調和振動子とコヒーレント状態

2025/02/12

1　コヒーレント状態の波動関数

消滅演算子 $\hat{a}$ の固有状態 $\left|\lambda\right\rangle$ を $\hat{a}\left|\lambda\right\rangle = \lambda\left|\lambda\right\rangle$ のように導入する。

この時、$\left|\lambda\right\rangle$ をコヒーレント状態といい、個数演算子 $\hat{N}$ の固有状態 $\left|n\right\rangle$ を使って展開すると、

$\left|\lambda\right\rangle = e^{-\frac{1}{2}\lambda^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}\left|n\right\rangle$ と表すことができる。

調和振動子の第 n 励起状態の波動関数 $\phi(n,x)$ は

$\phi(n,x) = \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}(\frac{m\omega}{\hbar\pi})^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega}{\hbar\pi}x^2}H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x)$ と表される。($H_n(x)$ はエルミート多項式)

x でコヒーレント状態の波動関数 $\psi(x)$ を座標表示させると、
$\psi(x) = \langle x|\lambda\rangle = e^{-\frac{1}{2}\lambda^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}\langle x|n\rangle$ と表される。

また、コヒーレント状態の定義 $\hat{a}\left|v\right\rangle = \lambda\left|\lambda\right\rangle$ より、

$\left(\frac{m\omega}{2\hbar}x + \frac{\hbar}{2m\omega}\frac{d}{dx}\right)\psi(x) = \lambda\psi(x)$

これを計算すると $\psi(x) = C\exp\left(-\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \lambda\right)^2\right)$ となり、規格化条件 $\int\|\psi(x)\|^2dx = 1$ より

$\psi(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left(-\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \lambda\right)^2\right)$ と直接求めることができる。

時間発展演算子 $\hat{U} = e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}$ を用いて $\left|\lambda(t)\right\rangle$ は
$\left|\lambda(t)\right\rangle = \hat{U}\left|\lambda\right\rangle = e^{-\frac{1}{2}\lambda^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}\left|n\right\rangle = e^{-\frac{1}{2}\lambda^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t}\left|n\right\rangle$　と表されるので、

$\psi(x,t) = e^{-\frac{1}{2}\lambda^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t}\phi(n,x)$　と表される。

$\psi(x,t)$ は $n=\infty$ まで和を取らなくても $n=N$　$N\gg\lambda$ を満たす N まで和を取れば近い値を得るので、数値計算を行い解の挙動を確認する。

2　理論

個数演算子 $\hat{N}$ はエルミート演算子なのでその固有状態 $|n\rangle$ は直交性を持つ。

よって、$\langle\lambda|\lambda\rangle = e^{-\lambda^2}(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^{*n}}{\sqrt{n!}}\langle n|)(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle) = e^{-\lambda^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^{2n}}{n!} = e^{-\lambda^2}e^{\lambda^2} = 1$

コヒーレント状態でのエネルギー期待値 $\langle H\rangle_\lambda$ は、

$\langle H\rangle_\lambda = \frac{1}{2}\hbar\omega + \hbar\omega\langle\lambda|\hat{N}|\lambda\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega + \hbar\omega\|\hat{a}|\lambda\rangle\|^2 = \hbar\omega(\lambda^2 + \frac{1}{2})$　と求められる。

位置の期待値 $\langle\hat{x}\rangle_\lambda$　運動量の期待値 $\langle\hat{p}\rangle_\lambda$　位置と運動量の不確定性 $(\Delta x)_\lambda(\Delta p)_\lambda$ を求める。

$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} - \hat{a^\dagger})$　　$\hat{p} = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}i(\hat{a^\dagger} - \hat{a})$　より、

$$\langle\hat{x}\rangle_\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle\lambda|\hat{a} - \hat{a^\dagger}|\lambda\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\langle\lambda|\hat{a}|\lambda\rangle + \langle\lambda|\hat{a^\dagger}|\lambda\rangle^*) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\lambda + \lambda^*)$$

$$\langle\hat{p}\rangle_\lambda = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\langle\lambda|\hat{a^\dagger} - \hat{a}|\lambda\rangle = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\lambda^* - \lambda)$$

$$(\Delta x)^2 = \left\langle\hat{x^2}\right\rangle_\lambda - \langle x\rangle_\lambda^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle\lambda|\hat{a}^2 + \hat{a^\dagger}^2 + 2\hat{N} + [\hat{a}, \hat{a^\dagger}]|\lambda\rangle - \langle x\rangle_\lambda^2$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega}((\lambda^2 + \lambda^{*2} + 2\|\lambda\|^2 + 1) - (\lambda^2 + \lambda^{*2} + 2\|\lambda\|^2)) = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$(\Delta p)^2 = \left\langle\hat{p^2}\right\rangle_\lambda - \langle p\rangle_\lambda^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2}\langle\lambda|\hat{a}^2 + \hat{a^\dagger}^2 - 2\hat{N} - [\hat{a}, \hat{a^\dagger}]|\lambda\rangle - \langle p\rangle_\lambda^2$$

$= -\frac{m\hbar\omega}{2}((\lambda^2 + \lambda^{*2} - 2\|\lambda\|^2 - 1) + (\lambda^2 + \lambda^{*2} - 2\|\lambda\|^2)) = \frac{m\hbar\omega}{2}$　より、$(\Delta x)_\lambda(\Delta p)_\lambda = \frac{\hbar}{2}$

実際、コヒーレント状態の波動関数 $\psi(x)$ はガウシアンであり、ロバートソンの不等式の等号成立条件 (最小不確定性となるとき、波動関数はガウシアン) という条件を満たす。

任意の時間 t に対する位置の期待値 $\left\langle\hat{x(t)}\right\rangle_\lambda$ を求める。
ハイゼンベルクの方程式より、$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{x(t)} = [\hat{x(t)}, \hat{H}] = [\hat{x(t)}, \frac{1}{2m}\hat{p(t)}^2] = i\hbar\frac{1}{m}\hat{p(t)}$
$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{p(t)} = [\hat{p(t)}, \hat{H}] = [\hat{p(t)}, \frac{m\omega^2}{2}\hat{x(t)}^2] = -i\hbar m\omega^2\hat{x(t)}$　より、$\frac{d^2}{dt^2}\hat{x(t)} = -\omega^2\hat{x(t)}$　を得る。

初期条件 $\hat{x(0)} = \langle x\rangle_\lambda$　$\hat{p(0)} = \langle p\rangle_\lambda$ のもとでこの方程式を解くと、

$$\hat{x(t)} = \hat{x(0)}\cos\omega t + \frac{1}{m\omega}\hat{p(0)}\sin\omega t$$

よって、$\left\langle\hat{x(t)}\right\rangle_\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}((\lambda + \lambda^*)\cos\omega t + (\lambda^* - \lambda)\sin\omega t = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\lambda^* e^{i\omega t} + \lambda e^{-i\omega t})$　となる。

特に、λ が実数のとき、$\lambda = \lambda^*$ より、$\left\langle\hat{x(t)}\right\rangle_\lambda = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\cos\omega t \quad \cdots(1)$　となる。

また、$\hat{H}$の固有状態 $|n\rangle$ にに対しては $\left\langle\hat{x(0)}\right\rangle_n = \left\langle\hat{p(0)}\right\rangle_n = 0$ より, $\left\langle\hat{x(t)}\right\rangle_n = 0$ となる。

3　数値計算

簡単のため、$\hbar = \omega = m = 1 \quad \lambda = 4$ とした。規格化条件は満たされないが解の挙動はグラフにプロットすることで確認することができる。

3.1　確率密度 $\rho(x, 0)$ の計算

波動関数 $\psi(x,0) = e^{-\frac{1}{2}\lambda^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} \phi(n,x)$ を $n = 10, 50$ まで計算して、その大きさの 2 乗である $\rho(x, 0)$ をプロットした。比較のため、コヒーレント状態の定義から求めた確率密度

$\rho(x,0) = \|(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{\frac{1}{4}} \exp\left(-(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \lambda)^2\right)\|^2$ もプロットした。

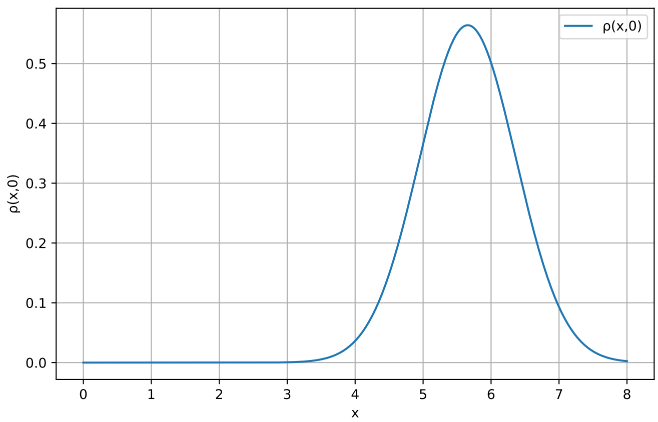

図 1: コヒーレント状態の定義から求めた確率密度

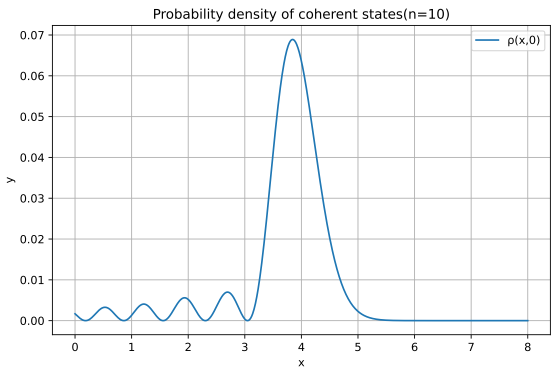

図 2: $n = 10$ まで計算した確率密度

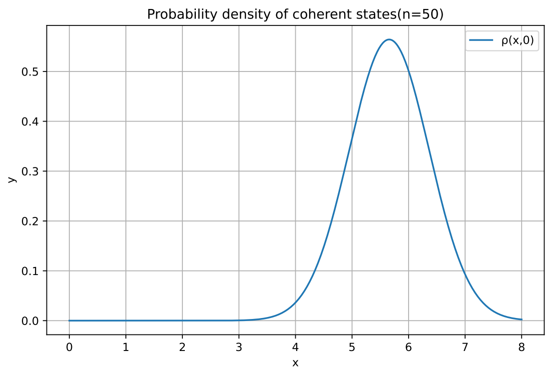

図 3: $n = 50$ まで計算した確率密度

$n = 10$ の時に残っている確率密度の波も $n = 50$ まで計算するとほぼ無くなり、図 1 とほとんど同じ形になったため、$\lambda = 4$ では $n = 50$ まで計算させると $\rho(x, 0)$ を再現できることが分かった。

3.2 確率密度 $\rho(x,t)$ の計算

周期 $T=\dfrac{2\pi}{\omega}$ として、$t=\dfrac{m}{8}T \quad (m=1...8)$ の時の確率密度を計算した。
$\psi(x,t)=e^{-\frac{1}{2}\lambda^2}\displaystyle\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t}\phi(n,x)$ は $n=\infty$ まで計算できないので、$n=50$ まで和を取ってそれをプロットした。

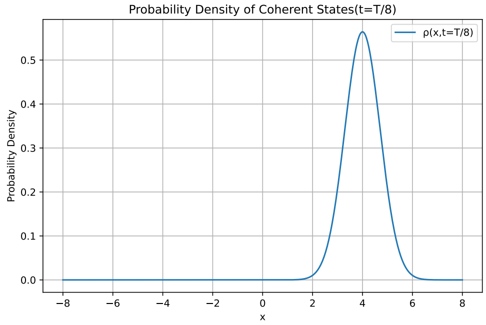

図 4: 確率密度 $\rho(x,\frac{1}{8}T)$

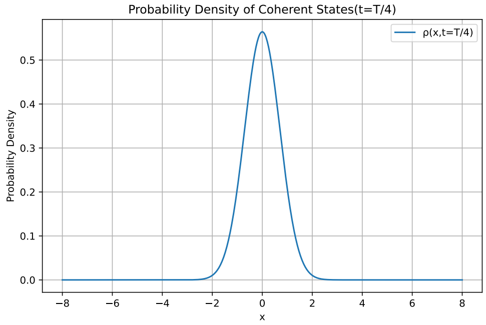

図 5: 確率密度 $\rho(x,\frac{1}{4}T)$

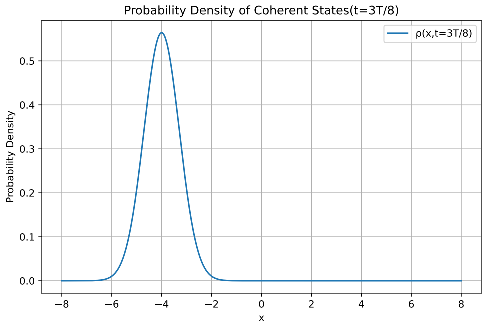

図 6: 確率密度 $\rho(x,\frac{3}{8}T)$

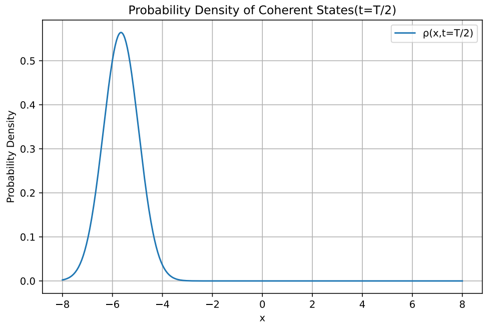

図 7: 確率密度 $\rho(x,\frac{1}{2}T)$

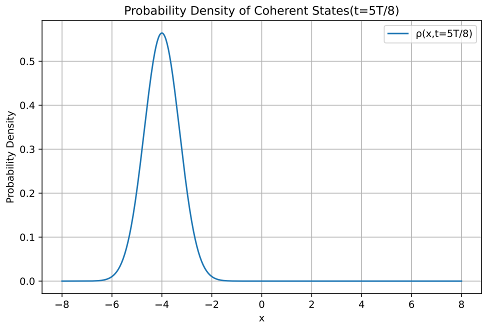

図 8: 確率密度 $\rho(x,\frac{5}{8}T)$

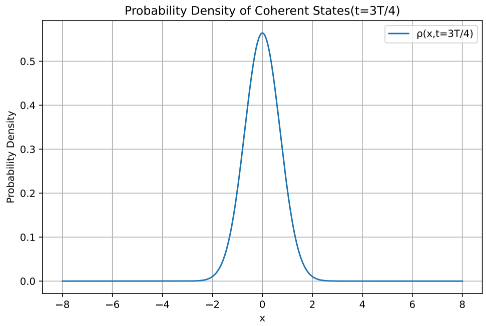

図 9: 確率密度 $\rho(x,\frac{3}{4}T)$

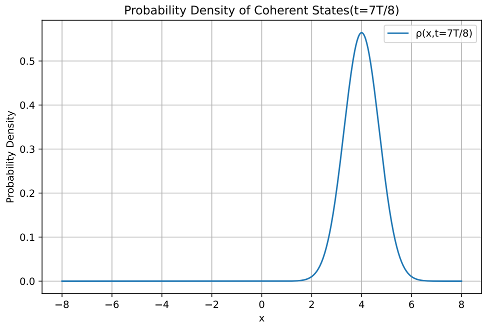

図 10: 確率密度 $\rho(x, \frac{7}{8}T)$

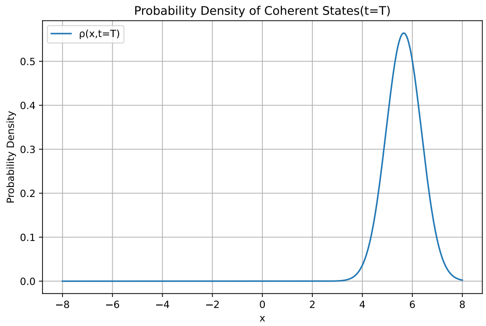

図 11: 確率密度 $\rho(x, T)$

$t = 0s$ から $10s$ までの GIF ファイル (passward:coherent) `https://d.kuku.lu/5k68ha3yb`

このことから、確率密度のピークが古典力学で調和振動子型ポテンシャル中を動く粒子の位置 $x(t)$ と一致することが分かる。実際、$\hbar$ を 0 に近づけたとき、位置と運動量の不確定性は 0、確率密度関数が尖った形 $(\rho(x,t) = \delta(x - x(t)))$ に近づき、古典力学の状態を表すことが分かる。

また、$\psi(x)$ は極大点中心で偶関数となるので位置の期待値 $\langle x \rangle = A\cos(\omega t + \delta)$ と表すことができると考えられ、理論 (1) 式でそれは保証される。
$\rho(x, T)$ を $\lambda = 10.0$ として、$n = 100$ まで計算させると図 12 のようになる。

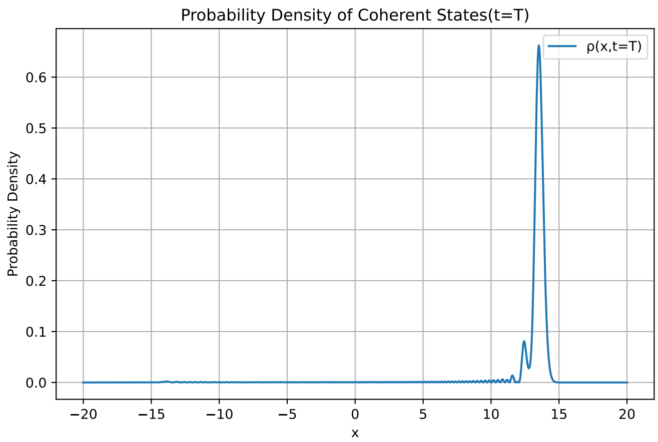

図 12: $\lambda = 10$ の時の確率密度 $\rho(x, T)$

$t = 0s$ から $10s$ までの GIF ファイル (passward:coherent) `https://d.kuku.lu/kctfvrjc8`

λ を大きくすると確率密度関数のグラフがより尖った形となることが分かる。これは λ が大きくなるとエネルギーの期待値 $\langle H \rangle_\lambda = \hbar\omega(\lambda^2 + \frac{1}{2})$ が大きくなり、古典力学での動きに近づくからであると考えられる。

4 疑問

λ を大きくしても位置と運動量の不確定性は $\frac{\hbar}{2}$ で一定のため 0 にならない。

「位置、運動量の期待値 $\langle x \rangle_\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\lambda + \lambda^*) \quad \langle p \rangle_\lambda = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\lambda^* - \lambda)$ は不確定性 $\frac{\hbar}{2}$ に対して十分小さいから」古典力学的な運動に近づくと言って良いのか。また、$\hbar$ を 0 に近づけることを要請すると、エネルギーの期待値 $\langle H \rangle_\lambda = \hbar\omega(\lambda^2 + \frac{1}{2})$ は λ の増加の仕方次第で 0 に近づくこともあると思う。その時、古典力学的な近似をする際に「$\langle H \rangle_\lambda$ が十分大きくなり、発散しない」という条件を付けなければならないのか。