量子物理学特論

第9回

1次元調和振動子

- シュレディンガー方程式の厳密解を求められる，数少ない例のひとつ
- 古典力学において安定なつりあいは，ポテンシャルの最小値に対応する。ポテンシャルの最小値付近では，多くの場合，ポテンシャルを二次関数で近似することができる。
  - これはまさに調和振動子（単振動）のポテンシャル
- 電磁場をはじめとして，無限個の調和振動子からなる系とみなせる場合が数多く存在

1次元調和振動子

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

この場合のシュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\phi(x) = E\phi(x)$$

$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ という無次元の変数を定義すると，

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} + (\varepsilon - \xi^2)\phi = 0 \qquad \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

ξが大きい時，ξ²に比べてεを無視すると，

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} - \xi^2\phi = 0 \qquad \phi \sim \exp\left(\pm\frac{1}{2}\xi^2\right)$$

1次元調和振動子

ξ→∞で波動関数が有限になるためには，$\phi \sim \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right)$

$\phi(\xi) = H(\xi)\exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right)$としてもとの方程式に代入。

$$\frac{d^2 H(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH(\xi)}{d\xi} + (\varepsilon - 1)H(\xi) = 0$$

これを満たすHを求める。

$H(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$として上の式に代入し，係数を比較

$$(n+1)(n+2)a_{n+2} = (2n - \varepsilon + 1)a_n$$

1次元調和振動子

$$\phi(\xi) = H(\xi)\exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right)$$

$$H(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n \qquad (n+1)(n+2)a_{n+2} = (2n - \varepsilon + 1)a_n$$

ところで，nが大きい時には $a_{n+2} \simeq \dfrac{2}{n}a_n$ であるが

$\xi \to \infty$ においてこの無限級数は $H \sim \exp(\xi^2)$ となり

φ(ξ)がξ→∞で発散してしまう。

これを防ぐには，Hの級数が有限次で打ち切られなければならない。すなわち，あるnに対して，

$$2n - \varepsilon + 1 = 0$$

この時，$a_{n+2}, a_{n+4}, a_{n+6} \cdots$ が0になる。

1次元調和振動子

$$\phi(\xi) = H(\xi)\exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right)$$

$$H(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n \qquad (n+1)(n+2)a_{n+2} = (2n-\varepsilon+1)a_n$$

あるnに対して $2n-\varepsilon+1=0$

$\varepsilon = 2n+1$ これを満たすεのみが許される

$$E = \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1)$$ エネルギーの量子化

対応するHは $\dfrac{d^2H_n}{d\xi^2} - 2\xi\dfrac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0$ で決まる

H_n:n次のエルミート多項式という

量子力学の基本的性質

- ⭐ 量子力学的演算子の物理的意味を学ぶ
- ⭐ 線形なエルミート演算子を物理量に対応させる

物理量とエルミート演算子

- 量子力学では，測定される物理量に対応した演算子を用意する。

- 演算子を波動関数とその複素共役で挟んで，全空間で積分することで，物理量が期待値として得られる。

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d^3 r$$

物理量は実数であるから，$\langle A \rangle = \langle A \rangle^* \quad \langle A \rangle^* = \int (\hat{A}\psi)^* \hat{A} \psi d^3 r$

$$\int \psi^* \hat{A} \psi d^3 r = \int (\hat{A}\psi)^* \psi d^3 r$$ が必要

このような関係を満たす演算子をエルミート演算子という

例：運動量演算子

$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$ がエルミート演算子であることを確認する

$$\int \psi^* \hat{p} \psi d^3 r = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* \vec{\nabla} \psi d^3 r$$

部分積分して，表面項を落とす。

$$\frac{\hbar}{i} \int \psi^* \vec{\nabla} \psi d^3 r = -\frac{\hbar}{i} \int (\vec{\nabla} \psi^*) \psi d^3 r = \int \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi \right)^* \psi d^3 r$$

確かにエルミート演算子の定義を満たしている。

エルミート演算子の性質

ψ_1,ψ_2が2乗可積分な任意の関数であるとする。

$\psi = \psi_1 + \lambda\psi_2$ も2乗可積分。i.e. $\int \psi^* \psi d^3r$ が有限に収束

エルミート演算子に対して，

$$\int (\psi_1^* + \lambda^* \psi_2^*)\hat{A}(\psi_1 + \lambda\psi_2) d^3r = \int (\hat{A}\psi_1 + \lambda\hat{A}\psi_2)^* (\psi_1 + \lambda\psi_2) d^3r$$

また $\int \psi_i^* \hat{A}\psi_i d^3r = \int (\hat{A}\psi)^* \psi d^3r$ より

$$\lambda^* \boxed{\left[\int \psi_2^* \hat{A}\psi_1 d^3r - \int (\hat{A}\psi_2)^* \psi_1 d^3r\right]}$$

$$+ \lambda \boxed{\left[\int \psi_1^* \hat{A}\psi_2 d^3r - \int (\hat{A}\psi_1)^* \psi_2 d^3r\right]} = 0$$

両方とも0

が任意のλに対して成り立つ。

エルミート演算子の性質

以上から，次が成り立つ。

$$\int \psi_2^* \hat{A} \psi_1 d^3 r = \int (\hat{A}\psi_2)^* \psi_1 d^3 r$$

この関係式をエルミート演算子の定義式とすることも多い

線形代数の復習

エルミート行列： $A^\dagger = A$

$$A_{ij}^* = A_{ji} \overset{\text{対応}}{\longleftrightarrow} \int \psi_2^* \hat{A} \psi_1 d^3 r = \int (\hat{A}\psi_2)^* \psi_1 d^3 r$$

エルミート行列の固有値は実数になる

$$A = U \Lambda U^\dagger \qquad \Lambda_{ij} = \lambda_i \delta_{ij}$$

ユニタリー行列： $U^\dagger U = U U^\dagger = I$

固有値の絶対値は1

エルミート共役な演算子

任意の演算子$\hat{A}$に対して，

$$\int (\hat{A}\psi_2)^* \psi_1 d^3r = \int \psi_2^* \hat{A}^\dagger \psi_1 d^3r$$

を満たす$\hat{A}^\dagger$を$\hat{A}$に対するエルミート共役な演算子という

- 任意の演算子に対し，$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$
- 2つのエルミート演算子$\hat{A}$，$\hat{B}$が可換であれば，その積もエルミートである。
- 一般に，$\hat{A}$と$\hat{B}$が線形でエルミートな演算子であれば，

$$\frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}) \qquad i(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$$

も線形でエルミートである。

エルミート演算子の性質

エルミート演算子 $\hat{A}$

$$U = e^{i\hat{A}} = \hat{E} + i\hat{A} + \frac{(i\hat{A})^2}{2!} + \cdots + \frac{(i\hat{A})^n}{n!} + \cdots$$

恒等演算子

$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$　　　$(\hat{A}^n)^\dagger = (\hat{A}^\dagger)^n = \hat{A}^n$　だから

$$\begin{aligned} U^\dagger =& (e^{i\hat{A}})^\dagger = \hat{E} - i\hat{A} + \frac{(-i\hat{A})^2}{2!} + \cdots + \frac{(-i\hat{A})^n}{n!} + \cdots \\ =& e^{-i\hat{A}} \end{aligned}$$

すなわち，$U^\dagger U = 1$ であるので，Uはユニタリー。

エルミート演算子の固有値

物理量Aの測定における統計的分布のゆらぎを考える。

$$\Delta A = a - \langle A \rangle \xrightarrow[\text{演算子}]{} \Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle A \rangle$$

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle = \int \psi^*(\Delta\hat{A})(\Delta\hat{A})\psi d^3r$$

$$= \int ((\Delta\hat{A})\psi)^*(\Delta\hat{A})\psi d^3r = \int |(\hat{A} - \langle A)\psi|^2 d^3r \geq 0$$

偏差の2乗平均

ゆらぎがなく，Aの値がはっきり決まるのは，$(\hat{A} - \langle A \rangle)\psi = 0$

すなわち，　$\hat{A}\psi = a\psi$　の場合のみ。

エルミート演算子の固有値

$$\hat{A}\psi = a\psi$$

固有値

固有関数(固有ベクトル)

一般に，この関係が満たされるのは，物理量Aのある値に対してだけであり，その値は連続的な値の場合もあれば，とびとびの離散的な値の場合もある。

固有値全体のことを，対応する演算子のスペクトルとよぶ

固有値と量子数

固有値aに対応する固有関数をψ$_a$と書く

$$\hat{A}\psi = a\psi_a$$

固有値がとびとびの値を持つ場合であれば，i=1,2,...として

$$\hat{A}\psi = a_i\psi_i$$

のように番号づけをすることができる。

固有値と固有関数を決める整数iのことを量子数とよぶ。

物理量と演算子

$$\hat{A}\psi = a\psi_a$$

状態ψ$_a$で物理量Aを測定すると，確実にA=aという決まった値になる（ゆらぎはない）。
演算子のどの固有関数とも一致しない波動関数によって，状態が記述されている場合は，物理量Aの測定に対して，様々な値が得られるが，そのいずれも$\hat{A}$の固有値のどれかに必ず一致している。

離散スペクトル

1次元のシュレディンガー方程式を考える。

$$\hat{H}\phi_E(x) = E\phi_E(x)$$

次が成り立つ場合に注目する。 $\int \phi_E^*(x)\phi_E(x)dx < \infty$

Eの近傍E+δEに対する固有関数があったとすると，

$$\hat{H}\phi_{E+\delta E}(x) = (E+\delta E)\phi_{E+\delta E}(x)$$

$\phi_{E+\delta E}(x) = \phi_E(x) + \delta\phi_E(x)$ のように，微小量で展開する

$$\hat{H}\delta\phi_E(x) = \delta E\phi_E(x) + E\delta\phi_E(x)$$

左から $\phi_E^*(x)$ をかけて積分する。

離散スペクトル

$$\int \phi_E^*(x)\hat{H}\delta\phi_E(x)dx = \delta E \int \phi_E^*(x)\phi_E(x)dx + E \int \phi_E^*(x)\delta\phi_E(x)dx$$

$$\parallel$$

$$E \int \phi_E^*(x)\delta\phi_E(x)dx$$

ゆえに $\delta E \int \phi_E^*(x)\phi_E(x)dx = 0$ であり，

$\int \phi_E^*(x)\phi_E(x)dx < \infty$ の場合には $\delta E = 0$

つまり，Eの近傍には別な固有値は存在せず，スペクトルが離散的になる

固有関数の性質：離散スペクトルの場合

演算子$\hat{A}$ が縮退のない離散的スペクトルをもつ場合を考える

$$\hat{A}\phi_i = a_i\phi_i$$

演算子のエルミート性などから，このような場合の性質を調べる

性質1 固有値a_iは実数である

$$\int \phi_i^* \hat{A}\phi_i d^3r = a_i \int \phi_i^* \phi_i d^3r$$

演算子のエルミート性から両辺とも実数

固有関数の性質：離散スペクトルの場合

性質2 固有関数の直交規格化性

$$\hat{A}\phi_j = a_j\phi_j$$

$$\int (\hat{A}\phi_j)^*\phi_i d^3r - \int \phi_i^* \hat{A}\phi_j d^3r = \int \phi_j^* \hat{A}\phi_i d^3r - \int \phi_i^* \hat{A}\phi_j d^3r$$

$$= (a_i - a_j)\int \phi_i^*\phi_j d^3r \underset{\uparrow}{=} 0$$

エルミート性

$a_i \neq a_j$ の場合 $\displaystyle\int \phi_i^*\phi_j d^3r = 0$

これは，異なる固有値の固有関数が直交することを示す

$\displaystyle\int \phi_i^*\phi_i d^3r < \infty$ なので，$\displaystyle\int \phi_i^*\phi_i d^3r = 1$ と規格化すると

$$\int \phi_i^*\phi_j d^3r = \delta_{ij}$$

固有関数の性質：離散スペクトルの場合

固有値a_iの固有関数がn重に縮退する場合

$$\hat{A}\phi_{i\ell} = a_i \phi_{i\ell} \quad (\ell = 1, 2, \cdots, n)$$

一般には，これらn個の固有関数は互いに直交しない

しかし，適当な線形結合をとりなおすことで，n組の直交する固有関数のセットを作ることができる。

シュミットの直交化法にならう

固有関数の性質：離散スペクトルの場合

例として2重縮退の場合を考える。

$$\hat{A}\phi_{i1} = a_i\phi_{i1} \qquad \hat{A}\phi_{i2} = a_i\phi_{i2}$$

$$\int \phi_{i1}^*\phi_{i1}d^3r = \int \phi_{i2}^*\phi_{i2}d^3r = 1 \qquad \int \phi_{i1}^*\phi_{i2}d^3r = K \neq 0$$ とする

$$\phi_{i2}' = \frac{\phi_{i2} - K\phi_{i1}}{\sqrt{1+K^2}}$$ とすると，$$\int \phi_{i1}^*\phi_{i2}'d^3r = 0$$ 直交化できた！

$$\int \phi_{i2}'^*\phi_{i2}'d^3r = 1$$

この時，次の関係式も維持される。 $\hat{A}\phi_{i2}' = a_i\phi_{i2}'$

固有関数の性質：離散スペクトルの場合

性質3 直交規格化された固有関数による展開

演算子 $\hat{A}$ の固有関数全体が完全系をなしている場合，
任意の波動関数を次のように展開できる

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i \phi_i(\vec{r}) \qquad \hat{A}\phi_i = a_i \phi_i$$

直交規格化の条件より， $c_i = \displaystyle\int \phi_i^* \psi d^3 r$

ゆえに $\langle A \rangle = \displaystyle\sum_i a_i |c_i|^2 \qquad \int \psi^* \psi d^3 r = \sum_i |c_i|^2 = 1$

物理量Aの測定値としてa_iが得られる確率

固有関数の性質：離散スペクトルの場合

性質4 完全性について

固有値が実数であり，固有関数系が完全系をなす演算子を観測可能量という

任意の関数系を展開できる固有関数の組が揃っていること

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i \left[\int \phi_i(\vec{r}')^* \psi(\vec{r}') d^3 r' \right] \phi_i(\vec{r})$$

和と積分の順序を入れ替える

$$\psi(\vec{r}) = \int \psi(\vec{r}') \left[\sum_i \phi_i(\vec{r}) \phi_i^*(\vec{r}') \right] d^3 r'$$

固有関数の性質：離散スペクトルの場合

性質4 完全性について

$$\psi(\vec{r}) = \int \psi(\vec{r}') \left[\sum_i \phi_i(\vec{r}) \phi_i^*(\vec{r}') \right] d^3r'$$

比較 $\updownarrow$

$$\psi(\vec{r}) = \int \psi(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') d^3r'$$

ψは任意の関数であることに注意

$$\sum_i \phi_i(\vec{r}) \phi_i^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

固有関数の完全性を表す関係式