調和振動子

バネとおもり

調和振動子は，古典力学・量子力学のどちらにおいても最も基本的な力学系であり，古くから研究されており，他の複雑な力学系を分析・理解する上でも基本的なパーツになる．

バネの一端を固定し，バネのもう一つの端に質量 m のおもりをつける．バネ自体の質量はゼロとみなせるとする．バネが伸び縮みしようとする力がゼロの状態を，釣り合いの状態あるいは平衡状態という．つまり，釣り合いの状態でおもりをそっと手放せば，おもりはいつまでも静止している．釣り合いの状態からバネを長さ x だけ伸ばすと，バネは復元力

$$F = -kx \tag{1}$$

で縮もうとする，と仮定する．この式の負号は，バネがおもりを引く力の向きは，バネが伸びた向きに対して逆向きであることを表している．式 (1) に従って復元力の大きさがバネの伸びに比例するようなバネを**線形バネ** (linear spring) といい，係数 k を**バネ定数** (constant factor characteristic of the spring, stiffness) という．$m > 0$, $k > 0$ とする．また，式 (1) を**フックの法則** (Hooke's law) という．言い換えると，**フックの法則に従うバネのことを線形バネという．**フックの法則は万能ではなく，世の中にはフックの法則に従わないバネもあることに注意してほしい．ただ，バネの伸び縮みの程度が小さいうちは，どんなバネでも近似的にフックの法則に従う．**調和振動子** (harmonic oscillator) は，線形バネとそれにつなげられたおもりを併(あわ)せた系である．

バネにつなげられたおもりを釣り合いの位置から x だけ変位させてやるためには，外部から仕事

$$W := -\int_0^x F\,dx = \frac{1}{2}kx^2 \tag{2}$$

をしてやらないといけない．この状態のバネには，された仕事に等しいエネルギー

$$U := W = \frac{1}{2}kx^2 \tag{3}$$

が蓄えられていると考えられる．U を**位置エネルギー** (potential energy) という．

一方で，質量 m のおもりが速度 v で動いていれば，おもりは**運動エネルギー** (kinetic energy)

$$K := \frac{1}{2}mv^2 \tag{4}$$

を持つとされる．また，おもりの**運動量** (momentum) という物理量を

$$p := mv \tag{5}$$

で定める．このとき，

$$K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2m}p^2 \tag{6}$$

が成り立つ．

古典力学の運動方程式

ニュートン流の力学法則によれば，**物体の運動量の時間変化は物体が受ける力に等しい**：

$$\frac{dp}{dt} = F. \tag{7}$$

運動量の定義式 $p = mv$ を思い出すと，線形バネ $F = -kx$ に関しては，運動方程式 (7) は

$$m\frac{dv}{dt} = -kx \tag{8}$$

となる．時刻 t のおもりの位置を $x(t)$ とすれば，速度 v は

$$v := \frac{dx}{dt} \tag{9}$$

で定義され，(8) は

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx \tag{10}$$

となる．(8) や (10) を調和振動子の運動方程式という．

式 (8) の両辺に v を掛けると，

$$mv\frac{dv}{dt} = -kxv = -kx\frac{dx}{dt} \tag{11}$$

となるが，これは

$$\frac{d}{dt}\Big(\frac{1}{2}mv^2\Big) = -\frac{d}{dt}\Big(\frac{1}{2}kx^2\Big) \tag{12}$$

と書き換えられる．これは

$$\frac{d}{dt}\Big(\frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2\Big) = 0 \tag{13}$$

と同等である．運動エネルギー (4) と位置エネルギー (3) の定義式によれば，この式 (13) は

$$\frac{d}{dt}\Big(K + U\Big) = 0 \tag{14}$$

を意味する．つまり，運動エネルギーや位置エネルギーの値は時々刻々変化するかもしれないが，両者を足したものは時間変化しない．このことを**エネルギー保存の法則** (law of conservation of energy) という．$E := K + U$ を**全エネルギー** (total energy) という．そうすると，

$$\frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 = E \tag{15}$$

である．これを式変形して

$$\begin{aligned} v^2 &= \frac{2}{m}\Big(E - \frac{1}{2}kx^2\Big) \\ \frac{dx}{dt} &= v = \pm\sqrt{\frac{2}{m}\Big(E - \frac{1}{2}kx^2\Big)} \\ \sqrt{\frac{m}{2E - kx^2}}\,\frac{dx}{dt} &= \pm 1 \end{aligned} \tag{16}$$

を得る．さらに

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \tag{17}$$

$$E = \frac{1}{2}ka^2 \tag{18}$$

とおけば，(16) は

$$\frac{1}{\sqrt{a^2 - x^2}}\,\frac{dx}{dt} = \pm\omega \tag{19}$$

に書き換えられる．この式の両辺を t について積分すると

$$\int_{x(0)}^{x(t)} \frac{1}{\sqrt{a^2 - x^2}}\,dx = \pm\int_0^t \omega\,dt \tag{20}$$

となり，この積分は

$$\sin^{-1}\frac{x(t)}{a} - \sin^{-1}\frac{x(0)}{a} = \pm\omega t \tag{21}$$

となる（問 1 (36) 参照）．さらに

$$\sin^{-1}\frac{x(0)}{a} = \pm\alpha \tag{22}$$

とおけば，

$$\sin^{-1}\frac{x(t)}{a} = \pm(\omega t + \alpha) \tag{23}$$

となって，

$$x(t) = \pm a\,\sin(\omega t + \alpha) \tag{24}$$

を得る．$\pm a$ を改めて a と書けば

$$x(t) = a\,\sin(\omega t + \alpha) \tag{25}$$

を得る．これが調和振動子の運動方程式 (10) の解である．式 (25) は

$$x(t) = a\,\sin(\omega t)\cos\alpha + a\,\cos(\omega t)\sin\alpha \tag{26}$$

とも書ける．

$$C_1 = a\,\cos\alpha, \qquad C_2 = a\,\sin\alpha \tag{27}$$

とおけば，

$$x(t) = C_1\,\sin\omega t + C_2\,\cos\omega t \tag{28}$$

とも書ける．これも調和振動子の運動方程式 (10) の一般解である．

(25), (28) のどちらも調和振動子の解と呼ばれる．これらによれば，バネにつながれたおもりは，時間 t に対して三角関数的に振動する．1 往復の振動に要する時間 T を**周期** (period) というが，これは

$$\omega T = 2\pi \tag{29}$$

で決まる．つまり，

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi\sqrt{\frac{m}{k}} \tag{30}$$

である．周期の逆数

$$\nu = \frac{1}{T} = \frac{\omega}{2\pi} \tag{31}$$

は，単位時間あたりの振動の回数であり，**振動数**とか**周波数** (frequency) と呼ばれる．周波数の単位は s^{-1} =Hz（ヘルツ）と書かれる．(31) を書き換えれば

$$\omega = 2\pi\nu \tag{32}$$

であるが，ω は**角振動数** (angular frequency) と呼ばれ，その単位は $\mathrm{rad}\cdot\mathrm{s}^{-1}$（ラジアン毎秒）である．また，式 (25) の係数 a は振動の振れ幅を表す量であり，**振幅** (amplitude) と呼ばれる．

調和振動子の著しい特徴として，振動の周期 T は，バネ k とおもりの質量 m だけで決まり，振幅 a とは無関係である．つまり，**おもりが大きく振れる場合も，小さく振れる場合も，往復に要する時間は変わらない．**この性質を**調和振動子の等時性**という．

問 1. 関数

$$y = \sin^{-1}\frac{x}{a} \tag{33}$$

は

$$\sin y = \frac{x}{a} \tag{34}$$

のことである．この関数のグラフを横軸 x，縦軸 y の平面に描け．また，

$$\frac{dy}{dx} = \pm\frac{1}{\sqrt{a^2 - x^2}} \tag{35}$$

となることを示せ．このことから

$$\int_{x_1}^{x_2} \frac{1}{\sqrt{a^2 - x^2}}dx = \sin^{-1}\frac{x_2}{a} - \sin^{-1}\frac{x_1}{a} \tag{36}$$

となることを示せ．

問 2. 復元力がフックの法則 (1) の代わりに

$$F = -(kx + cx^3) \tag{37}$$

に従う非線形バネにおもりをつなげた場合，振動の周期（往復運動に要する時間）は初期条件に依存する．$c > 0$ だったら振幅を大きくすると周期が長くなるか？それとも短くなるか？ $c < 0$ だったらどうなるか？

量子力学の調和振動子

調和振動子の全エネルギーの式 (15)

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 \tag{38}$$

を，運動量の定義式 (5), $p = mv$ を用いて書き直すと

$$E = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}kx^2 \tag{39}$$

となる．

おもりの位置 x を位置演算子 $\hat{Q}$ で置き換え，おもりの運動量 p を運動量演算子 $\hat{P}$ で置き換えた演算子

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}k\hat{Q}^2 \tag{40}$$

を量子力学的な**調和振動子のハミルトニアン**と呼ぶ．ただし，位置 $\hat{Q}$ と運動量 $\hat{P}$ は自己共役条件

$$\hat{Q}^\dagger = \hat{Q}, \qquad \hat{P}^\dagger = \hat{P} \tag{41}$$

と**正準交換関係** (canonical commutation relation)

$$[\hat{Q},\hat{P}]=\hat{Q}\hat{P}-\hat{P}\hat{Q}=i\hbar \tag{42}$$

を満たすものとする．

このハミルトニアン (40) が導くハイゼンベルク運動方程式は

$$\frac{d\hat{Q}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{Q},\hat{H}]=\frac{1}{m}\hat{P} \tag{43}$$

と

$$\frac{d\hat{P}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{P},\hat{H}]=-k\hat{Q}=-m\omega^2\hat{Q} \tag{44}$$

となる．(17) で

$$k=m\omega^2 \tag{45}$$

とおいたことに注意．連立方程式 (43), (44) はまとめて

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} m\omega\hat{Q} \\ \hat{P}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 & \omega \\ -\omega & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} m\omega\hat{Q} \\ \hat{P}\end{pmatrix} \tag{46}$$

と書ける．この方程式の解は

$$\begin{pmatrix} m\omega\hat{Q}(t) \\ \hat{P}(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \cos\omega t & \sin\omega t \\ -\sin\omega t & \cos\omega t\end{pmatrix}\begin{pmatrix} m\omega\hat{Q}(0) \\ \hat{P}(0)\end{pmatrix} \tag{47}$$

である．式 (47) は

$$\hat{Q}(t)=\hat{Q}(0)\cos\omega t+\frac{1}{m\omega}\hat{P}(0)\sin\omega t \tag{48}$$

とも書ける．これは古典力学の方程式の解 (28) と同じ形をしている．つまり，量子力学の調和振動子に対しても，おもりの位置が時間の三角関数で振動しているようなイメージを持つことができる．

問 3. (i) (43), (44) を確かめよ．
(ii) 連立方程式 (43), (44) をまとめて (46) の形に書けることを確かめよ．
(iii) (47) で与えられる $\hat{Q}(t),\hat{P}(t)$ が (46) を満たしていることを確認せよ．

エルミート共役

この節では演算子のエルミート共役の定義を確認しておく．よくわかっている人はこの節を飛ばしてよい．

演算子 $\hat{A}$ のエルミート共役 $\hat{A}^\dagger$ は，任意のベクトル $|\chi\rangle,|\psi\rangle\in\mathscr{H}$ に対して

$$\langle\chi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle=\langle\psi|\hat{A}|\chi\rangle^* \tag{49}$$

を満たすものと定義された．この定義式を少し書き換えておこう．$\hat{A}|\chi\rangle=|\xi\rangle$ とおけば，

$$\begin{aligned}\langle\chi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle &= \langle\psi|\hat{A}|\chi\rangle^* \\ &= \langle\psi|\xi\rangle^* \\ &= \langle\xi|\psi\rangle \\ &= \langle\hat{A}\chi|\psi\rangle\end{aligned} \tag{50}$$

となるので，エルミート共役の定義式を

$$\langle\chi|\hat{A}^\dagger\psi\rangle=\langle\hat{A}\chi|\psi\rangle \tag{51}$$

としてもかまわない．ただ，右辺の表式はブラ・ケット記法の規則から若干外れた表記になっていて，好ましくない．これは数学的に間違っているわけではなく，ブラ・ケット記法の表現力の限界である．

$\mathscr{H}=\mathbb{C}^n$ 空間でのエルミート共役を求めよう．

$$|\chi\rangle=\begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n\end{pmatrix},\quad |\psi\rangle=\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n\end{pmatrix}, \tag{52}$$

$$\hat{A}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn}\end{pmatrix} \tag{53}$$

とおく．ベクトルや行列の成分を

$$\chi_j=w_j, \tag{54}$$

$$(\hat{A})_{jk}=a_{jk} \tag{55}$$

と書くことにする．内積や行列の作用は

$$\langle\chi|\psi\rangle=\sum_{j=1}^{n}\chi_j^*\psi_j, \tag{56}$$

$$(\hat{A}\chi)_j=\sum_{k=1}^{n}(\hat{A})_{jk}\chi_k=\sum_{k=1}^{n}a_{jk}\chi_k \tag{57}$$

と書かれる．そうすると,

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}\chi|\psi\rangle &= \sum_j(\hat{A}\chi)_j^*\psi_j\\ &= \sum_j\sum_k(a_{jk}\chi_k)^*\psi_j\\ &= \sum_j\sum_k\chi_k^*a_{jk}^*\psi_j\end{aligned} \tag{58}$$

となり，これが，任意のベクトル $|\chi\rangle,|\psi\rangle\in\mathscr{H}$ について

$$\begin{aligned}\langle\chi|\hat{A}^\dagger\psi\rangle &= \sum_k\chi_k^*(\hat{A}^\dagger\psi)_k\\ &= \sum_k\sum_j\chi_k^*(\hat{A}^\dagger)_{kj}\psi_j\end{aligned} \tag{59}$$

と一致しなくてはならないのだから,

$$(\hat{A}^\dagger)_{kj} = a_{jk}^* \tag{60}$$

である．つまり，**行列 $\hat{A}^\dagger$ の k 行 j 列目の成分は行列 $\hat{A}$ の j 行 k 列目の成分の複素共役に等しい．**

$\mathscr{H}=L^2(\mathbb{R})$ 空間での掛け算演算子と微分演算子のエルミート共役を求めよう．波動関数 $\psi_1,\psi_2:\mathbb{R}\to\mathbb{C}$ の内積は

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1(x)^*\,\psi_2(x)\,dx \tag{61}$$

で定められる．一般に，複素数値関数 $V:\mathbb{R}\to\mathbb{C}$ は掛け算演算子 $\hat{V}$ を

$$\hat{V}\psi(x):=V(x)\cdot\psi(x) \tag{62}$$

で定める．右辺は複素数の掛け算である．エルミート共役の定義式 (51) に従って $\hat{V}^\dagger$ を計算する：

$$\begin{aligned}\langle\psi_1|\hat{V}^\dagger\psi_2\rangle &= \langle\hat{V}\psi_1|\psi_2\rangle\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\Big(V(x)\psi_1(x)\Big)^*\,\psi_2(x)dx\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}V(x)^*\psi_1(x)^*\,\psi_2(x)dx\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi_1(x)^*\,V(x)^*\psi_2(x)dx\end{aligned}$$

なので,

$$\hat{V}^\dagger\psi_2(x) = V(x)^*\cdot\psi_2(x) \tag{63}$$

でなくてはならない．次に,

$$\hat{D}\psi(x):=\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) \tag{64}$$

で定められる微分演算子 $\hat{D}$ のエルミート共役を求める：

$$\begin{aligned}\langle\psi_1|\hat{D}^\dagger\psi_2\rangle &= \langle\hat{D}\psi_1|\psi_2\rangle\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial\psi_1}{\partial x}\right)^*\psi_2(x)dx\\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\psi_1^*}{\partial x}\,\psi_2(x)dx\\ &= \Big[\psi_1^*(x)\psi_2(x)\Big]_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*\,\frac{\partial\psi_2}{\partial x}\,dx\\ &= 0+\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*\Big(-\frac{\partial\psi_2}{\partial x}\Big)dx\end{aligned}$$

である．ここで，3 行目から 4 行目に移るときに部分積分を行い，4 行目から 5 行目に移るときに波動関数 $\psi(x)\in L^2(\mathbb{R})$ は極限 $x\to\pm\infty$ で $\psi(x)\to 0$ に近づくことを使った．以上より,

$$\hat{D}^\dagger\psi_2(x) = -\frac{\partial}{\partial x}\psi_2(x) \tag{65}$$

である．

問 4. エルミート共役の性質

$$(\hat{A}+\hat{B})^\dagger=\hat{A}^\dagger+\hat{B}^\dagger \tag{66}$$

$$(c\hat{A})^\dagger=c^*\hat{A}^\dagger \tag{67}$$

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger=\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \tag{68}$$

$$[\hat{A},\hat{B}]^\dagger=-[\hat{A}^\dagger,\hat{B}^\dagger] \tag{69}$$

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger=\hat{A} \tag{70}$$

を証明せよ．

調和振動子のエネルギー固有値

式 (15) を見ればわかることだが，古典力学の調和振動子のエネルギーの値は $E \geq 0$ であり，$E \geq 0$ のどんな値でもとり得る．では，量子力学の調和振動子のエネルギーはどんな値をとるだろうか？　つまり，

$$\hat{H}|\phi\rangle = E|\phi\rangle, \qquad |\phi\rangle \neq 0 \tag{71}$$

が成り立つような実数 E をハミルトニアン $\hat{H}$ のエネルギー固有値といい，$|\phi\rangle$ をエネルギー固有状態というが，これらはどんな値，どんなベクトルだろうか？ 以下では，量子力学的な調和振動子のハミルトニアン (40) の固有値問題を解こう．

演算子 $\hat{A}, \hat{A}^\dagger$ を

$$\hat{A} := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{Q} + i\hat{P}), \tag{72}$$

$$\hat{A}^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{Q} - i\hat{P}) \tag{73}$$

と定める．このとき，

$$[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = 1 \tag{74}$$

が成り立つ（各自確認せよ）．このとき

$$\frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}k\hat{Q}^2 = \hbar\omega\left(\hat{A}^\dagger\hat{A} + \frac{1}{2}\right) \tag{75}$$

が成り立つ（確認せよ）．さらに，

$$\hat{N} := \hat{A}^\dagger\hat{A} \tag{76}$$

とおくと，$\hat{N}^\dagger = \hat{N}$ が成り立つ（確認せよ）．(75) を用いるとハミルトニアン (40) は

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right) \tag{77}$$

と書けるので，$\hat{H}$ の固有値を知りたければ $\hat{N}$ の固有値を求めればよい．ちょっと計算すれば

$$[\hat{N}, \hat{A}] = -\hat{A}, \tag{78}$$

$$[\hat{N}, \hat{A}^\dagger] = \hat{A}^\dagger, \tag{79}$$

$$[\hat{A}, (\hat{A}^\dagger)^k] = k(\hat{A}^\dagger)^{k-1} \tag{80}$$

が成り立つことがわかる（確認せよ）．ここで k は任意の自然数．

さて，$\hat{N}$ の固有値はまだわからないが，λ が $\hat{N}$ の固有値であり，$|\phi_\lambda\rangle$ がそれに属する固有ベクトルであったとする．つまり，

$$\hat{N}|\phi_\lambda\rangle = \lambda|\phi_\lambda\rangle, \qquad |\phi_\lambda\rangle \neq 0 \tag{81}$$

が成り立つとする．このとき

$$\langle\phi_\lambda|\hat{N}|\phi_\lambda\rangle = \langle\phi_\lambda|\lambda|\phi_\lambda\rangle, \tag{82}$$

であり，左辺は

$$\begin{aligned}\langle\phi_\lambda|\hat{N}|\phi_\lambda\rangle &= \langle\phi_\lambda|\hat{A}^\dagger\hat{A}|\phi_\lambda\rangle \\ &= \langle\hat{A}\phi_\lambda|\hat{A}\phi_\lambda\rangle \\ &= \left\|\hat{A}|\phi_\lambda\rangle\right\|^2 \geq 0 \end{aligned} \tag{83}$$

であり，(82) の右辺は

$$\langle\phi_\lambda|\lambda|\phi_\lambda\rangle = \lambda\langle\phi_\lambda|\phi_\lambda\rangle = \lambda\left\||\phi_\lambda\rangle\right\|^2 \tag{84}$$

であり，$\left\||\phi_\lambda\rangle\right\| > 0$ なので，(82) から

$$\lambda = \frac{\left\|\hat{A}|\phi_\lambda\rangle\right\|^2}{\left\||\phi_\lambda\rangle\right\|^2} \geq 0 \tag{85}$$

が導かれる．つまり $\hat{N}$ の固有値は**非負** (non-negative) である．

当たり前のことだが，任意の演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ について

$$\hat{A}\hat{B} = [\hat{A}, \hat{B}] + \hat{B}\hat{A} \tag{86}$$

が成り立つ（確認せよ）．性質 (78), (81) より

$$\begin{aligned}\hat{N}\hat{A}|\phi_\lambda\rangle &= ([\hat{N}, \hat{A}] + \hat{A}\hat{N})|\phi_\lambda\rangle \\ &= (-\hat{A} + \hat{A}\lambda)|\phi_\lambda\rangle \\ &= (\lambda - 1)\hat{A}|\phi_\lambda\rangle. \end{aligned} \tag{87}$$

この式は，$|\phi_\lambda\rangle$ が $\hat{N}$ の固有値 λ に属する固有ベクトルならば，$\hat{A}|\phi_\lambda\rangle$ は $\hat{N}$ の固有値 $\lambda-1$ に属する固有ベクトルであることを意味する．同様にして，

$$\begin{aligned}
\hat{N}\hat{A}^\dagger|\phi_\lambda\rangle &= ([\hat{N},\hat{A}^\dagger]+\hat{A}^\dagger\hat{N})|\phi_\lambda\rangle \\
&= (\hat{A}^\dagger+\hat{A}^\dagger\lambda)|\phi_\lambda\rangle \\
&= (\lambda+1)\hat{A}^\dagger|\phi_\lambda\rangle. \qquad (88)
\end{aligned}$$

もわかる．つまり，$\hat{A}^\dagger$ は $\hat{N}$ の固有値を 1 だけ増やし，$\hat{A}$ は $\hat{N}$ の固有値を 1 だけ減らす働きをしている．そのため $\hat{A}^\dagger$, $\hat{A}$ を**昇降演算子** (ladder operator) と呼んだり，$\hat{A}^\dagger$ を**生成演算子** (creation operator), $\hat{A}$ を**消滅演算子** (annihilation operator) と呼んだりする．

消滅演算子を繰り返し作用させることによってヌルでない固有ベクトルの列が無限に得られたとしたら，固有値の列 $\lambda,\lambda-1,\lambda-2,\cdots$ が無限に続くことになり，いつか負の固有値が現れることになる．しかし，(85) により $\hat{N}$ の固有値が負になることは禁止されている．ゆえに，消滅演算子の作用によってヌルベクトル

$$\hat{A}|\phi_0\rangle = 0 \qquad (89)$$

になってしまうようなベクトル $|\phi_0\rangle$ があるはずである．もちろんこれは

$$\hat{A}^\dagger\hat{A}|\phi_0\rangle = 0 \qquad (90)$$

を満たすので $\hat{N}$ の固有値 0 に属する固有ベクトルである．逆に，$|\phi_0\rangle$ に生成演算子 $\hat{A}^\dagger$ を繰り返し作用させれば，$\hat{N}$ の固有値 $n=1,2,3,\cdots$ に属する固有ベクトルが順次得られる．各固有ベクトルのノルムを $\langle\phi_n|\phi_n\rangle=1$ にそろえて

$$\hat{A}^\dagger|\phi_n\rangle = c_n|\phi_{n+1}\rangle \qquad (91)$$

にあてはまる複素数 c_n を求めよう．両辺のノルムを求めると

$$\begin{aligned}
|c_n|^2 &= \left\| c_n|\phi_{n+1}\rangle \right\|^2 \\
&= \left\| \hat{A}^\dagger|\phi_n\rangle \right\|^2 \\
&= \langle\hat{A}^\dagger\phi_n|\hat{A}^\dagger\phi_n\rangle \\
&= \langle\phi_n|\hat{A}\hat{A}^\dagger|\phi_n\rangle \\
&= \langle\phi_n|([\hat{A},\hat{A}^\dagger]+\hat{A}^\dagger\hat{A})|\phi_n\rangle \\
&= \langle\phi_n|(1+\hat{N})|\phi_n\rangle \\
&= (1+n)\langle\phi_n|\phi_n\rangle \\
&= n+1 \qquad (92)
\end{aligned}$$

となるので，

$$c_n = \sqrt{n+1} \qquad (93)$$

としてよい．そうすると，

$$\begin{aligned}
|\phi_n\rangle &= \frac{1}{c_{n-1}}\hat{A}^\dagger|\phi_{n-1}\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{A}^\dagger|\phi_{n-1}\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}}\hat{A}^\dagger\hat{A}^\dagger|\phi_{n-2}\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{A}^\dagger)^n|\phi_0\rangle \qquad (94)
\end{aligned}$$

を得る．また，性質 (80), (89) を用いると，

$$\begin{aligned}
\hat{A}|\phi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{A}(\hat{A}^\dagger)^n|\phi_0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{n!}}([\hat{A},(\hat{A}^\dagger)^n]+(\hat{A}^\dagger)^n\hat{A})|\phi_0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{n!}}(n(\hat{A}^\dagger)^{n-1}+0)|\phi_0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{(n-1)!}}\sqrt{n}\,(\hat{A}^\dagger)^{n-1}|\phi_0\rangle \\
&= \sqrt{n}\,|\phi_{n-1}\rangle \qquad (95)
\end{aligned}$$

を得る．以上をまとめると，$\hat{N}=\hat{A}^\dagger\hat{A}$ の固有

値問題は,

$$\hat{A}|\phi_0\rangle = 0, \tag{96}$$

$$|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{A}^\dagger)^n|\phi_0\rangle \ (n=0,1,2,3,\cdots) \tag{97}$$

$$\langle\phi_n|\phi_n\rangle = 1, \tag{98}$$

$$\hat{A}^\dagger|\phi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\phi_{n+1}\rangle, \tag{99}$$

$$\hat{A}|\phi_n\rangle = \sqrt{n}\,|\phi_{n-1}\rangle, \tag{100}$$

$$\hat{N}|\phi_n\rangle = n\,|\phi_n\rangle \tag{101}$$

という形で解けた．調和振動子のハミルトニアンは (77) の形に書けたので，$|\phi_n\rangle$ はハミルトニアンの固有ベクトルでもあり，

$$\hat{H}|\phi_n\rangle = \hbar\omega\Big(n+\frac{1}{2}\Big)|\phi_n\rangle \tag{102}$$

を満たす．つまり，量子力学的な調和振動子のエネルギーは

$$E_n = \hbar\omega\Big(n+\frac{1}{2}\Big) \ (n=0,1,2,3,\cdots) \tag{103}$$

という，等間隔で離散的な値をとる．

解釈としては，あたかも $\hbar\omega$ というエネルギーを持った粒子が 1 個，2 個，3 個，…と調和振動子に宿ることによって調和振動子のエネルギーが増大していくように見える．「バネとおもり」でできたシステムは一つなのだが，そこに一つぶあたり $\hbar\omega$ の**エネルギー量子** (energy quantum) が 1 個，2 個，3 個，…と宿っているように見えるのである．なお，$h = 2\pi\hbar$, $\omega = 2\pi\nu$ に注意するとエネルギー量子の大きさは

$$\varepsilon = \hbar\omega = h\nu \tag{104}$$

と書ける．プランク定数の値は

$$h = 6.62607\cdots\times 10^{-34}\mathrm{J\cdot s} \tag{105}$$

である．

電磁波に対するこのようなエネルギー量子（離散的なエネルギーを担う粒子）は**光量子** (light quantum) あるいは**光子** (photon) と呼ばれている．音波に対するエネルギー量子は**音響子** (phonon) と呼ばれる．

エネルギー量子が 0 個のとき，調和振動子は最小のエネルギー

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{106}$$

を持つ．古典力学の調和振動子の最小エネルギーは $E = 0$ だったのに対して，量子力学の調和振動子のエネルギーは 0 よりも大きい．イメージとしては，量子力学の調和振動子は，$Q=0$, $P=0$ の状態に静止することができなくて，エネルギー最小の状態でも振動しているように見える．このエネルギー $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ を**零点エネルギー** (zero-point energy) といい，最小エネルギー状態 $|\phi_0\rangle$ を**基底状態** (ground state) という．$n=1,2,3,\cdots$ に対応した状態 $|\phi_n\rangle$ を**励起状態** (excited state) という．

問 5. (i) 携帯電話の電波の周波数は 1.5GHz 程度である．この電波に伴う一つぶの光子のエネルギー $\varepsilon = h\nu$ を求めよ．
(ii) 太陽光発電で 2 ボルトの起電力を持つ光の周波数はいくらか？ ただし，2 ボルトの起電力とは，1 個の光子が 1 個の電子に 1.6×10^{-19} J のエネルギーを与えることを意味する．また，この光の波長はいくらか？ この光は何色に見えるか?ただし，光の速さは $c = 3.00\times10^8\ \mathrm{m\cdot s^{-1}}$ である．

調和振動子の波動関数

座標表示の波動関数 $\psi(x)$ の形で調和振動子のエネルギー固有関数を求めよう．この表示では位置演算子 $\hat{Q}$ は掛け算演算子

$$\hat{Q}\psi(x) = x\cdot\psi(x) \tag{107}$$

で表現され，運動量演算子 $\hat{P}$ は微分演算子

$$\hat{P}\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} \tag{108}$$

で表現される．ハミルトニアン (40) にこの置き換えを施すと，調和振動子の固有値問題 (71) は

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\Big)\phi(x) = E\phi(x) \tag{109}$$

と書ける．

まず基底状態の波動関数を求めるために，消滅演算子 (72) を用いた基底状態の定義式 (96) を座標表示すると

$$\begin{aligned} 0 &= \hat{A}\phi_0(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{Q}+i\hat{P})\phi_0(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(m\omega x+\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\phi_0(x) \end{aligned} \tag{110}$$

となる．つまり，基底状態の波動関数 $\phi_0(x)$ は方程式

$$\frac{\partial\phi_0}{\partial x} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\,\phi_0(x) \tag{111}$$

を満たす．この方程式の解は

$$\phi_0(x) = c\,\exp\Big(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\Big) \tag{112}$$

である．ただし，c は任意の複素数であり，規格化条件 $\langle\phi_0|$
$phi_0\rangle = 1$ を満たすようにその値を選ぶ．

問 6. (i) 方程式 (111) の解は (112) であることを示せ．
(ii)

$$\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 \tag{113}$$

は無次元量であることを示せ．
(iii)

$$c = \Big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\Big)^{\frac{1}{4}} \tag{114}$$

とおけば $\langle\phi_0|\phi_0\rangle = 1$ が成り立つことを示せ．

n 番目の励起状態の波動関数は (97) を用いて求められる：

$$\begin{aligned} \phi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{A}^\dagger)^n\,\phi_0(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left\{\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{Q}-i\hat{P})\right\}^n\phi_0(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!\,(2m\hbar\omega)^n}}\left(m\omega x-\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^n\phi_0(x). \end{aligned}$$

数式が簡潔に見えるように変数変換をしてやる．

$$s := \gamma x := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \tag{115}$$

を用いて変数 x を s で書き換える．変数 s を用いると，基底状態の波動関数 (112) は

$$\phi_0(x) = c\,e^{-\frac{1}{2}s^2} \tag{116}$$

と書かれ，n 番目の励起状態の波動関数は

$$\begin{aligned} \phi_n(x) &= \frac{\hbar^n}{\sqrt{n!\,(2m\hbar\omega)^n}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}x-\frac{\partial}{\partial x}\right)^n\phi_0 \\ &= \frac{\hbar^n\gamma^n}{\sqrt{n!\,(2m\hbar\omega)^n}}\left(\gamma x-\frac{1}{\gamma}\frac{\partial}{\partial x}\right)^n\phi_0 \\ &= \frac{\hbar^n\gamma^n}{\sqrt{n!\,(2m\hbar\omega)^n}}\left(s-\frac{\partial}{\partial s}\right)^n\phi_0 \end{aligned} \tag{117}$$

で与えられる．ここで，任意の関数 $F(s)$ に対して

$$\begin{aligned} \left(s-\frac{\partial}{\partial s}\right)F(s) &= \left(s-\frac{\partial}{\partial s}\right)e^{\frac{1}{2}s^2}e^{-\frac{1}{2}s^2}F(s) \\ &= e^{\frac{1}{2}s^2}\left(-\frac{\partial}{\partial s}\right)e^{-\frac{1}{2}s^2}F(s) \end{aligned} \tag{118}$$

が成り立つので，

$$\begin{aligned} \phi_n(x) &= \frac{\hbar^n\gamma^n}{\sqrt{n!\,(2m\hbar\omega)^n}}e^{\frac{1}{2}s^2}\left(-\frac{\partial}{\partial s}\right)^n e^{-\frac{1}{2}s^2}\phi_0 \\ &= \frac{c\,\hbar^n\gamma^n}{\sqrt{n!\,(2m\hbar\omega)^n}}(-1)^n e^{\frac{1}{2}s^2}\frac{\partial^n}{\partial s^n}e^{-s^2} \end{aligned} \tag{119}$$

が導かれる．さらに，

$$H_n(s) := (-1)^n\,e^{s^2}\frac{\partial^n}{\partial s^n}e^{-s^2} \tag{120}$$

という関数を定め，n 次の**エルミート多項式** (Hermite polynomial) と呼ぶ．これを用いると n 番目の励起状態の波動関数は

$$\phi_n(x) = \frac{c\,\hbar^n\gamma^n}{\sqrt{n!\,(2m\hbar\omega)^n}} e^{-\frac{1}{2}s^2} H_n(s) \tag{121}$$

と書ける．

問 7. (118) の式変形を確かめよ．

問 8. (i) エルミート多項式の定義式 (120) より，関数 $H_0(s)$, $H_1(s)$, $H_2(s)$, $H_3(s)$ を具体的に求めよ．
(ii) $H_n(s)$ は n 次の多項式であることを証明せよ．
(iii) n が偶数なら $H_n(s)$ は偶関数，n が奇数なら $H_n(s)$ は奇関数であることを証明せよ．
(iv) (121) に現れた関数を，$n = 0, 1, 2, 3$ について

$$\begin{aligned} \theta_n(s) &:= H_n(s)\cdot e^{-\frac{1}{2}s^2} \\ &= (-1)^n\, e^{\frac{1}{2}s^2} \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-s^2} \end{aligned} \tag{122}$$

と書く．$\theta_n(s)$ および $|\theta_n(s)|^2$ のグラフを描け．
(v) 関数 $\theta_n(s)$ が微分方程式

$$\frac{1}{2}\Big(-\frac{\partial^2}{\partial s^2} + s^2\Big)\theta_n(s) = \Big(n+\frac{1}{2}\Big)\theta_n(s) \tag{123}$$

を満たすことを証明せよ．

参考文献

[1] シッフ「量子力学」（吉岡書店）．第 13 節にエルミート多項式，第 16 節にラゲール多項式の説明がある．

[2] 金子尚武，松本道男「特殊関数」（培風館）．エルミート多項式など，微分方程式の解として現れる関数は，特殊関数と総称される．特殊関数についてはいろいろな参考書があるが，特殊関数だけを勉強しても面白くないし意味がわからないので，量子力学や力学などと関連づけて学ぶのがおすすめである．