8.6 量子振動子

ワークシート

問題

STEP III 1988、問 7

先に進む前に、まず問題を読んでおこう。問題は STEP Support Programme の問題データベースにある：

step.maths.org/questions/88-s3-q7

ヒント

まずは自力で問題に取り組んでみよう。行き詰まったら、ヒントを**一つずつ**読み、そのたびに問題に戻ること。**手を止めて、やってみよう**と記したヒントが重要な段階である。各ヒントの後には計算用の余白がある。

考えてみよう　$e^{-\lambda x^2}$ のような関数を推測として試すのが妥当なのはなぜか。$x \to \pm\infty$ のとき、$e^{-\lambda x^2}$ とその導関数はどうなるか。

段階 1 基底状態（ground state）

扱う内容：$n = 0$ の場合

考えてみよう $y_0 = e^{-\lambda x^2}$ を 2 回微分し、$n = 0$ とした方程式に代入せよ。指数関数の因子で両辺を割ること。

手を止めて、やってみよう 得られた結果はすべての x について成り立たなければならないので、x^2 の係数（coefficient）と定数項をそれぞれ比較せよ。両方を満たす λ はどれか。また、なぜ λ は正でなければならないのか。

段階 2　第一励起状態（first excited state）

扱う内容：$n = 1$ の場合

> **考えてみよう**　$y_1 = xe^{-\lambda x^2}$ と $n = 1$ について同じことを行え。同じ値の λ でうまくいくだろうか。

段階 3　恒等式（identity）

扱う内容：恒等式

> **考えてみよう**　積の微分法（product rule）を用いて $y_m y_n' - y_n y_m'$ を微分せよ。2 つの項が打ち消し合う。その後、y_n'' と y_m'' について微分方程式（differential equation）を用いよ。

段階 4 直交性（orthogonality）

扱う内容：直交性

> **手を止めて、やってみよう** この恒等式を $-\infty$ から ∞ まで積分せよ。無限遠での条件を踏まえると、左辺はどうなるか。また、なぜ $2(m-n)\omega$ で割ることができるのか。

背後にある数学

シュレーディンガー方程式

1926 年、シュレーディンガー（Erwin Schrödinger）は、量子的な粒子は**波動関数**（*wave function*）$\psi(x)$ によって記述されると提唱した。ポテンシャル $V(x)$ の中にあるエネルギー E の粒子に対して、波動関数は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi = E\psi.$$

を満たす。ばねの場合は $V(x) = \tfrac{1}{2}m\Omega^2 x^2$ であり、x の尺度を取り替えると、これはちょうど問題の方程式になり、$E = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\Omega$ となる。ψ が無限遠で減衰する（つまり粒子がどこかに存在する）という物理的な要請は、これらのエネルギーに対してしか満たされない。これが**量子化**（*quantisation*）であり、数学から自然に導かれるのである。最低のエネルギーが 0 ではなく $\tfrac{1}{2}\hbar\Omega$ であることに注意しよう。量子振動子は完全に静止することが決してできない。この**零点エネルギー**（*zero-point energy*）は実在し、測定することもできる。液体ヘリウムが通常の圧力のもとでは絶対零度においても凍らないのは、このためである。

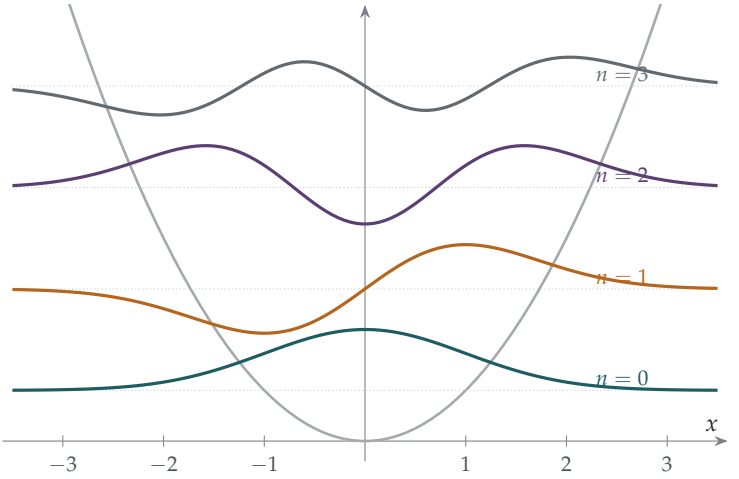

図 8.6.1　量子調和振動子（$\omega = 1$ の場合）。放物線はポテンシャルエネルギーを表す。各波動関数 y_n は、そのエネルギー準位 $n + \frac{1}{2}$ の高さに描かれている。準位は等間隔に並び、最低の準位は 0 より上にある。関数 y_n は n 回 0 を横切り、どの 2 つも互いに直交する。

エルミート関数とスツルム–リウヴィル理論

一般の解は $y_n = H_n(\sqrt{\omega}x)e^{-\omega x^2/2}$ であり、ここで H_n は n 次の多項式で、**エルミート多項式**（*Hermite polynomial*）とよばれる（図 8.6.1）。直交性はこの方程式に特有のものではない。方程式が適切な境界条件のもとで $(py')' + qy = -\lambda wy$ の形に書けるときはいつでも、異なる λ の値に属する解は、段階 4 とまったく同じ議論によって直交する。これが**スツルム–リウヴィル理論**（*Sturm–Liouville theory*）（1830 年代）であり、フーリエ級数の正弦関数（Section 3.7）、太鼓の膜の振動、静電気学のルジャンドル多項式（Legendre polynomials）、水素原子の波動関数などを包括する。Section 4.7 の固有値問題（eigenvalue problem）もその一例である。そこで求めた臨界値が固有値 λ であり、直交する関数はその系の自然な「モード」である。

次の一歩

1. **次の状態。** $\lambda = \frac{\omega}{2}$ のとき、$y_2 = (4\lambda x^2 - 1)e^{-\lambda x^2}$ が $n = 2$ とした方程式を満たすことを示せ。また、$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\omega x^2}\,dx = \sqrt{\pi/\omega}$ と $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\omega x^2}\,dx = \frac{1}{2\omega}\sqrt{\pi/\omega}$ を用いて、$\int_{-\infty}^{\infty} y_0 y_2\,dx = 0$ を直接確かめよ。

2. **ほかのエネルギーはない。** n を一般の数 ν に置き換えて、$y = e^{-\lambda x^2}$ を試せ。これがうまくいくのは $\nu = 0$ のときに限ることを示せ。（実際、減衰する解が存在するのは ν が 0 以上の整数のときに限る。）

3 **正弦波。** $y(0) = y(\pi) = 0$ のもとでの $y'' = -n^2 y$ から出発し、同じ方法を用いて、$m \neq n$ のとき $\int_0^{\pi} \sin mx \sin nx \, \mathrm{d}x = 0$ となることを示せ。

4 **はしご。** y_n が方程式の解ならば、$y_{n+1} = \omega x y_n - y_n'$ は n を $n+1$ に置き換えた方程式の解であることを示せ。これを用いて、y_0 から y_1 と y_2 を作れ。（これは量子力学における「上昇演算子（raising operator）」である。）

さらに学ぶために

- **David Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics***（Cambridge University Press）。『量子力学入門』。大学学部の物理学の標準的な教科書であり、第 2 章で調和振動子を扱っている。
- **Richard Feynman, *QED: The Strange Theory of Light and Matter***（Princeton University Press）。『光と物質のふしぎな理論』。量子力学の大家の一人による一般向けの解説である。
- **Mary Boas, *Mathematical Methods in the Physical Sciences***（Wiley）。『自然科学者のための数学的方法』。数学と物理学を学ぶ学生に向けて、エルミート多項式とスツルム–リウヴィル理論を扱っている。

詳しい解説付きの解答は第 8.6 節にある：

https://beyondstep.keithmcnulty.org/ja/ch08/quantum-oscillator.html

毎週 1 問の STEP の問題を丁寧に解き明かす The STEP Up。メールで無料配信中：keithmcnulty.substack.com