第8章　調和振動子と生成消滅演算子

前章に続いて１次元調和振動子を扱う。しかし，ここでは，座標と運動量の演算子から調和振動子量子の生成・消滅演算子を定義し，それらの交換関係を用いて，調和振動子のエネルギー固有値を求める。また，座標と運動量の演算子を用いて固有関数を導出する。さらに，波束の運動についても議論する。

8.1　生成消滅演算子とエネルギー固有値

8.1.1　生成消滅演算子

無次元化した座標と運動量の演算子

座標の演算子 x と運動量の演算子 p から，無次元化した演算子を次のように定義する：

$$Q \;=\; \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x, \qquad P \;=\; \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\,p. \tag{8.1}$$

これらの演算子の交換関係を計算すると

$$[\,Q,\,P\,] \;=\; \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\cdot\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\,[\,x,\,p\,] \;=\; \frac{1}{\hbar}\,[\,x,\,p\,]$$

となり，位置の演算子 x と運動量の演算子 p の交換関係 $[\,x,\,p\,] = i\hbar$ より，

$$[\,Q,\,P\,] \;=\; i \tag{8.2}$$

が得られる。運動量演算子 P は座標の微分

$$P \;=\; \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\,\frac{\hbar}{i}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \;=\; \frac{1}{i}\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Q} \tag{8.3}$$

と表せることからも，交換関係 (8.2) が導ける。

生成演算子と消滅演算子

座標と運動量の演算子の線型結合として，次のような演算子を導入する：

$$a^\dagger \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\,(Q - iP), \qquad a \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\,(Q + iP). \tag{8.4}$$

後の議論から明らかになるように，$a^\dagger$ を **生成演算子**（creation operator），a を **消滅演算子**（annihilation operator）と呼ぶ。座標の演算子 x と運動量の演算子 p はエルミート演算子であるので，

$$x^\dagger \;=\; x, \quad p^\dagger \;=\; p,$$

無次元化した演算子もエルミート演算子であり,

$$Q^\dagger \;=\; Q, \qquad P^\dagger \;=\; P,$$

従って，両者の線型結合である生成演算子 $a^\dagger$ は消滅演算子 a のエルミート共役になっていることがわかる。これらの演算子 a と $a^\dagger$ の交換関係は

$$\begin{aligned}[\,a,\,a^\dagger\,] &= \frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\,[\,Q+iP,\,Q-iP\,] \\ &= \frac{1}{2}\,[\,Q,\,Q\,]-i\,[\,Q,\,P\,]+i\,[\,P,\,Q\,]+[\,P,\,P\,]\end{aligned}$$

となるが，同じ演算子は交換するので $[\,Q,\,Q\,]=[\,P,\,P\,]=0$ であり，残る 2 つの交換関係は (8.2) に与えられているので,

$$[\,Q,\,P\,] \;=\; -\,[\,P,\,Q\,] \;=\; i$$

その結果

$$[\,a,\,a^\dagger\,] \;=\; 1 \tag{8.5}$$

が得られる。(8.4) を座標 Q と運動量 P について解くと

$$Q \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\,(a^\dagger+a), \qquad P \;=\; \frac{i}{\sqrt{2}}\,(a^\dagger-a) \tag{8.6}$$

となる。

数演算子

次の演算子を定義する：

$$N \;=\; a^\dagger a. \tag{8.7}$$

後の議論でその意味が明らかになるように，演算子 N は**数演算子**（number operator）と呼ばれる。N と a の交換関係は，交換関係の定義から

$$[\,N,\,a\,] \;=\; Na-aN \;=\; a^\dagger aa-aa^\dagger a$$

となるが，第 2 項の $aa^\dagger$ に交換関係 (8.5) を適用すると

$$aa^\dagger \;=\; 1+a^\dagger a$$

となるので,

$$[\,N,\,a\,] \;=\; a^\dagger aa-(1+a^\dagger a)a \;=\; -a$$

である。N と $a^\dagger$ の交換関係も同様に計算できる。その結果，演算子 N と生成・消滅演算子との交換関係

$$[\,N,\,a^\dagger\,] \;=\; a^\dagger, \qquad [\,N,\,a\,] \;=\; -a \tag{8.8}$$

が得られる。

8.1.2 ハミルトニアンとエネルギー固有値

ハミルトニアン

調和振動子のハミルトニアンは無次元化した座標の演算子 Q と運動量の演算子 P を用いて

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(P^2+Q^2\right) \tag{8.9}$$

と表せる。右辺の P^2+Q^2 に (8.6) の関係を代入すると

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

となる。最後の等号では交換関係 (8.5) を用いた。最右辺の $a^\dagger a$ は数演算子 (8.7) であるので，調和振動子のハミルトニアンは数演算子を用いて

$$H = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right) \tag{8.10}$$

と表せる。

数演算子の固有値

数演算子 N の固有値を ν，その固有値によって区別される固有関数を u_ν とする：

$$N\,u_\nu = \nu\,u_\nu. \tag{8.11}$$

（1）固有値 ν には下限がある。

固有関数 u_ν に消滅演算子 a を作用させ，それ自身との内積をつくり，生成演算子 $a^\dagger$ と消滅演算子 a が互いにエルミート共役の関係にあることを用いる：

$$(\,au_\nu,\, au_\nu\,) = (\,u_\nu,\, a^\dagger a u_\nu\,)$$

$a^\dagger a$ が数演算子であり，固有値方程式を用いて，右辺は

$$(\,u_\nu,\, a^\dagger a u_\nu\,) = (\,u_\nu,\, Nu_\nu\,) = \nu\,(\,u_\nu,\, u_\nu\,)$$

となる。よって，

$$(\,au_\nu,\, au_\nu\,) = \nu\,(\,u_\nu,\, u_\nu\,) \tag{8.12}$$

が得られる。右辺にある固有関数 u_ν と自分自身との内積は常に正でなければならない：

$$(\,u_\nu,\, u_\nu\,) > 0.$$

左辺の内積は，固有関数が恒等的に 0 でない限り，同様に正でなければならないので，数演算子 N の固有値 ν は

$$\nu \geq 0 \tag{8.13}$$

でなければならない。等号が成り立つのは，$(au_\nu, au_\nu) = 0$ のとき，すなわち，au_ν が恒等的に 0 の場合である。

（2）$a^\dagger u_\nu$ と au_ν は，それぞれ，数演算子の固有値 $\nu+1$ と $\nu-1$ をもつ。
u_ν に生成演算子 $a^\dagger$ を作用させ，続いて数演算子 N を作用させると

$$Na^\dagger u_\nu \;=\; (a^\dagger N + a^\dagger)u_\nu \;=\; (\nu+1)\,a^\dagger u_\nu$$

が得られる。1 番目の等号では交換関係 (8.8) を用い，2 番目の等号では数演算子の固有値方程式 (8.11) を用いた。生成演算子の代わりに消滅演算子を作用させた場合も同様に計算でき，

$$N\Big(a^\dagger u_\nu\Big) \;=\; (\nu+1)\Big(a^\dagger u_\nu\Big), \qquad N\Big(au_\nu\Big) \;=\; (\nu-1)\Big(au_\nu\Big) \tag{8.14}$$

が得られる。すなわち，$a^\dagger u_\nu$ は，数演算子 N の固有値 $\nu+1$ をもつ固有状態になっていて，au_ν は，$\nu>0$ であれば，固有値 $\nu-1$ をもつ固有状態になっている。

$a^\dagger u_\nu$ は，固有値 $\nu+1$ をもつ固有状態，すなわち，$u_{\nu+1}$ に比例している。そこで，$a^\dagger u_\nu$ と自分自身との内積をつくると，交換関係 (8.5) を用いて

$$\begin{aligned}(a^\dagger u_\nu, a^\dagger u_\nu) \;&=\; (u_\nu, aa^\dagger u_\nu) \;=\; (u_\nu, (1+a^\dagger a)u_\nu)\\ &=\; (u_\nu, (1+N)u_\nu) \;=\; (\nu+1)\,(u_\nu, u_\nu)\end{aligned}$$

となる。固有関数 u_ν に a を作用させたときも同様に計算できる。従って，固有関数 $u_{\nu+1}$（$u_{\nu-1}$）は，固有関数 u_ν に $a^\dagger$（a）を作用させて

$$u_{\nu+1} \;=\; \frac{1}{\sqrt{\nu+1}}\,a^\dagger u_\nu, \qquad u_{\nu-1} \;=\; \frac{1}{\sqrt{\nu}}\,au_\nu \tag{8.15}$$

によってつくることができる（ただし，第 2 式では $\nu \neq 0$）。

（3）数演算子の固有値 ν は 0 または正の整数である。
もし，そうでない固有値があったとする。たとえば，固有値が $0<\nu<1$ であるとする。そのとき，u_ν に消滅演算子 a を 2 回作用させて内積をとると，(8.14) の第 2 式と (8.12) を用いて

$$(aau_\nu, aau_\nu) \;=\; (au_\nu, Nau_\nu) \;=\; (\nu-1)\,(au_\nu, au_\nu) \;=\; \nu(\nu-1)\,(u_\nu, u_\nu)$$

となる。最右辺の内積は正であり，固有値 $\nu-1$ は負であるので，最右辺は負である。すなわち，左辺は負であり，自分自身との内積が常に正であることに矛盾する。よって，数演算子の固有値は ν は負でない整数でなければならない。正の整数である固有値 ν をもつ状態に消滅演算子 a を何回か作用させれば，必ず固有値が 0 の固有状態 u_0 に到達する。

以上の議論をまとめると，数演算子 N の固有値 ν は

$$Nu_\nu \;=\; \nu u_\nu, \qquad \nu \;=\; 0, 1, 2, \cdots \tag{8.16}$$

である。

ハミルトニアンの固有値

数演算子はエルミートである：

$$N^\dagger \;=\; (a^\dagger a)^\dagger \;=\; (a)^\dagger (a^\dagger)^\dagger \;=\; a^\dagger a \;=\; N. \tag{8.17}$$

エルミートな演算子の異なる固有値に対する固有関数は直交する。従って，固有値 $\nu = 0, 1, 2, \cdots$ に対する固有関数は直交し，(8.15) の第１式を用いて直交系をつくることができる：

$$u_0, \quad u_1 \;=\; a^\dagger u_0, \quad u_2 \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\left(a^\dagger\right)^2 u_0, \quad \cdots, \quad u_n \;=\; \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n u_0, \quad \cdots. \tag{8.18}$$

固有関数 u_0 を規格化すれば，この式によってつくられる固有関数は，自動的に規格化されている。

ハミルトニアンは，(8.10) に示したように数演算子で表されるので，数演算子の固有状態はハミルトニアンの固有状態である。ハミルトニアンの固有値は，ハミルトニアンの数演算子 N をその固有値で置き換えて，

$$H u_n \;=\; E_n u_n, \qquad E_n \;=\; \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad (\, n = 0, 1, 2, \cdots\,) \tag{8.19}$$

となる。これは，前章でシュレディンガー方程式を解いて得た固有値 (7.21) に一致する。

演算子 $a^\dagger$ は，これを固有関数 u_n に作用させると u_{n+1} を作り，エネルギー固有値は $\hbar\omega$ だけ大きくなる。これは，大きさが $\hbar\omega$ であるエネルギーの量子があって，エネルギー量子が１つ加わるごとに固有関数のエネルギーが $\hbar\omega$ ずつ大きくなると考えることができる。その意味で，N はエネルギー量子の数を与える数演算子（数演算子）であり，$a^\dagger$ はエネルギー量子の数を１つ増やす演算子（生成演算子），a はエネルギー量子の数を１つ減らす演算子（消滅演算子）である。

8.2　エネルギーの固有関数

8.2.1　基底状態と励起状態の波動関数

基底状態の波動関数

基底状態 u_0 に消滅演算子 a を作用させると 0 になる。ここで，a を (8.4) の第 2 式によって座標と運動量の演算子で表すと

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}(Q+iP) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}}\,p\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\,x + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right) \end{aligned}$$

となる。従って，$au_0 = 0$ は

$$\frac{\mathrm{d}u_0}{\mathrm{d}x} = -\frac{m\omega}{\hbar}\,xu_0$$

と表せる。この微分方程式を解き，規格化して

$$u_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \tag{8.20}$$

が得られる。

励起状態の波動関数

n 番目の励起状態は，(8.18) より

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n u_0(x)$$

から求められる。ここで，$a^\dagger$ は

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q-iP) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Q - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Q}\right)$$

であるから，u_0 の式 (8.20) を代入して，u_n は

$$u_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(Q - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Q}\right)^n \exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right) \tag{8.21}$$

によって計算できる。右辺にある演算子の n 乗を扱うために，次の恒等式を用いると便利である：

$$\left(Q - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Q}\right)\psi(Q) = -\exp\left(\frac{Q^2}{2}\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Q}\left[\exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right)\psi(Q)\right]. \tag{8.22}$$

ここに，$\psi(Q)$ は任意の関数であるから，演算子としての恒等式が成り立つ。たとえば，演算子の 2 乗は

$$\left(Q - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Q}\right)^2 = \exp\left(\frac{Q^2}{2}\right)\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Q}\right)^2\exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right)$$

と微分演算子だけの 2 乗で表せ，求めたい n 乗は

$$\left(Q-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Q}\right)^n \;=\; \exp\left(\frac{Q^2}{2}\right)\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Q}\right)^n \exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right) \tag{8.23}$$

と書き直すことができる。これを (8.21) の右辺に代入して

$$u_n(x) \;=\; \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\exp\left(\frac{Q^2}{2}\right)\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}Q}\right)^n \exp\bigl(-Q^2\bigr)$$

となる。ここで，

$$H_n(x) \;=\; (-1)^n e^{x^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}e^{-x^2}$$

は，エルミートの多項式である。よって，n 番目の励起状態の波動関数は

$$\begin{aligned} u_n(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right)H_n(Q) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\right) \end{aligned} \tag{8.24}$$

となる。

8.2.2　座標と運動量の期待値

生成消滅演算子を用いると，期待値などの計算も容易に求めることができる。n 番目の固有関数 u_n に対する期待値を添え字 n をつけて表すことにする。座標演算子 x と運動量演算子 p は (8.1) と (8.6) によって生成演算子と消滅演算子で表すことができる：

$$x \;=\; \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a^\dagger + a), \qquad p \;=\; \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,i\,(a^\dagger - a) \tag{8.25}$$

座標と運動量の期待値

波動関数 u_n に x を作用させると

$$xu_n \;=\; \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a^\dagger + a)u_n \;=\; \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(\sqrt{n+1}u_{n+1} + \sqrt{n}u_{n-1})$$

となるので，期待値は

$$\langle\, x\,\rangle_n \;=\; \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\Bigl[\,\sqrt{n+1}\,(\,u_n,\,u_{n+1}\,) + \sqrt{n}\,(\,u_n,\,u_{n-1}\,)\,\Bigr]$$

となる。固有関数の直交性より，右辺の内積はどちらも 0 になる。運動量演算子も生成演算子と消滅演算子の線型結合であるから，同様の結果になる。よって，座標 x，運動量 p の期待値は全ての固有関数に対して 0 になる：

$$\langle\, x\,\rangle_n \;=\; (\,u_n,\,xu_n\,) \;=\; 0, \qquad \langle\, p\,\rangle_n \;=\; (\,u_n,\,pu_n\,) \;=\; 0. \tag{8.26}$$

座標と２乗と運動量の２乗の期待値

次に，２乗の期待値を求める。x^2 と p^2 は生成演算子と消滅演算子を用いて

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

となるが，$a^\dagger a = N$ であり，$aa^\dagger = N + 1$ である。よって，

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(2N + 1 + a^\dagger a^\dagger + aa), \qquad p^2 = \frac{m\hbar\omega}{2}(2N + 1 - a^\dagger a^\dagger - aa) \tag{8.27}$$

となる。x の期待値を計算するときと同様に，第３項と第４項は期待値に寄与しない。従って，期待値は

$$\langle x^2 \rangle_n = (u_n, x^2 u_n) = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{8.28}$$

$$\langle p^2 \rangle_n = (u_n, p^2 u_n) = m\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{8.29}$$

で与えられる。

運動エネルギーとポテンシャルの期待値

運動エネルギーは p^2 に比例するので，期待値は

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_n = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{8.30}$$

一方，調和振動子のポテンシャルは x^2 に比例するので，ポテンシャルの期待値は

$$\langle V \rangle_n = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \qquad V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{8.31}$$

となる。運動エネルギーの期待値もポテンシャルの期待値も，エネルギー固有値 E_n のちょうど半分であることがわかる：

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_n = \langle V \rangle_n = \frac{1}{2}E_n. \tag{8.32}$$

不確定性

座標と運動量の期待値から，それぞれの不確定性が求められる。n 番目の固有状態での不確定性は

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle_n - (\langle x \rangle_n)^2 = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right), \tag{8.33}$$

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle_n - (\langle p \rangle_n)^2 = m\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \tag{8.34}$$

両者の不確定性の積は

$$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{8.35}$$

となる。従って，基底状態 $u_0(x)$ では，不確定性原理で許される最小の不確定性を実現している。

8.3 基底状態の波束の運動

調和振動子の基底状態は，不確定性が最小な波束になっている。そこで，時刻 $t=0$ において次のような式で表される波束の運動を考えてみる：

$$\begin{aligned}\psi(x,\,t=0) &= u_0(x-x_0)\,e^{ip_0x/\hbar} \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}\,(x-x_0)^2+\frac{ip_0}{\hbar}\,x\right]. \end{aligned} \tag{8.36}$$

この波束は調和振動子の基底状態を同じ空間的広がり（座標の不確定性）をもち，座標の期待値が x_0 で運動量の期待値が p_0 の波束である。この波束の運動，つまり時間の経過とともに波束がどのように変化していくかを調べる。

調和振動子の固有関数は正規直交系であるから，同じ調和振動子ポテンシャルの中に閉じ込められた波束は，固有関数で一意的に展開できる：

$$\psi(x,\,t=0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(x). \tag{8.37}$$

個々の固有状態はエネルギー固有値 E_n をもつので，時間的変化は固有状態の時間的変化

$$C_n(t) = e^{-iE_nt/\hbar} = \exp\left[-i\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)t\right] \tag{8.38}$$

で表される：

$$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n C_n(t) u_n(x). \tag{8.39}$$

従って，問題は展開係数 c_n の計算に帰着される。

展開係数 c_n は次に積分によって求められる：

$$c_n = \int_{-\infty}^{+\infty} (u_n(x))^*\psi(x,\,t=0)\,\mathrm{d}x. \tag{8.40}$$

固有関数 $u_n(x)$ は (8.24) で与えられ，無次元化した座標 Q を用いると簡単な形で表すことができ，同様に，$\psi(x,t=0)$ も Q で表すことができる：

$$u_n(x) = \left(\frac{1}{\pi b^2}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right)H_n(Q), \tag{8.41}$$

$$\psi(x,\,t=0) = \left(\frac{1}{\pi b^2}\right)^{1/4}\exp\left[-\frac{(Q-Q_0)^2}{2}+iP_0Q\right]. \tag{8.42}$$

ここに，Q_0 は x_0 に対応する Q の値であり，P_0 は p_0 に対応する P の値である。また，b は (7.4) で定義した長さの次元をもつ b-パラメータである。これらを (8.40) に代入して積分をすればよいが，被積分関数にエルミートの多項式があるので容易ではない。そこで，以下のようにエルミート多項式の母関数を利用すると便利である。u_n は $1/\sqrt{2^n n!}$ の因子を

含んでいるので，次のような和を取るとエルミート多項式の和は母関数になる（$\mathrm{d}x = b\,\mathrm{d}Q$ に注意）：

$$
\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{\infty}\sqrt{\frac{2^n}{n!}}\,c_n t^n &= \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(Q)}{n!}\,t^n\exp\left[-\frac{Q^2}{2}-\frac{(Q-Q_0)^2}{2}+iP_0Q\right]\mathrm{d}Q \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-t^2+2tQ\right]\exp\left[-\frac{Q^2}{2}-\frac{(Q-Q_0)^2}{2}+iP_0Q\right]\mathrm{d}Q \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-t^2-Q^2-\frac{Q_0^2}{2}+(Q_0+iP_0+2t)Q\right]\mathrm{d}Q \\
&= \exp\left[-t^2-\frac{Q_0^2}{2}+\left(\frac{Q_0+iP_0}{2}+t\right)^2\right] \\
&\quad\times\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\left(Q-\left(\frac{Q_0+iP_0}{2}+t\right)\right)^2\right]\mathrm{d}Q.
\end{aligned}
$$

積分は直ちに実行でき，最右辺の 2 行目は 1 になる。積分の前の因子は

$$
\begin{aligned}
&\exp\left[-t^2-\frac{Q_0^2}{2}+\left(\frac{Q_0+iP_0}{2}+t\right)^2\right] \\
&\quad= \exp\left[(Q_0+iP_0)\,t-\frac{Q_0^2+P_0^2-2iQ_0P_0}{4}\right] \\
&\quad= \exp\left[-\frac{Q_0^2+P_0^2-2iQ_0P_0}{4}\right]\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(Q_0+iP_0)^n}{n!}\,t^n
\end{aligned}
$$

すなわち，

$$
\sum_{n=0}^{\infty}\sqrt{\frac{2^n}{n!}}\,c_n t^n = \exp\left[-\frac{Q_0^2+P_0^2-2iQ_0P_0}{4}\right]\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(Q_0+iP_0)^n}{n!}\,t^n
$$

であるので，t^n の係数がそれぞれ等しいことより，展開係数は次の式で与えられる：

$$
c_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}(Q_0+iP_0)^n\exp\left[-\frac{Q_0^2+P_0^2-2iQ_0P_0}{4}\right]. \tag{8.43}
$$

波束の時間発展を表す $\psi(x,t)$ は，c_n に (8.39) を，u_n に (8.41) を，そして $C_t(t)$ に (8.38) を代入して

$$
\begin{aligned}
\psi(x,t) &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}(Q_0+iP_0)^n\exp\left[-\frac{Q_0^2+P_0^2-2iQ_0P_0}{4}\right] \\
&\qquad\times\left(\frac{1}{\pi b^2}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\exp\left(-\frac{Q^2}{2}\right)H_n(Q)\exp\left[-i\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)t\right] \\
&= \left(\frac{1}{\pi b^2}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{Q^2}{2}-\frac{Q_0^2+P_0^2-2iQ_0P_0}{4}-\frac{i\omega t}{2}\right) \\
&\qquad\times\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(Q)}{n!}\left[\frac{Q_0+iP_0}{2}\,e^{-i\omega t}\right]^n
\end{aligned}
$$

となる。ここで，最右辺の和はエルミート多項式の母関数において

$$
t = \frac{Q_0+iP_0}{2}\,e^{-i\omega t}
$$

にとったものに等しい。従って，母関数を使って和が取れてしまう：

$$
\begin{aligned}
\psi(x,t) &= \left(\frac{1}{\pi b^2}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{Q^2}{2} - \frac{Q_0^2+P_0^2-2iQ_0P_0}{4} - \frac{i\omega t}{2}\right] \\
&\qquad \times\ \exp\left[-\left(\frac{Q_0+iP_0}{2}\,e^{-i\omega t}\right)^2 + (Q_0+iP_0)\,e^{-i\omega t}\,Q\right] \\
&= \left(\frac{1}{\pi b^2}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{Q^2}{2} + (Q_0+iP_0)\,e^{-i\omega t}\,Q\right] \\
&\qquad \times\ \exp\left[-\frac{Q_0^2+P_0^2-2iQ_0P_0}{4} - \left(\frac{Q_0+iP_0}{2}\,e^{-i\omega t}\right)^2 - \frac{i\omega t}{2}\right].
\end{aligned}
$$

指数の複素数 $(Q_0+iP_0)\,e^{-i\omega t}$ を実部と虚部に分けて，

$$
(Q_0+iP_0)\,e^{-i\omega t} \;=\; \langle Q\rangle + i\,\langle P\rangle, \qquad \left\{\begin{aligned} \langle Q\rangle &= Q_0\cos\omega t + P_0\sin\omega t \\ \langle P\rangle &= P_0\cos\omega t - Q_0\sin\omega t \end{aligned}\right. \tag{8.44}
$$

また，

$$
\left(\frac{Q_0+iP_0}{2}\,e^{-i\omega t}\right)^2 \;=\; \frac{(\langle Q\rangle + i\,\langle P\rangle)^2}{4} \;=\; \frac{\langle Q\rangle^2 - \langle P\rangle^2 + 2i\langle Q\rangle\langle P\rangle}{4}
$$

$$
\langle Q\rangle^2 + \langle P\rangle^2 \;=\; Q_0^2 + P_0^2
$$

である。よって，$\psi(x,t)$ は

$$
\begin{aligned}
\psi(x,t) &= \left(\frac{1}{\pi b^2}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{1}{2}\,(Q-\langle Q\rangle)^2\right] \\
&\qquad \times\ \exp\left[i\left(\langle P\rangle Q + \frac{1}{2}(Q_0P_0 - \langle Q\rangle\langle P\rangle) - \frac{1}{2}\omega t\right)\right]
\end{aligned} \tag{8.45}
$$

となる。

波動関数の絶対値の 2 乗，すなわち，確率密度は

$$
|\,\psi(x,t)\,|^2 \;=\; \left(\frac{1}{\pi b^2}\right)^{1/2} \exp\left[-(Q-\langle Q\rangle)^2\right] \tag{8.46}
$$

である。時刻 $t=0$ における波動関数 (8.42) の絶対値の 2 乗は

$$
|\,\psi(x,\,t=0)\,|^2 \;=\; \left(\frac{1}{\pi b^2}\right)^{1/2} \exp\left[-(Q-Q_0)^2\right] \tag{8.47}
$$

であるから，波束の形は変化しない。波動関数を x と p に戻して表すと

$$
\begin{aligned}
\psi(x,t) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}\,(x-\langle x\rangle)^2\right] \\
&\qquad \times\ \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\langle p\rangle x + \frac{1}{2}(x_0p_0 - \langle x\rangle\langle p\rangle) - \frac{1}{2}\hbar\omega t\right)\right]
\end{aligned} \tag{8.48}
$$

となる。ここに，

$$
\langle x\rangle \;=\; x_0\cos\omega t - \frac{p_0}{m\omega}\sin\omega t \tag{8.49}
$$

$$
\langle p\rangle \;=\; p_0\cos\omega t - m\omega x_0\sin\omega t \tag{8.50}
$$

は，それぞれ，時刻 t における座標の期待値と運動量の期待値である。これは，調和振動子ポテンシャル内を運動する古典的粒子の座標と運動量に一致する。

座標の不確定性と運動量の不確定性は（計算の詳細は示さないが），

$$(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}, \qquad (\Delta p)^2 = \frac{m\hbar\omega}{2} \tag{8.51}$$

また，両者から

$$\Delta x\,\Delta p = \frac{\hbar}{2}. \tag{8.52}$$

不確定性 Δx も Δp も時間によらず一定であり，不確定性が最小な波束を保っている。すなわち，自由粒子の波束を不確定性が最小であるように作っても時間の経過とともに座標の不確定性が増大していくのに対して，調和振動子ポテンシャルの中に閉じ込めた波束は不確定性最小を保ち続ける。また，運動エネルギーとポテンシャルの期待値は

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{1}{2m}(p_0\cos\omega t - m\omega x_0\sin\omega t)^2 \tag{8.53}$$

$$\langle V \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{1}{2m}(m\omega x_0\cos\omega t + p_0\cos\omega t)^2 \tag{8.54}$$

であり，エネルギーの期待値は両者の和に等しく

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{p_0^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 \tag{8.55}$$

となる。エネルギーの期待値は時間に依らず一定であり，古典的な運動に伴うエネルギーのほかに，零点振動のエネルギーをもつ。