調和振動子の基底状態の性質

調和振動子の基底状態の位置とエネルギーの期待値とゆらぎの計算

規格化された調和振動子の基底状態の波動関数は

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

である。実際に規格化を確認すると

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ [\psi(x)]^*\psi(x) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \ \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \\ &= 1\end{aligned}$$

となる。ここでガウス積分の公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \tag{1}$$

を用いた。位置演算子 $\hat{x} = x$ の期待値は

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\ [\psi(x)]^* x\psi(x) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) \\ &= 0 \quad (x\text{ の奇関数})\end{aligned}$$

となる。x^2 の期待値は

$$\begin{aligned}\langle x^2\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\ [\psi(x)]^* x^2\psi(x) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x^2\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \frac{1}{2}\frac{\sqrt{\pi}}{(\frac{m\omega}{\hbar})^{3/2}} \\ &= \frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}\end{aligned}$$

となる。ここで式 (1) の α 微分から従う式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ x^2 e^{-\alpha x^2} = -\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \frac{\partial}{\partial\alpha}e^{-\alpha x^2} = -\frac{\partial}{\partial\alpha}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ e^{-\alpha x^2} = -\frac{\partial}{\partial\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \frac{1}{2}\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha^{3/2}}$$

を用いた。よって x の揺らぎは

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

エネルギー E はハミルトニアン $\hat{H}$ の期待値であり、調和振動子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

で与えられる。第 1 回演習問題より、基底状態 $\psi(x)$ に対し

$$\hat{H}\psi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right]\psi(x) = \frac{\hbar\omega}{2}\psi(x)$$

であるので、

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\ [\psi(x)]^* \hat{H}\psi(x) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx\ [\psi(x)]^* \frac{\hbar\omega}{2}\psi(x) \\
&= \frac{\hbar\omega}{2}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ [\psi(x)]^* \psi(x) \\
&= \frac{\hbar\omega}{2} \quad (\text{波動関数の規格化})
\end{aligned}$$

である。固有状態のゆらぎがゼロになることは式 (24) で示してあるが、具体的に $\hat{H}^2$ の期待値を計算すると

$$\begin{aligned}
\langle E^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\ [\psi(x)]^* \hat{H}\hat{H}\psi(x) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx\ [\psi(x)]^* \hat{H}\frac{\hbar\omega}{2}\psi(x) \\
&= \frac{\hbar\omega}{2}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ [\psi(x)]^* \hat{H}\psi(x) \\
&= \frac{\hbar\omega}{2}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ [\psi(x)]^* \frac{\hbar\omega}{2}\psi(x) \\
&= \frac{\hbar^2\omega^2}{4} \quad (\text{波動関数の規格化})
\end{aligned}$$

であるので、ゆらぎは

$$\Delta E = \sqrt{\frac{\hbar^2\omega^2}{4} - \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2} = 0$$

となる。