調和振動子の量子力学的波動関数と古典的な単振動

調和振動子のシュレーディンガ方程式を解いて求められる波動関数と，古典的な振舞いである単振動の間の関係はどうなっているのであろうか？これは光子とマクロな電磁波の関係にもかかわってくる。電磁波は物理量（電磁場）の波であって，状態を表す波動関数とは別ものである。電磁波の波束が光子ではなくて，あえて言うなら話は逆で，マクロな電磁波は光子の波束に対応する。光の「波動性と粒子性」というときの「波動性」は光の量子力学的な干渉性のことであり，電磁波そのもののことではない。電磁波の干渉性は光子の量子力学的干渉性に本源がある。電灯や太陽の光は全く位相がそろっていないにもかかわらず，ちゃんと干渉現象を示すのはこのためである。

調和振動子　まず，質量 m，角振動数 ω の 1 次元調和振動子のシュレーディンガ方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\psi(x)=E\psi(x) \tag{1}$$

の，境界条件 $\psi(\pm\infty)=0$，および規格直交条件をみたすエネルギー固有値と固有関数は

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (n=0,1,2,3,...) \tag{2}$$

$$\psi_n(x)=\left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{(\sqrt{2\pi}\ n!)^{1/2}}\ \mathrm{e}^{-s^2/4}\ H_n(s),\quad s=\left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}x \tag{3}$$

である。関数 $H_n(s)$ はエルミート多項式で，漸化式

$$H_0(s)=1,\ H_1(s)=s,\ H_n(s)=sH_{n-1}(s)-(n-1)H_{n-2}(s) \quad (n\geq 2) \tag{4}$$

$$H_n'(s)=nH_{n-1}(s) \quad (n\geq 1) \tag{5}$$

で与えられる。固有関数 (3) の係数は，以下の積分公式（直交関係）から決まる。

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-s^2/2}H_n(s)H_k(s)\ \mathrm{d}s=k!\ \delta_{n,k} \tag{6}$$

コヒーレント状態　固有関数にエネルギー固有値 (2) を用いてシュレーディンガ表示の時間変化

$$\psi_n(x,t)=\psi_n(x)\mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar}=\psi_n(x)\mathrm{e}^{-i(n+1/2)\omega t} \tag{7}$$

を含めても，個々の固有状態では波動関数の対称性により期待値は $\langle x\rangle_t=0$ であり，調和振動子の片鱗も見られない。重ね合わせの状態，例えば α を任意の複素数として

$$\psi(x,t)=(1+|\alpha|^2)^{-1/2}\ (\psi_0(x)+\alpha\psi_1(x)\mathrm{e}^{-i\omega t})\mathrm{e}^{-i\omega t/2} \tag{8}$$

を作ると，$\psi_0(x)\psi_1(x)$ が奇関数だから x の期待値は 0 でなくなり，初めて単振動の兆候が現れる：

$$\langle x\rangle_t=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}(1+|\alpha|^2)^{-1}\ 2|\alpha|\cos(\omega t-\phi) \qquad (\alpha=|\alpha|\mathrm{e}^{i\phi}) \tag{9}$$

そこで，すべての n についての重ね合わせの状態

$$\varPsi_\alpha(x)=\mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\ \psi_n(x),\quad \int_{-\infty}^{\infty}|\varPsi_\alpha(x)|^2\ \mathrm{d}x=1 \tag{10}$$

を考えてみる。これは量子光学の分野でコヒーレント状態（後述）と呼ばれる状態である。時間に依存する波動関数は (7) により

$$\varPsi_\alpha(x,t)=\left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{(\sqrt{2\pi})^{1/2}}\exp\left(-\frac{|\alpha|^2}{2}-\frac{s^2}{4}-\frac{i\omega t}{2}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n\mathrm{e}^{-in\omega t}}{n!}H_n(s) \tag{11}$$

となる。この式の級数の部分は，幸運にもエルミート多項式の母関数表示の公式

$$\exp\left(zs-\frac{z^2}{2}\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{n!}\ H_n(s),\quad z=\alpha\mathrm{e}^{-i\omega t}=|\alpha|\mathrm{e}^{-i(\omega t-\phi)} \tag{12}$$

そのものになっており，この重ね合わせの波動関数を**波束**の形にまとめることができる：

$$\Psi_\alpha(x,t)=\left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{(\sqrt{2\pi})^{1/2}}\exp\left[-\frac{1}{4}(s-2z)^2+\frac{z^2}{2}-\frac{|\alpha|^2}{2}-\frac{i\omega t}{2}\right] \tag{13}$$

$$|\Psi_\alpha(x,t)|^2\ \mathrm{d}x=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{1}{2}[\ s-2|\alpha|\cos(\omega t-\phi)\ ]^2\right]\mathrm{d}s\ ,\quad s=\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\ x \tag{14}$$

運動量に対する波動関数はこれをフーリエ変換して求めることができて，以下となる：

$$\hat{\Psi}_\alpha(p,t)=\left(\frac{2}{m\hbar\omega}\right)^{1/4}\frac{1}{(\sqrt{2\pi})^{1/2}}\exp\left[-\frac{1}{4}(\mu+2iz)^2-\frac{z^2}{2}-\frac{|\alpha|^2}{2}-\frac{i\omega t}{2}\right] \tag{15}$$

$$|\hat{\Psi}_\alpha(p,t)|^2\ \mathrm{d}p=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{1}{2}[\ \mu+2|\alpha|\sin(\omega t-\phi)\ ]^2\right]\mathrm{d}\mu\ ,\quad \mu=\sqrt{\frac{2}{m\hbar\omega}}\ p \tag{16}$$

以上より，座標 x および運動量 p の期待値と揺らぎ（不確定性）は

$$\langle x\rangle_t=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\ 2|\alpha|\cos(\omega t-\phi)\ ,\quad \langle p\rangle_t=-\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\ 2|\alpha|\sin(\omega t-\phi)\ =m\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x\rangle_t \tag{17}$$

$$\Delta x=\sqrt{\langle(x-\langle x\rangle_t)^2\rangle}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\ ,\quad \Delta p=\sqrt{\langle(p-\langle p\rangle_t)^2\rangle}=\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \tag{18}$$

となり，期待値が古典力学に従って単振動する。不確定性はいずれも振幅の $1/2|\alpha|$ であり，$|\alpha|\gg 1$ のとき古典粒子的になる。実際，コヒーレント状態 (10) は，最も古典粒子に近いという意味で，不確定性関係の等号 $\Delta x\Delta p=\hbar/2$ が成り立つ条件から求められた（**最小不確定性波束**）。

生成消滅演算子　エルミート多項式の漸化式を組み合わせた

$$\frac{s}{2}\ \mathrm{e}^{-s^2/4}H_n(s)\ =\ \frac{1}{2}\ \mathrm{e}^{-s^2/4}H_{n+1}(s)+\frac{n}{2}\ \mathrm{e}^{-s^2/4}H_{n-1}(s) \tag{19}$$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\mathrm{e}^{-s^2/4}H_n(s)\ &=\ -\frac{s}{2}\ \mathrm{e}^{-s^2/4}H_n(s)+n\ \mathrm{e}^{-s^2/4}H_{n-1}(s)\\ &=\ -\frac{1}{2}\ \mathrm{e}^{-s^2/4}H_{n+1}(s)+\frac{n}{2}\ \mathrm{e}^{-s^2/4}H_{n-1}(s)\end{aligned} \tag{20}$$

より，以下の関係式が得られる：

$$\left(\frac{s}{2}+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\right)\mathrm{e}^{-s^2/4}H_n(s)=n\mathrm{e}^{-s^2/4}H_{n-1}(s)\ ,\quad \left(\frac{s}{2}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\right)\mathrm{e}^{-s^2/4}H_n(s)=\mathrm{e}^{-s^2/4}H_{n+1}(s) \tag{21}$$

これは，$\psi_n=\mathrm{e}^{-s^2/4}H_n(s)/\sqrt{n!}$ として

$$a\ \psi_n=\sqrt{n}\ \psi_{n-1}\ ,\quad a^\dagger\ \psi_n=\sqrt{n+1}\ \psi_{n+1} \tag{22}$$

と書くことができる。ここで a と $a^\dagger$ は以下で定義される**消滅・ 生成演算子**である：

$$\frac{s}{2}+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}=a,\quad \frac{s}{2}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}=a^\dagger \tag{23}$$

この演算子の対は以下の諸式を満たし，$a^\dagger a$ は固有値が n となるエルミート演算子である：

$$a\ \psi_0=0\ ,\quad a^\dagger a\ \psi_n=n\ \psi_n\ ,\quad [a,a^\dagger]=[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s},s]=1 \tag{24}$$

$$H = \hbar\omega \left(-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2} + \frac{s^2}{4} \right) = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \tag{25}$$

さらに，状態 Ψ_α は $a\Psi_\alpha = \alpha\Psi_\alpha$ の関係をみたし，消滅演算子の固有状態であることがわかる。

電磁場　電磁場のエネルギーは，一般化した正準座標と正準運動量を定義して調和振動子の形に書くことができる（後述）。これを量子化したときのエネルギー固有値 $E_n = (n+1/2)\hbar\omega$ の固有状態は ***n* 光子状態**と呼ばれ，ケットベクトル $|n\rangle$ で表される。この光子数が定まった固有状態はエネルギーが確定しており，時間（位相）は完全に不確定になる。位相のそろった電磁波は，いろんな光子数状態 $\{|n\rangle\}$ の重ね合わせ，すなわち (10) に対応する**コヒーレント状態**

$$|\alpha\rangle = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \, |n\rangle \ , \ (\ \langle\alpha|\alpha\rangle = 1 \ ) \tag{26}$$

で与えられる。つまり電磁波は正準座標空間での**光子の波束**（光子の波動関数の波束で表されるマクロな振動）に対応する物理量なのである。この状態での光子数は，確率

$$P_n(\alpha) = |\langle n|\alpha\rangle|^2 = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \qquad \text{（ポアソン分布）} \tag{27}$$

に従う。母関数

$$f(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\alpha)\lambda^n = \mathrm{e}^{|\alpha|^2(\lambda-1)} \ , \ \ \langle n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(\alpha) n = f'(1) \ \ \text{etc.} \tag{28}$$

を使って計算すれば期待値と分散は以下となる：

$$\langle n\rangle = |\alpha|^2, \ \ \Delta n = \sqrt{\langle (n - \langle n\rangle)^2\rangle} = |\alpha| \ , \ \Delta n/\langle n\rangle = 1/|\alpha| \tag{29}$$

実際，$\alpha = |\alpha|\mathrm{e}^{i\bar{\phi}}$ として，$|\alpha| \gg 1$ のとき，以下のように 粒子数表示でも 波束で近似される：

$$P_n \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}\ |\alpha|} \exp\left(-\frac{(n-|\alpha|^2)^2}{2|\alpha|^2} \right) \ , \ \ |\alpha\rangle \simeq \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{P_n} \ \mathrm{e}^{in\bar{\phi}} |n\rangle \tag{30}$$

粒子数表示に共役な**位相表示**は，位相の値の範囲が $0 \sim 2\pi$ であるため，以下のように先ず離散型の規格直交系[1]として定義し，後で $M \to \infty$ とする（詳しくはノート [212] の最後を参照）：

$$|\phi_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{n=0}^{M-1} \mathrm{e}^{in\phi_m} |n\rangle \ , \ \ \phi_m = \frac{2\pi}{M} \ m \ , \ \ (m = 0, 1, 2, ..., M-1) \tag{31}$$

このとき，コヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ での位相 ϕ_m の確率分布は (30) を用いて

$$|\langle\phi_m|\alpha\rangle|^2 \simeq \frac{2\pi}{M} \frac{2\Delta n}{\sqrt{2\pi}} \ \exp\left(-\frac{(2\Delta n)^2}{2} (\phi_m - \bar{\phi})^2 \right) \ , \ \ (\Delta n = |\alpha|) \tag{32}$$

と近似される。$M \to \infty$ のとき ϕ_m を連続変数 ϕ とみなし，$2\pi/M = \mathrm{d}\phi$ と置けば，平均値が $\bar{\phi}$ のガウス分布であり，不確定性関係「$\Delta n \Delta\phi = 1/2$ 」が得られ，$\Delta\phi \simeq 1/2|\alpha|$ となる。すなわち，$|\alpha| \gg 1$ のとき，**位相もそろった波**になることがわかる。

マクロな重ね合わせ状態　最後に，位相が逆向きに振動する 2 つの調和振動子の波束に対応するコヒーレント状態の重ねあわせの状態，$(\Psi_\alpha + \Psi_{-\alpha})/\sqrt{2}$，つまり**偶数次**の固有関数だけの重ね合わせの状態を考えてみよう。2 つの波動関数は重なりがあるため直交しておらず，まだ規格化はされていない。エルミート多項式の直交関係 (6) を用いれば

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \ |\Psi_\alpha + \Psi_{-\alpha}|^2 \ \mathrm{d}s = 2\mathrm{e}^{-|\alpha|^2} \cosh|\alpha|^2 = 1 + \mathrm{e}^{-2|\alpha|^2} \tag{33}$$

[1] M が有限のときは完全系ではない。

となる。振幅が十分大きいときには2つの部分の重なり積分（$= \mathrm{e}^{-2|\alpha|^2}$）はほとんど0であり，ほぼ直交していると見なしてよい。この状態では，座標も運動量も期待値は0であるが，決して振幅が0の状態に確率が集中しているわけではない。$|\alpha| \gg 1$ の場合はいずれも分散がマクロな大きさになるため古典的な意味で振幅が0の状態ではないのである。実際，零点振動以外にマクロなエネルギー（電磁波では光子数）をちゃんともっている。要するに，逆位相の2つの単振動の可能性を兼ね備えた，量子力学的重ね合わせの状態であり，量子力学独特の状態である。もし，コヒーレント状態で表されるレーザ光を用いてこのような状態を作ることができれば，**マクロな量子力学的重ね合わせの状態**を実現できたことになる。ノート [212] で詳しく見るように，実際には，**スクイーズド状態**と呼ばれる状態を利用して，これに近い状態が作られる。

（付）電磁場のエネルギー　簡単のため，z 方向に伝わる波数 k，角振動数 $\omega(=ck)$ の平面波で，偏りも1方向（電場が x 方向で磁場が y 方向）のものだけを考える。$\boldsymbol{E} = -\partial \boldsymbol{A}/\partial t$ だから，この偏光ではベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ は x 成分だけである。もちろん実数だから

$$A_x(z,t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\,(a_t\,\mathrm{e}^{ikz} + a_t^*\,\mathrm{e}^{-ikz}),\quad (a_t = \alpha\mathrm{e}^{-i\omega t},\ a_t^* = \alpha^*\mathrm{e}^{i\omega t}) \tag{34}$$

とすると，$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$ より

$$\begin{aligned} B_y(z,t) = \frac{\partial}{\partial z}A_x(z,t) &= \frac{ik}{\sqrt{V}}\,(a_t\,\mathrm{e}^{ikz} - a_t^*\,\mathrm{e}^{-ikz}) \\ &= \frac{k}{\sqrt{V}}\,[\,i(a_t - a_t^*)\cos kz - (a_t + a_t^*)\sin kz\,] \end{aligned} \tag{35}$$

となる。電場も同様に計算できて $E_x(z,t) = cB_y(z,t)$ となるから，エネルギーは

$$\mathcal{H} = \int\left(\frac{\epsilon_0 {E_x}^2}{2} + \frac{{B_y}^2}{2\mu_0}\right)\mathrm{d}V = \epsilon_0 c^2 \int B_y(z,t)^2 \mathrm{d}V \qquad (\epsilon_0\mu_0 = 1/c^2,\ ck = \omega) \tag{36}$$

で与えられる。これに (35) を代入し，

$$\frac{1}{V}\int \cos^2 kz\ \mathrm{d}V = \frac{1}{V}\int \sin^2 kz\ \mathrm{d}V = \frac{1}{2}\ ,\quad \frac{1}{V}\int \cos kz \sin kz\ \mathrm{d}V = 0 \tag{37}$$

を用いて積分すればよい。さらに，正準座標 Q と正準運動量 P を

$$Q = \sqrt{\epsilon_0}(a_t + a_t^*)\ ,\quad P = \dot{Q} = -i\omega\sqrt{\epsilon_0}(a_t - a_t^*) \tag{38}$$

で導入すると，以下のように1次元調和振動子の形が得られる：

$$\mathcal{H} = \frac{P^2}{2} + \frac{\omega^2 Q^2}{2}\ ,\quad \dot{Q} = P = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial P}\ ,\quad \dot{P} = -\omega^2 Q = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial Q} \tag{39}$$

実際の電磁場は，すべての波数ベクトルと2つの偏りの自由度に対応する振動子の集まりになる。

解析力学では，正準変数を用いたハミルトン方程式は，**ポアソンかっこ式**

$$\{X,Y\} = \sum_i \left(\frac{\partial X}{\partial q_i}\frac{\partial Y}{\partial p_i} - \frac{\partial Y}{\partial q_i}\frac{\partial X}{\partial p_i}\right) \tag{40}$$

を使って

$$\dot{Q} = \{Q,\mathcal{H}\}\ ,\quad \dot{P} = \{P,\mathcal{H}\}\ ,\quad \{Q,P\} = 1 \tag{41}$$

と表される。**量子化**するには，ポアソンかっこ $\{X,Y\}$ を交換関係 $(i\hbar)^{-1}[X,Y]$ に対応させて，P, Q を交換関係 $[Q,P] = i\hbar$ をみたす演算子とみなせばよい。**生成・消滅演算子**を

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\,(\omega Q + iP)\,,\quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}\,(\omega Q - iP)\,,\quad [a,a^\dagger] = 1 \tag{42}$$

で定義すれば，ハミルトニアンは (25) と同じ形で与えられる。