

§ 15 調和振動子の量子論

調和振動子の量子論について簡単に述べる。これは、分子振動や固体の格子振動を考える基礎ではあるが、1中心多電子系の問題ではない為に、これまで取り上げる機会がなかった。この問題は、Jeansの定理により「電磁場は無数の調和振動子と等価である」となることから、電磁場を量子論的に考えることにも直結する。光量子論では、電磁波としての光は $h\omega = hv$ のエネルギーをもつ光子 (photon, フォトン) として「粒子」的に理解される。これに対応して、調和振動子の量子論では、 $h\omega = hv$ を単位とするエネルギーを phonon (フォノン) として「粒子」的に解釈する。

(15-1) 調和振動子に対する Schrödinger 方程式

前節で議論したように、質量 m 、バネ定数 K の調和振動子の運動方程式は、

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -m\omega^2 x, \quad \omega = \sqrt{K/m} \quad (1)$$

である。この方程式の解は $x = q \cdot \cos(\omega t + \alpha)$ で、また、この調和振動子の全エネルギー (Hamiltonian, H_0) は、

$$H_0 = \frac{1}{2} m(\dot{x})^2 + \frac{1}{2} Kx^2 = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot x^2 \quad (2)$$

である。定常状態の Schrödinger 方程式を得るには、正準量子化の手続きに従い、

(2)の古典論 Hamiltonian で $p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ の置き換えを行い、Hamiltonian の演算子

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot x^2 \quad (3)$$

を得る。時間に依存しない定常状態の Schrödinger 方程式は、この Hamiltonian の演算子と、波動関数 (ψ)、エネルギー固有値 (E) により、

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (4)$$

で与えられる。即ち、調和振動子に対する定常状態の Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot x^2 \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad (5)$$

となる。自由度 1 の 1次元問題だから、偏微分は通常 of 微分で良いので、(5)は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot x^2 \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad (6)$$

となる．この Schrödinger 方程式を満足する波動関数 (ψ) とエネルギー固有値 (E) を求め，その結果を考えることが，調和振動子の量子論の内容である．

(6)の両辺 $-\hbar^2/(2m)$ で割り，移項することで書き換えると，

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left\{ \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) E - \frac{1}{\hbar^2} m^2 \cdot \omega^2 \cdot x^2 \right\} \psi(x) = 0 \quad (7)$$

となる．そこで，次のように無次元量の変数 ξ とパラメータ λ を使う：

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m \cdot \omega}{\hbar}} \cdot x = \sqrt{\alpha} \cdot x \quad (8)$$

$$\lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (9)$$

ξ と λ が無次元量であることは次のように確認できる．

$$[\xi] = [\sqrt{m\omega/\hbar} \cdot x] = \left[\left\{ \frac{M \cdot T^{-1}}{(MLT^{-2})LT} \right\}^{1/2} \cdot L \right] = \left[\frac{L}{L} \right] = [1]$$

$$[\lambda] = \left[\frac{2E}{\hbar\omega} \right] = \left[\frac{MLT^{-2}L}{(MLT^{-2})LT \cdot T^{-1}} \right] = [1]$$

(8)の形で変数 x を変更したので，

$$\psi(x) = \psi(\xi/\sqrt{\alpha}) = \phi(\xi) \quad (10)$$

と記す．また，

$$\frac{d}{dx} = \sqrt{\alpha} \frac{d}{d\xi}, \quad \frac{d^2}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} \right) = \sqrt{\alpha} \frac{d}{d\xi} \left(\sqrt{\alpha} \frac{d}{d\xi} \right) = \alpha \frac{d^2}{d\xi^2} \quad (11)$$

に注意する．以上の(8)~(11)を用いて(7)を書き直せば，

$$\frac{d^2\phi(\xi)}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\phi(\xi) = 0 \quad (12)$$

となる．これが調和振動子に対する波動方程式の具体形である．見かけは簡単な方程式に見えるが，実はなかなか厄介な方程式である．

(15-2) 漸近解の性質とその利用

(12)で $|\xi| \rightarrow \infty$ の条件を考えると，(12)での λ を無視する場合になる．即ち，

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} - \xi^2\phi = 0 \quad (13)$$

である．ただし， $\phi(\xi) = \phi$ と表記する．この解は， $\phi \propto \exp(c\xi^2)$ で与えられることは直ぐに判るので，ここでは $\phi = \exp(c\xi^2)$ とすると，

$$\frac{d\phi}{d\xi} = 2c\xi \cdot \exp(c\xi^2),$$

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} = 2c \cdot \exp(c\xi^2) + 4c^2\xi^2 \cdot \exp(c\xi^2) \approx 4c^2\xi^2 \cdot \exp(c\xi^2)$$

となる。第二式では、 $|\xi| \rightarrow \infty$ の条件から、 $2c \cdot \exp(c\xi^2) \ll 4c^2\xi^2 \cdot \exp(c\xi^2)$ として、第一項を無視する。これらの結果を(13)に代入すると、

$$4c^2\xi^2 \cdot \exp(c\xi^2) - \xi^2 \cdot \exp(c\xi^2) = (4c^2 - 1)\xi^2 \cdot \exp(c\xi^2) = 0 \quad (14)$$

となるので、 $c = \pm 1/2$ である。従って、(13)の解は $\phi = \exp(\pm \xi^2/2)$ となる。しかし、 $|\xi| \rightarrow \infty$ の条件で解を考えているので、 $\phi = \exp(+\xi^2/2)$ の方は、この条件で発散し、解に採用できない。しかし、 $\phi = \exp(-\xi^2/2)$ の方は、 $|\xi| \rightarrow \infty$ で、 $\phi = \exp(-\xi^2/2) = 1/\exp(+\xi^2/2) \rightarrow 0$ と収束するので、これは解となる。従って、

$$\phi \propto \exp(-\xi^2/2) \quad (15)$$

である。この解はあくまでも $|\xi| \rightarrow \infty$ の条件での解であるから、**漸近解**と呼ばれる。この漸近解を参考にして、元の(12)の解を、次の形

$$\phi = H(\xi) \cdot \exp(-\xi^2/2) \quad (16)$$

に置く。これを元の方程式(12)に代入し $H(\xi)$ を決める。(16)の一階、二階の微分を求めて、(12)に代入すれば良い。

$$\frac{d\phi}{d\xi} = H'(\xi) \cdot \exp(-\xi^2/2) - \xi \cdot H(\xi) \cdot \exp(-\xi^2/2)$$

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} = H''(\xi) \cdot \exp(-\xi^2/2) - \xi \cdot H'(\xi) \cdot \exp(-\xi^2/2)$$

$$-H(\xi) \cdot \exp(-\xi^2/2) - \xi \cdot H'(\xi) \cdot \exp(-\xi^2/2) + \xi^2 \cdot H(\xi) \cdot \exp(-\xi^2/2)$$

これらを方程式(12)に代入した結果は、

$$H'' - 2\xi H' + (\lambda - 1)H = 0 \quad (17)$$

となる。この微分方程式に対し**多項式の解**を仮定し、これを求めることにする。

(15-3) 多項式の解

(17)の解を次のような多項式を用いて求める。この多項式は、とりあえず、無限級数の形を取るものとする。

$$H(\xi) = c_0 + c_1\xi + c_2\xi^2 + c_3\xi^3 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi^n \quad (18)$$

この多項式(18)によって、 H', H'' を求めると、

$$H'(\xi) = c_1 + 2c_2\xi + 3c_3\xi^2 + \cdots = \sum_{n=1}^{\infty} n \cdot c_n \cdot \xi^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} n \cdot c_n \cdot \xi^{n-1} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} H''(\xi) &= 2 \cdot c_2 + 3 \cdot 2 \cdot c_3\xi + 4 \cdot 3 \cdot c_4\xi^2 + \cdots = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)c_n\xi^{n-2} \\ &= \sum_{s=0}^{\infty} (s+2)(s+1)c_{s+2}\xi^s = \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1)c_{n+2}\xi^n \end{aligned} \quad (20)$$

(18), (19), (20)を(17)の $H(\xi)$ に関する微分方程式に代入すると,

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1)c_{n+2}\xi^n - 2 \sum_{n=0}^{\infty} n \cdot c_n \cdot \xi^n + (\lambda-1) \sum_{n=0}^{\infty} c_n \xi^n = 0$$

となるので, 一つにまとめると,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \{(n+2)(n+1)c_{n+2} - 2n \cdot c_n + (\lambda-1)c_n\} \xi^n = 0 \quad (21)$$

となる. これが任意の ξ について成立する為には, ξ^n の係数が0でなければならない. この条件から, 仮定した多項式の係数は次の条件を満たす必要がある.

$$c_{n+2} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+2)(n+1)} \cdot c_n \quad (22)$$

これは一つおきに展開係数を定める漸化式である. $c_0(\neq 0)$ を与えた場合は, $(c_0, c_2, c_4, c_6, \cdots)$ の偶数番目の係数が順次決まる. 奇数番目の係数 $(c_1, c_3, c_5, c_7, \cdots)$ を決めるには, $c_1(\neq 0)$ を与える. $H(\xi)$ を多項式に展開した場合の係数は, 偶数項と奇数項で別々に与えられる.

(16) $\phi = H(\xi) \cdot \exp(-\xi^2/2)$ に戻って考えると, 方程式(12)の解は

$$\phi = H(\xi) \cdot \exp(-\xi^2/2) = \exp(-\xi^2/2) \sum_{l=0}^{\infty} c_{2l} \xi^{2l} \quad (\text{偶数項}) \quad (23)$$

$$= \exp(-\xi^2/2) \sum_{l=0}^{\infty} c_{2l+1} \xi^{2l+1} \quad (\text{奇数項}) \quad (24)$$

の2種類に分離したものとして得られる. しかし, 次に述べるように, このような無限級数の多項式は $|\xi| \rightarrow \infty$ で発散するので, このままの無限多項式は適切な波動関数とは出来ない. 有限多項式とする必要がある. この条件は, 同時に, 離散的エネルギーが得られる条件でもある. §A5で述べたラゲール (Laguerre) の多項式と類似の状況となる.

(15-4) 有限多項式による波動関数と離散的エネルギー固有値

無限多項式の解(23)と(24)が、 $|\xi| \rightarrow \infty$ でどのような値を取るか吟味する必要がある。 $H(\xi)$ を無限多項式で表現した為この吟味が必要である。 解(23)と(24)は偶数項と奇数項に分離しているが、 $l \rightarrow \infty$ での ξ^{2l} , ξ^{2l+1} を含んでいるので、 $|\xi| \rightarrow \infty$ で $\phi = H(\xi) \cdot \exp(-\xi^2/2)$ がどのような値になるかを調べる。 (22)の漸化式から、大きな n のもとでの隣接項の係数比を求めると、

$$\frac{c_{n+2}}{c_n} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+2)(n+1)} \approx \frac{2n}{n^2} = \frac{2}{n} \quad (25)$$

となる。 この隣接項の係数比を $\exp(\xi^2)$ の場合と比べてみる。 $\exp(x) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{x^m}{m!}$ だから、

$$\exp(\xi^2) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\xi^{2m}}{m!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi^n}{(n/2)!}$$

と書ける。 第二の等号では $2m=n$ と置いているので、 n は偶数である。 この級数の $n \rightarrow \infty$ での n 番目項 $\frac{\xi^n}{[n/2]!}$ と次の $(n+2)$ 番目項 $\frac{\xi^{n+2}}{[(n+2)/2]!}$ の係数比を求めると、

$$\begin{aligned} \frac{1}{[(n+2)/2]!} / \frac{1}{[n/2]!} &= \frac{(n/2)!}{[(n+2)/2]!} \\ &= \frac{(n/2)(n/2-1)(n/2-2) \cdots}{(n/2+1)(n/2)(n/2-1)(n/2-2) \cdots} = \frac{1}{(n/2+1)} \approx \frac{2}{n} \end{aligned} \quad (26)$$

となる。 無限多項式の解(23)と(24)での隣接項の係数比は、 $\exp(\xi^2)$ の場合と同じになることが判る。 $\exp(\xi^2)$ は $|\xi| \rightarrow \infty$ で発散するので、無限多項式の解(23)と(24)も、 $|\xi| \rightarrow \infty$ で発散するとの結論になる。 $H(\xi)$ を無限多項式としたことが良くない訳である。

そこで(22)の係数の条件式に戻って考えると、

$$c_{n+2} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+2)(n+1)} \cdot c_n \quad (22)$$

において、 $2n+1-\lambda=0$ なら、 $H(\xi)$ は有限の多項式となることが判る。 即ち、

$$\lambda = 2n+1 \quad (n=0, 1, 2, 3, \dots) \quad (27)$$

が成立すると、(22)の漸化式により、 c_n の n 超える項の係数は全て 0 となる。

$$c_{n+2} = c_{n+4} = \cdots = 0 \quad (28)$$

(27)の条件があると $H(\xi)$ は有限多項式となる。 解(23)と(24)でも $H(\xi)$ はこの有限

多項式であるとする、解は $|\xi| \rightarrow \infty$ で発散せず、意味のある波動関数となる。

$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$ (9)であったから、 $2n+1-\lambda=0$ の条件は、

$$E = \frac{1}{2}\lambda\hbar\omega = \frac{1}{2}(2n+1)\hbar\omega = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega = (n + \frac{1}{2})h\nu \quad (29)$$

である。 $H(\xi)$ が有限多項式になることは、定常状態のエネルギー(E)が量子数 $n=0, 1, 2, 3, \dots$ に対応して離散的な値(E_n)を持つことを意味する。量子論の原則に対応する。従って、エネルギー固有値は

$$E = E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad (n=0, 1, 2, 3, \dots) \quad (30)$$

であり、 $E_{n+1} - E_n = \hbar\omega = h\nu$ である。隣り合うエネルギー準位の差は常に一定である。 $n=0$ に対しては、 $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}h\nu$ となるが、これは**零点エネルギー**と呼ばれる。

この正のエネルギーを持つ状態が**基底状態**である。(30)のエネルギー固有値に対応する固有関数 $\phi = H(\xi) \cdot \exp(-\xi^2/2)$ は、

$$\phi_n = \exp(-\xi^2/2) \cdot (c_0 + c_2\xi^2 + c_4\xi^4 + \dots + c_n\xi^n) \quad n=\text{偶数} \quad (31)$$

$$\phi_n = \exp(-\xi^2/2) \cdot (c_1\xi + c_3\xi^3 + c_5\xi^5 + \dots + c_n\xi^n) \quad n=\text{奇数} \quad (32)$$

である。有限多項式 $H(\xi)$ は ξ の n 次の多項式なので、 $H(\xi) \rightarrow H_n(\xi)$ と n を付して

$$\phi_n = H_n(\xi) \cdot \exp(-\xi^2/2) \quad (33)$$

と記すことができる。 $H_n(\xi)$ 自体は**エルミット (Hermite) の多項式**と呼ばれる。元々は、この多項式は、(17)の微分方程式 $H'' - 2\xi H' + (\lambda - 1)H = 0$ を満足するので、 $2n+1-\lambda=0$ の量子条件を(17)に代入すると、

$$H'' - 2\xi H' + 2nH = 0$$

である。 $H(\xi)$ は ξ の n 次の多項式で、 $H(\xi) \rightarrow H_n(\xi)$ と n を付したから、この H に関する微分方程式も、

$$\frac{\partial^2 H_n(\xi)}{\partial \xi^2} - 2\xi \frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi} + 2nH_n(\xi) = 0 \quad (34)$$

となる。(34)は、**エルミット (Hermite) の多項式**を解とする微分方程式であるから、**エルミットの微分方程式**と呼ばれる。§5で議論したラゲール (Laguerre) の多項式は、ラゲールの微分方程式の解であったが、これと類似の状況にある。

量子数 $n=0, 1, 2, 3, \dots$ に対応してエネルギー固有値と固有関数が決まるが、(31), (32), (33)の固有関数には規格化定数が付されていないことに注意。量子論

での固有関数は規格化された直交関数系でなければならない。§5で、ラゲール (Laguerre) の多項式の母関数、直交性、規格化積分について議論したように、エルミット (Hermite) の多項式についても同様な議論が必要となる。次節以降でこれを考えるよう。

(15-5) Hermite の多項式と調和振動子の波動関数

元々の Schrödinger 方程式 $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left\{ \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) E - \frac{1}{\hbar^2} m^2 \cdot \omega^2 \cdot x^2 \right\} \psi(x) = 0$ (7) の解

としての波動関数は, $\xi \equiv \sqrt{\frac{m \cdot \omega}{\hbar}} \cdot x = \sqrt{\alpha} \cdot x$ (8) と変数変換し, エルミット多

項式 $H_n(\xi)$ と規格化定数 A_n を用い, $\psi(x) = A_n \cdot \exp(-\xi^2/2) \cdot H_n(\xi)$ (34) と表現さ

れる. 規格化定数 A_n は規格化積分 $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = 1$ から決める. $\psi_n^*(x)$ は $\psi_n(x)$

の複素共役数であるが, この場合, $\psi_n(x)$ は実数だから

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} [\psi_n(x)]^2 dx = 1 \quad (35)$$

である. 規格化定数 A_n を定めるには, エルミット多項式の性質についてさらに議論する必要がある.

(5-1) エルミット多項式の母関数とエルミットの微分方程式

エルミット多項式は, 以下の母関数 $S(\xi, s)$ を用いて定義できる.

$$S(\xi, s) = e^{\xi^2 - (s-\xi)^2} = e^{-s^2 + 2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} \cdot s^n \quad (36)$$

この等式が成り立つことは後に述べるので, ここではとりあえず, 等式は成立するとして, この定義式を受け入れよう. そして, $S(\xi, s)$ を微分した結果から, $H_n(\xi)$ の微分方程式が得られることを確認しよう.

< $\partial S(\xi, s) / \partial s$: s による微分 >

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(\xi, s)}{\partial s} &= (-2s + 2\xi) e^{(-s^2 + 2s\xi)} = (-2s + 2\xi) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} \cdot s^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (-2s + 2\xi) \cdot s^n \cdot \frac{H_n(\xi)}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{(-2s^{n+1})}{n!} H_n(\xi) + \frac{2\xi s^n}{n!} H_n(\xi) \right] \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{(n-1)!} \cdot s^{n-1} \end{aligned} \quad (37)$$

1, 2 行目の等式は, $e^{-s^2 + 2s\xi}$ を s で微分し, $e^{-s^2 + 2s\xi}$ 自体を(36)の最後の級数で置き換えた結果である. 一方, 3 行目の等式は(36)の最後の級数を直接微分した結果である. 母関数の定義式によれば両者は等しいから,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{(-2s^{n+1})}{n!} H_n(\xi) + \frac{2\xi s^n}{n!} H_n(\xi) \right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{(n-1)!} \cdot s^{n-1}$$

である。この式で s^n の係数を左辺と右辺で比べると、次の等式が成立せねばならない。左辺での s^n の係数は、第一項では $(n-1)$ の項、第二項では n の項できまり、右辺では $(n+1)$ の項が決めるので、

$$\frac{-2}{(n-1)!} H_{n-1} + \frac{2\xi}{n!} H_n = \frac{1}{n!} H_{n+1}$$

である。両辺に $n!$ を掛けて整理し、次の漸化式を得る。

$$H_{n+1} = 2\xi H_n - 2nH_{n-1} \quad (38)$$

< $\partial S(\xi, s) / \partial \xi$: ξ による微分 >

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(\xi, s)}{\partial \xi} &= 2s e^{(-s^2 + 2s\xi)} = 2s \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} \cdot s^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} \cdot 2s^{n+1} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \cdot \frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi} \end{aligned}$$

1行目の等式は、 $e^{-s^2 + 2s\xi}$ を ξ で偏微分し、残りの $e^{-s^2 + 2s\xi}$ を(36)の最後の級数で置き換えた結果。二行目は(36)の最後の級数自体を ξ で偏微分した結果である。両者は等しい訳だから

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} \cdot 2s^{n+1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \cdot \frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi}$$

である。前回と同様に、この等式で s^n の係数を左辺と右辺で比べると、次の等式が成立せねばならない。

$$\frac{2}{(n-1)!} H_{n-1}(\xi) = \frac{1}{n!} \frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi}$$

整理して、

$$\frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi} = 2nH_{n-1}(\xi) \quad (39)$$

である。

< $\partial S(\xi, s) / \partial s$ と $\partial S(\xi, s) / \partial \xi$ の結合 : エルミットの微分方程式 >

母関数の偏微分から得られた上記の(38)と(39)を結合することで、エルミットの微分方程式が得られる。(39)右辺に、(38)の等式 $H_{n+1} = 2\xi H_n - 2nH_{n-1}$ を、

$2nH_{n-1} = 2\xi H_n - H_{n+1}$ として代入すると,

$$\frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi} = 2\xi H_n - H_{n+1}$$

となる. この式を ξ でもう一回微分して,

$$\frac{\partial^2 H_n(\xi)}{\partial \xi^2} = 2H_n(\xi) + 2\xi \frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi} - \frac{\partial H_{n+1}(\xi)}{\partial \xi} \quad (40)$$

となる. 右辺の最後の項には, (39)で $n \rightarrow (n+1)$ とした場合の関係式,

$$\frac{\partial H_{n+1}(\xi)}{\partial \xi} = 2(n+1)H_n(\xi)$$

を代入して,

$$\frac{\partial^2 H_n(\xi)}{\partial \xi^2} = 2\xi \frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi} - 2n \cdot H_n(\xi) \quad (41)$$

となるが, 移項すると,

$$\frac{\partial^2 H_n(\xi)}{\partial \xi^2} - 2\xi \frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi} + 2n \cdot H_n(\xi) = 0 \quad (42)$$

である. これは (34)式のエルミットの微分方程式に他ならない. このように, (36)の母関数 $S(\xi, s)$ は, (34)式のエルミットの微分方程式を導く. また同時に, 母関数 $S(\xi, s)$ の定義式は $H_n(\xi)$ 自体の表現式も与える. これを次ぎに確認しよう.

(5-2) エルミット多項式の直接表現

母関数 $S(\xi, s)$ の定義式(36)から $H_n(\xi)$ の直接表現も与えられる.

$$S(\xi, s) = e^{\xi^2 - (s-\xi)^2} = e^{-s^2 + 2\xi s} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} \cdot s^n \quad (36)$$

この定義式をよく見ると, これは, $S(\xi, s) = e^{\xi^2 - (s-\xi)^2} = e^{-s^2 + 2\xi s}$ を s の関数として, $s=0$ でマクローリン展開 (テーラー展開) したものであることが判る. $f(x)$ の $x=0$ での微分係数を用いて, $f(x)$ を冪級数に展開した式,

$$f(x) = f(0) + f'(0) \cdot x + \frac{f''(0)}{2!} \cdot x^2 + \frac{f'''(0)}{3!} \cdot x^3 + \dots$$

は頻繁に使われる近似式である. この一般項は $\left(\frac{d^n f}{dx^n} \right)_{x=0} \cdot \frac{x^n}{n!}$ であるから, $f(x)$ の

級数展開式は

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{d^n f}{dx^n} \right)_{x=0} \cdot \frac{x^n}{n!}$$

である。これと(36)を比べれば、(36)の $H_n(\xi)$ は、マクローリン級数の各項に付帯している「 $x=0$ における微分係数」に相当する。故に、

$$H_n(\xi) = \left. \frac{\partial^n S(s, \xi)}{\partial s^n} \right|_{s=0} = \left. \frac{\partial^n [e^{\xi^2 - (s-\xi)^2}]}{\partial s^n} \right|_{s=0} = e^{\xi^2} \left. \frac{\partial^n [e^{-(s-\xi)^2}]}{\partial s^n} \right|_{s=0} \quad (43)$$

である。最後の表現について、 $s=0$ に固定する前の $\frac{\partial^n}{\partial s^n} [e^{-(s-\xi)^2}]$ を考える。その

際、次の点に留意する。 $(s-\xi)$ の任意の関数 $g(s-\xi)$ を考えると、
 $\frac{\partial}{\partial s} g(s-\xi) = -\frac{\partial}{\partial \xi} g(s-\xi)$ である。これは次の偏微分の合成則から了解できる：

$$\frac{\partial g(s-\xi)}{\partial s} = \frac{\partial g(s-\xi)}{\partial (s-\xi)} \cdot \frac{\partial (s-\xi)}{\partial s} = g', \quad \frac{\partial g(s-\xi)}{\partial \xi} = \frac{\partial g(s-\xi)}{\partial (s-\xi)} \cdot \frac{\partial (s-\xi)}{\partial \xi} = g' \cdot (-1)$$

従って、この偏微分を n 回繰り返すと、

$$\frac{\partial}{\partial s} = -\frac{\partial}{\partial \xi} \rightarrow \frac{\partial^n}{\partial s^n} = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \xi^n}$$

である。これより、

$$\frac{\partial^n}{\partial s^n} [e^{-(s-\xi)^2}] = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} [e^{-(s-\xi)^2}]$$

である。(43)に戻れば、 $s=0$ とするので、

$$H_n(\xi) = e^{\xi^2} \left. \frac{\partial^n}{\partial s^n} [e^{-(s-\xi)^2}] \right|_{s=0} = (-1)^n e^{\xi^2} \left. \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} [e^{-(s-\xi)^2}] \right|_{s=0} = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-\xi^2}$$

となる。従って、エルミット多項式は次式の通り直接表現できる：

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-\xi^2} \quad (44)$$

(44)からエルミット多項式は具体的に決まる。ただし、(44)を使うのは $n=0$ と $n=1$ の場合だけとし、 $n \geq 2$ の $H_n(\xi)$ を求めるには、漸化式 $H_{n+1} = 2\xi H_n - 2nH_{n-1}$ (38) を使う方が簡単である。以下に $n=0 \sim 6$ の $H_n(\xi)$ を記す。

$$n=0 \quad H_0(\xi) = e^{\xi^2} \cdot e^{-\xi^2} = 1 \quad (45-0)$$

$$n=1 \quad H_1(\xi) = (-1)e^{\xi^2} (-2\xi)e^{-\xi^2} = 2\xi, \quad (45-1)$$

$$n=2 \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2 \quad (45-2)$$

$$n=3 \quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi \quad (45-3)$$

$$n=4 \quad H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12 \quad (45-4)$$

$$n=5 \quad H_5(\xi) = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi \quad (45-5)$$

$$n=6 \quad H_6(\xi) = 64\xi^6 - 480\xi^4 + 720\xi^2 - 120 \quad (45-6)$$

(5-3) エルミット多項式による波動関数の直交性と規格化積分

この問題は、次の二つの母関数の表現式、

$$S(\xi, s) = e^{\xi^2 - (s-\xi)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} \cdot s^n \quad (36)$$

$$T(\xi, t) = e^{\xi^2 - (t-\xi)^2} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{H_m(\xi)}{m!} \cdot t^m \quad (46)$$

を使って考える。(36)は既に使用したものである。二つの母関数の積に $e^{-\xi^2}$ を掛けたものを $(-\infty, +\infty)$ で積分してみる。 $e^{-\xi^2} = e^{-\xi^2/2} \cdot e^{-\xi^2/2}$ を掛けるのは、波動関数は $\psi_n = A_n e^{-\xi^2/2} \cdot H_n(\xi)$, $\psi_m = A_m e^{-\xi^2/2} \cdot H_m(\xi)$ なので、これらの積は $A_n A_m e^{-\xi^2} \cdot H_n(\xi) \cdot H_m(\xi)$ となること、即ち、二つの母関数の積に $e^{-\xi^2}$ を掛けるのは、二つの波動関数の積の $(-\infty, +\infty)$ での積分を考えたいからである。ただし、 $A_n A_m$ の係数は除外して考える。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} S(\xi, s) \cdot T(\xi, t) \cdot e^{-\xi^2} d\xi &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} s^n t^m \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{H_n(\xi) H_m(\xi)}{n! m!} e^{-\xi^2} d\xi \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2 - t^2 + 2s\xi + 2t\xi - \xi^2} d\xi = e^{2st} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\xi - s - t)^2} d(\xi - s - t) = e^{2st} \cdot \sqrt{\pi} \end{aligned} \quad (47)$$

$\sqrt{\pi}$ は、ガウス積分 $I = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-x^2) dx = \sqrt{\pi}$ による。 e^{2st} を級数展開すると、

$$e^{2st} = 1 + \frac{2st}{1!} + \frac{2^2 s^2 t^2}{2!} + \cdots + \frac{2^n s^n t^n}{n!} + \cdots$$

だから、

$$\sqrt{\pi} \cdot e^{2st} = \sqrt{\pi} \cdot \left(1 + \frac{2st}{1!} + \frac{2^2 s^2 t^2}{2!} + \cdots + \frac{2^n s^n t^n}{n!} + \cdots \right) \quad (48)$$

である。(47)の第二の表現と $\sqrt{\pi} \cdot e^{2st}$ は等しい訳だから、

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} s^n t^m \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{H_n(\xi) H_m(\xi)}{n! m!} e^{-\xi^2} d\xi \\ = \sqrt{\pi} \cdot \left(1 + \frac{2st}{1!} + \frac{2^2 s^2 t^2}{2!} + \cdots + \frac{2^n s^n t^n}{n!} + \cdots \right) \end{aligned} \quad (49)$$

である。(49)の等式の左右で $s^n t^m$ の項を比べると、右辺側には $(n = m)$ である $s^n t^n$ の項しか存在しない。これは、左辺では $(n \neq m)$ の $s^n t^m$ の係数は全てゼロあることを意味する。即ち、 $(n \neq m)$ では、

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{H_n(\xi)H_m(\xi)}{n!m!} e^{-\xi^2} d\xi = 0$$

であり、これは

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi)e^{-\xi^2/2} \cdot H_m(\xi)e^{-\xi^2/2} d\xi = 0 \quad (n \neq m) \quad (50)$$

を意味する。従って、 $\phi_n \propto e^{-\xi^2/2} \cdot H_n(\xi)$ は直交関数系をなす。 $H_n(\xi)$ 自体が直交関数系をなす訳ではないことに注意。

$(n = m)$ の場合、(49)の右辺と左辺で $s^n t^n$ の係数について比べると

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{H_n(\xi)H_m(\xi)}{n!m!} e^{-\xi^2} d\xi = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{H_n(\xi)H_n(\xi)}{n!n!} e^{-\xi^2} d\xi = \frac{2^n}{n!} \sqrt{\pi} \quad (51)$$

となる。第二の等式は

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi)e^{-\xi^2/2} \cdot H_m(\xi)e^{-\xi^2/2} d\xi = \sqrt{\pi} \cdot 2^n \cdot n! \quad (n = m) \quad (52)$$

を意味する。二つの母関数を使う手法は後に議論する選択則の問題でも重要である。

調和振動子に対する Schrödinger 方程式、

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left\{ \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) E - \frac{1}{\hbar^2} m^2 \cdot \omega^2 \cdot x^2 \right\} \psi(x) = 0 \quad (7)$$

の解としての波動関数は、 $\xi \equiv \sqrt{\frac{m \cdot \omega}{\hbar}} \cdot x = \sqrt{\alpha} \cdot x$ (8) として元々の変数 x を ξ に

変更し、 $H_n(\xi)$ と規格化定数 A_n を用いて、

$$\psi_n(x) = A_n \cdot \exp(-\xi^2/2) \cdot H_n(\xi) \quad (34)$$

と表現されるので、規格化積分は、

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} [\psi_n(x)]^2 dx = \left(\frac{1}{\sqrt{\alpha}} \right) (A_n)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\xi^2) \cdot [H_n(\xi)]^2 d\xi = 1$$

となる。因子 $1/\sqrt{\alpha}$ は、(8)の変数変更に由来する： $d\xi = \sqrt{\alpha} \cdot dx \rightarrow dx = (1/\sqrt{\alpha})d\xi$ 。規格化積分は変数を x として行わねばならない。従って、(52)の結果を使うと

$$\frac{1}{\sqrt{\alpha}} (A_n)^2 \cdot \sqrt{\pi} \cdot 2^n \cdot n! = 1$$

となるので、これより規格化定数 A_n は、

$$A_n = \left(\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \cdot \frac{1}{2^n \cdot n!} \right)^{1/2} \quad (53)$$

となる。ただし、 $\alpha = m \cdot \omega / \hbar$ である。

以上のようにして、(7)の Schrödinger 方程式の解である波動関数、即ち、量子数 n のエネルギー固有値 $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$) に属する固有関数

$\psi_n(x)$ は、 $\alpha = m \cdot \omega / \hbar$ として、

$$\psi_n(x) = \left(\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \cdot \frac{1}{2^n \cdot n!} \right)^{1/2} \cdot \exp[-\alpha x^2 / 2] \cdot H_n(\sqrt{\alpha} \cdot x) \quad (54)$$

となる。規格化定数は、

$$\left(\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \cdot \frac{1}{2^n \cdot n!} \right)^{1/2} = \sqrt{\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!}}} = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}} \cdot (2^n \cdot n!)^{-1/2}$$

のように、幾つかの形で表現できる。

固有関数 $\psi_n(x)$ を、 $n=0, 1, 2, 3$ について具体的に記せば、

$$\psi_0 = (\alpha/\pi)^{1/4} \cdot \exp(-\alpha x^2 / 2) \quad (55-0)$$

$$\psi_1 = (\alpha/\pi)^{1/4} \cdot (1/2)^{1/2} \cdot \exp(-\alpha x^2 / 2) \cdot 2\sqrt{\alpha} \cdot x \quad (55-1)$$

$$\psi_2 = (\alpha/\pi)^{1/4} \cdot (1/8)^{1/2} \cdot \exp(-\alpha x^2 / 2) \cdot (4\alpha x^2 - 2) \quad (55-2)$$

$$\psi_3 = (\alpha/\pi)^{1/4} \cdot (1/48)^{1/2} \cdot \exp(-\alpha x^2 / 2) \cdot [8(\sqrt{\alpha} \cdot x)^3 - 12\sqrt{\alpha} \cdot x] \quad (55-3)$$

である。固有関数 $\psi_n(x)$ の n が偶数か奇数かは、 $\psi_n(x)$ が偶関数か奇関数かに対応している。図 15-1 は、調和振動子のエネルギーと固有関数を $n=0 \sim 5$ について示す。あわせて、古典論での放物線のポテンシャル曲線も示している。

図 15-1 では、 $\alpha=1$ とした場合の波動関数 $\psi_n(x)$ の値を、座標原点(0, 0)を(0, $n+1/2$)に移し、 $\psi_n(x)$ の変動を 10 倍して図示している。 n の偶奇によって、 $\psi_n(x)$ の形状が偶関数、奇関数となることが判る。固有関数 $\psi_n(x)$ と各水平線が交わる点では、 $\psi_n(x) = 0$ である。両端の間で固有関数が 0 となる点は n 個ある。これは n の偶奇に依らない。固有関数の値が、古典論的エネルギーの放物線の外側でも 0 ではない。少しはみ出すことに注意。「はみ出し」の相対的な範囲は、 $n=0$ ではかなり大きい、 n が増加するにつれて小さくなる。 $n \rightarrow \infty$ でゼロとなることが予想できる。 $n \rightarrow \infty$ では量子論の結果は古典論と矛盾しないが、 $n \rightarrow 0$ ではそうではないことを表す。

$E/[\omega\hbar/(2\pi)]$

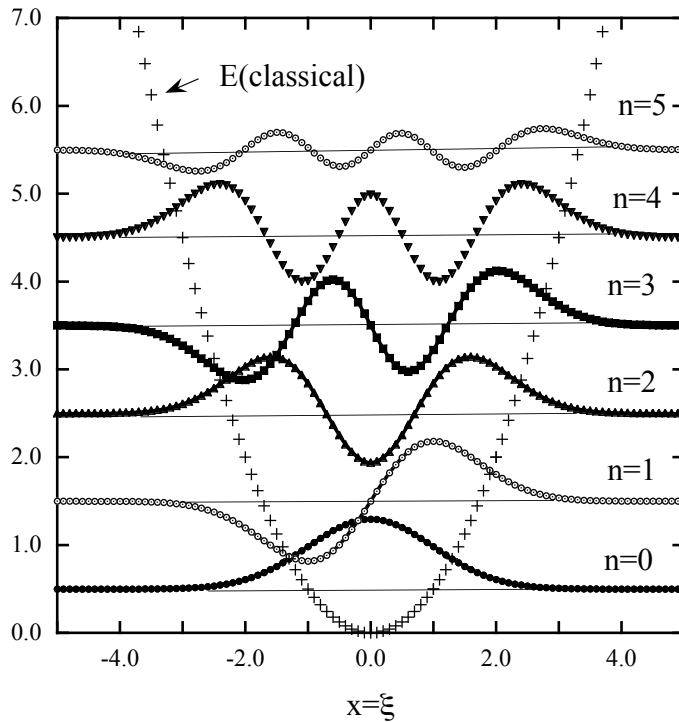


図 15-1. 調和振動子のエネルギーと固有関数. $x=\xi$ ($\alpha=1$)として計算している. 古典論のポテンシャルエネルギー (放物線) と量子化されたエネルギー (水平線) を示す. ただし, 縦軸は $E/(\hbar\omega) = E/(h/2\pi)\omega$ として示す. 固有関数 $\psi_n(x)$ は, $\psi_n(x)=0$ を $E/(\hbar\omega)$ に移動させ, その後で $10 \times \psi_n(x)$ の値をプロットしている.

偶関数か奇関数かの特性は, 別の表現をすれば, 固有関数 $\psi_n(x)$ は空間反転 $x \rightarrow (-x)$ に対し,

$$\psi_n(-x) = (-1)^n \cdot \psi_n(x) \quad (56)$$

の対称性があるとも言える. この種の固有関数 $\psi_n(x)$ の対称性は偶奇性 (parity, パリティ) と呼ばれる. 即ち,

$$n=\text{偶数の時 } \psi_n(-x) = \psi_n(x) \quad \rightarrow \quad \text{偶奇性 (parity): } + \text{ (プラス)}$$

$$n=\text{奇数の時: } \psi_n(-x) = -\psi_n(x) \quad \rightarrow \quad \text{偶奇性 (parity): } - \text{ (マイナス)}$$

エネルギー順位 $E_n = (n + 1/2)\omega\hbar$ の固有関数 $\psi_n(x)$ と隣接するエネルギー順位 $E_{n\pm 1} = [(n \pm 1) + 1/2]\omega\hbar$ の固有関数 $\psi_{n\pm 1}(x)$ は, 偶奇性 (parity) が異なる.

調和振動子は 1 次元の問題であるから, 空間反転は $x \rightarrow (-x)$ であるが, 一般的な空間反転は $(x, y, z) \rightarrow (-x, -y, -z)$ とすることである. これは右手系の座標系を左手系の座標系に変換する. 偶奇性 (parity) の問題は, 選択則 (selection rules) の問題に関連して後に議論する.

(15-6) 演算子の代数的関係に基づく調和振動子の量子論

調和振動子の量子論は、生成・消滅演算子の代数的関係からも議論できる。母関数を使う議論よりも簡単である。後の光子の議論にも関係し重要である。

(6-1) 調和振動子系での“昇・降”演算子

前節では、Schrödinger 方程式 $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 \cdot x^2 \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$ (6)から、

量子数 n のエネルギー固有値 $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$)に属する固有関

数 $\psi_n(x)$ は、 $\alpha = m \cdot \omega / \hbar$ として、

$$\psi_n(x) = \left(\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \cdot \frac{1}{2^n \cdot n!}\right)^{1/2} \cdot \exp[-\alpha x^2 / 2] \cdot H_n(\sqrt{\alpha} \cdot x) \quad (54)$$

となった。固有関数 $\psi_n(x)$ は規格化された直交関数系をなす。しかし、以下では変数を $\xi = \sqrt{\alpha} \cdot x = \sqrt{m\omega/\hbar} \cdot x$ に戻し、エルミート多項式の引数となっている $\sqrt{\alpha} \cdot x$ を ξ として使う。 $x = (1/\sqrt{\alpha})\xi$ を(54)の左右に代入し、左辺側を $\psi_n(\xi/\sqrt{\alpha}) = \phi_n(\xi)$ と記すと、

$$\phi_n(\xi) = \sqrt[4]{\alpha/\pi} \cdot \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!}} \cdot e^{-\xi^2/2} \cdot H_n(\xi)$$

である。これより $H_n(\xi)$ を $\phi_n(\xi)$ の関数として表すと、

$$H_n(\xi) = \sqrt[4]{\pi/\alpha} \cdot \sqrt{2^n \cdot n!} \cdot e^{\xi^2/2} \cdot \phi_n(\xi) \quad (57)$$

となるが、この表現を、既に得ている $H_n(\xi)$ に関する漸化式、

$$H_{n+1} = 2\xi H_n - 2n H_{n-1} \quad (38)$$

$$\frac{\partial H_n(\xi)}{\partial \xi} = 2n H_{n-1}(\xi) \quad (39)$$

に代入すると、 $\phi_n(\xi)$ に関する漸化式が得られる。

(57)を(38)に代入すると、

$$\xi \cdot \phi_n = \sqrt{\frac{n}{2}} \cdot \phi_{n-1} + \sqrt{\frac{n-1}{2}} \cdot \phi_{n+1} \quad (58)$$

となる。(57)を(39)に代入し、さらに(58)を使うと、

$$\frac{\partial \phi_n}{\partial \xi} = 2\sqrt{\frac{n}{2}} \cdot \phi_{n-1} - \xi \cdot \phi_n = \sqrt{\frac{n}{2}} \cdot \phi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \cdot \phi_{n+1} \quad (59)$$

となる。(58)と(59)の和と差を作ると以下のようになる：

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi}\right) \phi_n = \sqrt{n} \cdot \phi_{n-1}, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right) \phi_n = \sqrt{n+1} \cdot \phi_{n+1} \quad (60)$$

各式の左辺側では ϕ_n に演算子が作用していると理解し，それぞれの演算子を，

$$\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi}\right), \quad \hat{a}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right) \quad (61)$$

と定義する．(60)は

$$\hat{a} \cdot \phi_n = \sqrt{n} \cdot \phi_{n-1}, \quad \hat{a}^\dagger \cdot \phi_n = \sqrt{n+1} \cdot \phi_{n+1} \quad (62)$$

となり， \hat{a} は固有関数の n を一つ低下させる“下降演算子”， \hat{a}^\dagger は固有関数の n を一つ増加させる“上昇演算子”と呼べる．そこで，固有関数の ϕ_n にまず下降演算子 \hat{a} を作用させ，その結果に上昇演算子 \hat{a}^\dagger を作用させると，(62)から，

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} \phi_n = \hat{a}^\dagger (\hat{a} \cdot \phi_n) = \hat{a}^\dagger (\phi_{n-1}) = \sqrt{n} \cdot \hat{a}^\dagger (\phi_{n-1}) = \sqrt{n} \cdot \sqrt{n} \cdot \phi_n = n \cdot \phi_n \quad (63)$$

となる．“下降させて，次に上昇させる”訳だから，何も変化しないように想われるが，(63)は，「演算子 $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ は，その固有関数 $\phi_n(\xi)$ の量子数 n を取り出す働きがある」ことを示している．そこで，演算子 $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ を量子数 n を取り出す「数演算子」として，

$$\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a} \quad (64)$$

と定義すると，(63)は

$$\hat{N} \phi_n = n \phi_n \quad (65)$$

である．“上昇”演算子はフォノン(phonon)を“生成”する演算子，“下降”演算子はフォノン(phonon)を“消滅”させる演算子と解釈されることは，後に議論する．

二つの演算子は(61)で定義されているので， $\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}$ を具体的に求めてみる．あわせて，積の順序を反対にした $\hat{a} \hat{a}^\dagger$ についても，具体的に求めてみよう．(演算子に関する計算では， $\hat{a}^\dagger \hat{a} \phi$ のように，必ず演算子が作用する関数 ϕ と一緒にして計算すること． $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ だけで計算すると誤るので注意．)

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger \hat{a} \phi &= \hat{a}^\dagger (\hat{a} \phi) = (1/2) \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right) \left[\left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi}\right) \phi \right] = (1/2) \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right) \left(\xi \phi + \frac{\partial \phi}{\partial \xi}\right) \\ &= (1/2) \left(\xi^2 \phi - \phi - \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2}\right) = (1/2) \left(\xi^2 - 1 - \frac{\partial^2}{\partial \xi^2}\right) \phi \end{aligned} \quad (66)$$

となる．従って，

$$\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a} = (1/2) \left(\xi^2 - 1 - \frac{\partial^2}{\partial \xi^2}\right) \quad (67)$$

である．同様にして，積の順序を反対にした $\hat{a} \hat{a}^\dagger$ についても，

$$\begin{aligned}\hat{a}\hat{a}^\dagger\phi &= \hat{a}(\hat{a}^\dagger\phi) = (1/2)(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi})[(\xi - \frac{\partial}{\partial\xi})\phi] = (1/2)(\xi + \frac{\partial}{\partial\xi})[\xi\phi - \frac{\partial\phi}{\partial\xi}] \\ &= (1/2)(\xi^2\phi + \phi + \xi\frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \xi\frac{\partial\phi}{\partial\xi} - \frac{\partial^2\phi}{\partial\xi^2}) = (1/2)(\xi^2 + 1 - \frac{\partial^2}{\partial\xi^2})\phi\end{aligned}\quad (68)$$

となる。故に、積の順序を反対にした場合の演算子は

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = (1/2)(\xi^2 + 1 - \frac{\partial^2}{\partial\xi^2})\quad (69)$$

である。

この二つの演算子の交換子 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}$ は、(67)と(69)から、

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = (1/2) - (-1/2) = 1\quad (70)$$

となる。二つの演算子の交換関係を表現する。交換子が0であれば、その二つの演算子は可換であったが、 \hat{a} と \hat{a}^\dagger は可換ではない。しかし、 $[\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0$ は自明であるので、昇降演算子の交換関係をまとめると、

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \quad [\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0\quad (70')$$

となる。一方、二つの演算子 \hat{A} と \hat{B} により $[\hat{A}, \hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ と定義される演算子は反交換子と呼ばれる。右側の鍵括弧の下に+と記して、交換子と区別する。

この場合の反交換子は $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]_+ = \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}$ となるが、具体的には、

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]_+ = \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} = (\xi^2 - \frac{\partial^2}{\partial\xi^2})\quad (71)$$

である。(70),(71)の結果は後に固有値の表現を得る際に利用する。

(6-2) 固有関数と固有値

§ A4 では、ルジャンドルの多項式を用いて $Y_{l,0}$ が表現できることから、これに昇降演算子を繰り返し作用させて、 $m \neq 0$ の $Y_{l,m}$ を求めた。これと同様に、基底状態の固有関数 ϕ_0 に上昇演算子 \hat{a}^\dagger を繰り返し作用させれば、次々に他の固有関数を求めることが出来る。

$$\phi_1 = \hat{a}^\dagger \cdot \phi_0,$$

$$\phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{a}^\dagger \cdot \phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}^\dagger)^2 \phi_0,$$

$$\phi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{a}^\dagger \phi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}\sqrt{2}} (\hat{a}^\dagger)^3 \phi_0,$$

,

$$\phi_n = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^\dagger \cdot \phi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \phi_0, \quad (72)$$

基底項は、既に見たように、 $\psi_0 = (\alpha/\pi)^{1/4} \cdot \exp(-\alpha x^2/2)$ (50-0) であるから、

$$\phi_0(\xi) = (\alpha/\pi)^{1/4} \cdot \exp(-\xi^2/2) \quad (73)$$

である。基底の固有関数に下降演算子を作用させても、その下の固有関数は存在しないから、 $\hat{a}\phi_0 = 0$ 、即ち $(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi})\phi_0 = 0 \rightarrow \frac{\partial \phi_0}{\partial \xi} = -\xi\phi_0$ の条件から、基底

固有関数を定めることも出来る。この解は $\phi_0 = A_0 \exp(-\xi^2/2)$ である。規格化積分は ξ ではなく x の積分として行う必要があるから、結局(73)となる。

固有関数を定めることも出来る。この解は $\phi_0 = A_0 \exp(-\xi^2/2)$ である。規格化積分は ξ ではなく x の積分として行う必要があるから、結局(73)となる。

次の固有関数は、

$$\begin{aligned} \phi_1 &= \hat{a}^\dagger \phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \phi_0 = (\alpha/\pi)^{1/4} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \exp(-\xi^2/2) \\ &= (\alpha/\pi)^{1/4} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot e^{-(\xi^2/2)} \cdot 2\xi \end{aligned}$$

となる。以後は同様にしてこれを繰り返せば、固有関数が得られる。

次は、固有値を求めよう。Schrödinger 方程式 (6) は、

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

であるので、

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \right] \psi(x) = \hat{H} \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad (74)$$

である、従って演算子 Hamiltonian は、 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot x^2$ である。

$\xi = \sqrt{\alpha} \cdot x = \sqrt{m\omega/\hbar} \cdot x$ から、Hamiltonian を ξ で表すと、

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \cdot \frac{d^2}{d\xi^2} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} = -\frac{1}{2} \hbar\omega \cdot \frac{d^2}{d\xi^2} \quad (75)$$

となる。また、

$$\frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot x^2 = \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot \frac{\hbar}{m\omega} \cdot \xi^2 = \frac{1}{2} \hbar\omega \cdot \xi^2 \quad (76)$$

である。従って、 ξ で表現した演算子 Hamiltonian は、

$$\hat{H} = -\frac{\hbar\omega}{2} \cdot \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{\hbar\omega}{2} \cdot \xi^2 = \frac{\hbar\omega}{2} \cdot \left(\xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2} \right) \quad (77)$$

となる。この(77)には、(71)と(70)を使えるので、

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \cdot (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) = \frac{\hbar\omega}{2} \cdot (2\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1) = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1/2) = \hbar\omega(\hat{N} + 1/2)$$

である。両辺に右側から固有関数を掛ければ、数演算子は量子数 n を与えるから、

$$\begin{aligned} \hat{H}\phi_n &= \hbar\omega(\hat{N} + 1/2)\phi_n = \hbar\omega(n + 1/2)\phi_n \\ &= E_n\phi_n \end{aligned} \quad (78)$$

であり、この固有関数に対応するエネルギー固有値は

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$$

と求まる。前節の結果と同じである。

(6-3)正準変数 (Q, P) で表現した上昇・下降演算子

最後に変数を元に戻し、(61)の上昇・下降(生成・消滅)演算子を x と $\partial/\partial x$ で表現する。

$$\xi = \sqrt{\alpha} \cdot x = \sqrt{m\omega/\hbar} \cdot x, \quad \frac{\partial}{\partial \xi} = \frac{1}{\sqrt{m\omega/\hbar}} \cdot \frac{\partial}{\partial x}$$

より、

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad (79-1)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{\hbar}{m\omega} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (79-2)$$

運動量の x 成分は、

$$p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

なので、これを用いると、調和振動子の上昇・下降(生成・消滅)演算子は、

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{i}{m\omega} \cdot p_x \right), \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{i}{m\omega} \cdot p_x \right) \quad (80)$$

である。

一方、§14-6では、

$$Q \equiv \sqrt{m}x, \quad P \equiv \frac{1}{\sqrt{m}}p \quad \text{§14-6-(62)}$$

の正準変数への変換を行ったが、これにより調和振動子の質量 m を隠すことが

できた。量子化はこの正準変数における交換関係

$$[Q, P] = QP - PQ = i\hbar \quad (81)$$

の導入で実現する。 $p_x = p$ なので、これを(80)に代入すると、

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\omega Q + i \cdot P), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\omega \cdot Q - i \cdot P) \quad (82)$$

となる。(78)を繰り返すと、交換関係 $[Q, P] = QP - PQ = i\hbar$ (81)に注意して、

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hbar\omega(\hat{a}^\dagger \cdot \hat{a} + 1/2) = \hbar\omega \cdot \left\{ \frac{1}{2\hbar\omega}(\omega Q - iP)(\omega Q + iP) + 1/2 \right\} \\ &= \hbar\omega \cdot \left\{ \frac{1}{2\hbar\omega}[\omega^2 Q^2 + i\omega(QP - PQ) + P^2] + 1/2 \right\} \\ &= \hbar\omega \cdot \left\{ \frac{1}{2\hbar\omega}(\omega^2 Q^2 + i\omega[Q, P] + P^2) + 1/2 \right\} \\ &= \hbar\omega \cdot \left\{ \frac{1}{2\hbar\omega}(\omega^2 Q^2 - \hbar\omega + P^2) + 1/2 \right\} = \frac{1}{2}(P^2 + \omega^2 Q^2) \quad (83) \end{aligned}$$

となる。

§ 14-6 で議論した古典電磁気学でのベクトル・ポテンシャル \mathbf{A} の (\mathbf{k}, σ) 成分の正準変数との対応を再度掲げると、

$$\mathbf{Q}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \equiv (V\varepsilon_0)^{1/2}[\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) + \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t)] \quad \text{\$14-6-(56-1)}$$

$$\mathbf{P}_{\mathbf{k}\sigma}(t) \equiv \dot{\mathbf{Q}}_{\mathbf{k}\sigma}(t) = -i\omega_{\mathbf{k}}(V\varepsilon_0)^{1/2}[\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t) - \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t)] \quad \text{\$14-6-(56-2)}$$

として、古典電磁気学の Hamiltonian は

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\sigma} [\mathbf{P}_{\mathbf{k}\sigma}^2(t) + (\omega_{\mathbf{k}})^2 \mathbf{Q}_{\mathbf{k}\sigma}^2(t)] \quad \text{\$14-6-(57)}$$

で与えられた。従って、ベクトル・ポテンシャル \mathbf{A} の成分 $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}$ も、 $\mathbf{P}_{\mathbf{k}\sigma}$, $\mathbf{Q}_{\mathbf{k}\sigma}$ の量子化を通じて、(81), (82), (83)に従って、上昇・下降（生成・消滅）演算子に姿を変える。 § 14-6-(56-1, -2)を、(80)に対応する次式、

$$\hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}}}(\omega_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{Q}_{\mathbf{k}\sigma} + i \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{k}\sigma}), \quad \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\mathbf{k}}}}(\omega_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{Q}_{\mathbf{k}\sigma} - i \cdot \mathbf{P}_{\mathbf{k}\sigma}) \quad (84)$$

に代入すれば、上昇・下降（生成・消滅）演算子とベクトル・ポテンシャル \mathbf{A} の成分 $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}$ との直接的関係が得られる：

$$\hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\sigma} = (V\varepsilon_0)^{1/2} \cdot \sqrt{\frac{2\omega_{\mathbf{k}}}{\hbar}} \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}(t), \quad \hat{\mathbf{a}}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = 2(V\varepsilon_0)^{1/2} \cdot \sqrt{\frac{2\omega_{\mathbf{k}}}{\hbar}} \cdot \mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}^*(t) \quad (85)$$

となる。量子化により確かに、ベクトル・ポテンシャル \mathbf{A} の成分 $\mathbf{a}_{\mathbf{k}\sigma}$ は上昇・

下降（生成・消滅）演算子に姿を変える。これについては次章で議論する。

(6-4) フォノンに関する“生成演算子”と“消滅演算子”

調和振動子の離散的なエネルギーは、ゼロ点エネルギー($\hbar\omega/2$)を起点にして、 $\hbar\omega = \hbar\nu$ ずつ増加し、量子数 n のエネルギーは $E_n = \hbar\omega (n+1/2)$ である (図 15-1)。量子数 n の固有関数に上昇演算子、下降演算子を作用させると、それぞれ量子数 $(n\pm 1)$ の固有関数が得られる。そして隣り合うエネルギー準位の差は $E_{n\pm 1} - E_n = \pm \hbar\omega = \pm \hbar\nu$ である。このエネルギー $\hbar\omega = \hbar\nu$ の“一塊”はフォノン(phonon, 音響子)と呼ばれる。 $\hbar\nu$ の光量子をフォトン(photon, 光子)と呼ぶことに対応する“粒子”的な呼称である。零点エネルギーを別にして、量子数 n のエネルギー状態は n 個のフォノンの“塊”であると理解し、“ n フォノン状態”とも表現する。これはフォトンについても同じで、“ n フォトン状態”という。

“上昇”演算子はフォノン(phonon)を一個増やすので、フォノンを“生成”する生成演算子(creation operator)、“下降”演算子はフォノン(phonon)を一個減らすので、フォノンを“消滅”させる消滅演算子(annihilation operator)と解釈する。

$n=0$ の基底状態を “ $|0\rangle$ ” とディラック流のケットで記せば、

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger|0\rangle &= |1\rangle, & \hat{a}^\dagger|1\rangle &= |2\rangle, & \cdots & , & \hat{a}^\dagger|n-1\rangle &= |n\rangle \\ \hat{a}|n\rangle &= |n-1\rangle, & \hat{a}|n-1\rangle &= |n-2\rangle, & \cdots & , & \hat{a}|1\rangle &= |0\rangle \\ \hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle &= n|n\rangle \end{aligned}$$

となる。 $|n\rangle$ は量子数 n の固有関数、 n フォノン状態の固有関数を表す。

調和振動子の量子論は、フォノンの解釈を通じて、調和振動子を“粒子”的なものと理解できる状況を作り出す。フォトン(photon, 光子)とフォノン(phonon, 音響子)の考え方は、量子力学が定式化される以前のアインシュタインの研究に繋がる。

(6-5) フォトンとフォノン

プランク(1900)は、空洞(黒体)輻射の(単位体積当たり、単位振動数当たりの)エネルギー密度が、電磁波(光)の振動数 ν と絶対温度 T の関数として、次式で表現できることを示した。プランク分布式である(この導出は § 18 で行う)。

$$u(\nu, T) = \left(\frac{8\pi\nu^2}{c^3}\right) \frac{h\nu}{\exp(h\nu/k_B T) - 1} \quad (86)$$

ただし、 c は光速、 k_B はボルツマン定数、 h はプランク定数である。このエネ

ルギー密度の分布式は、温度一定の下で、電磁波(光)振動数の連続関数として得られる。しかし、プランクは、電磁波(光)のエネルギー自体が離散的な値を持たない限り、この分布式は得られないことを指摘した。これが量子論の始まりであった。その後、原子が示す様々な線スペクトルに関連する現象の理論的研究は著しいスピードで進展した。アインシュタインの「光量子論」、ボーアの「水素原子スペクトル理論」、モーゼレイの「X線スペクトル論」、ド・ブロイの「物質波動論」、ハイゼンベルグらの「行列力学」、シュレディンガーの「波動力学」などを経て、ディラックとジョルダン(1927, 1930)の「変換理論」によって「量子力学」として定式化された(高林武彦, 2010, 量子論の発展史, ちくま学芸文庫)。

定式化以前の段階(前期量子論)で、アインシュタイン(1905)は、光(=電磁波)を $h\nu$ を単位の“塊”とするフォトン(photon, 光子)と見なすことで、光電効果を説明することに成功した。アインシュタインは、この光量子論に引き続き、1907年には、固体の比熱が温度低下にともなって減少し、 $T \rightarrow 0$ で固体比熱 $\rightarrow 0$ となる実験事実を、単純な調和振動子の量子論から説明することにも成功する。結晶格子点を座標原点として熱振動する原子を調和振動子と見なす簡単なモデルである。フォノン(phonon, 音響子)は、量子化された固体の振動エネルギーの“一塊”を粒子的に表現したものである。多くの固体の振動エネルギーが音波領域にあることから、「phonon, 音響子」との造語になっている。光(=電磁波)のエネルギーをフォトン(photon, 光子)と粒子的に呼ぶことと同様で、何れもアインシュタインの先駆的研究に繋がる。

光を「粒子的」に考えるべきとするアインシュタインの光量子説は、コンプトン(A. H. Compton)による金属結晶に対するX線散乱実験からも強く支持されることになった。コンプトン(1923)は、散乱X線には、入射X線と同一波長のX線の他に、僅かに長い波長をもつX線も含まれている事実を見出した。そして、特殊相対性論を受け入れ、入射 X 線はエネルギー $E=h\nu=h\omega$ 、運動量 $p=h/\lambda=h\nu/c=hk$ の光子の流れと考え、X線光子と金属中の自由電子との弾性衝突を仮定し、そこでのエネルギー保存則と運動量保存則から、波長の僅かに長い散乱X線の散乱角と波長の関係は説明できることを示した。弾き飛ばされた電子も確認でき、エネルギーの一部はこの電子にも付与されるため、散乱X線には入射時よりも波長が僅か長いものも含まれる。この「コンプトン散乱」から、短波長の電磁波であるX線は、X線光子としての“粒子”性を備えていること

になる。

真空電磁場は、ベクトル・ポテンシャル \mathbf{A} の平面波展開を通じて、「波数ベクトル \mathbf{k} と振動方向 σ を異にする無数の光子 (= 調和振動子) の集合」と理解できることを見た。従って、フォトン(photon, 光子)は、量子化された調和振動子をあてはめて考えれば良いことになる。ただし、調和振動子のゼロ点エネルギー $-\hbar\omega/2 = -\hbar\nu/2$ は、フォトン(photon, 光子)には対応しない。プランク分布式(81)にも調和振動子のゼロ点エネルギーに対応する項はない。もし、光子が $\hbar\omega/2 = \hbar\nu/2$ のゼロ点エネルギーを持つとすれば、無数の光子からなる電磁場のエネルギーは ∞ に発散してしまうからである。フォトン(photon, 光子)の基底エネルギーは、調和振動子のゼロ点エネルギー $-\hbar\omega/2 = -\hbar\nu/2$ を除いて対応させる。

古典的電磁場の「調和振動子」は、§ 14 のはじめで議論したように、電荷も電流もない真空中の電磁場(\mathbf{E} , \mathbf{B})を考えたことに対する結論である。そこでは、ベクトル・ポテンシャル (\mathbf{A}) に対するクーロン条件 ($\text{div}\mathbf{A} = 0$)、電荷も電流も無いこと ($\rho_e = 0$, $\mathbf{i} = 0$) の条件から、Maxwell 方程式は、

$$\varphi = 0, \quad \text{div}\mathbf{A} = 0, \quad \mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = -\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \quad (\nabla^2 - \epsilon_0\mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2})\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = 0$$

となる。電磁場(\mathbf{E} , \mathbf{B})はベクトル・ポテンシャル (\mathbf{A}) だけで決まる。周期的境界条件の下でこれを満足する解は、平面波としてのベクトル・ポテンシャル \mathbf{A} をフーリエ展開したものとなった。「波数ベクトル \mathbf{k} と振動方向 σ を異にする“振動子”」とは、ベクトル・ポテンシャル \mathbf{A} の成分である。電磁場を量子化する際のベクトル・ポテンシャル \mathbf{A} の扱い方については、考えるべき事項がまだ残っている。§ 7-2 では、磁場が存在する場合のシュレディンガー方程式について言及したが、その際にベクトル・ポテンシャル \mathbf{A} が現れることを述べた。この問題である。次節ではこの問題について考える。