量子力学における 1 次元調和振動子モデルにおける
昇降演算子および波動関数について

山 K@yamak0523

2025 年 1 月 6 日

概要

本稿では, 量子力学における 1 次元調和振動子の定常状態における Schrödinger 方程式 (固有方程式) をみたすエネルギーおよび波動関数を昇降演算子を用いることで Hermite 関数との関連性を明らかにし Hermite 関数が $L^2(\mathbb{R})$ 上で完全正規直交系となることを示す.

1　物理学背景

古典力学における 1 次元調和振動子モデルのハミルトニアン H は

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{K}{2}x^2$$

という形で与えられる. ただし, $x, p \in \mathbb{R}$ はそれぞれ, 振動子の位置, 運動量を表す変数, $m, K > 0$ は振動子の質量, ばね定数である. これに対応する量子系のハミルトニアンは

$$H_{os} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{K}{2}x^2$$

となる. 今, H_{os} の固有値および固有関数, つまり定常状態におけるエネルギーと対応する波動関数求める問題が出てきた. 本稿では各定数は本質的ではないため単純化した

$$H_{os} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2$$

について関数解析学的手法を用いて考察していく.

2　空間と作用素の導入

$\mathbb{R}$ 上の Schwartz の急減少関数空間を $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, Lebesgue の二乗可積分関数空間を $L^2(\mathbb{R})$ と表記する. つまり

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}) = \left\{ f \;\middle|\; \lim_{|x|\to\infty} |x|^m f^{(n)}(x) = 0 \ (\forall m, n = 0, 1, 2, \ldots) \right\}$$
$$L^2(\mathbb{R}) = \left\{ f \;\middle|\; \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 \, dx < \infty \right\}$$

である. $L^2(\mathbb{R})$ は Hilbert 空間であり内積 $\langle f, g\rangle$, ノルム $\|f\|_2$ は

$$\langle f, g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\overline{g(x)}\, dx, \|f\|_2 = \sqrt{\langle f, f\rangle} = \left(\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 \, dx\right)^{\frac{1}{2}} \ \ (f, g \in L^2(\mathbb{R}))$$

となる. さらに, $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ は $L^2(\mathbb{R})$ の部分空間として稠密であることに注意する.

$L^2(\mathbb{R})$ 上で線形作用素 T および T の定義域 $D(T)$ を

$$T = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x + \frac{d}{dx}\right), D(T) = \mathcal{S}(\mathbb{R})$$

で定義する. また, 部分積分により T の共役作用素 T^* は

$$T^* = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x - \frac{d}{dx}\right)$$

で与えられることがわかる.

3 交換子の計算

次に, T, T^* の交換子 $[T, T^*] = TT^* - T^*T$ を計算すると

$$\begin{aligned}
([T,T^*]f)(x) &= ((TT^* - T^*T)f)(x) \\
&= \frac{1}{2}\left(x + \frac{d}{dx}\right)\left(x - \frac{d}{dx}\right)f(x) - \frac{1}{2}\left(x - \frac{d}{dx}\right)\left(x + \frac{d}{dx}\right)f(x) \\
&= \frac{1}{2}\left(x^2 f(x) + (xf(x))' - xf'(x) - f''(x)\right) - \frac{1}{2}\left(x^2 f(x) - (xf(x))' + xf'(x) - f''(x)\right) \\
&= (xf(x))' - xf'(x) \\
&= f(x)
\end{aligned}$$

より, $[T, T^*] = 1$ となることがわかる. このことを用いて, $[T, (T^*)^n] = n(T^*)^{n-1}$ $(n = 1, 2, \ldots)$ を示すことができる. 実際, $TT^* = 1 + T^*T$ を繰り返し用いることで

$$\begin{aligned}
T(T^*)^n &= (TT^*)(T^*)^{n-1} \\
&= (1 + T^*T)(T^*)^{n-1} \\
&= (T^*)^{n-1} + T^*(TT^*)(T^*)^{n-2} \\
&= 2(T^*)^{n-1} + (T^*)^2 T(T^*)^{n-2} \\
&= \cdots = n(T^*)^{n-1} + (T^*)^n T
\end{aligned}$$

より成り立つことがわかる.

4 Hermite 関数の導入

k 次の正規化された Hermite 関数 $h_k(x)$ を

$$h_k(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} & (k = 0) \\ \dfrac{1}{\sqrt{k!}}(T^*)^k h_0(x) & (k = 1, 2, \ldots) \end{cases}$$

のことをいう. この Hermite 関数についてこれから考えていく.

まず, $\|h_0\|_2 = 1$ であることは

$$\|h_0\|_2^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\, dx = 1$$

よりわかる. また, Th_0 を求めると

$$\begin{aligned}
(Th_0)(x) &= \frac{1}{\sqrt[4]{4\pi}}\left(x + \frac{d}{dx}\right)e^{-\frac{x^2}{2}} \\
&= \frac{1}{\sqrt[4]{4\pi}}\left(xe^{-\frac{x^2}{2}} - xe^{-\frac{x^2}{2}}\right) \\
&= 0
\end{aligned}$$

となる. さらに, $k = 1, 2, \ldots$ に対して

$$Th_k = \frac{1}{\sqrt{k!}}T(T^*)^k h_0 = \frac{1}{\sqrt{k!}}\left\{k(T^*)^{k-1} + (T^*)^k T\right\}h_0 = \sqrt{k}\cdot\frac{1}{\sqrt{(k-1)!}}(T^*)^{k-1}h_0 = \sqrt{k}h_{k-1}$$

$$T^* h_k = \sqrt{k+1}\cdot\frac{1}{\sqrt{(k+1)!}}T^*(T^*)^k h_0 = \sqrt{k+1}h_{k+1}$$

となる. このことから, $T^*Th_k = \sqrt{k}T^*h_{k-1} = kh_k$ がなりたつことがわかる. これは, T^*T の固有値 k ($k = 0, 1, 2, \ldots$) に対する固有ベクトルが h_k であることを示している.

次に, $S = T^*T + \dfrac{1}{2}$ とする. このとき, $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ に対して Sf を具体的に求めると

$$\begin{aligned}(Sf)(x) &= \frac{1}{2}\left(x - \frac{d}{dx}\right)\left(x + \frac{d}{dx}\right)f(x) + \frac{1}{2}f(x)\\ &= \frac{1}{2}\left(x^2f(x) - (xf(x))' + xf'(x) - f''(x)\right) + \frac{1}{2}f(x)\\ &= -\frac{1}{2}f''(x) + \frac{1}{2}x^2f(x)\end{aligned}$$

となる. 一方で, $Sh_k = \left(k + \dfrac{1}{2}\right)h_k$ より, 微分方程式

$$-\frac{1}{2}f''(x) + \frac{1}{2}x^2f(x) = Ef(x)\ (E \geq 0)$$

は, $E = k + \dfrac{1}{2}(= E_k)$ のとき h_k を解に持つことがわかる. この微分方程式は, 量子力学における調和振動子のモデルの Schrödinger 方程式であり, h_k を状態 k における波動関数という.

5 Hermite 関数の正規直交性

さて, 次に $\{h_k\}_{k=0}^{\infty}$ が $L^2(\mathbb{R})$ 内で正規直交系であることを示す. $m = 1, 2, \ldots$ に対して

$$\begin{aligned}\langle h_m, h_m\rangle &= \frac{1}{m!}\langle (T^*)^m h_0, (T^*)^m h_0\rangle\\ &= \frac{1}{m!}\langle T(T^*)^m h_0, (T^*)^{m-1} h_0\rangle\\ &= \frac{1}{(m-1)!}\langle (T^*)^{m-1} h_0, (T^*)^{m-1} h_0\rangle\\ &= \langle h_{m-1}, h_{m-1}\rangle\\ &= \cdots = \langle h_0, h_0\rangle\\ &= 1\end{aligned}$$

より正規性は示された. 直交性については, $m \neq n$ に対して

$$\begin{aligned}m\langle h_m, h_n\rangle &= \langle T^*Th_m, h_n\rangle\\ &= \langle h_m, T^*Th_n\rangle\\ &= n\langle h_m, h_n\rangle\end{aligned}$$

より, $\langle h_m, h_n\rangle = 0\ (m \neq n)$ となるから直交性も示された.

6 Hermite 関数の表示

ここからは, h_k の具体的な表示を与えていく.

$f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ に対して

$$((T^*)^k f)(x) = (-1)^k 2^{-\frac{k}{2}} e^{\frac{x^2}{2}} \frac{d^k}{dx^k}\left(e^{-\frac{x^2}{2}} f(x)\right)\ (k = 1, 2, \ldots)$$

を数学的帰納法で示していく.

(1) $k=1$ のとき

$$
\begin{aligned}
(\text{左辺}) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x-\frac{d}{dx}\right)f(x) \\
&= 2^{-\frac{1}{2}}(xf(x)-f'(x)) \\
(\text{右辺}) &= -2^{-\frac{1}{2}}e^{\frac{x^2}{2}}\left(-xe^{-\frac{x^2}{2}}f(x)+e^{-\frac{x^2}{2}}f'(x)\right) \\
&= 2^{-\frac{1}{2}}(xf(x)-f'(x))
\end{aligned}
$$

より成り立つ.

(2) $k=m$ で成り立つと仮定する. このとき, $k=m+1$ のとき

$$
\begin{aligned}
((T^*)^{m+1}f)(x) &= (T^*(T^*)^m f)(x) \\
&= (-1)^m 2^{-\frac{m}{2}}T^*\left\{e^{\frac{x^2}{2}}\frac{d^m}{dx^m}\left(e^{-\frac{x^2}{2}}f\right)\right\}(x) \\
&= (-1)^m 2^{-\frac{m+1}{2}}\left(x-\frac{d}{dx}\right)\left\{e^{\frac{x^2}{2}}\frac{d^m}{dx^m}\left(e^{-\frac{x^2}{2}}f(x)\right)\right\} \\
&= (-1)^m 2^{-\frac{m+1}{2}}\left[xe^{\frac{x^2}{2}}\frac{d^m}{dx^m}\left(e^{-\frac{x^2}{2}}f(x)\right)-\frac{d}{dx}\left\{e^{\frac{x^2}{2}}\frac{d^m}{dx^m}\left(e^{-\frac{x^2}{2}}f(x)\right)\right\}\right] \\
&= (-1)^{m+1}2^{-\frac{m+1}{2}}e^{\frac{x^2}{2}}\frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}}\left(e^{-\frac{x^2}{2}}f(x)\right)
\end{aligned}
$$

より成り立つことがわかる.

以上より, 数学的帰納法から任意の自然数 k に対して等式が成り立つ.

この結果より, h_k $(k=1,2,\ldots)$ の具体的な表示を得ることができる. 実際

$$
\begin{aligned}
h_k(x) &= \frac{1}{\sqrt{k!}}(T^*)^k h_0(x) \\
&= (-1)^k\left(\pi^{\frac{1}{2}}2^k k!\right)^{-\frac{1}{2}}e^{\frac{x^2}{2}}\frac{d^k}{dx^k}e^{-x^2}
\end{aligned}
$$

となる. ここで, $H_k(x)$ を

$$
H_k(x) = (-1)^k e^{x^2}\frac{d^k}{dx^k}e^{-x^2}\ \ (k=0,1,2\ldots)
$$

とし, $c_k=\left(\pi^{\frac{1}{2}}2^k k!\right)^{-\frac{1}{2}}$ とすると, $h_k=c_k e^{-\frac{x^2}{2}}H_k$ より, $\{c_k e^{-\frac{x^2}{2}}H_k\}$ は $L^2(\mathbb{R})$ の正規直交系である. また, H_k は k 次の多項式となる. 実際, $H_0(x)=1, H_1(x)=2x$ となり, $k=1,2,\ldots$ のとき $H_k(x)$ が k 次の多項式ならば, $H_{k+1}(x)$ については

$$
\begin{aligned}
H_{k+1}(x) &= (-1)^{k+1}e^{x^2}\frac{d^{k+1}}{dx^{k+1}}e^{-x^2} \\
&= -e^{x^2}\frac{d}{dx}\left((-1)^k\frac{d^k}{dx^k}e^{-x^2}\right) \\
&= -e^{x^2}\frac{d}{dx}\left(H_k(x)e^{-x^2}\right) \\
&= -e^{x^2}\left({H_k}'(x)e^{-x^2}-2xH_k(x)e^{-x^2}\right) \\
&= 2xH_k(x)-{H_k}'(x)
\end{aligned}
$$

より, $H_{k+1}(x)$ は $k+1$ 次の多項式になることがわかる.

7 Hermite 関数の完全性

Hermite 関数が $L^2(\mathbb{R})$ の正規直交系であることはすでに示した. そこでここでは, 完全性について示していく. そのためには複素解析学や Fourier 変換を用いることになるため, 議論が長くなる.

まず, 完全性についてはいくつか同値な命題があるが, ここでは $f \in L^2(\mathbb{R})$ が $\langle f, h_k \rangle = 0$ $(k = 0, 1, 2, \ldots)$ をみたすならば $f = 0$ を示すこととする.
まず, $F(z) = e^{-z^2+2zx}$ とすると, $F(z)$ は整関数であり

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A_n(x)}{n!} z^n$$

と Maclaurin 展開することができる. ただし, $A_n(x) = F^{(n)}(0)$ である. また, $F(z) = e^{x^2} e^{-(z-x)^2}$ より

$$\begin{aligned} A_n(x) &= e^{x^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-(z-x)^2} \bigg|_{z=0} \\ &= e^{x^2} \frac{d^n}{dw^n} e^{-w^2} \bigg|_{w=-x} \\ &= (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \\ &= H_n(x) \end{aligned}$$

となる. また, Cauchy の評価式より, 任意の $r > 0$ に対して

$$|H_n(x)| \leq \frac{n!}{r^n} \sup_{|z|=r} |F(z)| \leq \frac{n!}{r^n} e^{r^2+2r|x|}$$

が成り立つ. よって, $|z| < r$ のとき

$$\begin{aligned} \left| F(z) e^{-\frac{x^2}{2}} - \sum_{n=0}^{N} \frac{H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}}{n!} z^n \right| &= \left| \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}}{n!} z^n \right| \\ &\leq e^{r^2+2r|x|} e^{-\frac{x^2}{2}} \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{|z|^n}{r^n} \\ &\leq \left(1 - \frac{|z|}{r}\right)^{-1} e^{r^2+2r|x|} e^{-\frac{x^2}{2}} \end{aligned}$$

が成り立つ. ここで, $e^{-\frac{x^2}{2}} \in L^2(\mathbb{R})$ より, $L^2(\mathbb{R})$ の意味で

$$e^{-z^2+2zx} e^{-\frac{x^2}{2}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}}{n!} z^n$$

が成り立つことが示された. ここで, $f \in L^2(\mathbb{R})$ が $\langle f, h_k \rangle = 0$ $(k = 0, 1, 2, \ldots)$ をみたすと仮定する. このような f に対して, 内積の連続性から

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-z^2+2zx} e^{-\frac{x^2}{2}} \, dx = \sum_{n=0}^{\infty} {c_n}^{-1} \frac{\langle f, h_n \rangle}{n!} z^n = 0$$

が成り立ち, $e^{-z^2+2zx} e^{-\frac{x^2}{2}} = e^{-\frac{1}{2}(x-2z)^2+z^2}$ より, $2z = a (\in \mathbb{R})$ と置き換えることで

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-\frac{1}{2}(x-a)^2} \, dx = 0 \ (a \in \mathbb{R})$$

が成り立つことがわかる.

今, $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ の Fourier 変換 $\widehat{f}$ を

$$\widehat{f}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ix\xi} \, dx \ (\xi \in \mathbb{R})$$

と定義し, $f \in L^2(\mathbb{R})$ に対する Fourier 変換 $\widehat{f}$ は, $L^2(\mathbb{R})$ の意味で $f_n \to f$ $(n \to \infty)$ となる $\{f_n\} \subset \mathcal{S}(\mathbb{R})$ に対して $\widehat{f_n}$ の $L^2(\mathbb{R})$ における $n \to \infty$ の極限で定義する. また, $g \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ に対する逆 Fourier 変換は

$$\check{g}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(\xi) e^{ix\xi} \, d\xi \ (x \in \mathbb{R})$$

であり, Fourier 変換と同様に $L^2(\mathbb{R})$ における逆変換も定義する. Fourier 変換と逆 Fourier 変換は全単射な等長作用素であることに注意する.

ここで, $G(x) = e^{-\frac{1}{2}(x-a)^2}$ の Fourier 変換を求める.

$$\begin{aligned}
\widehat{G}(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}(x-a)^2} e^{-ix\xi}\, dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2} e^{-ia\xi} e^{-ix\xi}\, dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ia\xi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}(x-i\xi)^2 + \frac{1}{2}\xi^2}\, dx \\
&= e^{-\frac{1}{2}\xi^2} e^{-ia\xi}
\end{aligned}$$

となる. Fourier 変換は等長であるから

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-\frac{1}{2}(x-a)^2}\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{f}(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} e^{ia\xi}\, d\xi = 0 \ (a \in \mathbb{R})$$

となる. これは, $\widehat{f}(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ の逆 Fourier 変換が 0 であることを表している. ゆえに, $\widehat{f}(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = 0$ となるから, $\widehat{f} = 0$ となり, $f = 0$ が示された.

以上より, $\{h_k\}$ が $L^2(\mathbb{R})$ において完全であることが示された.

8 生成作用素と消滅作用素

$\{h_k\}$ が $L^2(\mathbb{R})$ の完全正規直交系であることが示されたたため, H_n を H_{os} の固有値 E_n に対応する固有空間, つまり

$$\mathcal{H}_n = \{\alpha h_n \mid \alpha \in \mathbb{C}\}$$

とすると

$$L^2(\mathbb{R}) = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_n$$

が成り立つ.

また, T^* は h_{n-1} を $\sqrt{k}h_k$ に写すことを考えると, $\mathcal{H}_{n-1}$ から $\mathcal{H}_n$ への線形作用素と考えることができる. この線形作用素は, 固有空間に対応するエネルギーの状態を 1 つ増やす働きがあるため, 生成作用素と呼ばれている. 一方, T は h_n を $\sqrt{n}h_{n-1}$ に写すことを考えると, $\mathcal{H}_n$ から $\mathcal{H}_{n-1}$ への線形作用素と考えることができる. この線形作用素は, 固有空間に対応するエネルギーの状態を 1 つ減らす働きがあるため, 消滅作用素と呼ばれている. 生成作用素と消滅作用素をあわせて, 昇降演算子または, 梯子演算子と呼ばれている.

参考文献

[1] 新井 朝雄. **ヒルベルト空間と量子力学**, 共立出版, 改定増補版 2014.

[2] G.B. Folland. *Real Analysis Modern Techniques and Their Applications*. A Wiley-Interscience Publication, Second edition, 1999.