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

$$\hat{a}^\dagger|0\rangle = \sqrt{1}\,|1\rangle \quad \Rightarrow \quad |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{1}}\hat{a}^\dagger|0\rangle$$

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

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：

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

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

$$\begin{aligned}
\langle n|\hat{O}|n\rangle &= \int dx\, \langle n|x\rangle \langle x|\hat{O}|n\rangle \quad \leftarrow (45) \\
&= \int dx\, \langle n|x\rangle \hat{O}_x \langle x|n\rangle \\
&= \int dx\, \phi_n^*(x)\hat{O}_x\phi_n(x) \quad \leftarrow \langle x|n\rangle = \phi_n(x) \\
&= (\phi_n, \hat{O}_x\phi_n)
\end{aligned} \tag{65}$$

$\hat{O}_x$ 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 (9) 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）

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

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

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

$\hat{n}$ 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 $n\pm1$ 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 $\hat{a}^\dagger$ の線形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

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

で得られるので、座標演算子 $\hat{x}$ の行列要素は

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

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：

$$\phi_n(x) : \begin{cases} x\text{ の偶関数} & n\text{ が偶数} \\ x\text{ の奇関数} & n\text{ が奇数} \end{cases}$$

$$\Rightarrow |\phi_n(x)|^2 : x\text{ の偶関数}$$

$$\Rightarrow x|\phi_n(x)|^2 : x\text{ の奇関数}$$

$$\Rightarrow -\infty\text{ から }+\infty\text{ で積分すると }0$$

$$\begin{aligned}\langle n|\,\hat{x}\,|n\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\langle n|x\rangle\,\langle x|\,\hat{x}\,|n\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \phi_n^*(x) x \phi_n(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ x|\phi_n(x)|^2 = 0\end{aligned}$$

補足：$\hat{x}^2$ などの計算では

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

の形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（補足A.2参照、符号に注意！）

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

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

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

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（補足A.5参照）

$$\int_{-\infty}^{\infty}dxe^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \tag{71}$$

を用いた。以上より、基底状態の波動関数は

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

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。