9 調和振動子

9.1 1 次元調和振動子

1 次元調和振動子のハミルトニアンは、

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad p = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} \tag{1}$$

である。シュレディンガー方程式を解析的に解くことも出来るが、ここでは昇降演算子を用いて代数的に解くことにする。

まずシュレディンガー方程式、

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

の両辺に $2/(\hbar\omega)$ を掛けると、

$$\left(-\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)\psi(x) = \frac{2E}{\hbar\omega}\psi(x) \tag{3}$$

となる。したがって、

$$y \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x, \quad \varepsilon \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} \tag{4}$$

と無次元量 y および ε を定義すれば、シュレディンガー方程式は、

$$\left(-\frac{d^2}{dy^2} + y^2\right)\psi(y) = \varepsilon\psi(y) \tag{5}$$

と簡素化される。

ここで**昇降演算子** (名前の意味は以下の議論から明らかであろう)

$$\begin{aligned} U &\equiv \frac{d}{dy} - y \\ D &\equiv \frac{d}{dy} + y \end{aligned} \tag{6}$$

を導入する。積 UD は、任意の関数 f に対して、

$$\begin{aligned} UD\,f &= \left(\frac{d}{dy} - y\right)\left(\frac{d}{dy} + y\right)f \\ &= \frac{d^2 f}{dy^2} + \frac{d}{dy}(yf) - y\frac{df}{dy} + y^2 f \\ &= \left[\underbrace{\frac{d^2}{dy^2} - y^2}_{=-H} + 1\right]f \end{aligned} \tag{7}$$

であるので、ハミルトニアン H を用いて、

$$UD = -H + 1 \tag{8}$$

と表される。同様にして、

$$DU = -H - 1 \tag{9}$$

である (演算子 U と D は非可換である)。
　式 (8) に左から D を掛けると、

$$DUD = -DH + D \tag{10}$$

となるが、この式の左辺に式 (9) を代入すると、

$$(-H - 1)D = -DH + D \tag{11}$$

より、

$$DH = HD + 2D \tag{12}$$

であることが分かる。
　一方、ハミルトニアン H を使って書いたシュレディンガー方程式

$$H\psi = \varepsilon\psi \tag{13}$$

に左から D を掛けると、

$$DH\psi = D\varepsilon\psi = \varepsilon D\psi \tag{14}$$

となる。左辺に式 (12) を代入すると、

$$(HD + 2D)\psi = \varepsilon D\psi \quad \to \quad H(D\psi) = (\varepsilon - 2)(D\psi) \tag{15}$$

であることが分かる。この式は、$D\psi$ という新たな波動関数は同じハミルトニアン H に対して $\varepsilon - 2$ という 2 だけ小さな固有値を持つ固有関数になっている事を示している。
　式 (13) から式 (15) までの操作をもう一度繰り返してみる。式 (15) に左から D を掛けると、

$$DHD\psi = (\varepsilon - 2)D^2\psi \tag{16}$$

であり、左辺に式 (12) を代入して整理すると、

$$H(D^2\psi) = (\varepsilon - 4)(D^2\psi) \tag{17}$$

を得る。この式は、$D^2\psi$ が $\varepsilon - 4$ という 4 だけ小さな固有値を持つ固有関数になっていることを示している。同じ操作を繰り返すと、

$$H(D^n\psi) = (\varepsilon - 2n)(D^n\psi) \tag{18}$$

が得られ、$D^n\psi$ が $\varepsilon - 2n$ という $2n$ だけ小さな固有値を持つ固有関数になっていることが示される。同様にして、

$$H(U^n\psi) = (\varepsilon + 2n)(U^n\psi) \tag{19}$$

が得られ、$U^n\psi$ が $\varepsilon + 2n$ という $2n$ だけ大きな固有値を持つ固有関数になっていることが示される。これらが U や D を昇降演算子と呼ぶ理由である。

ここまでで得られた昇降演算子の性質を用いて、調和振動子型ポテンシャルに対するエネルギー(固有値) と波動関数 (固有関数) を求めることを考える。基底状態のエネルギーと波動関数をそれぞれ ε_0 と ψ_0 とおくと、

$$H\psi_0 = \varepsilon_0\psi_0 \tag{20}$$

である。この式の左から D を掛けて、式 (12) を使うと、

$$H(D\psi_0) = (\varepsilon_0 - 2)(D\psi_0) \tag{21}$$

を得る。ε_0 を最低エネルギーと仮定したので、$D\psi_0$ がより低いエネルギー状態となると矛盾してしまう。矛盾しないためには、

$$D\psi_0 = 0 \tag{22}$$

である必要がある。また、式 (8) を ψ_0 に作用させると、$D\psi_0 = 0$ より、

$$UD\psi_0 = (-H+1)\psi_0 = 0 \quad \to \quad H\psi_0 = \psi_0 \tag{23}$$

から、基底状態のエネルギー ε_0 は 1 であることがわかる。

基底状態の波動関数は、微分方程式、

$$D\psi_0 = \left(\frac{d}{dy} + y\right)\psi_0 = 0 \tag{24}$$

を解くことにより求まる。具体的には、変数分離をして、

$$\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -ydy \quad \to \quad \ln\psi_0 = -\frac{1}{2}y^2 + C \quad \to \quad \psi_0 = N_0\exp(-y^2/2) \tag{25}$$

と求まる。

係数 N_0 は規格化条件、

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0|^2 dx = N_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-y^2)dx = 1 \tag{26}$$

から求めることが出来る。$y = \sqrt{m\omega/\hbar}\,x$ であるので、

$$N_0^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-y^2)dy = 1}_{=\sqrt{\pi}} \quad \to \quad N_0 = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \tag{27}$$

であることが分かる。したがって、基底状態の波動関数は、

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right] \tag{28}$$

となる。

規格化された励起状態の波動関数

n 番目 (基底状態を $n=0$ とする) の規格化された波動関数を ψ_n とすると、上昇演算子 U により、

$$U\psi_n = C_+\psi_{n+1} \tag{29}$$

の関係がある。ψ_i は規格化されているので、

$$|C_+|^2 = \int (U\psi_n)^*(U\psi_n)dx = 1 \tag{30}$$

である。U および y の定義から、

$$(U\psi_n)^* = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{d\psi_n^*}{dx} - \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(x\psi_n^*) = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\left[\hbar\frac{d\psi_n^*}{dx} - m\omega(x\psi_n^*)\right] \tag{31}$$

であるので、部分積分を行い、$\psi_n \to 0 (x \to \pm\infty)$ に注意すると、

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty}(U\psi_n)^*(U\psi_n)dx &= \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\hbar\frac{d\psi_n^*}{dx} - m\omega(x\psi_n)^*\right)(U\psi_n)dx \\
&= \frac{\hbar}{\sqrt{m\hbar\omega}}\underbrace{\left[\psi_n^*(U\psi_n)\right]_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\left(\hbar\frac{d}{dx} + m\hbar\omega x\right)(U\psi_n)dx \\
&= -\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^* DU\psi_n dx
\end{aligned} \tag{32}$$

となる。ここで、式 (9) から、

$$DU\psi_n = (-H-1)\psi_n = (-(1+2n)-1)\psi_n = -2(n+1)\psi_n \tag{33}$$

であるので、C_+ が正の実数になるように位相を選べば、

$$|C_+|^2 = 2(n+1) \quad \to \quad C_+ = \sqrt{2(n+1)} \tag{34}$$

であることが分かる。
以上から、規格化された波動関数 ψ_n は、

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2n}}U\psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{2^2 n(n-1)}}(U)^2\psi_{n-2}\cdots = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}(U)^n\psi_0 \tag{35}$$

と表される。例えば、第一励起状態の波動関数 ψ_1 は具体的には、

$$\begin{aligned}
\psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2^1 1!}}U\psi_0 \\
&= -\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\psi_0 \\
&= -\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} x\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right]
\end{aligned} \tag{36}$$

と求まる。

9.2　3 次元調和振動子

直交座標

3 次元調和振動子ポテンシャルのハミルトニアンは、

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\boldsymbol{r}^2 \tag{37}$$

である。H は 3 つの独立な 1 次元調和振動子、

$$H = H_1 + H_2 + H_3, \quad H_i = \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_i^2 \quad (i = 1, 2, 3) \tag{38}$$

に分解できるので、その固有値と固有状態は、

$$\begin{aligned} H\psi_{n_1n_2n_3}(\boldsymbol{r}) &= \hbar\omega\left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)\psi_{n_1n_2n_3}(\boldsymbol{r}), \quad n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \cdots, \infty \\ \psi_{n_1n_2n_3}(\boldsymbol{r}) &= \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z) \end{aligned} \tag{39}$$

で与えられる。H の固有値は和 $N = n_1 + n_2 + n_3$ だけで決まるので、N を与えたとき、

$$\hbar\omega\left(N + \frac{3}{2}\right), \quad N = 0, 1, 2, \cdots, \infty \tag{40}$$

に属する固有状態 $\psi_{n_1n_2n_3}$ は、$N = 0$ を除けば複数あり縮退している。縮退度を $g(N)$ とすると、$g(N)$ は N 個の $\circ$ と 2 個の $\bullet$ を、

$$\underbrace{\circ\circ\cdots\circ\circ}_{n_1}\bullet\underbrace{\circ\circ\cdots\circ\circ}_{n_2}\bullet\underbrace{\circ\circ\cdots\circ\circ}_{n_3} \tag{41}$$

のように 1 列に並べる方法の数に等しいので、

$$g(N) = {}_{n+2}\mathrm{C}_2 = \frac{(N+1)(N+2)}{2} \tag{42}$$

である。

極座標

球座標で考えた場合、N は動径方向のノードの数 n_r ($r = 0$ を含まない) と軌道角運動量の大きさ l を用いて、

$$N = 2n_r + l, \quad (n_r, l = 0, 1, 2, \ldots) \tag{43}$$

で与えられる。各 l の状態は磁気量子数 $m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l$ の分だけ $(2l+1)$ 重に縮退している。状態は直交座標系では (n_1, n_2, n_3) で、極座標では (n_r, l, m) で指定されるが、同じ N をもつ準位は全て同じエネルギーを持っている。この時の縮退度 $g(N)$ は、直交座標、球座標いずれで考えても同じであり、

$$g(N) = \sum_{n_1+n_2+n_3=N} 1 = \sum_{2n_r+l=N} (2l+1) = \frac{1}{2}(N+1)(N+2) \tag{44}$$

である。

演習問題 9

一次元調和振動子型ポテンシャルの基底状態について考える。以下の問いに答えよ。

1. 位置の期待値 $\langle x \rangle$ が 0 となることを示せ。
2. 運動量の期待値 $\langle p \rangle$ が 0 となることを示せ。
3. 位置のゆらぎの 2 乗の期待値 $(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$ を求めよ。
4. 運動量のゆらぎの 2 乗の期待値 $(\Delta p)^2 = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle$ を求めよ。
5. 不確定性関係 $\Delta x \Delta p$ の値を求めよ。

計算・メモ用余白