまいさを持ちつつ、ほぼ定まった状態が存在する。量子力学においてはこのような状態のことをコヒーレント状態と呼ぶ。

最も簡単な例として、下降演算子  $\hat{a}$  の固有状態がそのような例になっている。 $\alpha$  を任意の複素数として

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (664)$$

を満足する状態  $|\alpha\rangle$  について調べてみよう。 $\hat{a}$  はエルミート演算子ではないので、固有値  $\alpha$  は実数とは限らない。実際、任意の複素数値を固有値とする状態を構成することができる。 $|\alpha\rangle$  を定常状態  $|n\rangle$  で展開し、次のように置こう。

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n \frac{c_n}{n!} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \quad (665)$$

これを固有値方程式 (664) に代入してみると、

$$\sum_n c_n \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = \alpha \sum_n \frac{c_n}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \quad (666)$$

となる。 $\hat{a} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = n (\hat{a}^\dagger)^{n-1} |0\rangle$  を用いると、この左辺は

$$\sum_n c_n \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{(n-1)!}} (\hat{a}^\dagger)^{n-1} |0\rangle = \sum_n c_{n+1} \frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \quad (667)$$

なので、両辺の係数の比較より、係数に対する漸化式

$$c_{n+1} \sqrt{n+1} = \alpha c_n \quad (668)$$

が得られる。この漸化式を解くことにより全ての係数  $c_n$  ( $n \geq 1$ ) を  $c_0$  を用いて与えることができる。

$$c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0 \quad (669)$$

$c_0$  は状態  $|\alpha\rangle$  の規格化を決める。規格化条件  $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$  を要求しよう。この規格化条件に展開式 (665) を代入すると、

$$1 = \langle\alpha|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = |c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |c_0|^2 e^{|\alpha|^2}. \quad (670)$$

従って

$$c_0 = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \quad (671)$$

であり、コヒーレント状態が次のように求まった。

————— コヒーレント状態 —————

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (672)$$

コヒーレント状態の波動関数  $\psi_\alpha(y) = \langle y|\alpha\rangle$  を求めておこう。

$$\begin{aligned} \langle y|\alpha\rangle &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{n!} \langle y|n\rangle \\ &= \frac{e^{-|\alpha|^2/2}}{\pi^{1/4}} e^{-y^2/2} \sum_n \frac{1}{n!} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{2}}\right)^n H_n(y) \\ &= \frac{e^{-|\alpha|^2/2}}{\pi^{1/4}} e^{-y^2/2} G\left(y, \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\right) \end{aligned} \quad (673)$$

ただし、 $G(y, s)$  は (621) に与えたエルミート多項式の母関数である。さらに母関数の具体形を代入すれば

$$\psi_\alpha(y) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}(y-\sqrt{2}\operatorname{Re}\alpha)^2} e^{i(\sqrt{2}\operatorname{Im}\alpha y - \frac{\operatorname{Im}\alpha^2}{2})} \quad (674)$$

が得られる。二つの指数関数因子のうち、一つ目は振幅に関するものであり、位置  $y$  の期待値が  $\sqrt{2}\operatorname{Re}\alpha$  であることがここから読み取れる。また二つ目は位相因子に関するものであり、 $-i\partial_y$  の期待値が  $\sqrt{2}\operatorname{Im}\alpha$  であることが読み取れる。

無次元化された座標  $y$  と運動量  $-i\partial_y$  の期待値は、波動関数を用いなくても、以下のように代数的に導出することもできる。まず、これらを昇降演算子を用いて表わすと

$$\langle\alpha|y|\alpha\rangle = \langle\alpha|\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)|\alpha\rangle, \quad \langle\alpha|-i\partial_y|\alpha\rangle = \langle\alpha|\frac{1}{\sqrt{2}i}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)|\alpha\rangle \quad (675)$$

が得られる。ここで、

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad \langle\alpha|\hat{a}^\dagger = \langle\alpha|\alpha^* \quad (676)$$

を用いると、期待値が次のように得られる。

$$\langle\alpha|y|\alpha\rangle = \sqrt{2}\operatorname{Re}\alpha, \quad \langle\alpha|-i\partial_y|\alpha\rangle = \sqrt{2}\operatorname{Im}\alpha \quad (677)$$

無次元化する前の座標と運動量の期待値は次のように与えられる。

$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \langle y \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re} \alpha, \quad \langle \hat{p} \rangle = \sqrt{m\omega\hbar} \langle -i\partial_y \rangle = \sqrt{2m\omega\hbar} \operatorname{Im} \alpha. \quad (678)$$

コヒーレント状態  $|\alpha\rangle$  は定常状態ではないので、時間的に変化していく。一般に、 $t = 0$  における状態がエネルギー固有状態によって

$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle \quad (679)$$

と展開される時、一般の時刻  $t$  における状態は次のように与えられる。

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} c_n |\psi_n\rangle \quad (680)$$

であることを用いれば調和振動子の場合には  $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$  であるから  $t = 0$  における状態ベクトルが (672) のコヒーレント状態  $|\alpha\rangle$  であったときに、時刻  $t$  における状態ベクトルは

$$e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{i(n+\frac{1}{2})\omega t} |n\rangle = e^{\frac{i}{2}\omega t} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{(e^{i\omega t}\alpha)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{\frac{i}{2}\omega t} |\alpha(t)\rangle \quad (681)$$

となる。ただし  $\alpha(t)$  は次の関数である。

$$\alpha(t) = e^{i\omega t} \alpha \quad (682)$$

つまり、 $\alpha(t)$  は複素平面上で原点を中心とする円の上を角速度  $\omega$  で移動する。 $\alpha$  の実部と虚部は (678) によって座標と運動量の期待値を与える。座標と運動量の変化を相空間上に描くと、これは丁度古典的運動のそれと一致する。

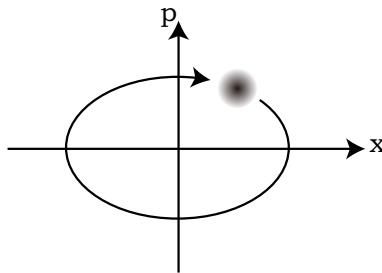


図 56: コヒーレント状態の時間発展

問題 13.1 コヒーレント状態  $|\alpha\rangle$  に対して  $y^2$  および  $-\partial_y^2$  の期待値を求めよ。

コヒーレント状態は、座標と運動量に対して 0 でない不確定性を持つが、その不確定性を無視できるような極限においては、古典的な粒子の運動とみなすことができる。

電磁波のエネルギー量子を調和振動子を用いて扱う場合には、エネルギー固有状態はエネルギー量子の数が確定値を取るような状態である。その場合には電場、磁場の値は不確定であり、期待値は 0 となる。それに対してコヒーレント状態では電場、磁場が時間ごとにほぼ決まった値を持ち古典的な電磁波に対応させることができる。