および

$$L_{q+1} = \begin{cases} (2q+1-\rho)L_q - q^2 L_{q-1} & \text{for } q \geq 1 \\ (1-\rho)L_0 & \text{for } q = 0 \end{cases} \tag{E.69}$$

が得られ、これらの結果から、ラゲール多項式が微分方程式

$$\rho L_q'' + (1-\rho)L_q' + qL_q = 0 \tag{E.70}$$

を満たすことを示すことができる。微分方程式 (E.70) はラゲールの微分方程式とよばれる。$q \neq q'$ のときの直交性は

$$\int_0^\infty d\rho e^{-\rho} L_q(\rho) L_{q'}(\rho) = (q!)^2 \, \delta_{qq'} \tag{E.71}$$

と表される。計算に便利なロドリゲスの公式

$$L_q(\rho) = e^\rho \frac{d^q}{d\rho^q}(e^{-\rho}\rho^q) \tag{E.72}$$

もよく知られている。

次にラゲールの陪多項式

$$L_q^p(\rho) = \frac{d^p}{d\rho^p} L_q(\rho) \tag{E.73}$$

に話題を移そう。ラゲール多項式は L_q は q 次多項式なので、その陪多項式 L_q^p は $(q-p)$ 次多項式であることに注意。ラゲールの微分方程式 (E.70) を p 階微分することで、ラゲールの陪多項式の従う微分方程式

$$\rho(L_q^p)'' + (1+p-\rho)(L_q^p)' + (q-p)L_q^p = 0 \tag{E.74}$$

が得られる。式 (E.74) もまたラゲールの微分方程式と呼ばれる。この式で $p = 2\ell + 1$, $q = n + \ell$ ととれば、水素類似原子の動径方程式と同じ微分方程式になることに注意してほしい。

ラゲールの陪多項式の母関数も式 (E.59) を ρ で p 階微分して得られる。

$$U_p(\rho, s) = \frac{(-s)^p \exp\left(-\rho \dfrac{s}{1-s}\right)}{(1-s)^{p+1}}, \tag{E.75}$$

$$U_p(\rho, s) = \sum_{q=p}^\infty \frac{1}{q!} L_q^p(\rho) s^q. \tag{E.76}$$

ラゲールの陪多項式も一種の直交多項式であり、$q \neq q'$ の場合、次の積分がゼロになることを示すことができる。

$$\int_0^\infty d\rho e^{-\rho} \rho^p L_q^p(\rho) L_{q'}^p(\rho) = \frac{(q!)^3}{(q-p)!} \delta_{qq'} \tag{E.77}$$

F　コヒーレント状態

F.1　調和振動子の復習

ハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2 \tag{F.1}$$

で与えられる 1 次元量子力学の問題は、エネルギー量子 $\hbar\omega$ の生成演算子 $\hat{a}^\dagger$ と消滅演算子 $\hat{a}$ を用いて見通しよく解くことができる。ここで、

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right), \qquad \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right), \tag{F.2}$$

であり、それらの交換関係は、$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ を用いて

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \tag{F.3}$$

と求められる。さらに、ハミルトニアンが

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \tag{F.4}$$

となることに注意しておく。

演算子法による解法では、エネルギー固有値が最小となる基底状態 $|0\rangle$ は、条件

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \tag{F.5}$$

を満たす状態として与えられ、n 番目の励起状態 $|n\rangle$ は

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^\dagger\right)^n|0\rangle \tag{F.6}$$

と求められる。これらエネルギー固有状態のエネルギー固有値は

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{F.7}$$

である。式 (F.6) からは、生成・消滅演算子を用いてエネルギー準位を上げ下げするときの規格化定数が

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \qquad \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \tag{F.8}$$

で与えられることも見て取れる。

F.2　量子ゆらぎ Δx と Δp

次に、調和振動子のこれらエネルギー固有状態での、位置と運動量の不確定性を評価する。生成・消滅演算子の定義式 (F.2) より、位置演算子 $\hat{x}$ と運動量演算子 $\hat{p}$ が

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right), \qquad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right) \tag{F.9}$$

と書けることに注意しておく。

エネルギー固有状態 $|n\rangle$ における位置と運動量の期待値が

$$\langle n|\,\hat{x}\,|n\rangle = \langle n|\,\hat{p}\,|n\rangle = 0 \tag{F.10}$$

となることは、状態の直交性

$$\langle n_1|n_2\rangle = \delta_{n_1 n_2} \tag{F.11}$$

より明らかであろう。

したがって、状態 $|n\rangle$ における位置の不確定性（量子ゆらぎ）Δx_n を求めるには、

$$\begin{aligned}(\Delta x_n)^2 &= \langle n|\,\hat{x}^2\,|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|(\hat{a}^\dagger+\hat{a})^2|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^\dagger)|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)\end{aligned} \tag{F.12}$$

と計算すればよい。ここで、2 行目から 3 行目の式変形では状態の直交性を用い、3 行目から 4 行目への変形には式 (F.8) を用いた。運動量の不確定性（量子ゆらぎ）も同様に

$$\begin{aligned}(\Delta p_n)^2 &= \langle n|\,\hat{p}^2\,|n\rangle \\ &= \frac{\hbar m\omega}{2}\langle n|(\hat{a}^\dagger-\hat{a})^2|n\rangle \\ &= \frac{\hbar m\omega}{2}\langle n|(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^\dagger)|n\rangle \\ &= \frac{\hbar m\omega}{2}(2n+1)\end{aligned} \tag{F.13}$$

と求められ、その積が

$$(\Delta x_n)^2(\Delta p_n)^2 = \frac{\hbar^2}{4}(2n+1)^2 \tag{F.14}$$

と計算できる。

式 (F.14) の結果は、エネルギー固有状態のうち、基底状態 $|0\rangle$ のみがハイゼンベルグの不確定性関係

$$\Delta x\,\Delta y \geq \frac{1}{2}\hbar \tag{F.15}$$

の下限を与える最小不確定性状態であり、励起準位 n が大きいほど不確定性が増していくことを示している。

一般に、最小不確定性状態の波動関数 u は、

$$u(x) = C\exp\left(-\frac{1}{2}\kappa(x-\xi)^2\right) \tag{F.16}$$

の形のガウス分布関数で与えられることが知られている。ここで、C は規格化の定数。κ は正の実定数であり、ξ は複素数パラメータである。

前節の結果は、基底状態の波動関数 $u_0(x)$ のみが

$$u_0(x) = A_0\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) \tag{F.17}$$

となってガウス分布関数の形をしており、励起状態の波動関数 $u_n(x)$ $(n \geq 1)$ がガウス分布関数ではなかった事実と整合している。以降の節では、基底状態以外の最小不確定性状態を演算子法を用いて具体的に構成し、その性質を調べていこう。

F.3 コヒーレント状態

波動関数をガウス分布関数に保ったまま基底状態を変形できれば、基底状態以外の最小不確定性状態を構成できる。ひとつの例として、$\bar{x}$ を実数パラメータとし、

$$\hat{T}(\bar{x}) = \exp\left(\frac{\bar{x}}{i\hbar}\hat{p}\right) \tag{F.18}$$

で与えられる並進変換を考えてみよう。式 (F.18) で与えられる演算子が並進変換であることは、任意の状態

$$|u\rangle = \int dx|x\rangle\, u(x)$$

に対して

$$\begin{aligned}\hat{T}(\bar{x})|u\rangle &= \int dx|x\rangle\, \exp\left(-\bar{x}\frac{d}{dx}\right)u(x) \\ &= \int dx|x\rangle\left[1-\bar{x}\frac{d}{dx}+\frac{1}{2}\bar{x}^2\left(\frac{d}{dx}\right)^2-\frac{1}{3!}\bar{x}^3\left(\frac{d}{dx}\right)^3+\cdots\right]u(x) \\ &= \int dx|x\rangle\left[u(x)-\bar{x}u'(x)+\frac{1}{2}\bar{x}^2u''(x)-\frac{1}{3!}\bar{x}^3u'''(x)+\cdots\right] \\ &= \int dx|x\rangle\, u(x-\bar{x})\end{aligned}$$

と作用することから理解できるであろう。したがって、状態

$$\hat{T}(\bar{x})|0\rangle$$

の波動関数を、式 (F.17) で与えられた基底状態波動関数 u_0 を用いて

$$u(x) = u_0(x-\bar{x}) = C_0\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}(x-\bar{x})^2\right) \tag{F.19}$$

と書き下すことができることがわかる。この状態は明らかに最小不確定性状態の例を与えている。演算子 $\hat{T}(\bar{x})$ がユニタリー

$$(\hat{T}(\bar{x}))^\dagger\,\hat{T}(\bar{x}) = \hat{T}(\bar{x})\,(\hat{T}(\bar{x}))^\dagger = 1$$

であることにも注意しよう。このことから、$\hat{T}(\bar{x})|0\rangle$ の規格化も自動的であることがわかる。生成・消滅演算子を用いると、並進変換の演算子が

$$\hat{T}(\bar{x}) = \exp\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\bar{x}\hat{a}^\dagger-\bar{x}\hat{a})\right) \tag{F.20}$$

と表されることにも注意しておく。

最小不確定性状態を表す波動関数 (F.16) でのパラメータ ξ は任意の複素数でよかったことに対し、基底状態を並進変換 $\hat{T}(\bar{x})$ で変換して作られる状態の波動関数 (F.19) では、対応するパラメータ $\bar{x}$ の取りうる値は実数に限られてしまう。単純に式 (F.18) に表れるパラメータ $\bar{x}$ を複素数にするとユニタリー性を満たさなくなってしまうので、式 (F.18) を参考にして、複素パラメータ η をもつ演算子 (変位演算子)

$$\hat{T}_\eta \equiv \exp\left(\eta\hat{a}^\dagger-\eta^\dagger\hat{a}\right) \tag{F.21}$$

を定義してみよう。変位演算子は、η を実数にとると並進変換 $\hat{T}(\bar{x}=\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\eta)$ に帰着することに注意。

変位演算子 $\hat{T}_\eta$ を基底状態 $|0\rangle$ に作用させることによって複素パラメータ ξ に中心をもつガウス分布関数型の波動関数をもつ状態

$$|\eta\rangle \equiv \hat{T}_\eta|0\rangle \tag{F.22}$$

が構成できる。このことを示すには、変位演算子によって消滅演算子 $\hat{a}$ が

$$\begin{aligned}\hat{T}_\eta\hat{a}\hat{T}_\eta^\dagger &= \hat{a}+[(\eta\hat{a}^\dagger-\eta^\dagger\hat{a}),\hat{a}]+\frac{1}{2}[(\eta\hat{a}^\dagger-\eta^\dagger\hat{a}),[(\eta\hat{a}^\dagger-\eta^\dagger\hat{a}),\hat{a}]]+\cdots \\ &= \hat{a}-\eta\end{aligned} \tag{F.23}$$

と変換されることに着目すればよい。同様に、生成演算子 $\hat{a}^\dagger$ は

$$\hat{T}_\eta \hat{a}^\dagger \hat{T}_\eta^\dagger = \hat{a}^\dagger - \eta^\dagger \tag{F.24}$$

と変換されることにも注意しておく。$0 = \hat{a}|0\rangle$ の両辺に $\hat{T}_\eta$ を作用させれば、

$$\begin{aligned} 0 &= \hat{T}_\eta \hat{a}|0\rangle = \hat{T}_\eta \hat{a} \hat{T}_\eta^\dagger \hat{T}_\eta |0\rangle \\ &= (\hat{a} - \eta)\hat{T}_\eta|0\rangle \\ &= (\hat{a} - \eta)|\eta\rangle \end{aligned}$$

となり

$$0 = (\hat{a} - \eta)|\eta\rangle \tag{F.25}$$

が得られる。状態 $|\eta\rangle$ の波動関数を $u_\eta(x)$ とすれば、式 (F.25) は

$$0 = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right) - \eta\right] u_\eta(x) \tag{F.26}$$

となる。このように見ていけば、波動関数 $u_\eta(x)$ が

$$u_\eta(x) = A \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}(x-\xi)^2\right), \qquad \xi = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\eta \tag{F.27}$$

と決定されることは明らかであろう。ここで、$\hat{T}_\eta$ はユニタリー演算子なので、状態 $|\eta\rangle$ は自動的に規格化されることに注意。規格化の定数 A は $\langle 0|\eta\rangle = e^{-|\eta|^2/2}$ を用いることで求められ

$$A = A_0 \exp\left[\frac{1}{2}\left(\eta^2 - |\eta|^2\right)\right] \tag{F.28}$$

と決定される。ここで、A_0 は式 (F.17) で基底状態波動関数 u_0 を規格化したときに用いられた定数と同一である。

式 (F.22) で定義される調和振動子量子力学の状態はコヒーレント状態として知られている状態である。調和振動子の量子力学は量子光学などの場の量子論において活用される。これらの重要な応用において、コヒーレント状態でレーザー光が記述されるなど、大きな役割を果たす。

F.4　コヒーレント状態の性質

この節ではコヒーレント状態の性質を列挙していく。

- コヒーレント状態 $|\eta\rangle$ は、エネルギー固有状態 $|n\rangle$ の重ね合わせの状態として

$$|\eta\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\eta|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n!}}\eta^n|n\rangle \tag{F.29}$$

の形で展開できる。

このことを示すには、次節で示すベーカー・キャンベル・ハウスドルフの公式を用いて

$$\hat{T}_\eta = \exp\left(-\frac{1}{2}|\eta|^2\right)\ \exp\left(\eta\hat{a}^\dagger\right)\ \exp\left(-\eta^*\hat{a}\right)$$

を示し、

$$
\begin{aligned}
|\eta\rangle &= \hat{T}_\eta|0\rangle \\
&= \exp\left(-\frac{1}{2}|\eta|^2\right)\,\exp\left(\eta\hat{a}^\dagger\right)|0\rangle \\
&= \exp\left(-\frac{1}{2}|\eta|^2\right)\,\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\eta^n(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \\
&= \exp\left(-\frac{1}{2}|\eta|^2\right)\,\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n!}}\eta^n|n\rangle
\end{aligned}
$$

と計算すればよい。

- コヒーレント状態 $|\eta\rangle$ は、消滅演算子 $\hat{a}$ の固有値 η の固有状態

$$\hat{a}|\eta\rangle = \eta|a\rangle \tag{F.30}$$

である。

この性質は式 (F.25) からすでに明らかであろう。あるいは、展開式 (F.29) と $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ を用いても示すことができる。

- コヒーレント状態 $|\eta\rangle$ は、生成演算子 $\hat{a}^\dagger$ の固有状態ではない。

この性質は、$[\hat{a},\hat{a}^\dagger] = 1 \neq 0$ から、$\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ が同時固有状態を持たないことからも明らかである。あるいは、展開式 (F.29) を見て、$|\eta\rangle$ には基底状態 $|0\rangle$ が含まれるのに対し、$\hat{a}|\eta\rangle$ は基底状態 $|0\rangle$ を含まないことからも示すことができる。

- コヒーレント状態での、生成・消滅演算子の期待値は、

$$\langle\eta|\,\hat{a}\,|\eta\rangle = \eta, \qquad \langle\eta|\,\hat{a}^\dagger\,|\eta\rangle = \eta^* \tag{F.31}$$

で与えられる。

この性質は、$|\eta\rangle$ が $\hat{a}$ の固有状態であり

$$\hat{a}|\eta\rangle = \eta|\eta\rangle, \qquad \langle\eta|\hat{a}^\dagger = \eta^*\langle\eta|$$

となることから明らかである。

- コヒーレント状態 $|\eta\rangle$ における位置と運動量の不確定性は

$$(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}, \qquad (\Delta p)^2 = \frac{\hbar m\omega}{2} \tag{F.32}$$

で与えられ、たしかに最小不確定性状態

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2}{4}$$

になっている。

この事実は波動関数の形から明らかである。演算子法を用いて示すには、不確定性の定義に基づき

$$(\Delta x)^2 = \langle\eta|\,\hat{x}^2\,|\eta\rangle - (\langle\eta|\,\hat{x}\,|\eta\rangle)^2, \qquad (\Delta p)^2 = \langle\eta|\,\hat{p}^2\,|\eta\rangle - (\langle\eta|\,\hat{p}\,|\eta\rangle)^2,$$

を計算すればよい。その際、

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

$$\hat{a}|\eta\rangle = \eta|\eta\rangle, \qquad \langle\eta|\hat{a}^\dagger = \langle\eta|\eta^*$$

を用いれば、計算を簡単に済ますことができる。

- ふたつのコヒーレント状態 $|\eta_1\rangle$ と $|\eta_2\rangle$ は直交せず、その内積は

$$\langle\eta_1|\eta_2\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\eta_1|^2 - \frac{1}{2}|\eta_2|^2 + \eta_1^*\eta_2\right) \tag{F.33}$$

で与えられる。

この性質は、展開式 (F.29) を用いて

$$\begin{aligned}\langle\eta_1|\eta_2\rangle &= e^{-\frac{1}{2}|\eta_1|^2}e^{-\frac{1}{2}|\eta_2|^2}\sum_{n_1=0}^{\infty}\sum_{n_2=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!}}(\eta_1^*)^{n_1}\eta_2^{n_2}\langle n_1|n_2\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}|\eta_1|^2}e^{-\frac{1}{2}|\eta_2|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\eta_1^*\eta_2)^n \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}|\eta_1|^2 - \frac{1}{2}|\eta_2|^2 + \eta_1^*\eta_2\right)\end{aligned}$$

と計算することで示される。

- コヒーレント状態 $|\eta\rangle$ におけるエネルギー量子数 n を測定する場合、n 個のエネルギー量子が測定される確率はポアソン分布

$$P_n = \frac{\bar{n}^n}{n!}e^{-\bar{n}} \tag{F.34}$$

で与えられる。ここで、$\bar{n} = |\eta|^2$ はポアソン分布における量子数 n の期待値である。

(説明) これはレーザー中に n 光子状態が存在する確率がポアソン分布で与えられることを示している。このことを示すには、$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ はエネルギー量子の個数演算子であり、

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

であること、また、コヒーレント状態 $|\eta\rangle$ が消滅演算子 $\hat{a}$ の固有状態であり

$$\langle\eta|\hat{N}|\eta\rangle = \langle\eta|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\eta\rangle = |\eta|^2$$

であることを用いればよい。これらを用いて、エネルギー量子数期待値 $\bar{n}$ が

$$\bar{n} = |\eta|^2$$

と求められる。エネルギー量子数が n である確率は

$$\begin{aligned}P_n &= |\langle n|\eta\rangle|^2 = \frac{1}{n!}|\eta|^{2n}e^{-|\eta|^2} \\ &= \frac{1}{n!}\bar{n}^n e^{-\bar{n}}\end{aligned}$$

と求められる。

- コヒーレント状態の完全性

$$1 = \frac{1}{\pi}\int d^2\eta \, |\eta\rangle\langle\eta| \tag{F.35}$$

ここで $d^2\eta$ は複素平面上の積分である。

この性質を示すには、式 (F.35) の両辺を $|n_1\rangle$, $|n_2\rangle$ で挟んだ

$$\delta_{n_1 n_2} = \frac{1}{\pi}\int d^2\eta\langle n_1|\eta\rangle\langle\eta|n_2\rangle$$

を導くことができれば良い。

$$\eta = re^{i\theta}$$

で与えられる変数 r, θ を用い、

$$d^2\eta = dr\, rd\theta$$

として右辺に表れる複素平面上の積分を実行すると

$$\begin{aligned}\frac{1}{\pi}\int d^2\eta\langle n_1|\eta\rangle\langle\eta|n_2\rangle &= \int_0^\infty dr\frac{2r^{n_1+n_2+1}e^{-r^2}}{\sqrt{n_1!n_2!}}\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\theta e^{i(n_1-n_2)\theta} \\ &= \delta_{n_1n_2}\int_0^\infty dr^2\frac{r^{2n_1}}{n_1!}e^{-r^2} \\ &= \delta_{n_1n_2}\end{aligned}$$

が得られる。

- コヒーレント状態の時間発展を計算すると

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\eta\rangle = e^{-\frac{i}{2}\omega t}|\eta(t)\rangle, \qquad \eta(t) = e^{-i\omega t}\eta(t=0) \tag{F.36}$$

となる。つまり、パラメータ η は時間とともに角振動数 ω で振動している。

この事実は、

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar}\hat{a}e^{+i\hat{H}t/\hbar} = e^{+i\omega t}\hat{a}, \qquad e^{-i\hat{H}t/\hbar}\hat{a}^\dagger e^{+i\hat{H}t/\hbar} = e^{-i\omega t}\hat{a}^\dagger$$

を用いて

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\eta\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\hat{T}_\eta e^{i\hat{H}t/\hbar}e^{-\frac{i}{2}\omega t}|0\rangle$$

を計算すれば明らかであろう。

このような状態のパラメータの単振動の描像は、古典力学での調和振動子の単振動の描像に符合するものとなっている。そのため、コヒーレント状態は「もっとも古典的な状態」とよばれることがある。

F.5 ベーカー・キャンベル・ハウスドルフの公式

交換しない演算子 $\hat{X}$, $\hat{Y}$ の指数関数の積を

$$e^{\hat{X}}e^{\hat{Y}} = e^{\hat{W}} \tag{F.37}$$

のように単一の指数関数にまとめるとき、演算子 $\hat{W}$ を

$$\hat{W} = \hat{X} + \hat{Y} + \frac{1}{2}[\hat{X},\hat{Y}] + \frac{1}{12}[\hat{X}-\hat{Y},[\hat{X},\hat{Y}]] + \cdots \tag{F.38}$$

のように演算子 $\hat{X}, \hat{Y}$ とそれらの交換関係を使った項による展開で書き下すことができる。特に

$$[\hat{X},[\hat{X},\hat{Y}]]=[\hat{Y},[\hat{X},\hat{Y}]]=0$$

の場合は、

$$\hat{W}=\hat{X}+\hat{Y}+\frac{1}{2}[\hat{X},\hat{Y}] \tag{F.39}$$

となる。これをベーカー・キャンベル・ハウスドルフの公式と呼ぶ。この公式は、具体的な問題を解く上で役に立つことがしばしばあり、知っておいて損のない公式である。

公式 (F.38) を証明するには、実数パラメータ t を導入し

$$e^{\hat{\widetilde{W}}}=e^{t\hat{X}}e^{t\hat{Y}} \tag{F.40}$$

で定義される演算子 $\hat{\widetilde{W}}$ のテイラー展開

$$\hat{\widetilde{W}}=\hat{W}_0+t\hat{W}_1+\frac{1}{2!}t^2\hat{W}_2+\frac{1}{3!}t^3\hat{W}_3+\cdots \tag{F.41}$$

を求めればよい。$\hat{W}$ は $t=1$ のときの演算子

$$\hat{W}=\hat{W}_0+\hat{W}_1+\frac{1}{2!}\hat{W}_2+\frac{1}{3!}\hat{W}_3+\cdots \tag{F.42}$$

となる。

定義 (F.40) より、$\hat{W}_0=0$ は明らかであろう。$\hat{W}_1, \hat{W}_2, \cdots$ を求めるには、式 (F.40) の両辺を微分した

$$\left[\frac{d}{dt}e^{\hat{\widetilde{W}}}\right]e^{-\hat{\widetilde{W}}}=\left[\frac{d}{dt}\left(e^{t\hat{X}}e^{t\hat{Y}}\right)\right]e^{-t\hat{Y}}e^{-t\hat{X}} \tag{F.43}$$

を考えると便利である。この式の左辺は

$$\hat{\widetilde{W}}'=\hat{W}_1+t\hat{W}_2+\frac{1}{2!}t^2\hat{W}_2+\cdots \tag{F.44}$$

を用いて

$$\hat{\widetilde{W}}'+\frac{1}{2}[\hat{\widetilde{W}},\hat{\widetilde{W}}']+\frac{1}{3!}[\hat{\widetilde{W}},[\hat{\widetilde{W}},\hat{\widetilde{W}}']]+\cdots$$

と展開でき、この式に (F.41), (F.44), $\hat{W}_0=0$ を代入することで、

$$\left[\frac{d}{dt}e^{\hat{\widetilde{W}}}\right]e^{-\hat{\widetilde{W}}}=\hat{W}_1+t\hat{W}_2+\frac{1}{2}t^2\left(\hat{W}_3+\frac{1}{2}[\hat{W}_1,\hat{W}_2]\right)+\cdots \tag{F.45}$$

が得られる。一方、右辺は

$$\begin{aligned}\left[\frac{d}{dt}\left(e^{t\hat{X}}e^{t\hat{Y}}\right)\right]e^{-t\hat{Y}}e^{-t\hat{X}} &= \hat{X}e^{t\hat{X}}e^{t\hat{Y}}e^{-t\hat{Y}}e^{-t\hat{X}}+e^{t\hat{X}}\hat{Y}e^{t\hat{Y}}e^{-t\hat{Y}}e^{-t\hat{X}} \\ &= \hat{X}+e^{t\hat{X}}\hat{Y}e^{-t\hat{X}} \\ &= \hat{X}+\hat{Y}+t[\hat{X},\hat{Y}]+\frac{t^2}{2!}[\hat{X},[\hat{X},\hat{Y}]]+\cdots \end{aligned} \tag{F.46}$$

と評価できる。式 (F.45) と式 (F.46) の t の各次数を比較することで、

$$\hat{W}_1 = \hat{X}+\hat{Y}, \tag{F.47}$$

$$\hat{W}_2 = [\hat{X},\hat{Y}], \tag{F.48}$$

$$\hat{W}_3 = \frac{1}{2}[\hat{X}-\hat{Y},[\hat{X},\hat{Y}]], \tag{F.49}$$

が得られることはもはや明らかであろう。

式 (F.45) も式 (F.46) も、各項が演算子 $\hat{X}, \hat{Y}$ とそれらの交換関係で表されることに注意しよう。そのため、$\hat{W}_n$ の項は $n-1$ 次の交換関係を含むことがわかる。このことから、2次以上の交換関係がゼロになる場合、つまり

$$[\hat{X}, [\hat{X}, \hat{Y}]] = [\hat{Y}, [\hat{X}, \hat{Y}]] = 0$$

となって、$[\hat{X}, \hat{Y}]$ が $\hat{X}$ とも $\hat{Y}$ とも交換する場合には、$\hat{W}_3$ 以降の項は出現せず、式 (F.39) が導かれることがわかる。

F.6 そのほかの最小不確定性状態

コヒーレント状態以外にも最小不確定性状態を構成することができる。たとえば、

$$\hat{D}(\rho) = \exp\left(-\frac{i}{2\hbar}\rho(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})\right) \tag{F.50}$$

で与えられるパラメータ ρ によるスケール変換で基底状態を変形させた状態がそれである。この演算子がスケール変換を与えることは、状態

$$|u\rangle = \int dx|x\rangle\, u(x)$$

に作用すると

$$\hat{D}(\rho)|u\rangle = \int dx|x\rangle e^{-\frac{1}{2}\rho} u(e^{-\rho}x)$$

なる状態を与えることから理解できる。調和振動子の基底状態 $|0\rangle$ の波動関数はガウス分布関数なので、$|0\rangle$ をスケール変換した $\hat{D}(\rho)|0\rangle$ の波動関数もガウス分布関数にとどまる。したがって、$\hat{D}(\rho)|0\rangle$ は最小不確定性状態になることがわかる。

$$\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x} = i\hbar\left[(\hat{a}^\dagger)^2 - (\hat{a})^2\right]$$

であることに注意しよう。コヒーレント状態の場合にならって、以降では、複素数パラメータ ζ を導入し

$$|\zeta\rangle = \hat{D}_\zeta|0\rangle, \qquad \hat{D}_\zeta = \exp(\zeta(\hat{a}^\dagger)^2 - \zeta^*(\hat{a})^2) \tag{F.51}$$

で与えられる状態の性質を考えてみよう。

- 状態 $|\zeta\rangle$ の時間発展を計算すると

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\zeta\rangle = e^{-\frac{i}{2}\omega t}|\zeta(t)\rangle, \qquad \zeta(t) = e^{-2i\omega t}\zeta(t=0) \tag{F.52}$$

  となる。つまり、パラメータ ζ は時間とともに角振動数 2ω で振動している。

- この状態では、位置と運動量の期待値は $\langle\zeta|\,\hat{x}\,|\zeta\rangle = \langle\zeta|\,\hat{p}\,|\zeta\rangle = 0$ であり、それらの不確定性は $(\Delta x)^2 = \langle\zeta\,\hat{x}^2\,|\zeta\rangle$, $(\Delta p)^2 = \langle\zeta\,\hat{p}^2\,|\zeta\rangle$ と計算できる。

$$\begin{aligned}
\langle\zeta|\,\hat{x}^2\,|\zeta\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left[\cosh^2(2|\zeta|) + \sinh^2(2|\zeta|) + 2\frac{\mathrm{Re}\zeta}{|\zeta|}\cosh(2|\zeta|)\sinh(2|\zeta|)\right], && \text{(F.53)}\\
\langle\zeta|\,\hat{p}^2\,|\zeta\rangle &= \frac{\hbar m\omega}{2}\left[\cosh^2(2|\zeta|) + \sinh^2(2|\zeta|) - 2\frac{\mathrm{Re}\zeta}{|\zeta|}\cosh(2|\zeta|)\sinh(2|\zeta|)\right]. && \text{(F.54)}
\end{aligned}$$

$(\Delta x)^2$ と $(\Delta p)^2$ は角振動数 2ω で振動しているが、エネルギー期待値は

$$\langle\zeta|\,\hat{H}\,|\zeta\rangle = \frac{1}{2m}\langle\zeta|\,\hat{p}^2\,|\zeta\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2\langle\zeta|\,\hat{x}^2\,|\zeta\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(\cosh^2(2|\zeta|) + \sinh^2(2|\zeta|)\right) \tag{F.55}$$

となり、時間とともに変化しないことに注意。また、最小不確定性状態を与えるのは、変換パラメータ ζ が実数の場合に限られることがわかる。

G　球座標・円筒座標系でのラプラシアン

この付録では、ブラケット記法を用いることによって３次元極座標系（球座標）や円筒座標系でのラプラシアン Δ が、簡単に導出できることを学ぶ。

G.1　デカルト座標系

最初にデカルト座標系の復習をするとともに記号の整理をしておく。３次元デカルト座標 (x,y,z) では、座標点 (x,y,z) と $(x+dx,y+dy,z+dz)$ の間の距離（線素）は

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 \tag{G.1}$$

で与えられる。３次元積分の無限小体積要素は

$$d^3V = dxdydz \tag{G.2}$$

である。

スカラー関数 f の勾配 (gradient) は

$$\vec{\nabla}f = \left(\frac{\partial}{\partial x}f\right)\vec{e}_x + \left(\frac{\partial}{\partial y}f\right)\vec{e}_y + \left(\frac{\partial}{\partial z}f\right)\vec{e}_z \tag{G.3}$$

で与えられる。$\vec{e}_x$, $\vec{e}_y$, $\vec{e}_z$ は、それぞれ x 方向, y 方向, z 方向への単位ベクトルである。３次元運動量演算子 $\hat{\vec{p}}$ は

$$|f\rangle = \int d^3V\ |\vec{x}\rangle f(\vec{x})$$

で与えられる状態 $|f\rangle$ に

$$\hat{\vec{p}}|f\rangle = \int d^3V\ |\vec{x}\rangle\left(-i\hbar\vec{\nabla}f(\vec{x})\right) \tag{G.4}$$

と作用する。

次の量を考える。

$$I \equiv \langle f_1|\,\hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{p}}\,|f_2\rangle \tag{G.5}$$

この量がラプラシアン

$$\begin{aligned}\Delta &= \vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla}\\ &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\end{aligned} \tag{G.6}$$

を用いて

$$I = -\hbar^2\int d^3V\ f_1^*\Delta f_2 \tag{G.7}$$

と計算できることは明らかであろう。

通常の量子力学での仮定にしたがって、状態 $|f_1\rangle$, $|f_2\rangle$ を与える波動関数 $f_1(\vec{x})$, $f_2(\vec{x})$ は二乗可積分であり無限遠方で十分に早くゼロになるとする。このとき、式 (G.5) で与えられる量が、状態 $\hat{\vec{p}}|f_1\rangle$ と状態 $\hat{\vec{p}}|f_1\rangle$ の内積であることは明らかである。