

本節では、1次元調和振動子モデルでハミルトニアンが書けるときの波動関数の表示を求める。波動関数とは、Schrödinger 方程式、

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (0.0.1)$$

を満たす  $|\psi\rangle$  について、

$$\psi(x) := \langle x|\psi\rangle \quad (0.0.2)$$

となるように（一般化）座標  $x$  へ射影したものである。式 (0.0.1) に対して  $\langle x|$  を左から書ければ、

$$\langle x|\hat{H}|\psi\rangle = E\psi(x) \quad (0.0.3)$$

となるのだから、左辺を計算して  $\psi(x)$  に演算子がかかる形に変形すれば、波動関数を求めることができる。本ノートにおいて、 $\hat{\cdot}$  を演算子として、その固有値を  $\cdot$ 、固有ベクトル (固有函数) を  $|\cdot\rangle$  と書く。

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \quad (0.0.4)$$

$$\hat{p}|x\rangle = p|x\rangle \quad (0.0.5)$$

である。また、 $\hat{x}$  や  $\hat{p}$  は物理量であり、Hermite 演算子だからその固有ベクトルは、

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x' - x) \quad (0.0.6)$$

$$\langle p'|p\rangle = \delta(p' - p) \quad (0.0.7)$$

と規格化してあり、

$$\int dx |x\rangle\langle x| = \hat{1} \quad (0.0.8)$$

$$\int dp |p\rangle\langle p| = \hat{1} \quad (0.0.9)$$

が成立する。なお、特に断らない限り積分範囲は  $-\infty$  から  $\infty$  である。

## 0.0.1 ハミルトニアン

古典的な1次元調和振動子のハミルトニアン  $H$  は、

$$H = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2m}p^2 \quad (0.0.10)$$

である。ただし、質量を  $m$ 、固有角周波数を  $\omega$ 、座標を  $x$ 、運動量を  $p$  とした。  $x$  と  $p$  は正準共役な変数の組であるから、  $x \rightarrow \hat{x}$ 、  $p \rightarrow \hat{p}$  とし、

$$\hat{H} = \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2 + \frac{1}{2m}\hat{p}^2 \quad (0.0.11)$$

$$= \hbar\omega \left( \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 \right) \quad (0.0.12)$$

$$= \hbar\omega \left[ \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{p} \right) \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{p} \right) - i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} [\hat{x}, \hat{p}] \right] \quad (0.0.13)$$

$$= \hbar\omega \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \quad (0.0.14)$$

となる。ただし、

$$\hat{a}^\dagger := \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{p} \right) \quad (0.0.15)$$

$$\hat{a} := \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{p} \right) \quad (0.0.16)$$

と定義した。

## 0.0.2 Hermite 多項式

以降の議論で用いるために、特殊関数の1つである Hermite 多項式を紹介しておこう。Hermite 多項式は Sturm-Liouville 演算子のうちの1つの演算子の固有関数であり、実数全体で定義された実数関数  $H_n(s)$  に対して、

$$\left(\frac{d^2}{ds^2} - 2s\frac{d}{ds} + 2n\right)H_n(s) = 0 \quad (0.0.17)$$

なる  $H_n(s)$  である。なお、 $n$  は非負整数である。なお、 $H_n(s)$  は適当な回数だけ微分可能であるとする。また、 $H_n(s)$  が張る空間  $V$  の内積は、 $f, g \in V$  として、

$$\langle f, g \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} ds f(s)g(s)e^{-s^2} \quad (0.0.18)$$

である<sup>1</sup>。Hermite 多項式は、適切に境界条件が設定された (Hermite 性のある) Sturm-Liouville 演算子の固有関数であり、そのような演算子の固有関数は直交基底となり、完全系を成すことが知られていて、実際、

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(s)H_n(s)e^{-s^2} ds = \sqrt{\pi}2^n n! \delta_n^m \quad (0.0.19)$$

のように直交する。

## 0.0.3 波動関数を用いた Schrödinger 方程式

以下では、波動関数を用いた Schrödinger 方程式である、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi(x) = E\psi(x) \quad (0.0.20)$$

を得る。

式 (0.0.3) に式 (0.0.11) で示した  $\hat{H}$  の表式を代入して、

$$\frac{1}{2}m\omega^2 \langle x|\hat{x}^2|\psi\rangle + \frac{1}{2m} \langle x|\hat{p}^2|\psi\rangle = E\psi(x) \quad (0.0.21)$$

$$\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) + \frac{1}{2m} \langle x|\hat{p}^2|\psi\rangle = E\psi(x) \quad (0.0.22)$$

となる。 $\langle x|\hat{p}^2|\psi\rangle$  は以下のレシピで計算できる。

1.  $f(x)\frac{d}{dx}\delta(x) = -\frac{d}{dx}f(x)\delta(x)$
2.  $\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\psi(x)$
3.  $\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(i\frac{xp}{\hbar}\right)$
4.  $\langle x|\hat{p}^2|\psi\rangle$  の計算

$\delta(x)$  はデルタ関数であり、積分して初めて意味を持つ関数である。

---

<sup>1</sup>Sturm-Liouville 演算子の形、

$$\frac{1}{\rho(x)}\left[\frac{d}{dx}\left\{p(x)\frac{d}{dx}\right\} + q(x)\right]$$

と、Sturm-Liouville 演算子の固有関数が張る空間の内積が、

$$\int_a^b f^*(x)g(x)\rho(x) dx$$

と書けることを思い出せば、内積に  $e^{-s^2}$  なる重み関数が入ることは自然なことである。

$$1. f(x) \frac{d}{dx} \delta(x) = -\frac{d}{dx} f(x) \delta(x)$$

左辺を積分して右辺になればよい。ただし、 $f(x)$  は、

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} f(x) = 0 \quad (0.0.23)$$

であるとする。実際に、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \frac{d}{dx} \delta(x) = [f(x) \delta(x)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d}{dx} f(x) \delta(x) \quad (0.0.24)$$

$$= - \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{d}{dx} f(x) \delta(x) \quad (0.0.25)$$

であるから、

$$f(x) \frac{d}{dx} \delta(x) = -\frac{d}{dx} f(x) \delta(x) \quad (0.0.26)$$

である。

$$2. \langle x | \hat{p} | \psi \rangle = -i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x)$$

$\langle x | [\hat{x}, \hat{p}] | x' \rangle$  を 2 種類の方法で計算する。まず、愚直に計算すると、

$$\langle x | [\hat{x}, \hat{p}] | x' \rangle = \langle x | \hat{x} \hat{p} - \hat{p} \hat{x} | x' \rangle \quad (0.0.27)$$

$$= x \langle x | \hat{p} | x' \rangle - x' \langle x | \hat{p} | x' \rangle \quad (0.0.28)$$

$$= (x - x') \langle x | \hat{p} | x' \rangle \quad (0.0.29)$$

である。一方、 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$  を用いれば、

$$\langle x | [\hat{x}, \hat{p}] | x' \rangle = i\hbar \langle x | x' \rangle \quad (0.0.30)$$

$$= i\hbar \delta(x - x') \quad (0.0.31)$$

2 つの方法で計算した  $\langle x | [\hat{x}, \hat{p}] | x' \rangle$  である **式** (0.0.29) と **式** (0.0.31) を等号で結んで、**式** (0.0.26) で示したデルタ函数の微分を用いて表現すれば、

$$\langle x | \hat{p} | x' \rangle = i\hbar \frac{\delta(x - x')}{x - x'} \quad (0.0.32)$$

$$= -i\hbar \frac{d}{d(x - x')} \delta(x - x') \quad (0.0.33)$$

$$= i\hbar \frac{d}{dx'} \delta(x - x') \quad (0.0.34)$$

となる。

さて、 $\langle x | \hat{p} | \psi \rangle$  を計算しよう。  $|x\rangle$  の完全性と、**式** (0.0.34) で示した関係を用いれば、

$$\langle x | \hat{p} | \psi \rangle = \langle x | \hat{p} \hat{1} | \psi \rangle \quad (0.0.35)$$

$$= \langle x | \hat{p} \int dx' | x' \rangle \langle x' | | \psi \rangle \quad (0.0.36)$$

$$= \int dx' \langle x | \hat{p} | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle \quad (0.0.37)$$

$$= i\hbar \int dx' \left[ \frac{d}{dx} \delta(x - x') \right] \phi(x') \quad (0.0.38)$$

$$= i\hbar \left\{ [\delta(x - x') \psi(x')]_{-\infty}^{\infty} - \int dx' \frac{d}{dx'} \phi(x') \delta(x - x') \right\} \quad (0.0.39)$$

$$= -i\hbar \frac{d}{dx} \phi(x) \quad (0.0.40)$$

を得る。

$$3. \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{xp}{\hbar}\right)$$

$\langle x|\hat{p}|p\rangle$  を 2 種類の方法で計算する．まず，愚直に計算すると，

$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = p \langle x|p\rangle \quad (0.0.41)$$

$$= pp(x) \quad (0.0.42)$$

となる．ただし  $p(x)$  は  $|p\rangle$  の  $x$  への射影である．一方，式 (0.0.40) で示した関係で  $|\psi\rangle \rightarrow |p\rangle$  を用いると，

$$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar \frac{d}{dx} p(x) \quad (0.0.43)$$

となる．式 (0.0.42) と式 (0.0.43) より，

$$-i\hbar \frac{d}{dx} p(x) = pp(x) \quad (0.0.44)$$

$$\Rightarrow p(x) = C \exp\left(i\frac{xp}{\hbar}\right) \quad (0.0.45)$$

となる． $C$  は規格化定数である．

さて， $C$  を求めるために， $\langle x|x'\rangle$  を計算すると，

$$\delta(x - x') = \langle x|x'\rangle \quad (0.0.46)$$

$$= \langle x| \int dp |p\rangle \langle p| |x'\rangle \quad (0.0.47)$$

$$= \int dp p(x) p(x') \quad (0.0.48)$$

$$= |C|^2 \int \exp\left(i\frac{(x - x')p}{\hbar}\right) \quad (0.0.49)$$

となる．ところで，デルタ函数の Fourier 変換とその逆変換が，

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dt \delta(t) e^{-i\omega t} \quad (0.0.50)$$

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega 1 \cdot e^{i\omega t} \quad (0.0.51)$$

と書けることより，式 (0.0.51) において，

$$\omega \rightarrow \frac{p}{\hbar} \quad (0.0.52)$$

$$t \rightarrow x - x' \quad (0.0.53)$$

と変換すれば，

$$\delta(x - x') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp\left(i\frac{x - x'}{\hbar} p\right) \quad (0.0.54)$$

となるので，係数を比較して，

$$|C|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \quad (0.0.55)$$

$$\Rightarrow C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (0.0.56)$$

となる．よって，

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{xp}{\hbar}\right) \quad (0.0.57)$$

となる．

4.  $\langle x|\hat{p}^2|\psi\rangle$  の計算

さて、いよいよ  $\langle x|\hat{p}^2|\psi\rangle$  を計算する道具がそろった。式 (0.0.57) を用いながら計算すると、

$$\langle x|\hat{p}^2|\psi\rangle = \langle x|\hat{p}^2\hat{1}|\psi\rangle \quad (0.0.58)$$

$$= \langle x|\hat{p}^2 \int dp |p\rangle\langle p| |\psi\rangle \quad (0.0.59)$$

$$= \int dp p^2 \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle \quad (0.0.60)$$

$$= \int dp p^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(i\frac{xp}{\hbar}\right) \langle p|\psi\rangle \quad (0.0.61)$$

$$= \int dp \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left\{ \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \langle x|p\rangle \right\} \langle p|\psi\rangle \quad (0.0.62)$$

$$= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \int dp \left\{ \frac{d^2}{dx^2} \langle x|p\rangle \right\} \langle p|\psi\rangle \quad (0.0.63)$$

$$= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{d^2}{dx^2} \langle x| \left[ \int dp |p\rangle\langle p| \right] |\psi\rangle \quad (0.0.64)$$

$$= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{d^2}{dx^2} \langle x|\psi\rangle \quad (0.0.65)$$

$$= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \quad (0.0.66)$$

となる。

式 (0.0.66) を式 (0.0.22) に代入すれば、

$$\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) + \frac{1}{2m} \langle x|\hat{p}^2|\psi\rangle = E\psi(x) \quad (0.0.67)$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) + \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad (0.0.68)$$

$$\Leftrightarrow \left(-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (0.0.69)$$

となる。

## 0.0.4 Schrodinger の解法

いささか唐突だが、波動関数が<sup>3</sup>、

$$\psi(x) = f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) \quad (0.0.70)$$

$$s := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (0.0.71)$$

と書けたとする。  $f(s)$  が Hermite 多項式となることを示す。

式 (0.0.69) の両辺を  $-\frac{\hbar^2}{2m}$  で割って、  $x$  から  $s$  に変数変換<sup>2</sup>すると、

$$\left(-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (0.0.72)$$

<sup>2</sup>この変数変換は  $x$  の無次元化ともとらえられる。実際に式 (0.0.71) の右辺の次元を調べると、

$$\sqrt{\frac{\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}}{\text{kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{s}}} \text{m} = 1$$

である。

$$\Leftrightarrow \left[ \frac{d^2}{dx^2} - \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} x^2 + \frac{2mE}{\hbar} \right] \psi(x) = 0 \quad (0.0.73)$$

$$\Leftrightarrow \left[ \left( \frac{ds}{dx} \right)^2 \frac{d^2}{ds^2} - \frac{\hbar}{m\omega} s^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} \right] f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) = 0 \quad (0.0.74)$$

$$\Leftrightarrow \left[ \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2}{ds^2} - \frac{\hbar}{m\omega} s^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} \right] f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) = 0 \quad (0.0.75)$$

$$\Leftrightarrow \left( \frac{d^2}{ds^2} - s^2 + \frac{2E}{\hbar\omega} \right) f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) = 0 \quad (0.0.76)$$

と書ける．第1項について， $\frac{d^2}{ds^2} f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right)$  を計算しよう．Leibniz 則より，

$$\frac{d^2}{ds^2} f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) = \frac{d^2 f}{ds^2} \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) + 2 \frac{df}{ds} \frac{d}{ds} \left( \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) \right) + f(s) \frac{d^2}{ds^2} \left( \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) \right) \quad (0.0.77)$$

$$= \frac{d^2 f}{ds^2} \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) - 2s \frac{df}{ds} \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) + f(s) (s^2 - 1) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) \quad (0.0.78)$$

$$= \left( \frac{d^2}{ds^2} - 2s \frac{d}{ds} + (s^2 - 1) \right) f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) \quad (0.0.79)$$

と計算できるから，式 (0.0.76) は，

$$\left( \frac{d^2}{ds^2} - s^2 + \frac{2E}{\hbar\omega} \right) f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) = 0 \quad (0.0.80)$$

$$\Leftrightarrow \left( \frac{d^2}{ds^2} - 2s \frac{d}{ds} + (s^2 - 1) - s^2 + \frac{2E}{\hbar\omega} \right) f(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) = 0 \quad (0.0.81)$$

$$\Rightarrow \left( \frac{d^2}{ds^2} - 2s \frac{d}{ds} + \frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \right) f(s) = 0 \quad (0.0.82)$$

となる．Hermite 多項式の形は，

$$\left( \frac{d^2}{ds^2} - 2s \frac{d}{ds} + 2n \right) H_n(s) = 0 \quad (0.0.83)$$

であったから，

$$\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 = 2n \quad (0.0.84)$$

$$f(s) \rightarrow H_n(s) \quad (0.0.85)$$

とすれば良いことがわかる． $n$  は非負整数で， $n = 0$  では零点振動に対応する．規格化定数を  $A$  とすれば，波動関数は，

$$\psi_n(x) = A H_n(s) \exp\left(-\frac{s^2}{2}\right) \quad (0.0.86)$$

と書ける．規格化定数は，

$$1 = \int dx |\psi(x)|^2 \quad (0.0.87)$$

$$= |A|^2 \int dx H_n(s) H_n(s) e^{-s^2} \quad (0.0.88)$$

$$= |A|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int ds H_n(s) H_n(s) e^{-s^2} \quad (0.0.89)$$

$$= |A|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sqrt{\pi} 2^n n! \quad (0.0.90)$$

より,

$$A = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi \hbar}} \quad (0.0.91)$$

となる. 波動関数は,

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi \hbar}} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \exp \left( -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right) \quad (0.0.92)$$

となる.