

=====
調和振動子とコヒーレント状態

2003.10.26 ... 調和振動子

2003. x. x ... コヒーレント

by KENZOU
=====

§ 1. 調和振動子

<abstract>
調和振動子の一般論と電場により摂動を受けた時の状況を調べ、この状態はあたかもコヒーレント状態と呼ばれる状態に良く似ていることをレポートする。

1. シュレーディンガー方程式

質量 m 、電荷 e をもつ 1 次元調和振動子を考える。ハミルトニアンは

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

となる。これからシュレーディンガー方程式は $p = -i\hbar \frac{d}{dx}$ とおいて

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \mathbf{y}_n(x) = \mathbf{e}_n \mathbf{y}_n(x) \quad (n=0, 1, 2, \dots) \tag{2}$$

となる。ここで \mathbf{y}_n 、 \mathbf{e}_n はそれぞれ固有関数とエネルギー固有値である。

2. シュレーディンガーの方程式を解く

長さの次元を持つ量 l を導入して、方程式を無次元化する。

$$l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad y = \frac{x}{l} \tag{3}$$

(3)を(2)に代入して整理すると

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2 \right) \mathbf{y}_n(l y) = -\frac{2\mathbf{e}_n}{\hbar\omega} \mathbf{y}_n(l y) \tag{4}$$

となる。この方程式は $y \rightarrow \infty$ の極限で (4) の右辺の $1/\omega$ が $\rightarrow 0$ となることから

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2 \right) \mathbf{y}_n(l y) = 0 \tag{5}$$

に帰着し、その漸近解は(5)より $\mathbf{y}_n(l y) = \exp(\pm y^2/2)$ となるから、 $y \rightarrow \infty$ で波動関数が発散しないことを要求して、方程式(4)を満たす波動関数を

$$\mathbf{y}_n(l y) = \exp(-y^2/2) \mathbf{f}_n(y) \tag{6}$$

とおく。(6)を(4)に代入して \mathbf{f} についての方程式に書きなおすと

$$\left[\frac{d^2}{dy^2} - 2y \frac{d}{dy} + \left(\frac{2e_n}{\hbar \omega} - 1 \right) \right] f_n(y) = 0 \quad (7)$$

となり、これはエルミート多項式 $\left(H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}, n=0, 1, 2, \dots \right)$ の満たす

微分方程式 $\left(\left[\frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + 2n \right] H_n = 0 \right)$ となる。したがって、

$$f_n(y) = N_n H_n(y), \quad (N_n \text{ は規格化因子}) \quad (8)$$

よって求める固有関数は

$$y_n(x) = N_n \exp(-x^2/2I^2) H_n(x/I) \quad (9)$$

となる。また、 $\frac{2e_n}{\hbar \omega} - 1 = 2n$ より固有エネルギーは

$$e_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (9)$$

を得る。 N_n は規格化条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx y_n(x) y_n(x) = N_n^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d(Iy) \exp(-y^2) H_n(y) H_n(y) = N_n^2 I \sqrt{\pi} 2^n n! = 1 \quad (10)$$

より、

$$N_n = (I \sqrt{\pi} 2^n n!)^{-1/2} \quad (11)$$

(10)の導出にエルミート多項式の直交性を利用した。

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx H_n(x) H_m(x) \exp(-x^2) = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nm} \quad (12)$$

ここで I の正体を明らかにしておく。 $n=0$ の基底状態の固有関数は

$$y_0(x) = N_0 \exp(-x^2/2I^2) H_0(x/I) = N_0 \exp(-x^2/2I^2) \quad (13)$$

位置の揺らぎ $(Dx)^2 (= \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)$ を求めると

$$(Dx)^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 y_0^2(x) = N_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 \exp(-x^2/I^2) = 4I^2 \quad (14)$$

これから

$$\Delta x/2 = l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (15)$$

となって、結局、 l はゼロ点振動の古典的半径を示しているということになる。

3. 固有関数の具体的な形を示す

エルミート多項式の具体的な形は

エルミート多項式の漸化式

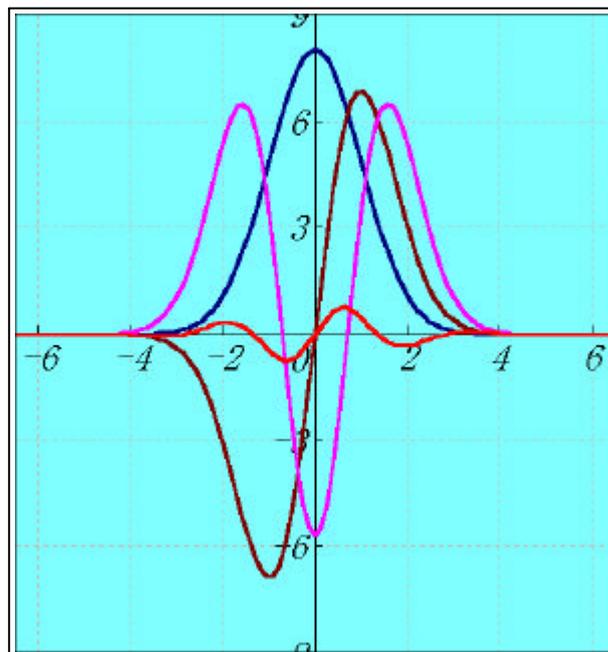
$$\begin{aligned}
 H_0 &= 1, & H_{n+1}(x) &= 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \\
 H_1 &= 2x, & \frac{d}{dx}H_n(x) &= 2nH_{n-1}(x) \\
 H_2 &= 4x^2 - 2, \\
 H_3 &= 8x^3 - 12x, \\
 H_4 &= 16x^4 - 48x^2 + 12, \\
 H_5 &= 32x^5 - 160x^3 + 120x,
 \end{aligned} \quad (13)$$

となるので、 $l=1$ で規格化した固有関数は

$$y_0(x) = p^{-1/4} \exp(-x^2/2) \quad (14)$$

$$y_1(x) = p^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(-x^2/2) 2x \quad (15)$$

$$y_2(x) = p^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{8}} \exp(-x^2/2) (4x^2 - 2) \quad (16)$$



青色 : y_0
 茶色 : y_1
 紅色 : y_2
 :
 赤色 : y_5

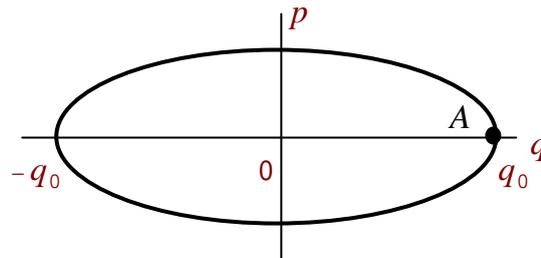
図.1 調和振動子の固有関数

確率密度分布は波動関数の2乗だから、図.1の基底状態を見ると、**中央付近に存在確率密度が高い形状**になっている。これは**古典的な単振動から予想されるものとは、完全に**

正反対のものである。すなわち、古典的な単振動では原点付近において粒子の速度は速いので滞在時間は短く、一方振動の両端では速度が遅くなるので滞在時間は長くなる。つまり、**粒子の存在確率は振動の両端で高く、中央で低いというのが古典的単振動**（蛇足参照）である。しかし、量子数が大きくなるにつれて古典的なイメージに漸近していく。

[蛇足]

古典力学での1次元調和振動子の *Hamiltonian* は $H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{k}{2}q^2$ で与えられる。運動方程式の解は q_0, \mathbf{q} が初期値から決まるとして $q = q_0 \cos(\mathbf{w}t + \mathbf{q}), p = -m\mathbf{w}q_0 \sin(\mathbf{w}t + \mathbf{q})$ となる。エネルギー E が一定の位相空間での軌跡は図のような楕円となる。 $\mathbf{q} = 0, q_0 > 0$ であれば q 軸上の点 A から軌道上を時計



回りに運動することになる。この運動を q 軸上に射影したものは $\pm q_0$ の間を角振動数 \mathbf{w} で往復運動する。そこで、 q が $q \sim q + dq (dq > 0)$ に存在する確率 $f(q) dq$ を求めてみる。 dq に存在している時間は1周期 ($= 2\mathbf{p}/\mathbf{w}$) の間に往復があることを加味して $2dt$ であるから

$$f(q) dq = \frac{2dt}{2\mathbf{p}/\mathbf{w}}$$

となる。これから確率密度 $f(q)$ を求めると

$$f(q) = \frac{\mathbf{w}}{\mathbf{p}} \frac{dt}{dq} = \frac{1}{\mathbf{p}} \frac{1}{\sqrt{q_0^2 - q^2}}$$

となる。このことから分かるように確率密度は振動の両端で非常に大きな値を取るようになる。念の為に確率密度を $-q_0$ から q_0 の範囲で積分すると

$$\int_{-q_0}^{q_0} dq f(q) = \frac{1}{\mathbf{p}} \int_{-1}^1 dz \frac{dz}{\sqrt{1-z^2}} = 1$$

となって、調和振動子の q は $-q_0$ から q_0 の範囲のどこかに必ずあることが分かる。[蛇足終わり]

4. 調和振動子の基底状態での座標 x と運動量 p の期待値を求める

基底状態の固有関数は $\mathbf{y}_0(x) = N_0 \exp(-x^2/2\mathbf{I}^2)$ であるから、座標 x の期待値は

$$\langle x \rangle = \langle \mathbf{y}_0(x) | x | \mathbf{y}_0(x) \rangle = N_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dx x \exp(-x^2/\mathbf{I}^2) = 0 \quad (17)$$

$$\langle p \rangle = \langle \mathbf{y}_0(x) | -i\hbar \frac{d}{dx} | \mathbf{y}_0(x) \rangle = -i\hbar N_0 \frac{1}{I^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x \exp(-x^2/I^2) = 0 \quad (18)$$

(17)の結果から、**基底状態にある粒子の単振動イメージはでてこない!**

5. 調和振動子の双極子遷移確率

話は変わって、ついでに調和振動子の選択ルールを調べておこう。このために位置座標 x の行列要素を求める。

$$\langle n | x | m \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \mathbf{y}_n^*(x) x \mathbf{y}_m(x) \quad (19)$$

$$\mathbf{y}_n(x) = N_n \exp(-x^2/2I^2) H_n(x/I) \quad (20)$$

$$\begin{aligned} x \mathbf{y}_m &= N_m \exp(-x^2/2I^2) I \frac{x}{I} H_m(x/I) \\ &= \frac{I}{2} N_m \exp(-x^2/2I^2) \{ H_{m+1}(x/I) + 2m H_{m-1}(x/I) \} \\ &= \frac{I}{2} \left\{ \frac{N_m}{N_{m+1}} \mathbf{y}_{m+1}(x) + \frac{N_m}{N_{m-1}} 2m \mathbf{y}_{m-1}(x) \right\} \\ &= \frac{I}{2} \{ \sqrt{2m+2} \mathbf{y}_{m+1}(x) + \sqrt{2m} \mathbf{y}_{m-1}(x) \} \end{aligned} \quad (21)$$

(21)の左から $\mathbf{y}_n^*(x)$ をかけて積分し、 $\mathbf{y}_n(x)$ の規格直交関係を使って

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \mathbf{y}_n^*(x) x \mathbf{y}_m(x) = \frac{I}{2} \sqrt{2(m+1)}, \quad n=m+1 \quad (22a)$$

$$= \frac{I}{2} \sqrt{2m}, \quad n=m-1 \quad (22b)$$

$$= 0, \quad n \neq m \pm 1 \quad (22c)$$

(22)は**選択則**と呼ばれる。 $\langle n | x | m \rangle$ は分子に電磁波があたったとき、分子の振動状態が $|m\rangle$ から $|n\rangle$ に変化する双極子遷移確率の計算ででてくる。この遷移確率は $|\langle n | x | m \rangle|^2$ に比例する。(22)は、調和振動している分子の双極子遷移は元の状態 $|m\rangle$ から上るいは下に一つだけ遷移が許されるということを表している。つまり、**調和振動子のエネルギー順位は双極子遷移では一段ずつしか上がり下がりできない。**

6. 電場の摂動を受けた調和振動子

(1) 固有関数を求める

質量 m 、電荷 e をもつ 1 次元調和振動子に電場 F が印加されたときのハミルトニアンは

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} - eFx \\
 &= \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \left(x - \frac{eF}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{e^2 F^2}{m\omega^2}
 \end{aligned} \tag{23}$$

ハミルトニアン(23)をよく見ると、丁度(1)のハミルトニアンを x 軸方向に $x_0 = \frac{eF}{m\omega^2}$ シフト

し y 軸方向に $y_0 = -\frac{1}{2} \frac{e^2 F^2}{m\omega^2}$ ($=e$) シフトしたものであることが分かる(2次曲線の数学を思い出そう)。そこで

$$\mathbf{x} = x - x_0 \tag{24}$$

$$\mathbf{e}_n = E_n - e \tag{25}$$

とおくことでハミルトニアン(1)と同じように解けることになる。結果は

$$\mathbf{y}_n(x) = N_n \exp\left(-\mathbf{x}^2/2\mathbf{l}^2\right) H_n(\mathbf{x}/\mathbf{l}) \tag{26}$$

$$N_n = (\mathbf{l}\sqrt{\pi} 2^n n!)^{-1/2}$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + e, \quad e = -\frac{1}{2} \frac{e^2 F^2}{m\omega^2}, \quad n=0, 1, 2, \dots \tag{27}$$

となる。これから波動関数を求めてその時間変化を調べていくわけであるが、電場による摂動を受けた場合は、**摂動のない場合と異なり粒子が古典振動と同じように振動すること**を示せる(「コヒーレント状態」を参照)。

(2) 波動関数の時間変化

波動関数の時間変化は

$$\mathbf{y}(x,t) = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \mathbf{y}(x,0) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \mathbf{f}_n(x) e^{-\frac{iHt}{\hbar}}, \quad \mathbf{y}(x,0) = \mathbf{y}_0(x) \tag{28}$$

に従う。ここで係数 A_n は $\mathbf{f}_n(x)$ の直交性から求まる。すなわち

$$\begin{aligned}
 A_n &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \mathbf{f}_n(x) \mathbf{y}(x,t=0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \mathbf{f}_n(x) \mathbf{y}_0(x) \\
 &= N_0 N_n \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{\mathbf{x}^2}{2\mathbf{l}^2}} e^{-\frac{\mathbf{x}^2}{2\mathbf{l}^2}} H_n(\mathbf{x}/\mathbf{l}) H_0(\mathbf{x}/\mathbf{l})
 \end{aligned}$$

$$=N_0N_n \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-\frac{\mathbf{a}^2}{4}} e^{-\left(\frac{\mathbf{a}}{2}\right)^{-z\mathbf{a}}} e^{-z^2} H_n(z) H_0(z+\mathbf{a}) \mathbf{I} \quad (29)$$

ここで $z=\mathbf{x}/\mathbf{l}$, $eF/\mathbf{l}m\mathbf{w}^2=\mathbf{a}$ おいた。 $H_0(z)=1$ であるから(29)式は

$$A_n=N_0N_n \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-\frac{\mathbf{a}^2}{4}} e^{-\left(\frac{\mathbf{a}}{2}\right)^{-z\mathbf{a}}} e^{-z^2} H_n(z) \mathbf{I} \quad (30)$$

エルミート多項式の母関数 $e^{2tx-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!}$ より $t=-\frac{\mathbf{a}}{2}$ とすれば

$$\exp\left(-\left(\frac{\mathbf{a}}{2}\right)^2 - z\mathbf{a}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{(-\mathbf{a}/2)^n}{n!} \quad (31)$$

(31)を(29)に代入して

$$\begin{aligned} A_n &= N_0N_n \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-\frac{\mathbf{a}^2}{4}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-\mathbf{a}/2)^m}{m!} H_m(z) e^{-z^2} H_n(z) \mathbf{I} \\ &= N_0N_n \sum_{m=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-\frac{\mathbf{a}^2}{4}} \frac{(-\mathbf{a}/2)^m}{m!} H_m(z) e^{-z^2} H_n(z) \mathbf{I} \\ &= N_0N_n \sum_{m=0}^{\infty} e^{-\frac{\mathbf{a}^2}{4}} \frac{(-\mathbf{a}/2)^m}{m!} \sqrt{\mathbf{p}} 2^m m! \mathbf{d}_{nm} \mathbf{I} \\ &= N_0N_n e^{-\frac{\mathbf{a}^2}{4}} \frac{(-\mathbf{a}/2)^n}{n!} \sqrt{\mathbf{p}} 2^n n! \mathbf{I} \\ &= e^{-\frac{\mathbf{a}^2}{4}} (-\mathbf{a})^n \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \end{aligned} \quad (32)$$

ここで、エルミート多項式の直交関係 $\int_{-\infty}^{+\infty} dx H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} dx = \mathbf{d}_{nm} \cdot 2^n \cdot n! \sqrt{\mathbf{p}}$ を使った。

さて、 n 番目の固有状態にいる確率を求めてみると

$$|A_n \exp(-iE_n t/\hbar)|^2 = |A_n|^2 = \frac{(\mathbf{a}^2/2)^n}{n!} \exp(-\mathbf{a}^2/2) \quad (33)$$

となり、これはポアソン分布となる。つまり、任意の時刻での系のエネルギーを測定すると **エネルギーの観測値はポアソン分布となる** (「コヒーレント」の項参照) ことがわかった。

(3) $x_{max}(t)$ の時間変化を求める

さて、粒子の存在確率 $|\mathbf{y}(x,t)|^2$ が最大の位置 $x_{max}(t)$ の時間変化を次ぎに調べてみる。波動関数は、(2)での結果より

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(x,t) &= \sum_{n=0}^{\infty} A_n \mathbf{f}_n(x) e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\mathbf{a}^2}{4}} (-\mathbf{a})^n \frac{1}{2^n n!} \frac{1}{\sqrt{1\sqrt{\mathbf{p}}}} e^{-\frac{x^2}{2I^2}} H_n(z) e^{-i\mathbf{w}\left(n+\frac{1}{2}\right)t - i\frac{\mathbf{e}}{\hbar}t} \\ &= e^{-\frac{i\mathbf{w}t}{2} - i\frac{\mathbf{e}t}{\hbar}} e^{-\frac{\mathbf{a}^2}{4}} \frac{1}{\sqrt{1\sqrt{\mathbf{p}}}} e^{-\frac{z^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{\mathbf{a}}{2} e^{-i\mathbf{w}t} \right)^n \frac{1}{n!} H_n(z) \end{aligned}$$

エルミート多項式の母関数を使って

$$= e^{-\frac{i\mathbf{w}t}{2} - i\frac{\mathbf{e}t}{\hbar}} e^{-\frac{\mathbf{a}^2}{4}} \frac{1}{\sqrt{1\sqrt{\mathbf{p}}}} e^{-\frac{z^2}{2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{a}^2}{4} e^{-2i\mathbf{w}t} - \mathbf{a} e^{-i\mathbf{w}t} z\right) \quad (34)$$

従って $|\mathbf{y}(x,t)|^2$ は

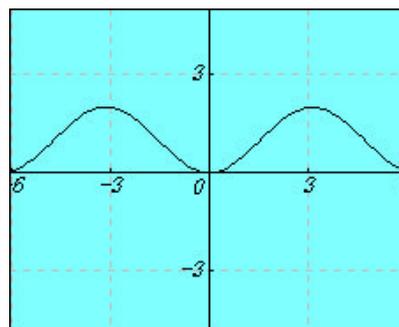
$$\begin{aligned} |\mathbf{y}(x,t)|^2 &= \frac{1}{1\sqrt{\mathbf{p}}} e^{-\frac{z^2}{2}} \exp\left(-\frac{\mathbf{a}^2}{2} \cos 2\mathbf{w}t - \mathbf{a} 2z \cos \mathbf{w}t\right) \\ &= \frac{1}{1\sqrt{\mathbf{p}}} \exp(-(\mathbf{a} \cos \mathbf{w}t + z)^2) \end{aligned} \quad (35)$$

となる。つまり、波動関数は中心 $z = -\mathbf{a} \cos \mathbf{w}t$ (36)

のガウス分布となる。 $z = (x - x_0) / I$, $I = \sqrt{\hbar / m\mathbf{w}}$, $\mathbf{a} = eF / I m \mathbf{w}^2$ であるから、(36)より

$$x_{max}(t) = I \mathbf{a} (1 - \cos \mathbf{w}t) = \frac{eF}{m\mathbf{w}^2} (1 - \cos \mathbf{w}t) \quad (37)$$

が得られる。これは $t=0$ で **原点に静止していた古典粒子の単振動の軌跡と同一** である。



$y=1-\cos(x)$ のカーブ

§ 2 . コヒーレント状態

1. 生成消滅演算子

2 .