

量子力学における 1 次元調和振動子モデルにおける 昇降演算子および波動関数について

山 K@yamak0523 (ymk@ymk_math)

2023 年 7 月 25 日

概要

本稿では、量子力学における 1 次元調和振動子の定常状態における Schrödinger 方程式 (固有方程式) をみたすエネルギーおよび波動関数を昇降演算子を用いることで Hermite 関数との関連性を明らかにし Hermite 関数が $L^2(\mathbb{R})$ 上で完全正規直交系となることを示す。

1 物理学背景

古典力学における 1 次元調和振動子モデルのハミルトニアン H は

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{K}{2}x^2$$

という形で与えられる。ただし、 $x, p \in \mathbb{R}$ はそれぞれ、振動子の位置、運動量を表す変数、 $m, K > 0$ は振動子の質量、ばね定数である。これに対応する量子系のハミルトニアンは

$$H_{os} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{K}{2}x^2$$

となる。今、 H_{os} の固有値および固有関数、つまり定常状態におけるエネルギーと対応する波動関数求める問題が出てきた。本稿では各定数は本質的ではないため単純化した

$$H_{os} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2$$

について関数解析学的手法を用いて考察していく。

2 空間と作用素の導入

\mathbb{R} 上の Schwartz の急減少関数空間を $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ 、Lebesgue の二乗可積分関数空間を $L^2(\mathbb{R})$ と表記する。つまり

$$\begin{aligned}\mathcal{S}(\mathbb{R}) &= \left\{ f \mid \lim_{|x| \rightarrow \infty} |x|^m f^{(n)}(x) = 0 \ (\forall m, n = 0, 1, 2, \dots) \right\} \\ L^2(\mathbb{R}) &= \left\{ f \mid \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx < \infty \right\}\end{aligned}$$

である。 $L^2(\mathbb{R})$ は Hilbert 空間であり内積 $\langle f, g \rangle$ 、ノルム $\|f\|_2$ は

$$\langle f, g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \overline{g(x)} dx, \|f\|_2 = \sqrt{\langle f, f \rangle} = \left(\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \quad (f, g \in L^2(\mathbb{R}))$$

となる。さらに、 $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ は $L^2(\mathbb{R})$ の部分空間として稠密であることに注意する。

$L^2(\mathbb{R})$ 上で線形作用素 T および T の定義域 $D(T)$ を

$$T = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{d}{dx} \right), D(T) = \mathcal{S}(\mathbb{R})$$

で定義する. また, 部分積分により T の共役作用素 T^* は

$$T^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{d}{dx} \right)$$

で与えられることがわかる.

3 交換子の計算

次に, T, T^* の交換子 $[T, T^*] = TT^* - T^*T$ を計算すると

$$\begin{aligned} ([T, T^*]f)(x) &= ((TT^* - T^*T)f)(x) \\ &= \frac{1}{2} \left(x + \frac{d}{dx} \right) \left(x - \frac{d}{dx} \right) f(x) - \frac{1}{2} \left(x - \frac{d}{dx} \right) \left(x + \frac{d}{dx} \right) f(x) \\ &= \frac{1}{2} (x^2 f(x) + (xf(x))' - xf'(x) - f''(x)) - \frac{1}{2} (x^2 f(x) - (xf(x))' + xf'(x) - f''(x)) \\ &= (xf(x))' - xf'(x) \\ &= f(x) \end{aligned}$$

より, $[T, T^*] = 1$ となることがわかる. このことを用いて, $[T, (T^*)^n] = n(T^*)^{n-1}$ ($n = 1, 2, \dots$) を示すことができる. 実際, $TT^* = 1 + T^*T$ を繰り返し用いることで

$$\begin{aligned} T(T^*)^n &= (TT^*)(T^*)^{n-1} \\ &= (1 + T^*T)(T^*)^{n-1} \\ &= (T^*)^{n-1} + T^*(TT^*)(T^*)^{n-2} \\ &= 2(T^*)^{n-1} + (T^*)^2 T(T^*)^{n-2} \\ &= \dots = n(T^*)^{n-1} + (T^*)^n T \end{aligned}$$

より成り立つことがわかる.

4 Hermite 関数の導入

k 次の正規化された Hermite 関数 $h_k(x)$ を

$$h_k(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt[4]{4\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} & (k=0) \\ \frac{1}{\sqrt{k!}} (T^*)^k h_0(x) & (k=1, 2, \dots) \end{cases}$$

のことをいう. この Hermite 関数についてこれから考えていく.

まず, $\|h_0\|_2 = 1$ であることは

$$\|h_0\|_2^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = 1$$

よりわかる. また, Th_0 を求めると

$$\begin{aligned} (Th_0)(x) &= \frac{1}{\sqrt[4]{4\pi}} \left(x + \frac{d}{dx} \right) e^{-\frac{x^2}{2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt[4]{4\pi}} \left(xe^{-\frac{x^2}{2}} - xe^{-\frac{x^2}{2}} \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

となる. さらに, $k = 1, 2, \dots$ に対して

$$\begin{aligned} Th_k &= \frac{1}{\sqrt{k!}} T(T^*)^k h_0 = \frac{1}{\sqrt{k!}} \{k(T^*)^{k-1} + (T^*)^k T\} h_0 = \sqrt{k} \cdot \frac{1}{\sqrt{(k-1)!}} (T^*)^{k-1} h_0 = \sqrt{k} h_{k-1} \\ T^* h_k &= \sqrt{k+1} \cdot \frac{1}{\sqrt{(k+1)!}} T^* (T^*)^k h_0 = \sqrt{k+1} h_{k+1} \end{aligned}$$

となる. このことから, $T^*Th_k = \sqrt{k}T^*h_{k-1} = kh_k$ がなりたつことがわかる. これは, T^*T の固有値 k ($k = 0, 1, 2, \dots$) に対する固有ベクトルが h_k であることを示している.

次に, $S = T^*T + \frac{1}{2}$ とする. このとき, $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ に対して Sf を具体的に求めると

$$\begin{aligned}(Sf)(x) &= \frac{1}{2} \left(x - \frac{d}{dx} \right) \left(x + \frac{d}{dx} \right) f(x) + \frac{1}{2} f(x) \\ &= \frac{1}{2} (x^2 f(x) - (xf(x))' + xf'(x) - f''(x)) + \frac{1}{2} f(x) \\ &= -\frac{1}{2} f''(x) + \frac{1}{2} x^2 f(x)\end{aligned}$$

となる. 一方で, $Sh_k = \left(k + \frac{1}{2}\right) h_k$ より, 微分方程式

$$-\frac{1}{2} f''(x) + \frac{1}{2} x^2 f(x) = E f(x) \quad (E \geq 0)$$

は, $E = k + \frac{1}{2} (= E_k)$ のとき h_k を解に持つことがわかる. この微分方程式は, 量子力学における調和振動子のモデルの Schrödinger 方程式であり, h_k を状態 k における波動関数という.

5 Hermite 関数の正規直交性

さて, 次に $\{h_k\}_{k=0}^\infty$ が $L^2(\mathbb{R})$ 内で正規直交系であることを示す. $m = 1, 2, \dots$ に対して

$$\begin{aligned}\langle h_m, h_m \rangle &= \frac{1}{m!} \langle (T^*)^m h_0, (T^*)^m h_0 \rangle \\ &= \frac{1}{m!} \langle T(T^*)^m h_0, (T^*)^{m-1} h_0 \rangle \\ &= \frac{1}{(m-1)!} \langle (T^*)^{m-1} h_0, (T^*)^{m-1} h_0 \rangle \\ &= \langle h_{m-1}, h_{m-1} \rangle \\ &= \dots = \langle h_0, h_0 \rangle \\ &= 1\end{aligned}$$

より正規性は示された. 直交性については, $m \neq n$ に対して

$$\begin{aligned}m \langle h_m, h_n \rangle &= \langle T^*Th_m, h_n \rangle \\ &= \langle h_m, T^*Th_n \rangle \\ &= n \langle h_m, h_n \rangle\end{aligned}$$

より, $\langle h_m, h_n \rangle = 0$ ($m \neq n$) となるから直交性も示された.

6 Hermite 関数の表示

ここからは, h_k の具体的な表示を与えていく.

$f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ に対して

$$((T^*)^k f)(x) = (-1)^k 2^{-\frac{k}{2}} e^{\frac{x^2}{2}} \frac{d^k}{dx^k} \left(e^{-\frac{x^2}{2}} f(x) \right) \quad (k = 1, 2, \dots)$$

を数学的帰納法で示していく.

(1) $k = 1$ のとき

$$\begin{aligned}
 (\text{左辺}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{d}{dx} \right) f(x) \\
 &= 2^{-\frac{1}{2}} (xf(x) - f'(x)) \\
 (\text{右辺}) &= -2^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{x^2}{2}} \left(-xe^{-\frac{x^2}{2}} f(x) + e^{-\frac{x^2}{2}} f'(x) \right) \\
 &= 2^{-\frac{1}{2}} (xf(x) - f'(x))
 \end{aligned}$$

より成り立つ.

(2) $k = m$ で成り立つと仮定する. このとき, $k = m + 1$ のとき

$$\begin{aligned}
 ((T^*)^{m+1} f)(x) &= (T^*(T^*)^m f)(x) \\
 &= (-1)^m 2^{-\frac{m}{2}} T^* \left\{ e^{\frac{x^2}{2}} \frac{d^m}{dx^m} \left(e^{-\frac{x^2}{2}} f \right) \right\} (x) \\
 &= (-1)^m 2^{-\frac{m+1}{2}} \left(x - \frac{d}{dx} \right) \left\{ e^{\frac{x^2}{2}} \frac{d^m}{dx^m} \left(e^{-\frac{x^2}{2}} f(x) \right) \right\} \\
 &= (-1)^m 2^{-\frac{m+1}{2}} \left[xe^{\frac{x^2}{2}} \frac{d^m}{dx^m} \left(e^{-\frac{x^2}{2}} f(x) \right) - \frac{d}{dx} \left\{ e^{\frac{x^2}{2}} \frac{d^m}{dx^m} \left(e^{-\frac{x^2}{2}} f(x) \right) \right\} \right] \\
 &= (-1)^{m+1} 2^{-\frac{m+1}{2}} e^{\frac{x^2}{2}} \frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}} \left(e^{-\frac{x^2}{2}} f(x) \right)
 \end{aligned}$$

より成り立つことがわかる.

以上より, 数学的帰納法から任意の自然数 k に対して等式が成り立つ.

この結果より, h_k ($k = 1, 2, \dots$) の具体的な表示を得ることができる. 実際

$$\begin{aligned}
 h_k(x) &= \frac{1}{\sqrt{k!}} (T^*)^k h_0(x) \\
 &= (-1)^k \left(\pi^{\frac{1}{2}} 2^k k! \right)^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{x^2}{2}} \frac{d^k}{dx^k} e^{-x^2}
 \end{aligned}$$

となる. ここで, $H_k(x)$ を

$$H_k(x) = (-1)^k e^{x^2} \frac{d^k}{dx^k} e^{-x^2} \quad (k = 0, 1, 2, \dots)$$

とし, $c_k = \left(\pi^{\frac{1}{2}} 2^k k! \right)^{-\frac{1}{2}}$ とすると, $h_k = c_k e^{-\frac{x^2}{2}} H_k$ より, $\{c_k e^{-\frac{x^2}{2}} H_k\}$ は $L^2(\mathbb{R})$ の正規直交系である. また, H_k は k 次の多項式となる. 実際, $H_0(x) = 1, H_1(x) = 2x$ となり, $k = 1, 2, \dots$ のとき $H_k(x)$ が k 次の多項式ならば, $H_{k+1}(x)$ については

$$\begin{aligned}
 H_{k+1}(x) &= (-1)^{k+1} e^{x^2} \frac{d^{k+1}}{dx^{k+1}} e^{-x^2} \\
 &= -e^{x^2} \frac{d}{dx} \left((-1)^k \frac{d^k}{dx^k} e^{-x^2} \right) \\
 &= -e^{x^2} \frac{d}{dx} \left(H_k(x) e^{-x^2} \right) \\
 &= -e^{x^2} \left(H_k'(x) e^{-x^2} - 2x H_k(x) e^{-x^2} \right) \\
 &= 2x H_k(x) - H_k'(x)
 \end{aligned}$$

より, $H_{k+1}(x)$ は $k + 1$ 次の多項式になることがわかる.

7 Hermite 関数の完全性

Hermite 関数が $L^2(\mathbb{R})$ の正規直交系であることはすでに示した. そこでここでは, 完全性について示していく. そのためには複素解析学や Fourier 変換を用いることになるため, 議論が長くなる.

まず, 完全性についてはいくつか同値な命題があるが, ここでは $f \in L^2(\mathbb{R})$ が $\langle f, h_k \rangle = 0$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) をみたすならば $f = 0$ を示すこととする.

まず, $F(z) = e^{-z^2+2zx}$ とすると, $F(z)$ は整関数であり

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A_n(x)}{n!} z^n$$

と Maclaurin 展開することができる. ただし, $A_n(x) = F^{(n)}(0)$ である. また, $F(z) = e^{x^2} e^{-(z-x)^2}$ より

$$\begin{aligned} A_n(x) &= e^{x^2} \left. \frac{d^n}{dz^n} e^{-(z-x)^2} \right|_{z=0} \\ &= e^{x^2} \left. \frac{d^n}{dw^n} e^{-w^2} \right|_{w=-x} \\ &= (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \\ &= H_n(x) \end{aligned}$$

となる. また, Cauchy の評価式より, 任意の $r > 0$ に対して

$$|H_n(x)| \leq \frac{n!}{r^n} \sup_{|z|=r} |F(z)| \leq \frac{n!}{r^n} e^{r^2+2r|x|}$$

が成り立つ. よって, $|z| < r$ のとき

$$\begin{aligned} \left| F(z) e^{-\frac{x^2}{2}} - \sum_{n=0}^N \frac{H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}}{n!} z^n \right| &= \left| \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}}{n!} z^n \right| \\ &\leq e^{r^2+2r|x|} e^{-\frac{x^2}{2}} \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{|z|^n}{r^n} \\ &\leq \left(1 - \frac{|z|}{r} \right)^{-1} e^{r^2+2r|x|} e^{-\frac{x^2}{2}} \end{aligned}$$

が成り立つ. ここで, $e^{-\frac{x^2}{2}} \in L^2(\mathbb{R})$ より, $L^2(\mathbb{R})$ の意味で

$$e^{-z^2+2zx} e^{-\frac{x^2}{2}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}}{n!} z^n$$

が成り立つことが示された. ここで, $f \in L^2(\mathbb{R})$ が $\langle f, h_k \rangle = 0$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) をみたすと仮定する. このような f に対して, 内積の連続性から

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-z^2+2zx} e^{-\frac{x^2}{2}} dx = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^{-1} \frac{\langle f, h_n \rangle}{n!} z^n = 0$$

が成り立ち, $e^{-z^2+2zx} e^{-\frac{x^2}{2}} = e^{-\frac{1}{2}(x-2z)^2+z^2}$ より, $2z = a (a \in \mathbb{R})$ と置き換えることで

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-\frac{1}{2}(x-a)^2} dx = 0 \quad (a \in \mathbb{R})$$

が成り立つことがわかる.

今, $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ の Fourier 変換 \widehat{f} を

$$\widehat{f}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ix\xi} dx \quad (\xi \in \mathbb{R})$$

と定義し, $f \in L^2(\mathbb{R})$ に対する Fourier 変換 \widehat{f} は, $L^2(\mathbb{R})$ の意味で $f_n \rightarrow f$ ($n \rightarrow \infty$) となる $\{f_n\} \subset \mathcal{S}(\mathbb{R})$ に対して \widehat{f}_n の $L^2(\mathbb{R})$ における $n \rightarrow \infty$ の極限で定義する. また, $g \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ に対する逆 Fourier 変換は

$$\check{g}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(\xi) e^{ix\xi} d\xi \quad (x \in \mathbb{R})$$

であり, Fourier 変換と同様に $L^2(\mathbb{R})$ における逆変換も定義する. Fourier 変換と逆 Fourier 変換は全単射な等長作用素であることに注意する.

ここで, $G(x) = e^{-\frac{1}{2}(x-a)^2}$ の Fourier 変換を求める.

$$\begin{aligned}\widehat{G}(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}(x-a)^2} e^{-ix\xi} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2} e^{-ia\xi} e^{-ix\xi} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ia\xi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}(x-i\xi)^2 + \frac{1}{2}\xi^2} dx \\ &= e^{-\frac{1}{2}\xi^2} e^{-ia\xi}\end{aligned}$$

となる. Fourier 変換は等長であるから

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-\frac{1}{2}(x-a)^2} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{f}(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} e^{ia\xi} d\xi = 0 \quad (a \in \mathbb{R})$$

となる. これは, $\widehat{f}(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ の逆 Fourier 変換が 0 であることを表している. ゆえに, $\widehat{f}(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = 0$ となるから, $\widehat{f} = 0$ となり, $f = 0$ が示された.

以上より, $\{h_k\}$ が $L^2(\mathbb{R})$ において完全であることが示された.

8 生成作用素と消滅作用素

$\{h_k\}$ が $L^2(\mathbb{R})$ の完全正規直交系であることが示されたため, H_n を H_{os} の固有値 E_n に対応する固有空間, つまり

$$\mathcal{H}_n = \{\alpha h_n \mid \alpha \in \mathbb{C}\}$$

とすると

$$L^2(\mathbb{R}) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_n$$

が成り立つ.

また, T^* は h_{n-1} を $\sqrt{k}h_k$ に写すことを考えると, \mathcal{H}_{n-1} から \mathcal{H}_n への線形作用素と考えることができる. この線形作用素は, 固有空間に対応するエネルギーの状態を 1 つ増やす働きがあるため, 生成作用素と呼ばれている. 一方, T は h_n を $\sqrt{n}h_{n-1}$ に写すことを考えると, \mathcal{H}_n から \mathcal{H}_{n-1} への線形作用素と考えることができる. この線形作用素は, 固有空間に対応するエネルギーの状態を 1 つ減らす働きがあるため, 消滅作用素と呼ばれている. 生成作用素と消滅作用素をあわせて, 昇降演算子または, 梯子演算子と呼ばれている.

参考文献

- [1] 新井 朝雄. ヒルベルト空間と量子力学, 共立出版, 改定増補版 2014.
- [2] G.B. Folland. *Real Analysis Modern Techniques and Their Applications*. A Wiley-Interscience Publication, Second edition, 1999.