

2.6 固有状態の規格直交性

調和振動子の固有エネルギー E_n は分かったが、固有状態 $\{|n\rangle\}$ の性質や波動関数は？
 \Rightarrow 調べたい物理量に対応する演算子の期待値を評価する。

規格化された固有状態 $|n\rangle$ を基底状態 $|0\rangle$ (前回の $|\Omega\rangle$) と生成演算子 \hat{a}^\dagger で構成する。
 式 (60) ($\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle = \sqrt{\lambda+1}|\lambda+1\rangle$) より

$$\begin{aligned}\hat{a}^\dagger|0\rangle &= \sqrt{1}|1\rangle \quad \Rightarrow \quad |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{1}}\hat{a}^\dagger|0\rangle \\ \hat{a}^\dagger|1\rangle &= \sqrt{2}|2\rangle \quad \Rightarrow \quad |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}^\dagger|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot 1}}(\hat{a}^\dagger)^2|0\rangle\end{aligned}$$

これを繰り返すと ($n! = n(n-1)\cdots 2 \cdot 1$)

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \tag{62}$$

エルミート演算子の異なる固有値に属する固有状態は直交する。よって規格化した $\{|n\rangle\}$ は

$$\langle \ell | n \rangle = \delta_{\ell n} \tag{63}$$

を満たす。直交性の証明：

$$\begin{aligned}\langle \ell | \hat{n} | n \rangle &= n \langle \ell | n \rangle \\ \langle \ell | \hat{n} | n \rangle &= \langle \ell | \hat{n}^\dagger | n \rangle \quad \leftarrow \hat{n} \text{がエルミート} \\ &= (\hat{n} | \ell \rangle)^\dagger | n \rangle \\ &= (\ell | \ell \rangle)^\dagger | n \rangle \\ &= \ell \langle \ell | n \rangle \quad \leftarrow \ell \text{は実数 (今の場合非負整数)} \\ \Rightarrow (n - \ell) \langle \ell | n \rangle &= 0 \\ \Rightarrow \langle \ell | n \rangle &= 0 \quad \text{for } n \neq \ell\end{aligned}$$

2.7 生成消滅演算子の行列要素

一般の演算子 \hat{O} の **行列要素**

$$\langle \ell | \hat{O} | n \rangle \tag{64}$$

ℓ, n は整数なので、 $\langle \ell | \hat{O} | n \rangle$ を (ℓ, n) 成分として行列の形に並べると、全ての状態間の演算子の期待値が (無限次元の) 正方行列で表現できる。

状態 $|n\rangle$ による演算子 \hat{O} の期待値：行列要素の対角成分

$$\begin{aligned}
 \langle n|\hat{O}|n\rangle &= \int dx \langle n|\hat{O}|x\rangle \langle x|n\rangle \quad \leftarrow (44) \\
 &= \int dx \langle n|x\rangle \hat{O}_x \langle x|n\rangle \\
 &= \int dx \phi_n^*(x) \hat{O}_x \phi_n(x) \quad \leftarrow \langle x|n\rangle = \phi_n(x) \\
 &= (\phi_n, \hat{O}_x \phi_n) \tag{65}
 \end{aligned}$$

\hat{O}_x は演算子 \hat{O} の座標表示。 ϕ_n は規格化されているので式 (11) と一致。

消滅演算子の行列要素の一般形：

$$\begin{aligned}
 \langle \ell|\hat{a}|n\rangle &= \langle \ell|\sqrt{n}|n-1\rangle \quad \leftarrow (59) \\
 &= \sqrt{n} \delta_{\ell, n-1} \quad \leftarrow (63)
 \end{aligned}$$

生成演算子の行列要素の一般形：

$$\begin{aligned}
 \langle \ell|\hat{a}^\dagger|n\rangle &= \langle \ell|\sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad \leftarrow (60) \\
 &= \sqrt{n+1} \delta_{\ell, n+1} \quad \leftarrow (63)
 \end{aligned}$$

数演算子の行列要素の一般形：

$$\begin{aligned}
 \langle \ell|\hat{n}|n\rangle &= \langle \ell|n|n\rangle \quad \leftarrow (57) \\
 &= n \delta_{\ell n} \quad \leftarrow (63)
 \end{aligned}$$

具体的に行列で表現すると (ℓn の番号は 0 から始まること、右辺は ℓn 成分の意味なので両辺はスカラーであることに注意)

$$\begin{aligned}
 \langle \ell|\hat{a}|n\rangle &= \begin{pmatrix} \langle 0|\hat{a}|0\rangle & \langle 0|\hat{a}|1\rangle & \langle 0|\hat{a}|2\rangle & \cdots \\ \langle 1|\hat{a}|0\rangle & \langle 1|\hat{a}|1\rangle & \langle 1|\hat{a}|2\rangle & \cdots \\ \langle 2|\hat{a}|0\rangle & \langle 2|\hat{a}|1\rangle & \langle 2|\hat{a}|2\rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}_{\ell n} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}_{\ell n} \\
 \langle \ell|\hat{a}^\dagger|n\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}_{\ell n} \\
 \langle \ell|\hat{n}|n\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}_{\ell n}
 \end{aligned}$$

\hat{n} の行列要素は対角的。

\hat{a} と \hat{a}^\dagger は対角成分 (つまり期待値) を持たない。

$\leftarrow \hat{a}, \hat{a}^\dagger$ の作用で固有値が n から $n \pm 1$ に変わった状態と $\langle n|$ は直交するため。

2.8 座標、運動量演算子の行列要素

\hat{a} と \hat{a}^\dagger の線型結合でかける任意の演算子の期待値が計算できる。

例えば、座標、運動量を生成消滅演算子の定義 (50)、(51) を使って書き直すと

$$\begin{aligned}\hat{a} + \hat{a}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} 2\sqrt{m\omega} \hat{x} \quad \Rightarrow \quad \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ \hat{a} - \hat{a}^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} i \frac{2}{\sqrt{m\omega}} \hat{p} \quad \Rightarrow \quad \hat{p} = -i \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)\end{aligned}$$

で得られるので、座標演算子 \hat{x} の行列要素は

$$\begin{aligned}\langle \ell | \hat{x} | n \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \ell | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | n \rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\langle \ell | \hat{a} | n \rangle + \langle \ell | \hat{a}^\dagger | n \rangle) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n} \delta_{\ell, n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{\ell, n+1}) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}_{\ell n}\end{aligned}$$

運動量演算子 \hat{p} の行列要素は

$$\begin{aligned}\langle \ell | \hat{p} | n \rangle &= -i \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \langle \ell | (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) | n \rangle \\ &= -i \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\sqrt{n} \delta_{\ell, n-1} - \sqrt{n+1} \delta_{\ell, n+1}) \\ &= -i \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \cdots \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \cdots \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}_{\ell n}\end{aligned}$$

行列要素は一般に複素数 ($\langle \ell |$ と $\hat{p} | n \rangle$ の内積)。

対角要素は0、つまり

$$\langle n | \hat{x} | n \rangle = 0, \quad \langle n | \hat{p} | n \rangle = 0$$

理由：

$$\begin{aligned} \phi_n(x) &: \begin{cases} x \text{ の偶関数} & n \text{ が偶数} \\ x \text{ の奇関数} & n \text{ が奇数} \end{cases} \\ &\Rightarrow |\phi_n(x)|^2 : x \text{ の偶関数} \\ &\Rightarrow x|\phi_n(x)|^2 : x \text{ の奇関数} \\ &\Rightarrow -\infty \text{ から } +\infty \text{ で積分すると } 0 \\ \langle n | \hat{x} | n \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle n | x \rangle \langle x | \hat{x} | n \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi_n^*(x) x \phi_n(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx x |\phi_n(x)|^2 = 0 \end{aligned}$$

補足： \hat{x}^2 などの計算では

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

となる。そのまま行列要素をとるより $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ より $\hat{a}\hat{a}^\dagger = 1 + \hat{a}^\dagger\hat{a}$ と数演算子の定義を利用して

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

とすると楽。

2.9 座標表示の波動関数

目標：座標表示の規格化された波動関数を導出する。

シュレディンガー方程式で得られる第 n 励起状態の波動関数 $\phi_n(x)$ ：

$$\langle x | n \rangle = \phi_n(x) \tag{66}$$

$$= \left(\frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \right)^{1/2} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right) \tag{67}$$

$$= \begin{cases} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right) & (n=0) \\ \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right) & (n=1) \\ \vdots & \end{cases} \tag{68}$$

座標基底 $|x\rangle$ ：座標演算子 \hat{x} の固有状態

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \quad \langle x|\hat{x} = x\langle x| \tag{69}$$

運動量演算子は（HP の補足参照、符号に注意！）

$$\hat{p}|x\rangle = +i\hbar \frac{d}{dx}|x\rangle, \quad \langle x|\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}\langle x| \quad (70)$$

基底状態の条件 $\hat{a}|0\rangle = \mathbf{0}$ に左から $\langle x|$ をかけると

$$\begin{aligned} 0 &= \langle x|\hat{a}|0\rangle \\ &= \langle x|\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\hat{x} + i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right)|0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}x + i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}(-i\hbar\frac{d}{dx})\right)\langle x|0\rangle \quad \leftarrow (69), (70) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}x + \frac{\hbar}{\sqrt{m\omega}}\frac{d}{dx}\right)\phi_0(x) \quad \leftarrow (66) \end{aligned}$$

つまり

$$\frac{d\phi_0(x)}{dx} + \frac{m\omega}{\hbar}x\phi_0(x) = 0$$

これは変数分離で解くことができ、

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_0}{dx} &= -\frac{m\omega}{\hbar}x\phi_0 \\ \frac{d\phi_0}{\phi_0} &= -\frac{m\omega}{\hbar}xdx \\ \int \frac{d\phi_0}{\phi_0} &= -\frac{m\omega}{\hbar} \int xdx \\ \ln \phi_0 &= -\frac{m\omega}{\hbar} \frac{x^2}{2} + C \\ \phi_0(x) &= \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + C\right\} \\ &= C' \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\} \end{aligned}$$

C は積分定数で $C' = e^C$ 。 C' は規格化条件から決定できる：

$$\int dx |\phi_0(x)|^2 = (C')^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right\} = (C')^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = 1$$

よって（厳密には C' は複素数で良いが位相を正の実数になるように選択）

$$C' = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

ここでガウス積分（HP の補足参照）

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (71)$$

を用いた。以上より、基底状態の波動関数は

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\} \quad (72)$$

となり式 (68) に一致。

第 1 励起状態 $|1\rangle$ の波動関数：式 (66) より

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= \langle x|1\rangle \\ &= \langle x|\frac{1}{\sqrt{1}}\hat{a}^\dagger|0\rangle \quad \leftarrow (62) \\ &= \langle x|\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{m\omega}\hat{x} - i\frac{1}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right)|0\rangle \quad \leftarrow (51) \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - i\frac{1}{m\omega}(-i\hbar\frac{d}{dx})\right)\langle x|0\rangle \quad \leftarrow (69), (70) \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\} \quad \leftarrow (72) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\} - \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\}\right) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\} - \frac{\hbar}{m\omega}\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\}\frac{d}{dx}\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\}\right) \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{\hbar}{m\omega}\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x\right)\right)\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\} \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(1+1)x\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\} \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right\} \end{aligned}$$

となり式 (68) に一致。

今日のポイント

- 任意の演算子を \hat{a} 、 \hat{a}^\dagger で表すことで状態 $|n\rangle$ の性質が調べられる。
- 調和振動子の波動関数 $\phi_n(x) = \langle x|n\rangle$ は交換関係から導出できる。

生成消滅演算子の考え方は講義後半の角運動量・スピンの議論や、量子場の理論での粒子描像など、よく利用される。