第 IV 部

量子論の発展的話題について

1　確率の流れ

既に第 III 部定理 1.21 にて確率の総和が 1 になることを見てきたが，それは全空間での積分値が 1 になることを意味しているのであった．実際には確率についてはもっと強く，各点 $\boldsymbol{x}$ での保存則を導くことができる．ここではその保存則を 3 次元空間を運動する粒子にポテンシャルが働いている場合について示そう．

まず，各点での確率密度を,

$$|\Psi(\boldsymbol{x},t)|^2 \equiv \rho(\boldsymbol{x},t) \tag{1.1}$$

によって定義しよう．この式の左辺はキチンと確率密度を表していることが，示されているのでこのように定義することは問題ない．この式にシュレディンガー方程式を当てはめられるようにするために，t で微分してみよう．

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(\boldsymbol{x},t)|^2 = \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) = \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi \tag{1.2}$$

ここで，3 次元空間を運動する粒子にポテンシャルが働いている場合のシュレディンガー方程式は,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\Psi \tag{1.3}$$

だから，この式の両辺を $i\hbar$ で割り，複素共役をとるなどして式 (1.2) に代入すると,

$$\begin{aligned}
\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi &= \frac{1}{i\hbar}\left\{\Psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right) - \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\Psi^*\right]\Psi\right\} &(1.4)\\
&= -\frac{\hbar}{2im}\left[\Psi^*\left(\nabla^2\Psi\right) - \left(\nabla^2\Psi^*\right)\Psi\right] &(1.5)\\
&= \nabla\cdot\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^*(\nabla\Psi) - (\nabla\Psi^*)\Psi\right] &(1.6)
\end{aligned}$$

ここで，ベクトル解析の公式,

$$\nabla\cdot\left[A\left(\nabla B\right) - \left(\nabla A\right)B\right] = A\left(\nabla^2 B\right) - \left(\nabla^2 A\right)B \tag{1.7}$$

を用いた．以上により,

$$j(\boldsymbol{x},t) \equiv -\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^*(\nabla\Psi) - (\nabla\Psi^*)\Psi\right] \tag{1.8}$$

と置けば,

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\boldsymbol{x},t) = \frac{\partial}{\partial t}|\Psi(\boldsymbol{x},t)|^2 = \nabla\cdot(-j(\boldsymbol{x},t)) \tag{1.9}$$

より,

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot j = 0 \tag{1.10}$$

が得られた．これは電磁気学や流体力学などにも出てくる，連続の式と呼ばれるものである．

ここで用いた公式 (1.7) の証明は次に記す:

定理 1.1.

$$\nabla\cdot\left[A\left(\nabla B\right) - \left(\nabla A\right)B\right] = A\left(\nabla^2 B\right) - \left(\nabla^2 A\right)B \tag{1.11}$$

証明. まず記号を簡単にするために $(x,y,z) = (x^i)$ と略記する．このとき,

$$\begin{aligned}
\nabla\cdot\left[A\left(\nabla B\right) - \left(\nabla A\right)B\right] &= \nabla\cdot\left(A\frac{\partial B}{\partial x^i} - \frac{\partial A}{\partial x^i}B\right) &(1.12)\\
&= \sum_i\frac{\partial}{\partial x^i}\left(A\frac{\partial B}{\partial x^i} - \frac{\partial A}{\partial x^i}B\right) &(1.13)\\
&= \sum_i A\frac{\partial^2 B}{\partial {x^i}^2} - \frac{\partial^2 A}{\partial {x^i}^2}B &(1.14)\\
&= A(\nabla^2 B) - (\nabla^2 A)B &(1.15)
\end{aligned}$$

以上により示された．　□

さて，ここでは連続の式が一体どういう意味を持っているのか考えてみよう．式 (1.10) の両辺を 3 次元空間の閉領域 V で積分してみよう．すると，

$$\frac{\partial}{\partial t}\iiint_V \rho(\boldsymbol{x},t)dv = \iiint_V \frac{\partial}{\partial t}\rho(\boldsymbol{x},t)dv = \iiint_V \nabla\cdot[-j(\boldsymbol{x},t)]\,dv \tag{1.16}$$

この式の右辺にガウスの発散定理を適用すると，

$$\iiint_V \nabla\cdot[-j(\boldsymbol{x},t)]\,dv = \iint_{\partial V} -j(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{n}ds \tag{1.17}$$

だから，結局

$$\frac{\partial}{\partial t}\iiint_V \rho(\boldsymbol{x},t)dv = \iint_{\partial V} -j(\boldsymbol{x},t)\cdot\boldsymbol{n}ds \tag{1.18}$$

が得られる．この式の右辺の法線ベクトル $\boldsymbol{n}$ は閉曲面の外側を向くように定義されているので，確率の流れ $j(\boldsymbol{x},t)$ に負号が付いていることより閉曲面の内部に流れ込む向きになっている．従って，この式の意味を考えてみると，左辺は閉領域 V に単位時間当たりに確率が増える量を表し，右辺は単位時間当たりに $j(\boldsymbol{x},t)$ がこの閉領域 V に流れ込む量を表している．

つまり，$j(\boldsymbol{x},t)$ は電荷に対する電流のように単位時間当たりに流れる確率を表している．

このことより，この式は，確率の空間分布について，

1. その閉領域に流れ込む分と流れ出す分の差だけ確率が増える．
2. どこかから勝手に湧き出したり，消えたりしない．

が成り立つことが分かり，直感的には確率の瞬間移動がないという，全確率の保存よりもかなり強い局所的な保存則となっていることが分かる．

2　系の時間発展について

2.1　外場のかかった系の時間発展

閉じた系の時間発展は第 III 部 1 節の基本原理 (4)(式 (1.32)) において紹介されるシュレディンガー方程式に従うことは既に述べた．一般に外部系と相互作用をする場合は，その外部系も含む系を考えないと正しく時間発展を記述できないのであるが，ここに例外がある．外部系の影響が外場のみとみなせたり，系のパラメータ (例えばバネ定数) の値を変化させるだけだとみなせるような場合で，しかもその外場やパラメータの値が系の状態変化に左右されずに，あらかじめ定められたとおりに時間発展するような場合である．そのような場合には，全体系に基本原理 (4) を適用した式から，対象とする系だけをみたときの時間発展を簡単に導くことができ，その結果は多くの場合，また式 (1.32) の形になる:

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\Psi\rangle. \tag{2.1}$$

もちろんここで元の基本原理の場合と異なりハミルトニアン $\hat{H}$ が時間に影響する $\hat{H}=\hat{H}(t)$ という形で現れることになるが，第 III 部定理 1.21 の確率の保存の議論がそのまま成り立つので，系の状態ベクトルの変化は，無限小のユニタリ変換を連続にしたものになっている．

ここでこの例を 2 つ挙げる．調和振動子のハミルトニアンは,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \tag{2.2}$$

であるが，外場 $\phi=\phi(t)$ がかかったときには，その古典的ポテンシャルエネルギーは $-x\phi(t)$ となるからこの場合のハミルトニアンは時間に影響されるものとなり，

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 - x\phi(t) \tag{2.3}$$

となる．これが外場のかかった場合の例である．一方パラメータが時間変化する例としてはバネ定数が $\omega=\omega(t)$ となるので，やはりハミルトニアンは時間に影響されるものとなり，

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega(t)^2}{2}\hat{x}^2 \tag{2.4}$$

となる．

2.2 時間発展演算子

2.2.1 一般論

閉じた系または前節で述べたような場合は，状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ も $|\Psi(0)\rangle$ も同じヒルベルト空間の元であり，時々刻々と連続的に変化するのであるから，これは無限小の変換 $\hat{U}(dt)$ を考えると，

$$|\Psi(t+dt)\rangle = \hat{U}(dt)|\Psi(t)\rangle \tag{2.5}$$

のように書ける．時刻 0 から時刻 t までの間にこの無限小の変換が随時行われるのでその変換は全体として一つの演算子 $\hat{U}(t)$ で表されるはずである．従って次が成り立つ:

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle \tag{2.6}$$

ここでこの無限小の演算子の無限積は，式 (2.6) の両辺が同じヒルベルト空間の元であることより，確かに演算子になっている．この演算子は全確率が保存することより，

$$\langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle = \langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \langle\hat{U}(t)\Psi(0)|\hat{U}(t)\Psi(0)\rangle = \langle\Psi(0)|\hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t)\Psi(0)\rangle \tag{2.7}$$

であるが，これが任意の $|\Psi(0)\rangle$ で成り立つのだから，

$$\hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t) = \hat{1} \tag{2.8}$$

が成り立つ．ここでこの時間発展は逆向きにも解くことが出来るのであったから，当然逆演算子 $\hat{U}^{-1}(t)$ が存在するが，これは明らかに $\hat{U}^\dagger(t)$ に等しい:

$$\hat{U}^{-1}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \tag{2.9}$$

一般に (2.9) 式のように $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$ を満たす演算子 $\hat{U}$ をユニタリ演算子と呼ぶので，式 (2.9) より $\hat{U}(t)$ はユニタリ演算子であり，状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ の時間発展はユニタリ発展であることが分かる．$\hat{U}(t)$ の満たすべき方程式は，(2.6) をシュレディンガー方程式 (2.1) に代入して，

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle = \hat{H}(t)\hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle, \tag{2.10}$$

この式が任意の $|\Psi(0)\rangle$ で成り立つから，結局，

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}(t) = \hat{H}(t)\hat{U}(t), \tag{2.11}$$

が成り立つことになる．これは時間に関する 1 階の微分方程式だから初期条件がいるが，式 (2.6) において $t=0$ を代入することにより，

$$\hat{U}(0) = \hat{1} \tag{2.12}$$

が成り立つからこれが初期条件になる．

2.2.2 ハミルトニアンが時間に依存しない場合

ハミルトニアンが時間に依存しない閉じた系などの場合，式 (2.11)，初期条件 (2.12) を満たす解は次の通りである:

$$\hat{U}(t) = \sum_n \frac{1}{n!}\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}\right)^n t^n \tag{2.13}$$

実際，この式を式 (2.11) に代入してみると，$\hat{H}(t) = \hat{H}$ だから，

$$\text{左辺} = i\hbar \frac{d}{dt}\hat{U}(t) \tag{2.14}$$
$$= i\hbar \frac{d}{dt}\left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}\right)^n t^n\right) \tag{2.15}$$
$$= i\hbar \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!}\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}\right)^n t^{n-1}\right) \tag{2.16}$$
$$= i\hbar \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!}\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}\right)^{m+1} t^{m}\right) \tag{2.17}$$
$$= \hat{H} \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!}\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}\right)^{m} t^{m}\right) \tag{2.18}$$
$$= \hat{H}U(t) \tag{2.19}$$
$$= \text{右辺} \tag{2.20}$$

と微分方程式 (2.11) を満たしている．初期条件は明らかだろう．また，この解の両辺の共役をとることにより，

$$\hat{U}^\dagger(t) = \sum_n \frac{1}{n!}\left(\frac{\hat{H}^\dagger}{-i\hbar}\right)^n t^n = \sum_n \frac{1}{n!}\left(-\frac{\hat{H}}{i\hbar}\right)^n t^n \tag{2.21}$$

が得られる．ところで (2.13) 式右辺の $\hat{H}$ をただの数だと思えば，当然指数関数の展開公式より，

$$\exp\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}t\right) = \sum_n \frac{1}{n!}\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}\right)^n t^n \tag{2.22}$$

が得られこれは通常通り微分方程式 (2.11) の演算子を数とみなしたものの解となっている．そこでこの展開公式を基にして上の式を演算子の場合の定義式とみなすと，

$$\hat{U}(t) = \exp\left(\frac{\hat{H}}{i\hbar}t\right), \tag{2.23}$$
$$\hat{U}^\dagger(t) = \exp\left(-\frac{\hat{H}}{i\hbar}t\right), \tag{2.24}$$

と表すことが出来る．また第 III 部定理 (1.14) より任意のエルミート演算子とその関数は可換だから，

$$\left[\hat{H}, \hat{U}(t)\right] = 0, \qquad \left[\hat{H}, \hat{U}^\dagger(t)\right] = 0, \tag{2.25}$$

も成り立つ．

2.2.3 ハミルトニアンが時間に依存する場合

式 (2.11) を t から 0 まで積分すると，

$$\int_0^t \hat{H}(t_1)\hat{U}(t_1)dt = \int_0^t i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}(t_1)dt, = i\hbar\Big[\hat{U}(t_1)\Big]_0^t = i\hbar(\hat{U}(t) - \hat{U}(0)) = i\hbar(\hat{U}(t) - \hat{1}) \tag{2.26}$$

より，

$$\hat{U}(t) = \hat{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{H}(t_1)\hat{U}(t_1)dt \tag{2.27}$$

が成り立つ．これは当然，(2.11) を満たすものの，右辺に $\hat{U}(t_1)$ が含まれているから解とは呼べない．しかしこの解を良く見ると，右辺の第 1 項目が $\hat{1}$ となっており，第 1 項目で打ち切れば，$\hat{U}(t)$ の荒い近似になっていることがわかる．そこで $\hat{U}(t_1)$ に (2.27) 式の右辺を代入してやれば，

$$\hat{U}(t) = \hat{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{H}(t_1)dt_1 + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_0^t\int_0^{t_1} \hat{H}(T_1)\hat{H}(t_2)\hat{U}(t_2)dt_1dt_2 \tag{2.28}$$

となり，右辺の第 2 項目で打ち切れば，先ほどよりよい近似になっていることが分かる．このようにして，右辺に現れる $\hat{U}(t_2)$ を (2.27) 式の右辺で置き換えるというような作業を無限回繰り返すと，次の無限級数回を得る:

$$\hat{U}(t) = \hat{1} + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{H}(t_1)dt_1 + \frac{1}{(i\hbar)^2}\int_0^t\int_0^{t_1} \hat{H}(T_1)\hat{H}(t_2)dt_1dt_2 + \frac{1}{(i\hbar)^3}\int_0^t\int_0^{t_1}\int_0^{t_2} \hat{H}(T_1)\hat{H}(t_2)\hat{H}(t_3)dt_1dt_2dt_3 + \cdots . \tag{2.29}$$

当然ではあるが，この解において $\hat{H}(t) = \hat{H}$ と仮定すると容易に式 (2.13) が得られるのが確かめられる．

なお，このようにハミルトニアンが時間に依存する場合は一般に，

$$\left[\hat{H}(t),\, \hat{H}(\tilde{t})\right] \neq 0, \qquad \left[\hat{H}(t),\, \hat{U}(t)\right] \neq 0, \qquad \left[\hat{H}(t),\, \hat{U}^\dagger(t)\right] \neq 0, \tag{2.30}$$

なので注意が必要である．

2.3 ハイゼンベルク描像

量子論の代表的な描象としてシュレディンガー描像とハイゼンベルク描像がある．基本的に前者は物理量が一定で状態ベクトルが時間発展するのに対し，後者は物理量が時間発展し状態ベクトルが一定となっている．従って，これまでみてきたのは前者のシュレディンガー描像だったことになる．ここではハイゼンベルク描像について紹介する．

2.3.1 シュレディンガー描像からハイゼンベルク描像への移行

時間発展演算子を $\hat{U}(t)$ とすると，(2.6) より，

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle \tag{2.31}$$

が成り立つのであったから，時刻 t において物理量 $\hat{A}$ を測定した場合の期待値 $\langle A\rangle_t$ は，

$$\langle A\rangle_t = \langle\Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle = \langle\hat{U}(t)\Psi(0)|\hat{A}|\hat{U}(t)\Psi(0)\rangle = \langle\Psi(0)|\hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle \tag{2.32}$$

となるから，

$$\hat{A}_H \equiv \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t) \tag{2.33}$$

と置くと，(2.32) は，

$$\langle A\rangle_t = \langle\Psi(0)|\hat{A}_H|\Psi(0)\rangle \tag{2.34}$$

と表すことが出来る．また確率分布については，時刻 t における物理量 A の確率密度関数を $p_A(a,\, t)$ とすると，

$$\begin{aligned} p_A(a,\, t) &= \langle\Psi(t)|\hat{\mathcal{P}}_A(a)|\Psi(t)\rangle &(2.35)\\ &= \langle\hat{U}(t)\Psi(0)|\hat{\mathcal{P}}_A(a)|\hat{U}(t)\Psi(0)\rangle &(2.36)\\ &= \langle\Psi(0)|\hat{U}^\dagger(t)\hat{\mathcal{P}}_A(a)\hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle &(2.37)\\ &= \langle\Psi_H|\hat{\mathcal{P}}_{AH}(a,\, t)|\Psi_H\rangle &(2.38)\end{aligned}$$

のように表すことが出来る．

以上，2 つの例を見れば分かるとおり，A の期待値 $\langle A\rangle_t$ も，A の確率密度関数 $p_A(a,\, t)$ もどちらも状態ベクトルは変化せず，物理量が時間発展するように表されている．このように表したとしても数学的には全く同値なので全く同じ理論予測が成り立つ．このような量子系の記述法をハイゼンベルク描像と呼ぶ．但し，量子論で重要な測定したときの非ユニタリ発展は今までと同じく，状態ベクトルのほうが射影されるので注意が必要である．

ここで我々はようやく，次の重要な事実が数学的に明らかになったことを知る: 即ち，古典的な教科書の多くで使われている波動力学は量子論をシュレディンガー描像でシュレディンガー表現で定式化したものであり，ハイゼンベルクが作った行列力学は量子論をハイゼンベルク描像で行列表示したものであり，従って両者は数学的に同値であるということである．

さて，逆にハイゼンベルク描像からシュレディンガー描像に移るのは簡単である．単純に，

$$\hat{A} = \hat{1}\hat{A}\hat{1} = \hat{U}(t)\hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t)\hat{U}^\dagger(t) = \hat{U}(t)\hat{A}_H(t)\hat{U}^\dagger(t), \tag{2.39}$$

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle = \hat{U}(t)|\Psi_H\rangle, \tag{2.40}$$

のようにすればよい．なお最後の式変形は状態ベクトルが初期状態のまま変わらないから，単に $|\Psi_H\rangle = |\Psi(0)\rangle$ としてよいからである．また次の事実も便利である:

$$\widehat{AB}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{B}\hat{U}(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t)\hat{U}^\dagger(t)\hat{B}\hat{U}(t) = \hat{A}_H(t)\hat{B}_H(t), \tag{2.41}$$

$$\left[\hat{A},\, \hat{B}\right]_H = \hat{U}^\dagger(t)\left[\hat{A},\, \hat{B}\right]\hat{U}(t) = \left[\hat{A}_H(t),\, \hat{B}_H(t)\right] \tag{2.42}$$

2.3.2　ハイゼンベルクの運動方程式を導く〜物理量がシュレディンガー描像で時間に依存しない場合〜

$\hat{A}_H(t)$ が従う微分方程式を導くために，$\hat{A}_H(t)$ を t で微分してみよう:

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \frac{d}{dt}\left(\hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t)\right) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\left(\frac{d}{dt}\hat{U}(t)\right) + \left(\frac{d}{dt}\hat{U}^\dagger(t)\right)\hat{A}\hat{U}(t) \tag{2.43}$$

この式において，

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}(t) = \hat{H}\hat{U}(t) \tag{2.44}$$

とその共役，

$$-i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}^\dagger(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{H}^\dagger = \hat{U}^\dagger(t)\hat{H} \tag{2.45}$$

が成り立つことを用いると，(2.43) 式に代入すると，(式が長くなるので t を省略して書くと)

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\hat{A}_H &= \hat{U}^\dagger\hat{A}\left(\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\hat{U}\right) + \left(-\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger\hat{H}\right)\hat{A}\hat{U} && (2.46)\\
&= \frac{1}{i\hbar}\left(\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{H}\hat{U} - \hat{U}^{\dagger\hat{H}\hat{A}\hat{U}}\right) && (2.47)\\
&= \frac{1}{i\hbar}\left(\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U} - \hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}\right) && (2.48)\\
&= \frac{1}{i\hbar}\left(\hat{A}_H\hat{H}_H - \hat{H}_H\hat{A}_H\right) && (2.49)\\
&= \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H,\, \hat{H}_H\right] && (2.50)
\end{aligned}$$

従って，

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H(t),\, \hat{H}_H(t)\right] \tag{2.51}$$

という式にまとまる．これがハイゼンベルク描象の演算子 $\hat{A}_H(t)$ の時間発展を記述する方程式で，ハイゼンベルクの運動方程式と呼ばれる．初期条件は $t = 0$ で，(2.12) が成り立つことより，

$$\hat{A}_H(0) = \hat{U}^\dagger(0)\hat{A}\hat{U}(0) = \hat{1}^\dagger\hat{A}\hat{1} = \hat{A} \tag{2.52}$$

を初期条件とすればよい．なお，$\hat{H}(t) = \hat{H}$ のようにハミルトニアンが時間に依存しない場合，(2.25) 式より $\hat{H}$ と $\hat{U}(t)$ は可換だから，

$$\hat{H}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{H}\hat{U}(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t)\hat{H} = \hat{H} \tag{2.53}$$

を式 (2.51) に代入して，

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H(t),\, \hat{H}\right] \tag{2.54}$$

となり，より簡単になる．

2.3.3 保存則

ハイゼンベルク描像は保存則を論じるときに特に便利である．例えば (2.42) を (2.51) に適用すれば,

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H(t),\, \hat{H}_H(t)\right] = \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger\left[\hat{A},\, \hat{H}\right]\hat{U} \tag{2.55}$$

が成り立つから，もしも $\hat{A}$ と $\hat{H}$ が交換するならば,

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = 0 \tag{2.56}$$

従って，$\hat{A}_H(t)$ は時間に依存しなくなり常に初期条件 $\hat{A}_H(0) = \hat{U}^\dagger(0)\hat{A}\hat{U}(0) = \hat{A}$ に等しくなる．すると，A の期待値は,

$$\langle A\rangle_t = \langle\Psi_H|\hat{A}_H(t)|\Psi_H\rangle = \langle\Psi(0)|\hat{A}|\Psi(0)\rangle \tag{2.57}$$

より，$\langle A\rangle_t$ は時間に依存しなくなる．同様に，いま，$\hat{A}$ と $\hat{H}$ が可換のとき，第 II 部定理 1.15 より,

$$\left[\hat{A},\, \hat{H}\right] = 0 \Longleftrightarrow \text{全ての固有値 } a,\, h \text{ に対して} \left[\hat{\mathcal{P}}_A(a),\, \hat{\mathcal{P}}_H(h)\right] = 0 \tag{2.58}$$

だから,

$$\text{全ての固有値 } a \text{ に対して} \left[\hat{\mathcal{P}}_A(a),\, \hat{H}\right] = \left[\hat{\mathcal{P}}_A(a),\, \sum_h h\hat{\mathcal{P}}_H(h)\right] = 0 \tag{2.59}$$

が成り立つ．従って射影演算子 $\hat{\mathcal{P}}_A(a)$ は物理量だから，以上の議論において $\hat{A} \equiv \hat{\mathcal{P}}_A(a)$ としても全く同じことが成り立つ．従って，$\hat{A}$ と $\hat{H}$ が交換するとき,

$$p_A(a,\, t) = \langle\Psi_H|\hat{\mathcal{P}}_{AH}(a,\, t)|\Psi_H\rangle = \langle\Psi(0)|\hat{\mathcal{P}}_A(a)|\Psi(0)\rangle \tag{2.60}$$

より，確率分布に関しても時間に依存しない形になる．実は確率分布についてのみ時間変化しないことが示されれば，期待値や分散はこれから求められる量なので，それらも時間に依存しないことがすぐ分かる．そこでそれを強調するためにいま，示した事実を定理として書いておこう:

定理 2.1. $\hat{A}$ と $\hat{H}$ が交換するとき，($\hat{A}$ がシュレディンガー描像でも時間に依存するような特殊な場合を除けば) 物理量 A は保存される．つまり，A の測定値の確率分布は時間によらずいつ測っても同じである．従って，期待値や分散についても保存される．

これらが量子系における保存則である．

最も簡単な例としては,

$$\left[\hat{H},\, \hat{H}\right] = 0, \tag{2.61}$$

だから，$\hat{H}$ が時間に依存しない場合，物理量 H 即ち，系の全エネルギーは保存される．

2.3.4 ハイゼンベルクの運動方程式を導く〜物理量がシュレディンガー描像でも時間に依存する場合〜

演算子 $\hat{A}$ がシュレディンガー描像でも時間に依存するような特別な場合，(2.46) 式の右辺には,

$$\hat{U}^\dagger(t)\left(\frac{d}{dt}\hat{A}(t)\right)\hat{U}(t) = \left(\frac{d}{dt}\hat{A}(t)\right)_H \tag{2.62}$$

が出来てしまうので，ハイゼンベルクの運動方程式は,

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H(t),\, \hat{H}_H(t)\right] + \left(\frac{d}{dt}\hat{A}(t)\right)_H \tag{2.63}$$

となる．(2.51) 式と違い，余分な項が出来たために，たとえ $\left[\hat{A},\, \hat{H}\right] = 0$ であっても，$\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t) = \left(\frac{d}{dt}\hat{A}(t)\right)_H$ となってしまうために，物理量 A が保存するとはいえなくなってしまう．例えば，$\left[\hat{H}(t),\, \hat{H}(t)\right] = 0$ であるにもかかわらず，$\frac{d}{dt}\hat{H}_H(t) = \left(\frac{d}{dt}\hat{H}(t)\right)_H$ となるので，$\frac{d}{dt}\hat{H}(t) = 0$ でもない限り，エネルギーは保存されない．これは直感的にも不自然では無いだろう．なお，この微分方程式 (2.63) を解くための初期条件については (2.52) をそのまま使えばよいことは言うまでもない．

2.3.5 $t_0 \neq 0$ を初期条件とする場合について

初期条件を $t=0$ ではなくて，$t=t_0$ とする場合，任意の $t>0$ で，

$$|\varPsi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\varPsi(0)\rangle = \hat{U}(t-t_0)|\varPsi(t_0)\rangle \tag{2.64}$$

より，$\hat{U}(t-t_0)$ を改めて，$\hat{U}_{t_0}(t)$ と置けば，$t \geq t_0$ にて，

$$|\varPsi(t)\rangle = \hat{U}_{t_0}(t)|\varPsi(t_0)\rangle \tag{2.65}$$

となり，初期条件は,

$$\hat{A}_H(t_0) = \hat{U}^\dagger_{t_0}(t_0)\hat{A}\hat{U}_{t_0}(t_0) = \hat{U}^\dagger(t_0-t_0)\hat{A}\hat{U}(t_0-t_0) = \hat{1}^\dagger\hat{A}\hat{1} = \hat{A}, \tag{2.66}$$

及び,

$$\hat{A}_H(t_0) = \hat{A}(t_0), \tag{2.67}$$

となる．なおここでの議論では $t=0$ の状態が存在することを仮定して $t=0 \to t=t_0$ を初期状態に取り替えているわけだが，あらかじめ $t=0$ の時刻を $t=t_0$ として議論しても全く同じ結論を得る．

3 1次元調和振動子について

1次元調和振動子の量子化は量子論の発展的話題，特に場の量子論において重要な役割を果たし，その理論的意義は大きい．そこでここではこの1次元調和振動子の量子化について述べる．

1次元調和振動子は，古典的には一つの一般化座標 q とそれと共役な一般化運動量 p で記述される1自由度系で，そのハミルトニアンは,

$$H = H(q,p) = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{m\omega^2}{2}q^2, \tag{3.1}$$

の形の2次形式で表される．ここで一般化座標 q は通常のデカルト座標の x として考えれば，p は普通の意味での運動量になる．従って，今後の議論では特に断らずに $q=x$ として扱うことにする．このとき，ハミルトニアン

$$H = H(x,p) = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2, \tag{3.2}$$

は p^2 と x^2 の線形結合だから，いま，$\hat{p}$ 及び $\hat{x}$ それぞれがエルミートであり，従って，$\hat{p}^2$ も $\hat{x}^2$ もエルミートになるから，(3.3) 式全体がエルミート演算子になる．従って，(3.3) 式の量子化は単純に

$$\hat{H} = H(\hat{x},\hat{p}) = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2, \tag{3.3}$$

とすればよい．従ってシュレディンガー方程式は,

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\varPsi(t)\rangle = \left(\frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2\right)|\varPsi(t)\rangle, \tag{3.4}$$

となるので，シュレディンガー表現のシュレディンガー方程式は,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varPsi(t,x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\varPsi(t,x) \tag{3.5}$$

となる．この変形のメリットは (3.4) がヒルベルト空間に対する微分方程式であるのに対して，(3.5) は単なる偏微分方程式であるので解くのが易しいということである．この1次元調和振動子の波動関数 $\varPsi(x,t)$ は，定常状態の場合について，拙著:「1次元調和振動子の波動関数」に詳しく書いたので気になる方は参考にすると良いだろう．

これらより，時刻 t における位置 x は,

$$\langle x\rangle_t = \langle\varPsi(t)|\hat{x}|\varPsi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\overline{\varPsi(t,x)}x\varPsi(t,x)dx, \tag{3.6}$$

同様にポテンシャルは,

$$\langle V\rangle_t = \langle\varPsi(t)|\hat{V}|\varPsi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\overline{\varPsi(t,x)}\frac{m\omega^2}{2}x^2\varPsi(t,x)dx, \tag{3.7}$$

によって各時刻における，それぞれの物理量を求めることが出来る．

3.1 生成演算子・消滅演算子

さて，ハミルトニアン $\hat{H}$ の固有状態，即ちエネルギー固有状態を求めるには，(3.5) の偏微分方程式を解いてエネルギーレベルを求めてもよいが，ここでは別のやり方でエネルギーレベルを求めてみる．

まず，1 次元調和振動子のハミルトニアンを次のように表す:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \tag{3.8}$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}\left[\frac{m\omega}{\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{m\hbar\omega}\hat{p}^2\right] \tag{3.9}$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}\left[\frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{p}^2 - \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}\right. \tag{3.10}$$

$$\left. + \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{p}^2 + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}\right] \tag{3.11}$$

$$= \frac{\hbar\omega}{2}\left[\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right) + \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right)\right] \tag{3.12}$$

ここで途中の式変形を見れば分かるとおり，$\hat{x}$ と $\hat{p}$ が交換しないことに注意が必要であろう．これより，

$$\hat{a} \overset{\mathrm{def}}{=} \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}, \tag{3.13}$$

と置けば，

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}, \tag{3.14}$$

だから，(3.12) は，

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}), \tag{3.15}$$

と表せる．ここで $\hat{a}^\dagger \neq \hat{a}$ だから，$\hat{a}$ も $\hat{a}^\dagger$ もエルミート演算子ではないし，従って可観測量，つまり物理量にならないことに注意しよう．

$\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ の交換関係は，

$$[\hat{a},\, \hat{a}^\dagger] = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right) - \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right)\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\right) \tag{3.16}$$

$$= -\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} \tag{3.17}$$

$$= -\frac{i}{2\hbar}\hat{x}\hat{p} + \frac{i}{2\hbar}\hat{p}\hat{x} - \frac{i}{2\hbar}\hat{x}\hat{p} + \frac{i}{2\hbar}\hat{p}\hat{x} \tag{3.18}$$

$$= -\frac{i}{\hbar}[\hat{x},\, \hat{p}] \tag{3.19}$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \times i\hbar \tag{3.20}$$

$$= 1, \tag{3.21}$$

となる．実はこの単純な交換関係を満たすように $\hat{a}$ を定義するために，$\dfrac{h\omega}{2}$ という因子を前に出したのである．結局ハミルトニアン $\hat{H}$ は $\hat{a},\, \hat{a}^\dagger$ で表せたわけだが，実はこの系の全ての物理量は $\hat{a}$ 及び $\hat{a}^\dagger$ で表せる．というのも (3.13) 及び (3.14) の連立方程式は逆に解くことが出来るため，$\hat{x}$ も $\hat{p}$ も $\hat{a},\, \hat{a}^\dagger$ で表せるからである．従って，(3.13) 及び (3.14) を逆に解いた，

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \tag{3.22}$$

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger), \tag{3.23}$$

を物理量 $\hat{A}(x, p)$ に代入して $\hat{a},\, \hat{a}^\dagger$ を基本変数としても $\hat{x},\, \hat{p}$ を基本変数とするのと全く同じ理論になる．このときどのようなことがいえるか調べてみよう．まず,

$$[\hat{a},\, \hat{a}^\dagger] = 1, \tag{3.24}$$

より,

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1, \tag{3.25}$$

だから，これを，(3.15) に代入すると,

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1 + \hat{a}^\dagger \hat{a}) = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\right) \equiv \hbar\omega\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right), \tag{3.26}$$

但し,

$$\hat{n} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}, \tag{3.27}$$

と置いた．これは,

$$\hat{n}^\dagger = (\hat{a}^\dagger \hat{a})^\dagger = \hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{n}, \tag{3.28}$$

より，エルミート演算子になっている．従ってその固有値 n に対する固有ベクトルを $|n\rangle$ とすると,

$$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle, \tag{3.29}$$

が成り立つ．ここで,

$$\hat{A}[\hat{B},\, \hat{C}] + [\hat{A},\, \hat{C}]\hat{B} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}) + (\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A})\hat{B} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \cancel{\hat{A}\hat{C}\hat{B}} + \cancel{\hat{A}\hat{C}\hat{B}} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} = [\hat{A}\hat{B},\, \hat{C}], \tag{3.30}$$

即ち

$$[\hat{A}\hat{B},\, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B},\, \hat{C}] + [\hat{A},\, \hat{C}]\hat{B}, \tag{3.31}$$

を用いると,

$$[\hat{n},\, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger \hat{a},\, \hat{a}] = \hat{a}^\dagger[\hat{a},\, \hat{a}] + [\hat{a}^\dagger,\, \hat{a}]\hat{a} = 0 - [\hat{a},\, \hat{a}^\dagger]\hat{a} = -\hat{a} \tag{3.32}$$

及び,

$$[\hat{n},\, \hat{a}^\dagger] = [\hat{a}^\dagger \hat{a},\, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger[\hat{a},\, \hat{a}^\dagger] + [\hat{a}^\dagger,\, \hat{a}^\dagger]\hat{a} = \hat{a}^\dagger \times 1 + 0 = \hat{a}^\dagger, \tag{3.33}$$

が成り立つ．これは $\hat{n}$ が $\hat{a}$ とも $\hat{a}^\dagger$ とも交換しないことを表しているから，$\hat{n}$ と交換する $\hat{a},\, \hat{a}^\dagger$ の関数は $\hat{n}$ の関数になっているものだけであることを意味する．この系の全ての物理量は $\hat{a},\, \hat{a}^\dagger$ の関数として表せるのだったから，$\hat{n}$ と交換する物理量は $\hat{n}$ の関数になっているものだけということになる．すると $\hat{n}$ は，第 III 部定義 1.17 の条件を満たすから，$\hat{n}$ はこの系の交換する物理量の完全集合になっていることが分かる．これはつまり，交換する物理量の完全集合としてシュレディンガー表現のときに採用した $\hat{x}$ の代わりに，$\hat{n}$ を採用することが出来ることを意味する．従って，そのヒルベルト空間は,

$$\mathcal{H} = \left\{ |\Psi\rangle \;\middle|\; |\Psi\rangle = \sum_n \Psi(n)|n\rangle, \Psi(n) \in \mathbb{C}, \sum_n |\Psi(n)|^2 = \text{有限} \right\} \tag{3.34}$$

にとればよく，これは明らかに縮退がないので無駄に大きくないヒルベルト空間になっている． さらにこのヒルベルト空間上の量子論は， フォン・ノイマンの一意性定理より， この系のシュレディンガー表現したものとユニタリ同値なので，同じ物理的結果を与えるので，これで計算すれば充分である．

さて，既に固有ベクトルを $|n\rangle$ と表したことから，想像も付くだろうが，実は n は必ず 0 以上の整数になる．証明は次の通り:

まず,

$$n = \langle n|\hat{n}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle = \langle \hat{a}n|\hat{a}|n\rangle = \|\hat{a}|n\rangle\| \geq 0, \tag{3.35}$$

より $n \geq 0$ である．次に，(3.32) の両辺に右側から $|n\rangle$ を作用させると，

$$-\hat{a}|n\rangle = [\hat{n}, \hat{a}]|n\rangle = \hat{n}\hat{a}|n\rangle - \hat{a}\hat{n}|n\rangle = \hat{n}\hat{a}|n\rangle - n\hat{a}|n\rangle, \tag{3.36}$$

となるので，これより，

$$\hat{n}(\hat{a}|n\rangle) = \hat{n}\hat{a}|n\rangle - n\hat{a}|n\rangle + n\hat{a}|n\rangle = -\hat{a}|n\rangle + n\hat{a}|n\rangle = (n-1)(\hat{a}|n\rangle), \tag{3.37}$$

が得られるが，これは $\hat{a}|n\rangle$ が，固有ベクトル $|n-1\rangle$ と平行なベクトルであることを示している．そこでその規格化するための定数を c_n として，

$$\hat{a}|n\rangle = c_n|n-1\rangle, \tag{3.38}$$

と置いてみると，

$$n = \|\hat{a}|n\rangle\| = \|c_n|n-1\rangle\| = |c_n|^2, \tag{3.39}$$

より，

$$c_n = \sqrt{n} \tag{3.40}$$

ととればよいことが分かる．これより，結局,

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \tag{3.41}$$

が成り立ち，$\hat{a}$ は n を 1 だけ減らす演算子になっているから，$\hat{a}$ を消滅演算子と呼ぶ.

さて，以上のことより n は 0 以上の整数になることが示せる．何故なら，例えば，$n = 0.5$ とすると，(3.41) より，$\hat{a}|0.5\rangle = \sqrt{0.5}|-0.5\rangle$ が成り立つが，右辺のベクトルは -0.5 の固有状態を表し，$n \geq 0$ に反するからである．一方，0 以上の整数の場合，(3.41) 式において $\hat{a}|0\rangle = 0$ となってしまうので，負の n が存在することは起きない．これで n が非負整数であることは示せた．次に,(3.33) の両辺に右から $|n\rangle$ を作用させると，

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = [\hat{n}, \hat{a}^\dagger]|n\rangle = \hat{n}\hat{a}^\dagger|n\rangle - \hat{a}^\dagger\hat{n}|n\rangle = \hat{n}\hat{a}^\dagger|n\rangle - n\hat{a}^\dagger|n\rangle, \tag{3.42}$$

より，

$$\hat{n}(\hat{a}^\dagger|n\rangle) = (n+1)(\hat{a}^\dagger|n\rangle), \tag{3.43}$$

が成り立つから $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ は固有ベクトル $|n+1\rangle$ と平行なベクトルであり，規格化の定数を c'_n，つまり，

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = c'_n|n+1\rangle, \tag{3.44}$$

とし，この式の両辺に左から $\langle n+1|$ を作用させれば,

$$c'_n = \langle n+1|\hat{a}^\dagger|n\rangle, \tag{3.45}$$

が得られるが，いま,

$$\hat{a}|n+1\rangle = \sqrt{n+1}|n\rangle, \tag{3.46}$$

の両辺の共役をとると，

$$\langle n+1|\hat{a}^\dagger = \sqrt{n+1}\langle n|, \tag{3.47}$$

が得られるので，これを (3.45) に代入すると，

$$c'_n = \sqrt{n+1}\langle n|n\rangle = \sqrt{n+1}, \tag{3.48}$$

となるので，結局,

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \tag{3.49}$$

となることが分かった．明らかに $\hat{a}^\dagger$ は，n を 1 つだけ増やすので，この $\hat{a}^\dagger$ を生成演算子と呼ぶ．(3.49) は何度でも適用できるから，n に上限は無い．従って n は任意の非負整数を取ることが分かる．

以上より，エネルギーレベルが求まる．実際この系のハミルトニアンは，

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right), \tag{3.50}$$

であったが，この式の両辺に右から $|n\rangle$ を作用させると，

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\right)|n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle, \tag{3.51}$$

より，エネルギー固有状態が，状態ベクトル $|n\rangle$ のとき，エネルギー固有値は,

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \qquad (n = 0,\, 1,\, \cdots) \tag{3.52}$$

となることが分かった．このように 1 次元調和振動子の量子系ではエネルギーレベルが等間隔で並ぶことが特徴的である．また基底エネルギーは $n = 0$ のときで,

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \tag{3.53}$$

となり 0 にならない．ここで元の物理量 $x,\, p$ で，交換関係,

$$[\hat{x},\, \hat{p}] = i\hbar, \tag{3.54}$$

が成り立つから，第 III 部系 1.10 より,

$$\delta x \delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \tag{3.55}$$

が成り立つわけであるが，いま一般に,

$$\langle(\Delta A)^2\rangle = \langle(A - \langle A\rangle)^2\rangle = \langle A^2 - 2\langle A\rangle A + \langle A\rangle^2\rangle = \langle A^2\rangle - 2\langle A\rangle\langle A\rangle + \langle A\rangle^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2, \tag{3.56}$$

だったから,

$$\langle A^2\rangle = \langle A\rangle^2 + \langle(\Delta A)^2\rangle = \langle A\rangle^2 + \left[\sqrt{\langle(\Delta A)^2\rangle}\right]^2 = \langle A\rangle^2 + (\delta A)^2 \geq (\delta A)^2, \tag{3.57}$$

が成り立つので，これをハミルトニアン $\hat{H}$ に適用すると，$\langle A\rangle = \langle\hat{A}\rangle = \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle$ に注意して,

$$\begin{aligned}
\langle\hat{H}\rangle &= \left\langle \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \right\rangle && (3.58)\\
&= \frac{1}{2m}\langle\hat{p}^2\rangle + \frac{m\omega^2}{2}\langle\hat{x}^2\rangle && (3.59)\\
&\geq \frac{1}{2m}(\delta p)^2 + \frac{m\omega^2}{2}(\delta x)^2 && (3.60)\\
&\geq 2\sqrt{\frac{1}{2m}(\delta p)^2 \cdot \frac{m\omega^2}{2}(\delta x)^2} && (3.61)\\
&= \omega\delta x\delta p && (3.62)\\
&\geq \omega \cdot \frac{\hbar}{2} && (3.63)\\
&= \frac{\hbar\omega}{2}, && (3.64)
\end{aligned}$$

が成り立つので，$E_0 = \dfrac{\hbar\omega}{2}$ は，不確定性関係を満たす下限に等しいことになる．(なお，上の変形で相加平均 $\geq$ 相乗平均を用いた)

これより $|0\rangle$ は不確定性関係を満たす下限のエネルギー固有状態ということになるので，このような状態を最小不確定状態と呼ぶ．この状態でも $x,\, p$ は決まった値を持たないから，直感的には微小の振動をしている状態と考えられる．これを俗に零点振動と呼び，E_0 を零点エネルギーと呼ぶ．

3.2 波動関数を求める

最後にエネルギーレベルごとの波動関数を求めてみよう．

エネルギー固有状態は $|n\rangle$ だから，これを座標表示した波動関数は,

$$\varphi_n(x) = \langle x|n\rangle, \tag{3.65}$$

によって表される．まず，基底状態の満たす式,

$$\hat{a}|0\rangle = 0, \tag{3.66}$$

を座標表示すると,

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_0(x) = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_0(x) = 0, \tag{3.67}$$

従って，いま変数は x だけだから,

$$\frac{d\varphi_0}{dx} + \frac{m\omega}{\hbar}x\varphi_0 = 0, \tag{3.68}$$

となるが，これは 1 階線形微分方程式だから解法は良く知られている．

$$u = \exp\left(\int \frac{m\omega}{\hbar}xdx\right)\varphi_0 = \exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)\varphi_0, \tag{3.69}$$

と置き，u を x で微分すると,

$$\frac{du}{dx} = \frac{m\omega}{\hbar}x\exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)\varphi_0 + \exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)\frac{d\varphi_0}{dx} = \exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)\left(\frac{d\varphi_0}{dx} + \frac{m\omega}{\hbar}x\varphi_0\right) = 0, \tag{3.70}$$

これより,

$$u = C,\ \text{即ち}\varphi_0 = C\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right), \tag{3.71}$$

を得る．規格化定数を求めると,

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty}|\varphi_0(x)|^2dx \tag{3.72}$$

$$= |C|^2\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)dx \tag{3.73}$$

$$= |C|^2\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-y^2\right)\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}dy \tag{3.74}$$

$$= |C|^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-y^2\right)dy \tag{3.75}$$

$$= |C|^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\cdot\sqrt{\pi}, \tag{3.76}$$

これより,

$$C = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \tag{3.77}$$

が得られるので，結局,

$$\varphi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right), \tag{3.78}$$

となることが分かった．励起状態 $(n \geq 1)$ を求めるには，(3.49) 式の両辺を $\sqrt{n+1}$ で割った式を座標表示すると,

$$\varphi_{n+1}(x) = \frac{1}{n+1}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_n(x) = \frac{1}{n+1}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_n(x), \tag{3.79}$$

が得られるので，この漸化式の右辺の $\varphi_n(x)$ に $n = 0, 1, \cdots,$ の式を入れてやることで求まる．