

January 23, 2013

# 量子力学I ノート

Ryuichiro Kitano

*Department of Physics, Tohoku University, Sendai 980-8578, Japan*

## Abstract

量子力学 I 講義ノート。といってもほとんど Griffiths の教科書どおり。

# Contents

<b>0</b>	<b>参考文献など</b>	<b>5</b>
<b>1</b>	<b>量子の不思議な世界</b>	<b>6</b>
1.1	ダブルスリットの実験(電子は波?)	7
1.2	光電効果(光は粒子?)	8
1.3	水素原子:エネルギーはとびとび	9
1.4	黒体輻射(ちょっとだけ)	12
1.5	省略したトピック	15
<b>2</b>	<b>古典論の復習</b>	<b>16</b>
2.1	その前に、偏微分の復習	16
2.2	ラグランジアン	18
2.3	作用	18
2.4	最小作用の原理	19
2.5	電磁場中の粒子	20
2.6	ハミルトニアン	20
2.7	ポアソンカッコ	23
2.8	ハミルトニアンと作用の関係	23
<b>3</b>	<b>波動関数</b>	<b>25</b>
3.1	シュレーディンガー方程式	25
3.2	重ね合わせの原理	26
3.3	波動関数の統計的解釈	27
3.4	規格化	28
3.5	確率の流れ	32
3.6	不安定な粒子(ちょっと脇道)	32

3.7	運動量 ( 演算子! )	34
3.8	演算子?	35
3.9	Ehrenfest の定理	38
3.10	シュレーディンガー方程式から古典力学へ	39
3.11	不確定性原理	40
3.12	3章のまとめ	45
4	時間によらないシュレーディンガー方程式	47
4.1	定常状態	47
4.1.1	変数分離	47
4.1.2	1次元問題では、束縛状態に縮退はない。	51
4.1.3	$\psi(x)$ は実関数にとれるのだ	53
4.1.4	パリティ	53
4.1.5	$E$ は $V_{\min}$ よりおおきいのだ	54
4.1.6	とびとびのエネルギー ( エネルギーの量子化 )	55
4.2	井戸型ポテンシャル ( 完全剛体の壁 )	56
4.2.1	シュレーディンガー方程式を解く。	56
4.2.2	初期条件の例	61
4.2.3	$c_n$ の意味	63
4.2.4	もうちょっと調べてみよう。	64
4.3	ここまでのまとめ	67
4.4	フーリエ級数・フーリエ変換	68
4.4.1	三角関数で展開?	68
4.4.2	フーリエ級数	70
4.4.3	フーリエ級数の複素表示	74
4.4.4	正規直交関数系	74
4.4.5	フーリエ積分	76
4.4.6	フーリエ変換	78
4.4.7	ディラックのデルタ関数	79
4.4.8	デルタ関数と完全性	83
4.5	調和振動子	84
4.5.1	調和振動子ってなんだ?	84
4.5.2	代数的な方法 ( 生成消滅演算子 )	85

4.5.3	ポテンシャルエネルギーの期待値は全エネルギーの半分なのだ . . . . .	93
4.5.4	解析的な方法 . . . . .	97
4.5.5	エルミート多項式の性質 . . . . .	104
4.5.6	調和振動子まとめ . . . . .	108
4.6	自由粒子 . . . . .	109
4.6.1	粒子は波、っていうか波の集まり . . . . .	109
4.6.2	簡単な例 . . . . .	113
4.6.3	群速度と位相速度 . . . . .	115
4.6.4	アインシュタインの式とド・ブロイの式 . . . . .	117
4.6.5	確率の流れを求めてみる。 . . . .	118
4.6.6	ガウス型波束 . . . . .	118
4.7	デルタ関数ポテンシャル . . . . .	123
4.7.1	束縛状態と散乱状態 . . . . .	123
4.7.2	デルタ関数井戸 . . . . .	125
4.7.3	束縛状態 . . . . .	126
4.7.4	散乱状態 . . . . .	128
4.7.5	デルタ関数型障壁とトンネル効果 . . . . .	131
4.8	有限井戸型ポテンシャル . . . . .	132
4.8.1	束縛状態 . . . . .	133
4.8.2	散乱状態 . . . . .	141
4.9	ポテンシャル障壁とトンネル効果 . . . . .	145
4.9.1	Gamov の透過因子 . . . . .	149
<b>5</b>	<b>量子力学の理論体系</b> . . . . .	<b>150</b>
5.1	ヒルベルト空間 . . . . .	150
5.2	物理量 (観測可能量・オブザーバブル) . . . . .	152
5.2.1	エルミート演算子 . . . . .	152
5.2.2	固有状態 . . . . .	156
5.3	エルミート演算子あれこれ . . . . .	157
5.3.1	とびとび固有値の場合 . . . . .	157
5.3.2	連続的な固有値の場合 . . . . .	159
5.4	一般化された統計的解釈 . . . . .	162
5.5	不確定性原理 . . . . .	166

5.5.1	一般化された不確定性原理 . . . . .	166
5.5.2	最小波束 . . . . .	168
5.5.3	エネルギーと時間の不確定性 . . . . .	169
5.6	ディラックの記法 . . . . .	171
5.7	Heisenberg 描像・Heisenberg 方程式 . . . . .	184
5.8	正準量子化 . . . . .	187
5.8.1	ビリアル定理 . . . . .	188
A	次元の整理	190

# Chapter 0

## 参考文献など

1. D. J. Griffiths, “Introduction to Quantum Mechanics,” Pearson Education.
2. 「物理のための数学」和達三樹著、岩波書店.
3. A. Tonomura, J. Endo, T. Matsuda, T. Kawasaki and H. Ezawa “Demonstration of single-electron buildup of an interference pattern,” Am. J. Phys. **57** (2) (1989) 117.
4. 「量子力学 I」猪木慶治・川合光著、講談社サイエンティフィック.
5. 「解析概論」高木貞治著、岩波書店.

基本的に [1] でいこうと思います。フーリエ級数・フーリエ変換は [2] を使ってます。

# Chapter 1

## 量子の不思議な世界

まずは、不思議な世界に触れよう。

量子力学とはなんだろう。

- その名の通り、量子を扱う。例えば、電子とか、光子とか。
- 古典力学とは全然違う。(まあ、定義だねえ。量子論ではないのを古典論と呼びます。)
- どう違うかって言うと、確率で物事が決まっている。運動方程式をとくと物理量  $A$  を測定したとき  $a_n$  に観測される確率がわかる。
- エネルギーがとびとびの値をとることがある。たとえば、水素原子における電子の軌道がとびとびになることがわかる。(この理由は、いままで騙されてましたよねえ。)

なんの役に立つのであろう。

- ミクロな世界では、量子論じゃないと説明できないことがあります。
- 様々なデバイスにも使われているようです。(よく知りませんが。江崎ダイオードはノーベル賞ですねえ。)
- つべこべ言わない。とにかく、自然がそうなんだからしかたがない。

難しいの？

- イメージがわからないところがある。粒子が波動だったりしたり、壁をすり抜けたり…。



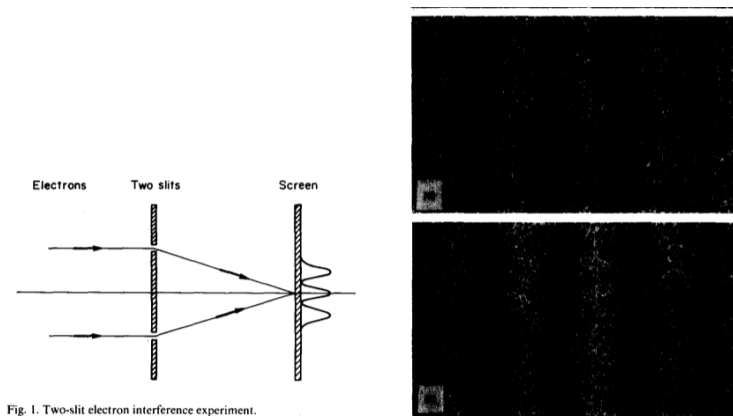
- でも、やることは簡単。(少なくともこの講義では。)

せっかく、理学部に入ったんだから、量子力学ぐらい勉強しようぜ。

## 1.1 ダブルスリットの実験 (電子は波?)

視覚的によくわかるのが、Tonomura らの実験 [3]。Youtube にもアップされています。

<http://www.youtube.com/watch?v=ZJ-0PBRuthe>



(原論文より)

電子一個一個は、どちらかの穴を通してスクリーンに点として写る。点がいっぱいたまってくると、なんと、干渉縞がみえる!

つまり、電子はまるで、両方の穴を通ってくる波みたいにふるまう。でも、電子一個一個も見える。間違いなく粒子であって、どちらかの穴しか通っていない。

量子力学の世界では、電子などの物質は粒子と波動の二つの性質をもつ。「波と粒子の2重性 (wave-particle duality)。」なんのこっちゃ。

高校生のときに習いましたよね。そうです、ド・ブロイ波ってやつです。運動量  $p$  の粒子は

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (1.1)$$

の波長をもった波動の性質を持つんでした…。ここで、でてくるプランク定数  $h$  は

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} \quad (1.2)$$

です。次元は

$$[h] = [ML^2T^{-1}] \quad (1.3)$$

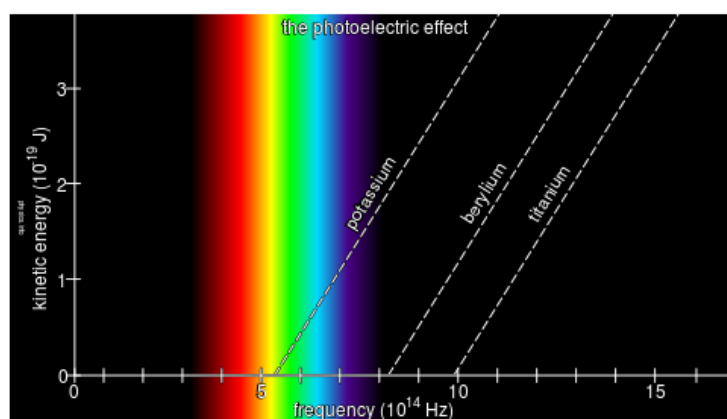
です。こいつが量子力学のもっとも基本的な量です。次元は、作用とか角運動量とかと同じ次元です。したがって、作用とか角運動量が  $h$  と比べて十分大きいようなマクロな運動は古典論で取り扱えますが、そうでないときは、量子論の効果が重要になります。

## 1.2 光電効果 ( 光は粒子? )

アインシュタインがノーベル賞とったやつですね。電磁気学で習ったように、光は波動です。もうちょっと言うと、真空中のマックスウェル方程式の解で、電場とか磁場が振動している電磁波です。そのエネルギーは振幅の 2 乗に比例しますね。

ところが、光電効果 (photoelectric effect) については、それでは説明がつかないんです。光電効果とは、金属に光をあてると電子が飛び出す現象です。まあ、それはいいでしょう。エネルギーを電子にあたえただけですよ。でも、不思議なのは、

- 金属にあてる光の振動数 ( 色ですね ) がある一定値以上でないと電子が飛び出さない。いくら光の強度 ( 振幅ですね ) を増やしても同じ。
- 飛び出した電子の運動エネルギーは、光の振動数の一次関数。これも、光の強度とは無関係。光の強度は、出てくる電子の数を増やす。(Hertz と Lenard が Einstein 前, Richardson, Millikan が Einstein 後。)



(Taken from <http://physics.info/photoelectric/>)

まとめると、この図のようになります。式で書くと、

$$K = \frac{1}{2}mv^2 = h\nu - W. \quad (1.4)$$

$h$  は比例係数で、なんと先ほども出てきたプランク定数です。 $W$  は物質の種類に依存する定数で仕事関数と呼ばれています。

おかしいですね。光の強度を増やせばエネルギーが増えるんだから電子が飛び出しても良さそうなのに…。振動数がどうしてここに関わってくるのか？ 実際多くの物理学者は、実験を信じなかったようです。っていうのは、Maxwell 方程式が美しすぎて、変更があるとは思わなかったんでしょうなあ。

アインシュタインは光のエネルギーの粒 (quanta) の集まりで、その一つの粒のエネルギー ( $E$ ) が

$$E = h\nu, \quad (1.5)$$

であると提唱。ここで、 $h$  は定数 (プランク定数) で、 $\nu$  は振動数。(ここから、近代的にこの粒を光子 (photon) と呼びますね。) こうすると、光電効果を以下のように自然に説明できる。

- 光電効果は束縛されている電子が光子のエネルギーをもらって飛び出すという素過程で起こっている。
- 光子のエネルギーが足りないと、電子は飛び出すことができない。
- 光子のエネルギーが多いと、電子は運動エネルギーが増える。
- 光の強度とは、光子の数で、いくら多くても光子のエネルギーが足りないと電子は飛び出さない。

まとめると、光も粒子としての性質を持っているんです！ だからと言って、この式 (1.5) は、意味不明ですね。でも、量子論になれてくると、当たり前を感じてくるから不思議ですねえ。みなさんもこの境地になるまで勉強しましょう。

### 1.3 水素原子：エネルギーはとびとび

上記の不思議な現象の他にも、古典電磁気学では説明できない、もうちょっと身近なものが水素原子です。水素原子は、陽子のまわりを電子がぐるぐる回っているって高校で習ったでしょ

う。Rutherford の模型ですね。でも、古典電磁気学によると、電子がぐるぐる回ると電磁波を放出して、エネルギーを失い、最後には電子が陽子とくっついてしまうはずですが、でも実際は、そんなことは起こりません。水素原子は安定に存在します。実際、どれくらいの時間で落ちてしまうのか考えてみましょう。(猪木・川合 I[4]、第 1 章章末問題 [2])

Larmor の公式より、単位時間あたりの電磁波の放出エネルギーは、

$$\frac{dW}{dt} = -\frac{2}{3} \frac{e^2}{4\pi c^3} |\dot{\mathbf{v}}|^2, \quad (1.6)$$

で与えられます(砂川 P.290、場古典 P.197)。この講義では真空の誘電率を  $\epsilon_0 = 1$  ととりまします。でも、分母の  $4\pi$  は残しておきます。すべては  $e^2$  の定義に押し付けられます。そのとき、クーロンポテンシャルが

$$V = -\frac{e^2}{4\pi r} \quad (1.7)$$

です。で、 $e$  の次元は

$$[e] = [M^{1/2} L^{3/2} T^{-1}] \quad (1.8)$$

です。

さて、電子が陽子から半径  $r$  のところで円運動しているとすると、電子の加速度の大きさは

$$|\dot{\mathbf{v}}| = \frac{e^2}{4\pi m_e r^2} = r\omega^2 \quad (1.9)$$

で与えられます。 $m_e$  は電子の質量です。また、電子のエネルギーは

$$\begin{aligned} W(r) &= \frac{1}{2} m_e |\mathbf{v}|^2 - \frac{e^2}{4\pi r} \\ &= \frac{1}{2} m_e (r\omega)^2 - \frac{e^2}{4\pi r} \\ &= -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi r}. \end{aligned} \quad (1.10)$$

円運動なので、 $|\dot{\mathbf{v}}| = r\omega^2$ ,  $|\mathbf{v}| = r\omega$ 、これらと式 (1.9) から上の式がでますね。したがって、

$$\frac{dW}{dt} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi r^2} \frac{dr}{dt}. \quad (1.11)$$

よって、式 (1.6)、(1.9) と (1.11) を組み合わせると、単位時間あたりの半径の変化は

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{4}{3} \frac{e^4}{(4\pi)^2 m_e^2 c^3 r^2} \quad (1.12)$$

となります。

最初にボーア半径のところに電子があったとすると、電子が陽子にたどりついてしまうまでの時間は、

$$\begin{aligned}t_0 &= \int_0^{t_0} dt \\&= - \int_0^{a_0} \frac{dt}{dr} dr \\&= \frac{3(4\pi)^2 m_e^2 c^3}{4 e^4} \int_0^{a_0} r^2 dr \\&= \frac{1(4\pi)^2 m_e^2 c^3 a_0^3}{4 e^4}.\end{aligned}\tag{1.13}$$

でした。あとは、データを代入しましょう。

$$m_e = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg},\tag{1.14}$$

$$c = 3.00 \times 10^8 \text{ m/s},\tag{1.15}$$

$$a_0 = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m},\tag{1.16}$$

$$e^2 = 4\pi\alpha \cdot \hbar c = 9.67 \times 10^{-36} c \text{ kg m}^2/\text{s}.\tag{1.17}$$

これらを入れると、

$$t_0 = 1.56 \times 10^{-11} \text{ s}.\tag{1.18}$$

だいぶ短い時間で落ちこちやいますね。そんなわけないので、理論の変更が必要なんです。

実際、水素原子から出てくる光の振動数は連続的ではなくて、Balmer(バルマー) 系列と呼ばれる不連続なスペクトルを持っています。

$$\nu \propto \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right).\tag{1.19}$$

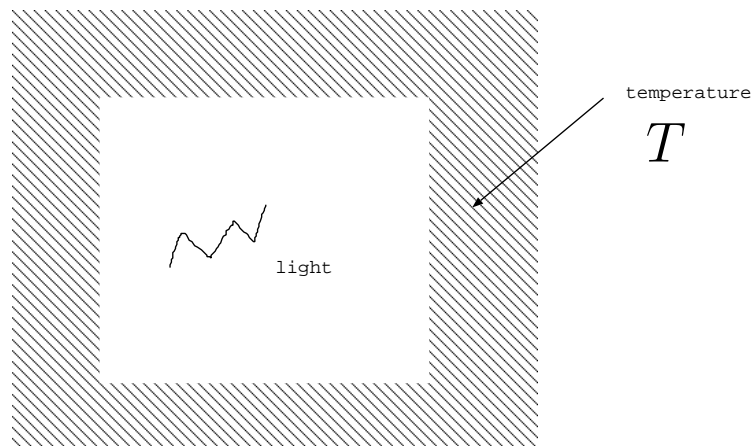
(ちなみに他にも Lyman 系列などいろいろあります。) これと、式 (1.5) から、水素原子の電子はとびとびのエネルギーをもっているらしいということがわかりますね。もう何なんでしょう。

徐々に学んでいきましょう。とにかく、ここで言いたかったのは、今までの電磁気学やニュートン力学を、あきらめざるをえない実験結果がたくさん存在するってことです。そうです、自然界はそれだけでは終わらなかったのです。

高校生のときにクーロンの法則を習ったときに、こんなこと思いませんでした？ $r = 0$ でどうなっちゃうんだろうって。そうなんです、明らかに変なんです。ミクロな世界にいくと、量子力学的な扱いが必要になります。さらに、もっと近くにいくと相対論的な扱いも必要になってきます。これから、いろいろ学びますよ～。あ、ちなみに、ニュートンの法則の場合は、事情がもっと複雑です。ブラックホールが出てきたり…。この講義では、こういう問題の初歩の初歩である、量子力学について学びます。

## 1.4 黒体輻射（ちょっとだけ）

プランクがいわゆるプランク定数  $h$  を導入したのが黒体輻射のエネルギースペクトルです。



温度  $T$  の壁に囲まれた中の光のエネルギースペクトル分布（温度が  $T$  のとき、単位体積あたりで、振動数が  $\nu$  から  $\nu + d\nu$  までの光がもっているエネルギーの量）:

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}. \quad (1.20)$$

$\nu$  が小さいところでは  $\nu^2$  に比例して、Rayleigh-Jeans の公式となり、この部分は古典的に理解できます。 $\nu$  の大きいところは Wien の式というものになりまして、経験的に知られていました。プランクはこの二つの式をみごとに内挿してみせたわけです。

で、この式の意味はなんなんでしょうか？じつは、この式の意味するところは、光が粒々だって言ってるんです。つまり、光は光子っていう粒子で、そのエネルギーは

$$\varepsilon = h\nu, \quad (1.21)$$

と与えられるとすると、理解できちゃうんです。まず、前の

$$\frac{8\pi\nu^2}{c^3} \quad (1.22)$$

は状態の数です。こっちは波で考えます。 $x, y, z$  方向の波の周期の数をそれぞれ、 $n_x, n_y, n_z$  とすれば、状態の数は、

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} dn_x dn_y dn_z &= \frac{1}{(2\pi)^3} dk_x dk_y dk_z \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{2\pi}{c}\right)^3 \nu^2 d\nu \\ &= \left(\frac{4\pi\nu^2}{c^3}\right) d\nu \end{aligned} \quad (1.23)$$

となりますね。ただし、

$$n_{x,y,z} = \frac{k_{x,y,z}L}{2\pi} \quad (1.24)$$

$$k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\nu}{c} \quad (1.25)$$

です。2倍答えが違うっぽいのは、光は横波なので、偏光の仕方が2つあって、状態が2倍になります。

後ろのファクターがボーズ・アインシュタイン分布ってやつです。こっちは粒子で考えます。ボルツマンの分布則で、温度が  $T$  のとき、系のエネルギーが  $E$  である確率は

$$e^{-\beta E} \quad (1.26)$$

に比例します。 $\beta$  は

$$\beta = \frac{1}{kT} \quad (1.27)$$

です。いま、系のエネルギーは光子のエネルギーを足したものだとして、

$$E = \sum_i n_i h \nu_i = \sum_i \varepsilon_i \quad (1.28)$$

で、 $n_i$  は整数です。 $(n_i = 0, 1, 2, \dots)$ 。ここで、量子論的に振動数  $\nu$  はとびとびの値であることにしました。とすると、振動数  $\nu_i$  をもった光子のエネルギーの和の平均値は

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon_i \rangle &= \frac{\sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \dots \varepsilon_i e^{-\beta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \dots)}}{\sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \dots e^{-\beta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \dots)}} \\ &= \frac{\sum_{n_i=0}^{\infty} n_i h \nu_i e^{-\beta n_i h \nu_i}}{\sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-\beta n_i h \nu_i}} \quad (\text{共通部分を約分した。}) \\ &= \frac{-\frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-\beta n_i h \nu_i}}{\sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-\beta n_i h \nu_i}} \\ &= \frac{-\frac{\partial}{\partial \beta} \left( \frac{1}{1 - e^{-\beta h \nu_i}} \right)}{\frac{1}{1 - e^{-\beta h \nu_i}}} \\ &= \frac{h \nu_i}{1 - e^{-\beta h \nu_i}} \\ &= \frac{h \nu_i}{e^{\beta h \nu_i} - 1} \end{aligned} \quad (1.29)$$

となって理解できました。

この  $h$  は、 $E = h \nu$  なので、次元は [エネルギー] × [時間]、つまり、

$$[h] = ML^2 T^{-1} \quad (1.30)$$

で、値は、

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s} \quad (1.31)$$



です。

## 1.5 省略したトピック

シュテルン・ゲルラッハ、コンプトン散乱

## Chapter 2

# 古典論の復習

まずは、ちょっとだけ、復習しましょう。この講義では、ハミルトニアンってのがしょっちゅう出てきます。

### 2.1 その前に、偏微分の復習

変数  $x$  と  $y$  があって、その関数として、 $f(x, y)$  があったとしましょう。量子力学では、こういう多変数の関数を扱います。

まずは、偏微分の定義です。これは簡単ですね。片方をとめて、片方を微分するんです。

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h, y) - f(x, y)}{h}, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x, y+h) - f(x, y)}{h}, \quad (2.2)$$

ですね。2階微分も同様に、

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right), \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial f}{\partial y} \right), \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right), \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial f}{\partial y} \right), \quad (2.4)$$

です。 $\partial^2 f / \partial x \partial y$  と  $\partial^2 f / \partial y \partial x$  が存在して、ともに連続のときは

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} = \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \quad (2.5)$$

です。(解析概論 [5]、§23、ちなみに、2階微分の記号で順序が反対になってる。)

つぎに、

$$\Delta f = f(x + \Delta x, y + \Delta y) - f(x, y) \quad (2.6)$$

っていのを考えましょう。

$$\Delta f = \frac{\partial f}{\partial x} \Delta x + \frac{\partial f}{\partial y} \Delta y + \epsilon_1 \Delta x + \epsilon_2 \Delta y \quad (2.7)$$

と書くと、偏微分の定義から、 $\epsilon_1$  と  $\epsilon_2$  は  $\Delta x$  や  $\Delta y$  をゼロに近づけると、ゼロになります。したがって、これらを見捨てた主要部分：

$$df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy \quad (2.8)$$

を全微分と呼びます。

変数  $x, y$  もなんか2つの変数  $p, q$  の関数だとしましょう。

$$x = x(p, q), \quad y = y(p, q) \quad (2.9)$$

このとき、

$$\begin{aligned} df &= \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy \\ &= \frac{\partial f}{\partial x} \left( \frac{\partial x}{\partial p} dp + \frac{\partial x}{\partial q} dq \right) + \frac{\partial f}{\partial y} \left( \frac{\partial y}{\partial p} dp + \frac{\partial y}{\partial q} dq \right) \\ &= \left( \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial p} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial p} \right) dp + \left( \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial q} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial q} \right) dq \end{aligned} \quad (2.10)$$

となります。

$$df = \frac{\partial f}{\partial p} dp + \frac{\partial f}{\partial q} dq \quad (2.11)$$

とくらべると、

$$\frac{\partial f}{\partial p} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial p} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial p}, \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial f}{\partial q} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial q} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial q} \quad (2.13)$$

ということがわかります。

それから、たとえば、 $x$  と  $y$  がある 1 つのパラメータ  $t$  の関数だとしましょう。

$$x = x(t), \quad y = y(t) \quad (2.14)$$

このときは、同様にやると、

$$\begin{aligned} df &= \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dt} dt + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dt} dt \\ &= \left( \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dt} \right) dt, \end{aligned} \quad (2.15)$$

したがって、

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dt} \quad (2.16)$$

となります。

## 2.2 ラグランジアン

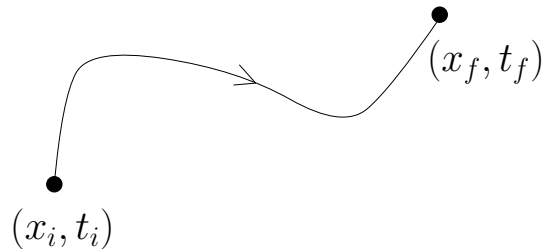
これは定義するものです。一般に、座標  $x$  と速度  $\dot{x}$  の関数で、

$$L(x, \dot{x}) = T - V \quad (2.17)$$

の形をしています。 $T$  は運動エネルギー、 $V$  はポテンシャルです。ここでは、時間  $t$  に依存しないとしましょう。当然、ラグランジアンの次元はエネルギーの次元  $[ML^2T^{-2}]$  です。

## 2.3 作用

運動の始点  $x_i(t_i)$  と終点  $x_f(t_f)$  があつたとき、適当に path を考えることができます。



任意の path(つながってないとダメですよ) に対応して、作用の値が

$$S[x] = \int_{t_i}^{t_f} L(x, \dot{x}) dt \quad (2.18)$$

で与えられます。作用は関数  $x(t)$  の関数です。こういうのを汎関数と呼びます。作用の次元は [エネルギー]×[時間] ですので、 $[ML^2T^{-1}]$  ですね。プランク定数  $h$  の次元と同じです。

## 2.4 最小作用の原理

で、この作用 (action) を最小にするのが選ばれるというのが、最小作用の原理です。このような path を古典的 path と呼びます。っていうのは、量子論ではここからずれることができるんです。

さてさて、古典的 path を求めるためには、作用を変分してゼロって式を解けばいいんですよ。つまり、 $x$  の経路をちょっと変えてみたり、ちょっとだけスピード  $\dot{x}$  を変えてみたりしても作用が変わらないという要請をすれば求まります。式で書くと、

$$\begin{aligned} 0 &= \delta S \\ &= \int_{t_i}^{t_f} dt \left( \frac{\partial L}{\partial x} \delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} \right) \\ &= \int_{t_i}^{t_f} dt \left( \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta x \Big|_{t_i}^{t_f} \end{aligned} \quad (2.19)$$

となります。始点と終点は固定して作用の値をもとめていますので、最後の式の最後の項はゼロです。となると、あらゆる変形  $\delta x$  にたいして、第一項の積分がゼロとならなければなりません。ってことは、

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = 0. \quad (2.20)$$

これが、オイラー・ラグランジュ方程式です。

例えば、質点の運動として、

$$T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2, \quad V = V(x) \quad (2.21)$$

とすると、オイラー・ラグランジュ方程式は

$$m \ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x} = F \quad (2.22)$$

とニュートンの運動方程式となります。

## 2.5 電磁場中の粒子

電磁場中の粒子のラグランジアンは、

$$L = \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 - q\phi + \frac{q}{c}\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A} \quad (2.23)$$

と与えられます。スカラーポテンシャル  $\phi$  とベクトルポテンシャル  $\mathbf{A}$  は電場  $\mathbf{E}$  と磁場  $\mathbf{B}$  と

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.24)$$

という関係にありましたね。

このラグランジアンから運動方程式が導かれます。

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \left( m\dot{\mathbf{x}} + \frac{q}{c}\mathbf{A} \right) + q\nabla\phi - \frac{q}{c}\nabla(\dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}) \\ &= m\ddot{x}^i + \frac{1}{c} \left( \frac{\partial A^i}{\partial t} + \frac{\partial A^i}{\partial x^j} \dot{x}^j \right) + q \frac{\partial \phi}{\partial x^i} - \frac{q}{c} \dot{x}^j \frac{\partial A^j}{\partial x^i} \\ &= m\ddot{x}^i - q \left[ -\frac{\partial \phi}{\partial x^i} - \frac{1}{c} \frac{\partial A^i}{\partial t} + \frac{1}{c} \dot{x}^j \left( \frac{\partial A^j}{\partial x^i} - \frac{\partial A^i}{\partial x^j} \right) \right] \\ &= m\ddot{x}^i - q \left[ E^i + \frac{1}{c} \epsilon_{ijk} \dot{x}^j B^k \right] \\ &= m\ddot{\mathbf{x}} - q \left[ \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right] \end{aligned} \quad (2.25)$$

よく知ってる形ですね。第2項はローレンツ力ですね。ちなみに、途中で、

$$\epsilon_{ijk} B^k = \epsilon_{ijk} \epsilon_{kmn} \frac{\partial A^n}{\partial x^m} = (\delta_{im} \delta_{jn} - \delta_{in} \delta_{jm}) \frac{\partial A^n}{\partial x^m} = \frac{\partial A^j}{\partial x^i} - \frac{\partial A^i}{\partial x^j} \quad (2.26)$$

を使いました。

## 2.6 ハミルトニアン

ラグランジアン  $L$  は  $x$  と  $\dot{x}$  の関数でした。ここで、運動量  $p$  を

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \quad (2.27)$$

と定義します。これをつかってハミルトニアン  $H$  は

$$H = p\dot{x} - L \quad (2.28)$$

で与えられます。これを  $p$  と  $x$  の関数とみます。こういうのをルジャンドル変換と呼びます。以降  $\dot{x}$  は独立変数ではなくて、式 (2.27) を解いて得られる  $p$  と  $x$  の関数です。(ちなみに解けない場合もあったりしますが、深入りしません。)

$$x = x, \quad \dot{x} = \dot{x}(x, p) \quad (2.29)$$

逆に、

$$p = p(x, \dot{x}), \quad x = x \quad (2.30)$$

です。独立変数がなんであるか、常に意識するようにしましょう。次元もチェックしておきましょうね。ハミルトニアンの次元はラグランジアンとおなじ、エネルギーの次元です。

そうすると、

$$\begin{aligned} dH(x, p) &= d(p\dot{x} - L) \\ &= \dot{x}dp + p d\dot{x} - dL \\ &= \dot{x}dp + p d\dot{x} - \frac{\partial L}{\partial x} dx - \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} d\dot{x} \\ &= \dot{x}dp + p d\dot{x} - \left( \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) dx - \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} d\dot{x} \quad (\text{オイラー・ラグランジュ方程式}) \\ &= \dot{x}dp + p d\dot{x} - \dot{p}dx - p d\dot{x} \quad (p \text{ の定義}) \\ &= \dot{x}dp - \dot{p}dx, \end{aligned} \quad (2.31)$$

つまり、

$$\frac{\partial H(x, p)}{\partial p} = \dot{x}, \quad \frac{\partial H(x, p)}{\partial x} = -\dot{p} \quad (2.32)$$

です。この二つが、ハミルトンの運動方程式です。途中、 $p$  の定義とオイラー・ラグランジュの運動方程式を使っています。

このハミルトニアンなるもの、ご存知のように、エネルギーを表します。っていうのは、

$$\begin{aligned}\frac{dH}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p} \frac{dp}{dt} \\ &= -\dot{p}\dot{x} + \dot{x}\dot{p} \\ &= 0\end{aligned}\tag{2.33}$$

なのです。つまり、ハミルトニアンが（もしくはラグランジアンが）時間に陽に依存しないとき、 $H$ は保存量となります。時間に依存しないポテンシャル中の運動なんかでエネルギーが保存しますね。それが、ハミルトニアンで与えられます。エネルギーの次元をもっていて、保存するもの、それすなわちエネルギーです。

たとえば、ポテンシャル中の質点の運動を表すラグランジアン

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)\tag{2.34}$$

から、ハミルトニアンを求めてみましょう。

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}\tag{2.35}$$

ですので、これをつかって、

$$H = \dot{x}p - \left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)\right) = \frac{p^2}{2m} + V(x).\tag{2.36}$$

できました。これが、全エネルギーで、保存するのはご存知のとおり。このハミルトニアン、量子力学で主役的な役割しますよ。

電磁場中ではどうでしょう。式(2.23)のラグランジアンから運動量を求めると

$$\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{x}} + \frac{q}{c}\mathbf{A}\tag{2.37}$$

です。これをつかって、

$$\begin{aligned}H &= \dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{p} - L \\ &= \frac{1}{2}m\dot{\mathbf{x}}^2 + q\phi \\ &= \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)^2 + q\phi\end{aligned}\tag{2.38}$$

となります。



## 2.7 ポアソンカッコ

ポアソンカッコの定義は、 $A, B$  を  $(x, p)$  および  $t$  を変数とした力学量とすると、

$$\{A, B\}_{\text{P.B.}} \equiv \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial x} \quad (2.39)$$

で定義されます。簡単ですね。これを使うと、適当な力学量  $O$  の時間発展を記述する方程式が綺麗にかかけます。

$$\begin{aligned} \frac{dO}{dt} &= \frac{\partial O}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial O}{\partial p} \frac{dp}{dt} + \frac{\partial O}{\partial t} \\ &= \frac{\partial O}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial O}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{\partial O}{\partial t} \\ &= \{O, H\}_{\text{P.B.}} + \frac{\partial O}{\partial t} \end{aligned} \quad (2.40)$$

この式をもって、ハミルトニアンは時間発展の生成子である。なんて言います。 $O$  に  $x$  と  $p$  を入れると、ハミルトンの運動方程式が復活しますね。

それから、定義式に  $A, B$  として、 $x, p$  を使ってみると、

$$\{x, x\}_{\text{P.B.}} = 0, \quad \{p, p\}_{\text{P.B.}} = 0, \quad \{x, p\}_{\text{P.B.}} = 1 \quad (2.41)$$

です。これらが、あとで重要だったりします。

## 2.8 ハミルトニアンと作用の関係

運動方程式を満たすような作用(つまり最小の作用)を終点の座標  $x_f$  と時刻  $t_f$  の関数とみて、 $S_{\text{cl}}(x_f, t_f)$  と書きましょう。始点はどこでもいいです。このとき、 $x_f$  や  $t_f$  を少し変えると、もちろん、運動の経路自体が変わりますので、ちょっと複雑ですよね。とにかく、経路をちょこっと動かしたとき作用の変化分は、作用の定義から

$$\delta S = \int_{t_i}^{t_f} dt \left( \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta x \Big|_{t_i}^{t_f} \quad (2.42)$$

ですね。最初の項は、運動方程式からゼロです。そうすると、

$$\delta S_{\text{cl}} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta x \Big|_{t_f} = p \delta x_f \quad (2.43)$$

ですね。これは、終点の時刻  $t_f$  を固定して、 $x_f$  の変化分を見ているわけですので、

$$\frac{\partial S_{cl}}{\partial x_f} = p \quad (2.44)$$

です。ほほう。

つぎに、また作用の定義式から

$$\frac{dS_{cl}}{dt_f} = L(t = t_f) \quad (2.45)$$

というのもよろしいでしょう。偏微分じゃないですよ。全微分です。

$$\begin{aligned} \frac{dS_{cl}}{dt_f} &= \frac{\partial S_{cl}}{\partial t_f} + \frac{\partial S_{cl}}{\partial x_f} \dot{x}_f \\ &= \frac{\partial S_{cl}}{\partial t_f} + p \dot{x}_f \end{aligned} \quad (2.46)$$

変形に上で導出した式 (2.44) をつかいました。上の2つの式を組み合わせると、

$$\frac{\partial S_{cl}}{\partial t_f} = L - p \dot{x}_f = -H \Big|_{t_f} = -H \quad (2.47)$$

ハミルトニアンが時刻によらないことを使いました。これが、作用とハミルトニアンの関係式です。面白いですね。作用の終点時刻をちょこっと変えたときのずれ具合がエネルギーなんです。この  $H$  中の  $p$  を式 (2.44) を用いて書き直して、 $S_{cl}$  に対する方程式にしたものを「ハミルトン=ヤコビの方程式」と呼びます。

たとえば、質点系では、

$$\begin{aligned} -\frac{\partial S}{\partial t} &= H \\ &= \frac{p^2}{2m} + V(x) \\ &= \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V(x) \end{aligned} \quad (2.48)$$

です。めんどうなので、 $cl$  とか  $f$  を落としました。

## Chapter 3

# 波動関数

### 3.1 シュレーディンガー方程式

さて、量子力学では、粒子は波なんていうわけのわからんことが起こってましたね。どう形式化していきましょうか。

古典力学の目標は、 $x(t)$  を計算することでしたね。これは、ある時刻で、 $x$  と  $p$  を与えると、ポテンシャル  $V(x)$  のなかでの  $x$  と  $p$  の時間発展はハミルトニアン

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (3.1)$$

を用いてハミルトンの運動方程式によって記述できましたね。 $m$  は粒子の質量です。

量子力学の目標はちょっとちがって、波動関数  $\Psi(x, t)$  なるものを求めることです。ある時刻でそれを与えると、時間発展は

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t) \quad (3.2)$$

に従います。この方程式がシュレーディンガー方程式です。いきなり、すごいことになってますね。ここで、 $\hbar$  はプランク定数を  $2\pi$  で割ったものです。

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054572 \times 10^{-34} \text{ J s} \quad (3.3)$$

この  $\hbar$  がでてくると、量子力学です。なんか、新しいもんが出てきたときはかならず、その次元をチェックしましょう。まずは、波動関数  $\Psi$  ですが、これは、方程式からは次元がよみとれません。すべての項が  $\Psi$  の一次ですので、どんな次元だとしても OK です。あとで、出てくる式から次元は決まりますが、いまは置いておきましょう。

方程式の一番最後の項の次元は

$$[V\Psi] = [ML^2T^{-2}][\Psi] \quad (3.4)$$

左辺の項は

$$[\hbar T^{-1}][\Psi] \quad (3.5)$$

ですので、 $\hbar$ の次元は

$$[\hbar] = [ML^2T^{-1}] \quad (3.6)$$

ですね。正しい単位になってますか？右辺第一項の次元は

$$[\hbar^2 M^{-1} L^{-2}][\Psi] = [ML^{-2}T^{-2}][\Psi] \quad (3.7)$$

となりますから、きちんとなってますね。

$$x(t) \Rightarrow \Psi(x, t) \quad (3.8)$$

うーん。なんなんですかねえ。なれていきましょう。

### 3.2 重ね合わせの原理

シュレーディンガー方程式を満たす2つの波動関数  $\Psi_1(x, t)$  と  $\Psi_2(x, t)$  があったとしましょう。つまり、

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + V(x)\Psi_1 \quad (3.9)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + V(x)\Psi_2 \quad (3.10)$$

ですね。このとき、

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\Psi_1 + \Psi_2) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + V(x)\Psi_1 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + V(x)\Psi_2 \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 (\Psi_1 + \Psi_2)}{\partial x^2} + V(x)(\Psi_1 + \Psi_2) \end{aligned} \quad (3.11)$$

ですね。なにをいっているかというと、 $\Psi_1 + \Psi_2$  もまた解なんです。このことを「重ね合わせの原理」とよびます。

これは、まさに波の性質ですよ。波の式を二つ足し合わせてもやっぱり波っていう。

### 3.3 波動関数の統計的解釈

さて、とにかく、波動関数  $\Psi(x, t)$  なるものが登場しました。この関数と粒子をどう関係づけましょう？ 波動関数は位置  $x$  の関数ですので、なんとなく、空間に広がったものですよ。粒子とは違う気がします。

ここで登場するのが、Born の統計的解釈です。つまり、間違いなく、粒子は粒子なんだけど、時刻  $t$  において、粒子の位置  $x$  をたとえば、 $a < x < b$  の範囲に見つける確率が

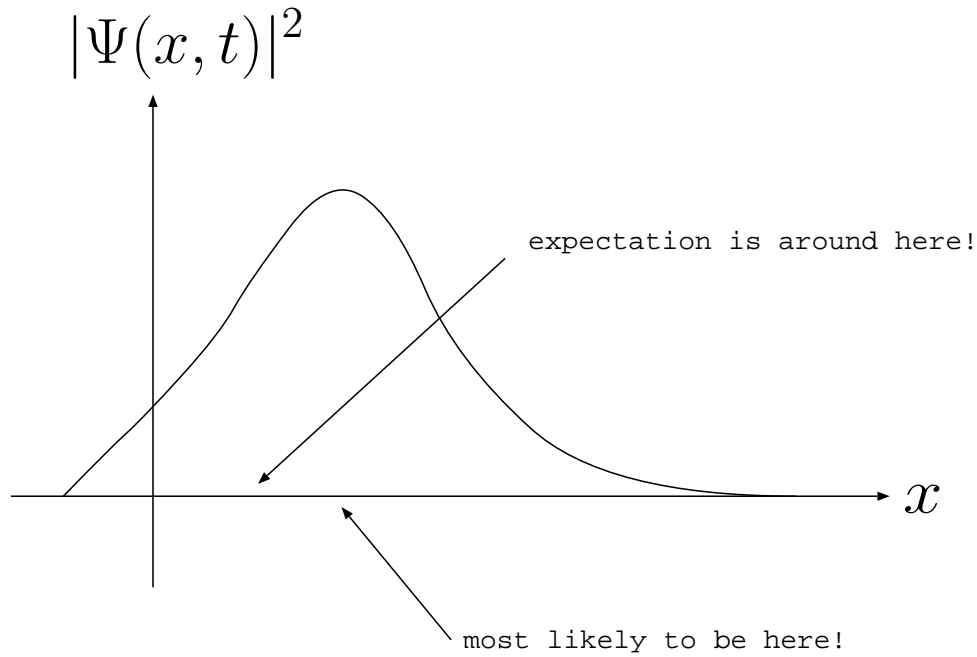
$$\int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (3.12)$$

で与えられるんです。おっと、ここで、いままで言いませんでしたが、 $\Psi$  は複素数です。シュレーディンガー方程式に虚数単位  $i$  がついてるので、そうしとかないといけません。だから、絶対値は

$$|\Psi(x, t)|^2 = \Psi^* \Psi \quad (3.13)$$

の意味です。

ちょっとイメージがわきましたか？ 例えば、 $\Psi$  がすごく広がっているような関数のときは、位置があまりよくわからない状態で、とがっているようなときは位置がはっきりしている状態です。つまり、量子力学では、状態  $\Psi$  を指定しても、その粒子の位置は確率的にしかわからないんです。その確率密度が  $|\Psi|^2$  で与えられます。



### 3.4 規格化

$|\Psi|^2$  を確率密度と解釈するためには、波動関数は

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (3.14)$$

でなければなりません。粒子はどっかにはいるってことですね。シュレディンガー方程式をみるに、 $\Psi$  が解ならその定数倍も解ですね。ですので、上の条件は適当な定数をかければ、シュレディンガー方程式と同時に満たすことができます。この作業を波動関数の規格化といいます。ただし、上の積分が収束して、ゼロでないような場合の話です。このような規格化できないような波動関数は物理的に排除されます。つまり、シュレディンガー方程式をとりて、規格化できない解を得たときはそれは、1 粒子状態を記述していないので、捨て去ります。これ、重要ですよ。

この式から、波動関数の次元が決まりますね。上の様に規格化されたときは、

$$[\Psi] = [L^{-1/2}] \quad (3.15)$$

ですよ。

でも、ちょっとまってください。せっかくある時刻で波動関数を規格化しても、時間がたったら規格化できてるかどうかわからないじゃないか、確率解釈をどうする、と思うかもしれませんが、しかし、ここではそうはならないことを証明します。まずは、

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (3.16)$$

ですね。(ここでつまずいた場合は、解析概論 [5] を読もう!) そうすると、積分の中身は

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 = \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \quad (3.17)$$

となります。

そこで、シュレーディンガー方程式から、

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V \Psi, \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V \Psi^* \quad (3.18)$$

ですので、これを上に代入します。ちなみに、ポテンシャル  $V$  は実数であることを使ってます。これ、重要です。そうすると、

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right] \quad (3.19)$$

となります。これを、式 (3.16) に代入すると、

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0 \quad (3.20)$$

となりました。さてさて、波動関数は無限遠でゼロでないとは規格化できませんので、そうなることを要請して右辺がゼロになってます。したがって、証明できました。一旦、規格化された波動関数はずっと規格化されてます。粒子は増えたり消えたりしません。

波動関数に慣れるために、ひとつ練習問題をやってみましょう。

[Griffiths, Problem 1.5]

波動関数が

$$\Psi(x, t) = A e^{-\lambda|x|} e^{-i\omega t} \quad (3.21)$$

であるとしましょう。ただし、 $A, \lambda, \omega$  は実数です。次元をチェックしてくださいよ。 $[A] = [L^{-1/2}]$ ,  $[\lambda] = [L^{-1}]$ ,  $[\omega] = [T^{-1}]$  ですよ。こんな波動関数を与えるポテンシャルはそのうち出てきま

す。まず、規格化してみます。

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx &= \int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-2\lambda|x|} dx \\ &= 2A^2 \int_0^{\infty} e^{-2\lambda x} dx \\ &= 2A^2 (1/(-2\lambda)) e^{-2\lambda x} \Big|_0^{\infty} \\ &= \frac{A^2}{\lambda}\end{aligned}\tag{3.22}$$

なので、規格化するためには、

$$A = \sqrt{\lambda}\tag{3.23}$$

と取れば OK です。ちなみに、適当な位相  $e^{i\delta}$  をつけても物理に影響はありません。次元をチェックしましょうね。次元があつてるとほっとします。

次に、粒子の位置の期待値を求めてみましょう。確率密度が  $|\Psi|^2$  ってことは、

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi|^2 dx\tag{3.24}$$

ですね。これは、非積分関数が奇関数なので、当然、 $\langle x \rangle = 0$  です。

それから、 $x^2$  の期待値はどうなるでしょう。

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\Psi|^2 dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \lambda e^{-2\lambda|x|} dx \\ &= \frac{\lambda}{4} \frac{d^2}{d\lambda^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\lambda|x|} dx \\ &= \frac{\lambda}{4} \frac{d^2}{d\lambda^2} \frac{1}{\lambda} \\ &= \frac{1}{2\lambda^2}\end{aligned}\tag{3.25}$$

ですね。ここから、分散が

$$\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2\tag{3.26}$$

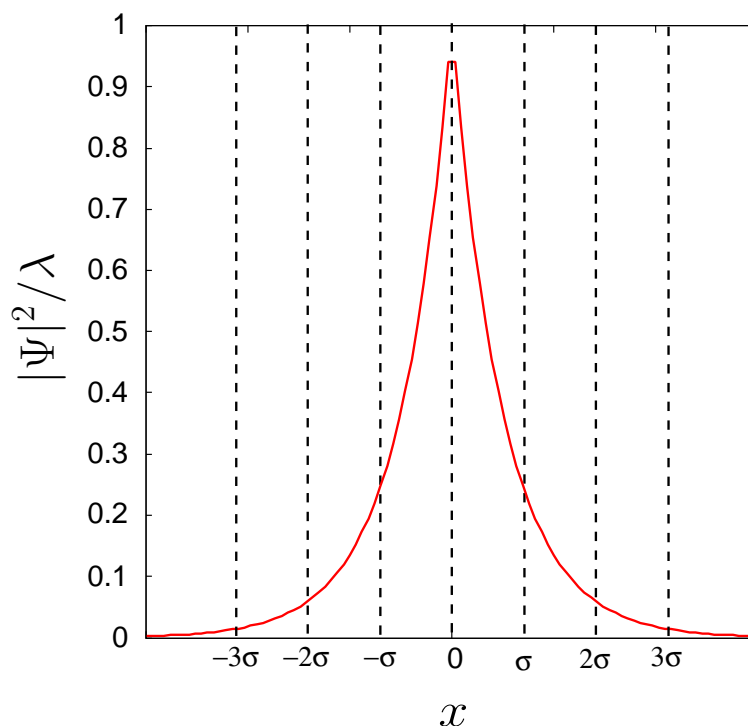
から、

$$\sigma^2 = \frac{1}{2\lambda^2}\tag{3.27}$$



です。しつこいようですが、定義より  $[\sigma] = [L]$  ですので、次元 OK。

図示すると、こんな感じですね。



さて、粒子を  $-\sigma < x < \sigma$  の外で見つける確率を計算してみましょう。これは、

$$\begin{aligned} P_{\text{out}} &= \int_{-\infty}^{-\sigma} |\Psi|^2 dx + \int_{\sigma}^{\infty} |\Psi|^2 dx \\ &= 2 \int_{\sigma}^{\infty} |\Psi|^2 dx \\ &= 2\lambda \int_{\sigma}^{\infty} e^{-2\lambda x} dx \\ &= \left[ -e^{-2\lambda x} \right]_{\sigma}^{\infty} \\ &= e^{-\sqrt{2}} \\ &\simeq 0.24 \end{aligned} \tag{3.28}$$

ですので、76%程度は  $-\sigma < x < \sigma$  の中で見つかりますね。 $\sigma$  が典型的な  $x$  の広がりを表していることがわかります。粒子の位置がボヤけとるわけですね。

これ、しかし、どういう意味なんでしょう？波動関数が  $\Psi$  であるような系をたくさん作って、位置を測定すると、その測定結果のヒストグラムが図のようになるっていうのが、もっと

も理解しやすいですね。実は、同じ系で何回も測定しちゃうと2回目からは同じ場所で粒子を見つけてしまいます…。測定すると、系が壊れてしまうんですね。この辺、ややこしいので深入りしないでいきましょう。

### 3.5 確率の流れ

[Griffiths, Problem 1.14]

粒子を  $a < x < b$  の範囲に見つける確率を  $P_{ab}$  とすると

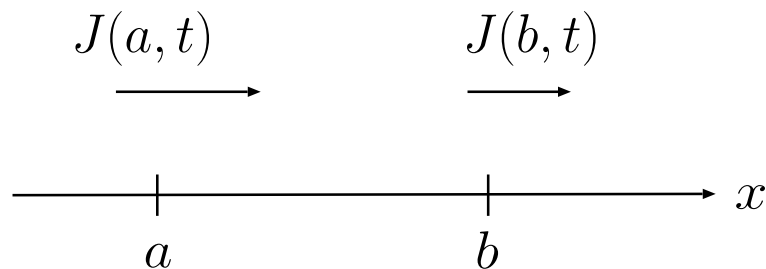
$$\begin{aligned}
 \frac{dP_{ab}}{dt} &= \frac{d}{dt} \int_a^b |\Psi|^2 dx \\
 &= \int_a^b \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 dx \\
 &= \int_a^b \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right] dx \\
 &= J(a, t) - J(b, t)
 \end{aligned} \tag{3.29}$$

ただし、

$$J(x, t) \equiv \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) \tag{3.30}$$

です。式 (3.19) を使いましたよ。

この、 $J(x, t)$  を確率の流れと呼びます。イメージわきますかね。波動関数の規格化が時間によらずにできるっていうことは、この確率の流れが湧き出したり吸い込まれたりしないっていうことです。確率は保存します。



### 3.6 不安定な粒子 (ちょっと脇道)

[Griffiths, Problem 1.15]

確率の保存をみましたね。しかし、粒子が崩壊していなくなるような現象を記述したいときはどうしたらよいのでしょうか？いままでの仮定したどれかを崩すしかありませんね。そうです。ポテンシャルは実数というのを仮定していましたが、それを崩します。いま、ポテンシャルに虚数の部分

$$V = V_0 - \frac{i\Gamma}{2} \quad (3.31)$$

ってというのがあったとします。 $\Gamma$ は正の定数としましょう。 $([\Gamma] = [ML^2T^{-2}])$ 。さあ、どうなるか見てみましょう。式(3.18)が、

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V \Psi, \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{-i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V^* \Psi^* \quad (3.32)$$

となりますので、ここから、

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right] - \frac{\Gamma}{\hbar} |\Psi|^2 \quad (3.33)$$

と余計な項が登場しました。したがって、粒子をどこかしらに見つける確率

$$P(t) = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx \quad (3.34)$$

は微分方程式

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{\Gamma}{\hbar} P \quad (3.35)$$

を満たすことがわかります。その解は

$$P(t) = P(t=0) e^{-\frac{\Gamma}{\hbar} t} \quad (3.36)$$

ですので、粒子の寿命は

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma} \quad (3.37)$$

です。 $[\tau] = [ML^2T^{-1}/(ML^2T^{-2})] = [T]$ で次元OK。ちなみに半減期  $t_{1/2}$  っていうのは、粒子を見つける確率が半分になるために要する時間なので、

$$P(t = t_{1/2}) = P(t=0) e^{-\frac{\Gamma}{\hbar} t_{1/2}} = \frac{P(t=0)}{2} \quad (3.38)$$

したがって、

$$t_{1/2} = \ln 2 \cdot \tau \quad (3.39)$$

です。

### 3.7 運動量 ( 演算子 ! )

古典力学では、 $x$  ともう一つ運動量  $p$  で、粒子の運動を記述できました。量子力学では運動量ってどんななんなんでしょう？実は、量子力学では、 $p$  は

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.40)$$

っていう波動関数にかかる「演算子」として導入されます。たとえば、運動量  $p$  の期待値は

$$\langle p \rangle = \int \Psi^* \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right) dx \quad (3.41)$$

という風に計算されるのです。

本当にそうなっているかちょっと見てみましょう。そのために、位置の期待値  $\langle x \rangle$  が時間につれ変化する様子を見てみましょう。式 (3.19) より、

$$\begin{aligned} \frac{d\langle x \rangle}{dt} &= \int x \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \int x \frac{\partial}{\partial x} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \int \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx \quad (\text{部分積分、遠方でゼロ}) \\ &= -\frac{i\hbar}{m} \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx \quad (\text{さらに部分積分}) \end{aligned} \quad (3.42)$$

となります。2行目にいくときと3行目にいくときに、部分積分と、遠方で波動関数がゼロになることを使いました。で、まあ、この期待値の時間変化を速度の期待値  $\langle v \rangle$  と呼ぶことにしましょう。

ここから、運動量を  $p = mv$  とすると確かに

$$\langle p \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt} = \int \Psi^* \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx \quad (3.43)$$

となってます。うーん。くるしいですねえ。急に、あまり理論的構成じゃなくなってきちゃいました。きちんとした構成は、もうちょっと慣れてから勉強しましょうね。強引ですが、先に進みます。

演算子っていうのは新しい概念ですね。位置のときは、わかりやすかったですよね。その位置にある確率密度が  $|\Psi|^2$  と考えればよかったです。でも、これからは、もうちょっと一般化されたルールを考えなければなりません。というのは、まず、位置  $x$  っていうのも波動関数にかかる演算子だと見ます。その位置演算子の作用は

$$\Psi \rightarrow x\Psi \quad (3.44)$$

という簡単なものです。運動量演算子は

$$\Psi \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi \quad (3.45)$$

と波動関数に作用します。それで、期待値を求めるルールはその作用された奴と  $\Psi^*$  の掛け算したものを積分するということにします。そうすれば、

$$\langle x \rangle = \int \Psi^* x \Psi dx, \quad \langle p \rangle = \int \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi dx \quad (3.46)$$

ですね。これが、量子力学のルールです。 $\langle x \rangle$  はその表式から実数であることがわかりますが、 $\langle p \rangle$  は一見明らかではないですよ。でもちゃんと実数になります。

$$\begin{aligned} \langle p \rangle^* &= \int \Psi \left( -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi^* \right) dx \\ &= \int \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right) \Psi^* dx \quad (\text{部分積分しました。遠方でゼロも使ってます。}) \\ &= \langle p \rangle \end{aligned} \quad (3.47)$$

確かに。

### 3.8 演算子？

さて、新しい概念「演算子」なるものが登場しました。数学的にいえば、関数から関数への写像とでも言うんですかね。つまり、

$$\hat{x} : \Psi(x, t) \rightarrow x\Psi(x, t), \quad (3.48)$$

$$\hat{p} : \Psi(x, t) \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x}, \quad (3.49)$$

でしたね。写された先の関数にそれぞれ、 $\hat{x}\Psi$ ,  $\hat{p}\Psi$  と名前をつけましょう。つまり、

$$\hat{x}\Psi = x\Psi, \quad \hat{p}\Psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \quad (3.50)$$

これら  $\hat{x}$  や  $\hat{p}$  は線形演算子であることもあとで重要です。つまり、

$$\hat{x}(a\Psi_1 + b\Psi_2) = a(\hat{x}\Psi_1) + b(\hat{x}\Psi_2), \quad (3.51)$$

$$\hat{p}(a\Psi_1 + b\Psi_2) = a(\hat{p}\Psi_1) + b(\hat{p}\Psi_2), \quad (3.52)$$

なににってるかっていうと、 $\hat{x}$  とか  $\hat{p}$  っていうのは行列みたいなもので、波動関数  $\Psi$  はベクトルみたいなもんですね。

それを踏まえてちょっと抽象化しましょう。演算子  $\hat{A}$  と  $\hat{B}$  があつたとき、演算子の掛け算は次のようなルールにします。

$$\hat{A}\hat{B} : \Psi(x, t) \rightarrow \hat{A}(\hat{B}\Psi) \quad (3.53)$$

$\hat{A}$  と  $\hat{B}$  が線形演算子ならば、

$$\begin{aligned} (\hat{A}\hat{B})(a\Psi_1 + b\Psi_2) &= \hat{A}(a(\hat{B}\Psi_1) + b(\hat{B}\Psi_2)) \\ &= a(\hat{A}\hat{B}\Psi_1) + b(\hat{A}\hat{B}\Psi_2) \end{aligned} \quad (3.54)$$

ですので、 $\hat{A}\hat{B}$  も線形演算子になります。行列の掛け算ですね。

演算子の足し算の自然な定義は

$$\hat{A} + \hat{B} : \Psi \rightarrow \hat{A}\Psi + \hat{B}\Psi \quad (3.55)$$

でしょう。これも  $\hat{A}$  と  $\hat{B}$  が線形演算子ならば、 $\hat{A} + \hat{B}$  は線形演算子ですよ。

$$\begin{aligned} (\hat{A} + \hat{B})(a\Psi_1 + b\Psi_2) &= \hat{A}(a\Psi_1 + b\Psi_2) + \hat{B}(a\Psi_1 + b\Psi_2) \\ &= (a\hat{A}\Psi_1 + b\hat{A}\Psi_2) + (a\hat{B}\Psi_1 + b\hat{B}\Psi_2) \\ &= a(\hat{A} + \hat{B})\Psi_1 + b(\hat{A} + \hat{B})\Psi_2. \end{aligned} \quad (3.56)$$

さてさて、準備は整いました。いま、 $\hat{x}$  と  $\hat{p}$  の演算子としての操作は定義されましたので、それらの関数である物理量  $Q(x, p)$  も演算子となります。たとえば、ハミルトニアンだとか、角

運動量だとかは  $x$  と  $p$  の関数でしたね。演算子としての操作は上で決めた足し算と掛け算のルールにのっとって決めればよろしいです。たとえば、運動量の 2 乗  $p^2$  は演算子の掛け算のルールより、

$$\hat{p}^2 : \Psi \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right) = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \quad (3.57)$$

と 2 階微分になりました。これで一般の  $x$  と  $p$  の関数  $Q(x, p)$  を演算子としてみるができますね。

こういうやつら  $Q(x, p)$  の期待値を求めるルールも

$$\langle Q(x, p) \rangle = \int \Psi^* Q \left( x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx \quad (3.58)$$

です。たとえば、運動エネルギー

$$T = \frac{p^2}{2m} \quad (3.59)$$

の期待値は

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx \quad (3.60)$$

となります。

ちなみに、シュレーディンガー方程式の右辺はハミルトニアン演算子が波動関数に作用したものであることがわかりますね。つまり、

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad (3.61)$$

です。したがって、エネルギーの期待値は

$$\langle E \rangle = \int \Psi^* i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi dx \quad (3.62)$$

であることがわかります。へー。運動量が  $x$  微分で、エネルギーが時間微分なんだね。エネルギーの期待値  $\langle E \rangle$  が時間によらないこともわかるよね (宿題)。これが、量子バージョンのエネルギー保存則です。

### 3.9 Ehrenfest の定理

しかし、こんな古典力学と似ても似つかないようなルールにして、きちんと古典力学を再現できるのでしょうか？古典力学の粒子の運動はハミルトニアン

$$H = \frac{p^2}{2m} + V \quad (3.63)$$

で記述できましたね。ここから、ハミルトンの運動方程式

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{dV}{dx} \quad (3.64)$$

が得られます。さてさて、今回われわれの設定したルールによると、

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{m} \quad (3.65)$$

というのはもう見ました。なるほど。もうひとつはどうでしょう。

$$\begin{aligned} \frac{d\langle p \rangle}{dt} &= \frac{d}{dt} \int \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi dx \\ &= \frac{\hbar}{i} \int \left[ \left( \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* \right) \left( \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right) + \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial t} \Psi \right] dx \\ &= \frac{\hbar}{i} \int \left[ -\frac{1}{i\hbar} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi^* + V \Psi^* \right) \left( \frac{\partial}{\partial x} \Psi \right) \right] dx \\ &\quad + \frac{\hbar}{i} \int \left[ \Psi^* \frac{1}{i\hbar} \frac{\partial}{\partial x} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + V \Psi \right) \right] dx \\ &= \int \left( \Psi^* V \frac{\partial}{\partial x} \Psi - \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} (V \Psi) \right) dx \\ &= - \int \Psi^* \frac{dV}{dx} \Psi dx \\ &= - \left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle \end{aligned} \quad (3.66)$$

なるほど、なるほど。途中でシュレーディンガー方程式を使っています。これによると、期待値は古典力学の運動方程式(つばいもの)にしたがうわけですね。これを、エーレンフェスト(Ehrenfest)の定理といいます。ちょっと気をつけなければいけないのは、一般には

$$\left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle \neq \frac{dV(\langle x \rangle)}{d\langle x \rangle} \quad (3.67)$$

ですよ。でも、波動関数のぼやけ具合を無視してしまえば、右辺と左辺は同じ意味です。つまり、ぼやけ具合を無視して、期待値だけみてるのが、古典力学っていうことですね。



### 3.10 シュレーディンガー方程式から古典力学へ

Ehrenfest の定理で大体、古典力学との対応がわかったような、わかってないようなですね。ぼやけ具合の無視という。もう一つ、シュレーディンガー方程式が  $\hbar$  が小さいという近似で古典力学へたどり着けることも見るができます。

まず、何となく、波動関数を

$$\Psi(x, t) = e^{iS(x,t)/\hbar} \quad (3.68)$$

と書いてみます。これを、シュレーディンガー方程式に代入してみると、左辺は、

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\partial S}{\partial t} e^{iS/\hbar} \quad (3.69)$$

右辺は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi = \left[ -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V \right] e^{iS/\hbar} \quad (3.70)$$

したがって、

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V - \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \quad (3.71)$$

となります。ここで、 $\hbar$  を小さいとして無視すると、

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + V \quad (3.72)$$

ですね。これはまさに、ハミルトン = ヤコビの運動方程式 (2.48) です。そうすると、この方程式の解  $S(x, t)$  は以下の性質をもつはずですね。

$$\frac{\partial S}{\partial x} = p, \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -H. \quad (3.73)$$

これを踏まえると、量子論における運動量やエネルギーが空間微分や時間微分で与えられるのがそれほど不思議ではないですね。

$$\hat{p}\Psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial x} e^{iS/\hbar} = \frac{\partial S}{\partial x} \Psi \quad (3.74)$$

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = i\hbar \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} e^{iS/\hbar} = -\frac{\partial S}{\partial t} \Psi \quad (3.75)$$

確かに、古典力学の式 (3.73) は量子力学の演算子と対応していることが見てとれます。

### 3.11 不確定性原理

波動関数と物理量のイメージがそろそろつかめてきたのではないのでしょうか？波動関数の広がり、粒子の位置のぼやけ具合を表していますね。さて、ここで、有名なハイゼンベルグの不確定性原理の登場です。しかし、本当の理解はもうちょっとあとです。ここでは、それがなんなのか、紹介しておきます。

高校生でド・ブROI波長って習いましたよね。意味はよくわからないけど。ここでも、まだ意味を理解しないで使っちゃいましょう。これもあとで、理解できますよ。ド・ブROIのっているのは、粒子は波の性質をもっていて、その波長と粒子の運動量との関係が

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \quad (3.76)$$

でした。

さてさて、粒子を波と見てしまうと、その位置はよくわかりません。粒子と見てしまうと、今度は波としての波長がよくわかりません。で、波長っていうのは、運動量と関係していますので、運動量がよくわからんということです。で、量子力学では、そのわからなさ具合が、

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (3.77)$$

であるというのが不確定性原理です。原理っていうからには、証明してはいけないルールってことですが、あとで、これに対応するもうちょっとわかりやすい原理からスタートして証明します。

不確定性原理の意味は、位置がはっきり決まっているようなボヤけてない波動関数（粒子ですね）では、運動量は全然決まってないということを言ってます。逆に運動量がはっきりしているようなとき（波ですね）は位置は全然決まってないということです。古典力学と全然違いますね。古典力学では、 $x$  と  $p$  を指定してはじめて、その後の運動が記述できますが、量子力学では、両方が決まっているような状態はないといってるのです。

また練習問題やってみましょう。

[Griffiths, Problem 1.9]

質量  $m$  の粒子の状態が、波動関数

$$\Psi(x, t) = A e^{-a[(mx^2/\hbar) + it]} \quad (3.78)$$

で与えられているとします。ただし、 $A$ と $a$ は正の実数です。

次元をチェックしましょうね。

$$[a] = [T^{-1}], \quad [A] = [L^{-1/2}] \quad (3.79)$$

ですね。

それでは、まず規格化してみましょう。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2amx^2/\hbar} dx \\ &= A^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2am}} \end{aligned} \quad (3.80)$$

したがって、

$$A = \left( \frac{2am}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \quad (3.81)$$

で規格化完了です。

### ガウス積分公式

ちなみに、上では、ガウス積分の公式を使いました。

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}ax^2} dx = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \quad (3.82)$$

ですね。

$$X = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}ax^2} dx \quad (3.83)$$

とおくと、

$$\begin{aligned} X^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{1}{2}a(x^2+y^2)} \\ &= \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} dr r e^{-\frac{1}{2}ar^2} \\ &= \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} dr \frac{d}{dr} \left[ \left( -\frac{1}{a} \right) e^{-\frac{1}{2}ar^2} \right] \\ &= 2\pi \left[ \left( -\frac{1}{a} \right) e^{-\frac{1}{2}ar^2} \right]_0^{\infty} \\ &= \frac{2\pi}{a} \end{aligned} \quad (3.84)$$

なので、

$$X = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \quad (3.85)$$

ですね。  $a = 2$  のときが一番覚えやすいです。

次に、この波動関数を実現するようなポテンシャル  $V(x)$  を探してみましょう。シュレーディンガー方程式より

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + V(x)\Psi \quad (3.86)$$

ですので、波動関数を代入すれば、

$$\hbar a \Psi = a(\hbar - 2amx^2)\Psi + V(x)\Psi \quad (3.87)$$

となりますね。したがって、

$$V(x) = 2a^2mx^2 \quad (3.88)$$

とわかります。これはみたことある形ですね。そう、バネの振動のポテンシャルです。調和振動子ってやつですね。これ、あとでしっかりやります。

この波動関数で与えられる状態の  $\langle x \rangle$ ,  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle p \rangle$ ,  $\langle p^2 \rangle$  を計算してみましょう。

$$\langle x \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-2amx^2/\hbar} dx \quad (3.89)$$

$$\langle x^2 \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2amx^2/\hbar} dx \quad (3.90)$$

$$\langle p \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-amx^2/\hbar} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} e^{-amx^2/\hbar} \right) dx \quad (3.91)$$

$$\langle p^2 \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-amx^2/\hbar} \left( -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-amx^2/\hbar} \right) dx \quad (3.92)$$

ここで、 $A^2$  はさっき計算した奴を使います。まず、 $\langle x \rangle$  と  $\langle p \rangle$  は

$$\langle x \rangle = 0, \quad \langle p \rangle = 0 \quad (3.93)$$

であることは、すぐわかりますね。奇関数の積分になっているので、ゼロです。まあ、物理的にも明らかですよ。左右対称なポテンシャル中の運動ですから。

$\langle x^2 \rangle$  はガウス積分の公式をもう一度使います。公式 (3.82) を両辺  $a$  について微分してみましょう。そうすると、

$$-\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{1}{2}ax^2} dx = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\pi}{a^3}} \quad (3.94)$$

となります。つまり、

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{1}{2}ax^2} dx = \sqrt{\frac{2\pi}{a^3}} \quad (3.95)$$

ですね。これを使えば、

$$\langle x^2 \rangle = \sqrt{\frac{2am}{\pi\hbar}} \sqrt{\frac{2\pi}{(4am/\hbar)^3}} = \frac{\hbar}{4am} \quad (3.96)$$

です。 $\langle p^2 \rangle$  も同様です。

$$\langle p^2 \rangle = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} (2\hbar am - 4a^2 m^2 x^2) e^{-2amx^2/\hbar} dx = \hbar am \quad (3.97)$$

ですね。

さてさて、それでは、不確定性原理が成り立ってるかどうか確かめてみましょう。

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{4am}} \quad (3.98)$$

$$\sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \sqrt{\hbar am} \quad (3.99)$$

なので、

$$\sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2} \quad (3.100)$$

ですね。おっと、ここでももしろいことに気づきます。そうです。この波動関数は不確定性関係をギリギリ満たしてるんです。これについては、もうちょっとあとで詳しくやりますよ。

不確定性関係から、エネルギーの最小値を概算することもできます。例えば、上の問題(調和振動子)のポテンシャル

$$V(x) = 2a^2 mx^2 \quad (3.101)$$

のときは  $\langle x \rangle = 0$ 、 $\langle p \rangle = 0$  ですので、

$$\langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (3.102)$$

ですよ。これを無理やり、古典論の意味で

$$x^2 \cdot p^2 \gtrsim \frac{\hbar^2}{4} \quad (3.103)$$

と解釈しましょう。つまり、 $x$  の位置での運動量に下限が与えられるということです。そうすると、調和振動子のエネルギーは

$$\begin{aligned} E &= \frac{p^2}{2m} + 2a^2 mx^2 \\ &\gtrsim \frac{\hbar^2}{8mx^2} + 2a^2 mx^2 \\ &\gtrsim a\hbar \end{aligned} \quad (3.104)$$

です。エネルギーがゼロになれないんですね。

### 3.12 3章のまとめ

いろいろ、学びましたねえ。まとめておきましょう。

$$\Psi(x, t) : \quad \text{波動関数、こいつは複素数} \quad (3.105)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 : \quad \text{規格化。これによって、確率解釈が可能。} \quad (3.106)$$

規格化できないやつは潔く捨てる。

$$P_{ab} = \int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx : \quad \text{粒子が } a < x < b \text{ の領域に存在する確率。} \quad (3.107)$$

つまり、 $|\Psi(x, t)|^2$  が確率密度。

$$\langle x^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^n |\Psi(x, t)|^2 dx : \quad \text{期待値。} \quad (3.108)$$

$$\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle x \rangle)^2 |\Psi(x, t)|^2 dx : \quad \text{分散！} \quad (3.109)$$

2番めの表式より、 $\sigma_x^2$  は常に正。

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi : \quad \text{シュレーディンガー方程式！} \quad (3.110)$$

$\hbar$  の次元は [運動量] × [距離]

$$J(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) : \quad \text{確率の流れ。} \quad (3.111)$$

$$\frac{dP_{ab}}{dt} = J(a, t) - J(b, t) : \quad \text{確率の保存！} \quad (3.112)$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} : \quad \text{運動量演算子！波動関数にかかります。} \quad (3.113)$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi dx : \quad \text{運動量の期待値。} \quad (3.114)$$

$$\langle Q(x, p) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* Q \left( x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx : \quad \text{一般の演算子の期待値のルール。} \quad (3.115)$$

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{m}, \quad \frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle : \quad \text{Ehrenfest の定理。} \quad (3.116)$$

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} : \quad \text{不確定性原理！} \quad (3.117)$$



## Chapter 4

# 時間によらないシュレーディンガー方程式

### 4.1 定常状態

#### 4.1.1 変数分離

さてさて、そろそろ、シュレーディンガー方程式を解いてみましょうか。

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \quad (4.1)$$

この章では、 $V$  は時間  $t$  によらない  $x$  のみの関数とします。

変数分離っていうのをします。それは、

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t) \quad (4.2)$$

とまあ、勝手に分離してこういう形の解を探してみましょう。こうすると、シュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \psi \frac{d\phi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} \phi + V\psi\phi \quad (4.3)$$

です。両辺を  $\psi\phi$  で割って、

$$i\hbar \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V \quad (4.4)$$

ですね。

さあ、この表式、左辺は  $t$  だけの、右辺は  $x$  だけの関数となりました。そんなことってありえますか？唯一の可能性は、両辺ともに定数であることですね。というわけで、その定数を  $E$  とおきます。したがって、左辺から、

$$i\hbar \frac{d\phi}{dt} = E\phi \quad (4.5)$$

右辺からは

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi \quad (4.6)$$

と分離できました。最初の奴は簡単に解けて、

$$\phi(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (4.7)$$

です。2番めのやつ (4.6) を時間によらないシュレーディンガー方程式と呼びます。

ここで、一つの重要なことがあります。上で  $E$  が変数分離の定数 (分離定数) としてでてきました。これは、実数でないで困るっていうのをまず見ておきましょう。

[Griffiths, Problem 2.1]

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (4.8)$$

でしたが、 $E$  が複素数だったとして、 $E = E_0 + i\Gamma$  とおいてみましょう。こうすると、規格化条件から

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi e^{\frac{2\Gamma t}{\hbar}} dx = 1 \quad (4.9)$$

です。しかし、これはむりですね。左辺は時間の関数で右辺は定数です。したがって、規格化条件を満たすような解 (つまり物理的な解) は  $E$  を実数にしないと得られません。

さて、勝手に変数分離した形の解を仮定しましたが、それはいったいどういう状態を記述しているのでしょうか？

### 1. 定常状態

波動関数は

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (4.10)$$

なので、時間に依存するのですが、確率密度  $|\Psi|^2$  や、物理量の期待値

$$\langle Q \rangle = \int \psi^* Q \left( x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \psi dx \quad (4.11)$$

からは、時間依存性は消えてしまいますね。(  $E$  が実数です。) という意味で、この解は定常状態を表しているのです。当然  $\langle x \rangle$  は定数となりますので、 $\langle p \rangle = 0$  です。

## 2. エネルギーが決定された状態

古典力学でのハミルトニアンは、

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (4.12)$$

で、これがエネルギーでしたね。これを演算子に直すと

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (4.13)$$

ですね。これを用いると、時間によらないシュレーディンガー方程式 (4.6) は

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (4.14)$$

と書けます。したがって、ハミルトニアンの期待値、つまりエネルギーは

$$\langle H \rangle = \int \psi^* \hat{H}\psi dx = E \quad (4.15)$$

です。  $E$  っておいた意味がわかりますよね。それから、

$$\hat{H}^2\psi = \hat{H}E\psi = E\hat{H}\psi = E^2\psi \quad (4.16)$$

ですので、やっぱり、

$$\langle H^2 \rangle = \int \psi^* \hat{H}^2\psi = E^2 \quad (4.17)$$

です。というわけで、エネルギーの分散は

$$\sigma_H^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = 0 \quad (4.18)$$

となり、エネルギーの測定は同じ値  $E$  となります。エネルギーのきまった状態なんです。

3. 一般解は、変数分離した解の線形結合！

のちのち、きちんとやりますが、そうなんです。一般に、時間依存するシュレーディンガー方程式の解は、

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (4.19)$$

と書けます。 $c_n$  は定数です。線形微分方程式なので、解を足しても定数倍してもやっぱり解です（重ね合わせの原理！）この様にして新しい解を作ることができます。（やってみましょう。）

つまり、初期条件が  $\Psi(x, 0)$  が与えられたとして、シュレーディンガー方程式をとく方法は、まず、時間に依存しないシュレーディンガー方程式の解を見つけます。

$$\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \dots \quad (4.20)$$

対応するエネルギーが

$$E_1, E_2, E_3, \dots \quad (4.21)$$

としましょう。まず、初期条件から

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \quad (4.22)$$

ですね。この式から  $c_n$  を決定します。あとでやりますが、決定できちゃいます。これで、 $c_n$  がわかれば、時間発展は

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (4.23)$$

とすれば、解になっているのは明らかですね。一つ一つが解で、それを足しても解。それから、初期条件を満たしているので OK ってわけです。

おもしろいですね。変数分離して得た解は定常状態なのですが、それらを足し合わせて、時間に依存する解を得ることができました。

時間によらないシュレーディンガー方程式は

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (4.24)$$

と書けることをみましたね。この方程式、形だけ見ると、線形代数の固有値問題ですよ。  $\hat{H}$  が行列で、  $\psi$  は固有ベクトル、  $E$  が固有値です。  $\hat{H}$  が与えられたら、固有値方程式から固有値  $E$  を求めて、対応する固有ベクトル  $\psi$  は、連立一次方程式を解けば求まるってやつです。で、線形独立な固有ベクトルは次元の数だけあるので（複素数上の場合です）、あらゆるベクトル（例えば  $\Psi(x, 0)$ ）はこれらの固有ベクトルの線形結合でかけるっていうのに似てますよね。

ここで、重要なのは、今求めたいのは「線形独立な  $\psi$  の組」を見つけたいということです。たとえば、一つの固有値  $E_1$  について、  $\psi_1$  と  $\psi'_1$  と二つの解があったとしましょう。この時、この二つを  $\psi_1$  と  $\psi'_1$  ととってもいいし、  $\psi_1 + \psi'_1$  と  $\psi_1 - \psi'_1$  ととってもよいです。

#### 4.1.2 1次元問題では、束縛状態に縮退はない。

まず、命題の意味を理解しましょう。「縮退」ってなんでしょう？これは、時間によらないシュレーディンガー方程式

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (4.25)$$

において、同じ  $E$  について、独立な2つ以上の解  $\psi$  があるとき縮退といいます。それでは、「独立な」とはどういう意味でしょう？これは、物理的に異なる状態を表していると言う意味です。式でいうと、関数の組  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$  があって、

$$c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_n\psi_n = 0 \quad (4.26)$$

となるような複素数の組  $c_n$  が  $c_1 = c_2 = \dots = c_n = 0$  でしかないとき、関数の組は独立と言います。二つの場合は、

$$c_1\psi_1 + c_2\psi_2 = 0 \quad (4.27)$$

で、  $\psi_1$  と  $\psi_2$  が独立でないときは、  $c_1$  か  $c_2$  がゼロでないですから、  $\psi_1$  は  $\psi_2$  の定数倍ですね。

次に、束縛状態ってなんでしょう？これは、後ほどでてきますが、遠方で  $\psi$  がゼロになるような解です。ちなみに、  $\Psi$  は必ず遠方でゼロになりますが、  $\psi$  はそうとは限りません。これも、後ほど。

シュレーディンガー方程式を満たす、同じエネルギーの二つの解があったとしましょう。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi, \quad (4.28)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + V\phi = E\phi. \quad (4.29)$$

二つの式を比べると

$$\frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{1}{\phi} \frac{d^2\phi}{dx^2} \quad (4.30)$$

ですね。これを

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{d\psi}{dx} \phi - \frac{d\phi}{dx} \psi \right) = 0 \quad (4.31)$$

の形にできます。したがって、

$$\frac{d\psi}{dx} \phi - \frac{d\phi}{dx} \psi = c \quad (4.32)$$

で、 $c$  は定数です。束縛状態なので、 $|x| \rightarrow \infty$  で

$$\psi \rightarrow 0, \quad \phi \rightarrow 0 \quad (4.33)$$

です。ということは、 $c = 0$  ですね。結局、

$$\frac{1}{\psi} \frac{d\psi}{dx} = \frac{1}{\phi} \frac{d\phi}{dx} \quad (4.34)$$

で、両辺を積分して、

$$\psi = c' \phi \quad (4.35)$$

$c'$  は定数です。というわけで、 $\psi$  と  $\phi$  は独立でないです。

(ちなみに、この証明のなかで  $\psi$  と  $\phi$  で割る部分がありますので、陰に波動関数がゼロでない領域での議論をしています。つまり、ゼロである点を除いていますので、その除いた領域で  $\psi$  と  $\phi$  が独立でないことが言えています。ゼロである点が孤立していれば、 $c'$  はゼロである点の右と左で同じ値をとらなければならないことは、その点でシュレーディンガー方程式を満たすことからわかるでしょう。孤立していない場合は証明が崩れます。ただ、その場合は、孤立系が二つある場合に相当するので、縮退とは言わないですよね。)

### 4.1.3 $\psi(x)$ は実関数にとれるのだ

つぎに、 $\psi(x)$  は常に実関数にとれることを示しましょう。「とれる」という意味は、式 (4.20) の独立な解の組み合わせを、適当に定数倍したり、独立な解同士の線形結合（ただし、同じエネルギーに対応したやつらの間）をとったりして、全部実関数にできるという意味です。ちなみに、同じエネルギーに対応する独立な解はないことを束縛状態については説明してしまいましたが、今後のため、規格化できないような場合も含めて議論します。

まずは、 $\psi(x)$  は時間に依存しないシュレーディンガー方程式の解ですので、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi \quad (4.36)$$

ですね。ここで、この式の複素共役をとると、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi^*}{dx^2} + V\psi^* = E\psi^* \quad (4.37)$$

ですので、同じ方程式を満たします。 $\psi$  と  $\psi^*$  が独立な解でないときは、

$$\psi^* = c\psi \quad (4.38)$$

ですね。この式を 2 回使うと、

$$\psi = c^*\psi^* = |c|^2\psi \quad (4.39)$$

なので、 $|c|^2 = 1$  で  $c$  は位相です、つまり、 $c = e^{i\delta}$ 。なので、 $\psi' = e^{i\delta/2}\psi$  とすれば、 $\psi'^* = e^{-i\delta/2}\psi^* = c^*e^{i\delta/2}\psi^* = e^{i\delta/2}\psi = \psi'$ 。したがって、これは実関数ですね。

また、互いに独立であるときは、 $\psi + \psi^*$  とか  $i(\psi - \psi^*)$  も同じ方程式を満たします。これらは、実関数です。

### 4.1.4 パリティ

それから、 $V(x)$  が偶関数の場合について考えてみます。つまり、

$$V(-x) = V(x) \quad (4.40)$$

です。この時、 $\psi(x)$  は偶関数か奇関数にとれるということも示しておきましょう。例によって、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (4.41)$$

です。ここで、 $x \rightarrow -x$  とします。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(-x)}{dx^2} + V(-x)\psi(-x) = E\psi(-x) \quad (4.42)$$

ここでは、何もしていません。 $x$  の名前を変えただけです。そこで、 $V(-x) = V(x)$  ですので、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(-x)}{dx^2} + V(x)\psi(-x) = E\psi(-x) \quad (4.43)$$

となりました。というわけで、 $\psi(x)$  が解なら  $\psi(-x)$  も同じ方程式の解です。これらが独立な解でないとき、

$$\psi(x) = c\psi(-x) \quad (4.44)$$

と書けます。 $c$  は適当な複素数です。上の式で、

$$\psi(-x) = c\psi(x) = c^2\psi(-x) \quad (4.45)$$

とできますので、 $c^2 = 1$ 、つまり、 $c = \pm 1$  です。したがって、 $\psi(x)$  は偶関数か奇関数ということになります。また、 $\psi(x)$  と  $\psi(-x)$  が独立である時は、 $\psi(x) \pm \psi(-x)$  も解で、これらはそれぞれ、偶関数、奇関数ですね。

#### 4.1.5 $E$ は $V_{\min}$ よりおおきいのだ

シュレーディンガー方程式を

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \psi \quad (4.46)$$

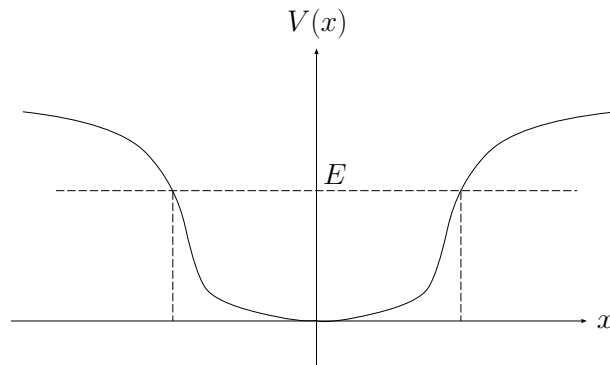
と書きます。 $\psi$  は実関数にとれるので、そうだとします。で、いま、 $E$  が  $V(x)$  の最小値  $V_{\min}$  より小さいとすると、右辺の  $\psi$  の係数はつねに正です。っていうことは、 $\psi$  は  $\psi > 0$  で下に凸、 $\psi < 0$  で上に凸なので、 $x$  軸にむかって凸な関数です。つまり、 $x \rightarrow \infty$  か  $x \rightarrow -\infty$  でゼロになりえませんが、規格化できません。

古典的には、運動エネルギーが正なので、絶対  $E \geq V_{\min}$  ですよね。量子論でもそれは変わりないようです。古典論で適当な  $E$  でポテンシャル  $V$  のもとで運動している場合は、 $E = V(x)$  となる点で一旦止まって、向きを変えますね。この点は回帰点と呼ばれています。この場合、量子論ではちょっと違ったことがおこりますよ。たのしみですね。



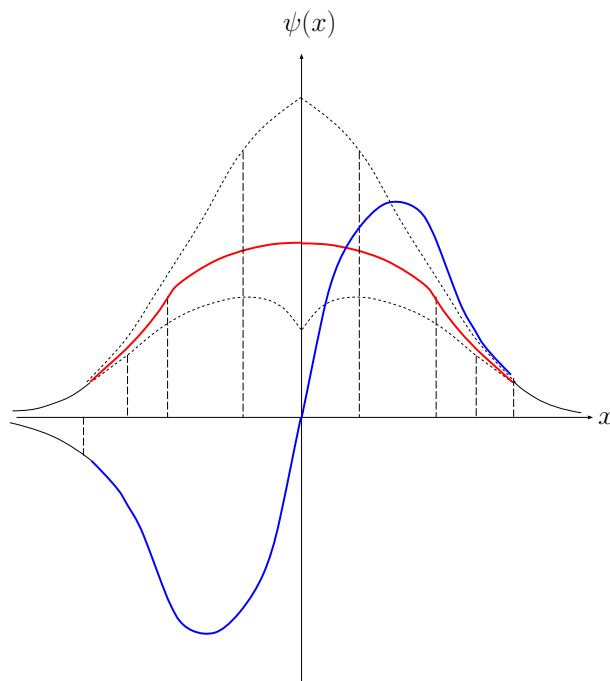
#### 4.1.6 とびとびのエネルギー（エネルギーの量子化）

上で、 $E > V_{\min}$  を見ました。ところで、こんな感じのポテンシャルを考えてみましょう。



古典的には  $E = V(x)$  となる2つの点を行ったり来たりする運動をしますよね。量子論で、時間によらないシュレーディンガー方程式を解こうとすると  $E$  が特別な値でないと解にならないことを見ておきましょう。

シュレーディンガー方程式を見るに、 $\psi$  は無限遠方で  $x$  軸に向かって凸で、回帰点において、凹凸を変えます。したがって、図のように、回帰点をうまく選ばないと、 $x = 0$  できちんと接続できません。



このように、きちんと接続できる解は、とびとびの  $E$  の値の時のみに存在します。また、複数ある場合は、エネルギーをあげるほど  $\psi$  に節がふえることも見て取れます。

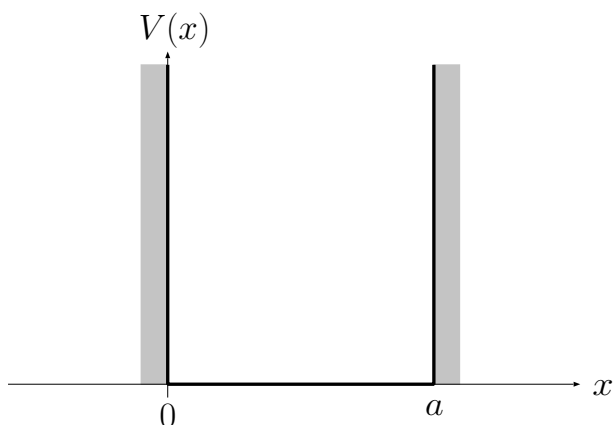
## 4.2 井戸型ポテンシャル（完全剛体の壁）

### 4.2.1 シュレーディンガー方程式を解く。

さてさて、徐々に、物理っぽくなってきますよ。下のようなポテンシャルを考えましょう。

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{if } 0 \leq x \leq a \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4.47)$$

こんな感じです。



つまり、井戸の間にはポテンシャルはないので、自由ですが、井戸の端で、無限に大きな力が働いて、粒子を閉じ込めてるっていう状況ですね。

さて、こんな状況では、粒子は外に出られないので井戸の外では  $\psi(x) = 0$  です。井戸の中はフリー ( $V = 0$ ) なので、解くべきシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (4.48)$$

です。これは簡単ですね。

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (4.49)$$

と書き直すとたちどころに解が

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (4.50)$$

であることがわかるでしょう。  $A$  と  $B$  は任意の定数ですが、たいいてい場合は境界条件により決定されます。境界条件は、 $\psi$  の連続性から

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \quad (4.51)$$

とします。この連続性の要求については、もうちょっとあとでやりますね。とにかく、この境界条件のもとでの解を全部探しましょう。

$$\psi(0) = A \sin 0 + B \cos 0 = B = 0 \quad (4.52)$$

です。次に、

$$\psi(a) = A \sin ka = 0 \quad (4.53)$$

$A = 0$  だと、 $\psi = 0$  となって、規格化できないので、これはない。とすると、 $\sin ka = 0$  です。したがって、

$$ka = 0, \pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi, \dots \quad (4.54)$$

$k = 0$  はまた、 $\psi = 0$  になってしまうのでだめ。 $k$  が負のやつらは正のやつらと独立ではありません。結局、独立な解は

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.55)$$

ですね。

あれ？  $A$  は決まりませんでしたね。まあ、 $k$  が決まったのでよしとしましょう。さて、 $k$  って何だったかって言うと、式 (4.49) でした。つまり、 $k$  が上のようにとびとびの時にしか解がない、っていうことは、エネルギーがとびとびっていうことですね。

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (4.56)$$

です。とうとう出ましたね。エネルギーとびとび事件です。エネルギーは、この上の値しかとれないんです。古典論と大違いです。

$A$  は規格化で決めましょう。

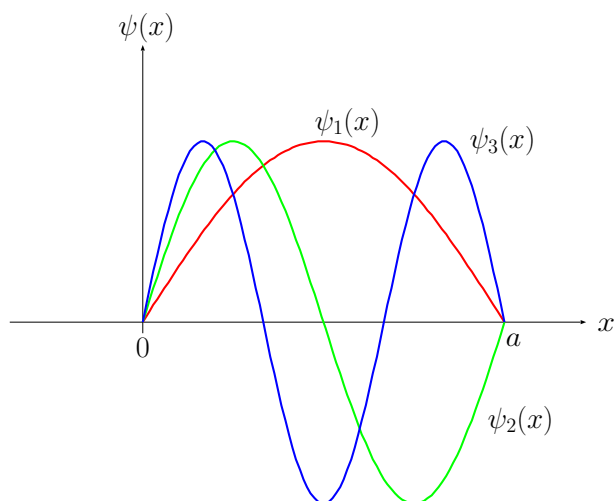
$$\begin{aligned}
 1 &= \int_0^a |A|^2 \sin^2(kx) dx \\
 &= |A|^2 \int_0^a \frac{1 - \cos(2kx)}{2} dx = |A|^2 \left[ \frac{x}{2} - \frac{1}{4k} \sin(2kx) \right]_0^a = \frac{|A|^2 a}{2}
 \end{aligned} \tag{4.57}$$

ですので、 $A = \sqrt{2/a}$  ととれば OK です。したがって、解は

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \tag{4.58}$$

です。無限個のセットの解ができました。

こんな感じ。



一番低いエネルギーに対応する状態  $\psi_1$  は基底状態といいます。で、その他はエネルギーが  $n^2$  に比例して大きくなっていきますね。これらは、励起状態といいます。

この  $\psi_n$  はいくつか面白い性質を持っていますので、紹介していきましょう。

- 偶奇性。

井戸の中心に対して、 $\psi_n$  は偶か奇です。 $\psi_1$  は偶、 $\psi_2$  は奇、 $\psi_3$  は偶 …。

- エネルギーが上がっていくにつれて節が一つずつ増えていきます。
- 互いに直交している。

これは、大事です。直交しているとは、 $m \neq n$  のときに

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = 0 \quad (4.59)$$

であるということです。実際、

$$\begin{aligned} \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx &= \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \\ &= \frac{1}{a} \int_0^a \left[ \cos\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) - \cos\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right) \right] dx \\ &= \left[ \frac{1}{(m-n)\pi} \sin\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) - \frac{1}{(m+n)\pi} \sin\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right) \right]_0^a \\ &= \frac{1}{\pi} \left[ \frac{\sin[(m-n)\pi]}{m-n} - \frac{\sin[(m+n)\pi]}{m+n} \right] \\ &= 0 \end{aligned} \quad (4.60)$$

です。 $m = n$  のときは、2行めから3行めにいけないので、ゼロになりません。すでに規格化しているので、当然、1になります。

三角関数の公式を忘れたときは

$$\sin \theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i}, \quad \cos \theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2} \quad (4.61)$$

を使えばいいんだよ。

まとめて書くと、

$$\int \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn} \quad (4.62)$$

です。 $\delta_{mn}$  っていうのは、クロネッカーのデルタといわれているやつで、

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & \text{if } m \neq n; \\ 1, & \text{if } m = n \end{cases} \quad (4.63)$$

です。式(4.62)が成り立っているとき、 $\psi$  は直交していると言います。また、このような関数の集まりを正規直交関数系とよびます。

- 完全系をなす！

つまり、あらゆる関数が、

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (4.64)$$

というように、 $\psi$  の線形結合でかけるのです。(実際にはディリクレ条件なるものを満たす腐っていない関数ですが。)これは、次の章でもっときちんと勉強していきましょう。

上の、完全性を認めたとして、そうすると、係数  $c_n$  は次のように決まります。

$$\int \psi_m(x)^* f(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{mn} = c_m. \quad (4.65)$$

クロネッカーのデルタが役にたちました。つまり、

$$c_n = \int \psi_n(x)^* f(x) dx \quad (4.66)$$

です。

以上、4つの性質がでてきましたが、井戸型に限らず、結構成り立ちます。

この  $\psi_n$  と  $E_n$  から、定常状態の波動関数は

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-i(n^2\pi^2\hbar/2ma^2)t} \quad (4.67)$$

だとわかります。したがって、時間に依存する一般の波動関数は、その重ね合わせで、

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-i(n^2\pi^2\hbar/2ma^2)t} \quad (4.68)$$

です。(宿題：これが、シュレーディンガー方程式を満たすかどうか確かめてみましょう。)

ちょっと前に、 $c_n$  が初期条件から決定できちゃうぞといいました。式 (4.22) あたりですね。

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \quad (4.69)$$

の  $c_n$  の決定についてです。それは、こういうことです。上で、任意の関数の場合についてやったように、

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \Psi(x, 0) dx \quad (4.70)$$

で決定できますね。

長くなりましたが、これで完結です。つまり、初期条件として波動関数  $\Psi(x, 0)$  が与えられたとき、まず、上の式で、 $c_n$  を決定してしまいます。そうすれば、シュレーディンガー方程式の解、つまりその後の時間発展はその  $c_n$  をつかって、式 (4.68) で与えられます。この方法は、どんなポテンシャルでも同じようにできます。まず、時間に依存しない解を全部もとめて、あとはうまく重ね合わせれば OK!

#### 4.2.2 初期条件の例

ちょっと例をやってみましょう。初期条件を

$$\Psi(x, 0) = Ax(a - x), \quad (0 \leq x \leq a), \quad (4.71)$$

としてみたらどうなるでしょう。もちろん、井戸のそとでは、 $\Psi = 0$ です。絵を描いてみてください。

さてさて、どうするんでしたっけ？まず、規格化から  $A$  を決めていきましょう。

$$1 = \int_0^a |\Psi(x, 0)|^2 dx = |A|^2 \int_0^a x^2(a - x)^2 dx = |A|^2 \frac{a^5}{30}. \quad (4.72)$$

あっさり、きまりましたね。

$$A = \sqrt{\frac{30}{a^5}} \quad (4.73)$$

とすれば OK です。例によって、位相はどうでもいいです。

つぎは？そうですね。式 (4.70) から  $c_n$  を決めればおしまいでしたね。

$$\begin{aligned} c_n &= \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sqrt{\frac{30}{a^5}} x(a - x) dx \\ &= \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \left[ a \int_0^a x \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx - \int_0^a x^2 \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \right] \end{aligned} \quad (4.74)$$

面倒くさそうな積分でできました。こういうときは、公式作っときましょう。

三角関数 × 多項式の積分

$n = 0, 1, 2, \dots$  として、

$$\begin{aligned} \int_{c_1}^{c_2} x^{2n} \sin(ax) dx &= (-1)^n \frac{d^{2n}}{da^{2n}} \int_{c_1}^{c_2} \sin(ax) dx \\ &= (-1)^n \frac{d^{2n}}{da^{2n}} \left[ -\frac{1}{a} \cos(ax) \right]_{c_1}^{c_2} \end{aligned} \quad (4.75)$$

$$\begin{aligned} \int_{c_1}^{c_2} x^{2n+1} \sin(ax) dx &= (-1)^n \frac{d^{2n+1}}{da^{2n+1}} \int_{c_1}^{c_2} (-\cos(ax)) dx \\ &= (-1)^n \frac{d^{2n+1}}{da^{2n+1}} \left[ -\frac{1}{a} \sin(ax) \right]_{c_1}^{c_2} \end{aligned} \quad (4.76)$$

$$\begin{aligned} \int_{c_1}^{c_2} x^{2n} \cos(ax) dx &= (-1)^n \frac{d^{2n}}{da^{2n}} \int_{c_1}^{c_2} \cos(ax) dx \\ &= (-1)^n \frac{d^{2n}}{da^{2n}} \left[ \frac{1}{a} \sin(ax) \right]_{c_1}^{c_2} \end{aligned} \quad (4.77)$$

$$\begin{aligned} \int_{c_1}^{c_2} x^{2n+1} \cos(ax) dx &= (-1)^n \frac{d^{2n+1}}{da^{2n+1}} \int_{c_1}^{c_2} \sin(ax) dx \\ &= (-1)^n \frac{d^{2n+1}}{da^{2n+1}} \left[ -\frac{1}{a} \cos(ax) \right]_{c_1}^{c_2} \end{aligned} \quad (4.78)$$

これをつかって、

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \left\{ a \left[ \left( \frac{a}{n\pi} \right)^2 \sin \left( \frac{n\pi x}{a} \right) - \frac{ax}{n\pi} \cos \left( \frac{n\pi x}{a} \right) \right]_0^a \right\} \\ &\quad - \left[ 2 \left( \frac{a}{n\pi} \right)^2 x \sin \left( \frac{n\pi x}{a} \right) - \frac{(n\pi x/a)^2 - 2}{(n\pi/a)^3} \cos \left( \frac{n\pi x}{a} \right) \right]_0^a \\ &= \frac{2\sqrt{15}}{a^3} \left[ -\frac{a^3}{n\pi} \cos(n\pi) + a^3 \cdot \frac{(n\pi)^2 - 2}{(n\pi)^3} \cos(n\pi) + a^3 \cdot \frac{2}{(n\pi)^3} \cos(0) \right] \\ &= \frac{4\sqrt{15}}{(n\pi)^3} (\cos(0) - \cos(n\pi)) \\ &= \begin{cases} 0, & \text{if } n \text{ is even,} \\ 8\sqrt{15}/(n\pi)^3, & \text{if } n \text{ is odd,} \end{cases} \end{aligned} \quad (4.79)$$

できました。したがって、結局、式 (4.68) に代入して、

$$\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{30}{a}} \left( \frac{2}{\pi} \right)^3 \sum_{n=1,3,5,\dots} \frac{1}{n^3} \sin \left( \frac{n\pi x}{a} \right) \exp \left[ \frac{-in^2\pi^2\hbar t}{2ma^2} \right] \quad (4.80)$$

と波動関数が求められました。



例題の波動関数を動画にしてみました。動画たちはこちら。

#### 4.2.3 $c_n$ の意味

ここで、 $c_n$  の意味について述べておきましょう。波動関数  $\Psi$  が与えられたときに、それと、位置の測定の確率との関係は最初にやりましたよね。式 (3.12) です。その他の物理量の測定の場合は期待値の求め方はやりましたが、ある測定をして、何かの物理量を何かしらの値に見つける確率についてはまだやってません。これは、じつはあとでしっかりやりますが、それが、 $c_n$  の意味と関係しています。

そうなんです。 $|c_n|^2$  が、エネルギーの測定において、エネルギー  $E_n$  を得る確率なんです。とうぜん、確率っていうからには、

$$\sum_n |c_n|^2 = 1 \quad (4.81)$$

ですよ。どれどれ、調べてみましょう。これは、波動関数の規格化から導くことができます。

$$\begin{aligned} 1 &= \int |\Psi(x, 0)|^2 dx \\ &= \int \left( \sum_m c_m \psi_m(x) \right)^* \left( \sum_n c_n \psi_n(x) \right) dx \\ &= \sum_m \sum_n c_m^* c_n \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx \\ &= \sum_m \sum_n c_m^* c_n \delta_{mn} \\ &= \sum_n |c_n|^2 \end{aligned} \quad (4.82)$$

ですね。 $\psi_n$  の直交性が役にたちました。ちなみに、例題のやつにこれを適用すると

$$\frac{1}{1^6} + \frac{1}{3^6} + \frac{1}{5^6} + \dots = \frac{\pi^6}{960} \quad (4.83)$$

っていうのが証明できちゃいましたね。まあ、余談でしたが。この式、右辺も左辺もほとんど 1 です。つまり、例題の最初のやつはほとんど基底状態ですね。じっさい、形がよく似ている。

つぎに、 $|c_n|^2$  が確率ならばエネルギーの期待値は

$$\langle H \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \quad (4.84)$$

のはずですね。これも、簡単にチェックできます。まずは、

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \quad (4.85)$$

でしたよね。これが、時間によらないシュレーディンガー方程式そのものです。なので、

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int \Psi^* \hat{H} \Psi dx \\ &= \int \left( \sum_m c_m \psi_m e^{-iE_m t} \right)^* \hat{H} \left( \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t} \right) dx \\ &= \sum_m \sum_n c_m^* c_n E_n e^{-i(E_n - E_m)t} \int \psi_m^* \psi_n dx \\ &= \sum_m \sum_n c_m^* c_n E_n e^{-i(E_n - E_m)t} \delta_{mn} \\ &= \sum_n |c_n|^2 E_n \end{aligned} \quad (4.86)$$

とちゃんとなってます。しかも、エネルギーの期待値は時間によらないです。これが、エネルギー保存を表しています。

#### 4.2.4 もうちょっと調べてみよう。

[Griffiths, Problem 2.4]

$n$  番目の定常状態での、期待値  $\langle x \rangle$ ,  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle p \rangle$ ,  $\langle p^2 \rangle$  を求めてみよう。まずは、

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2 \left( \frac{n\pi x}{a} \right) dx \\ &= \frac{1}{a} \int_0^a x \left[ 1 - \cos \left( \frac{2n\pi x}{a} \right) \right] dx \\ &= \frac{1}{a} \left[ \frac{x^2}{2} - \frac{ax}{2n\pi} \sin \left( \frac{2n\pi x}{a} \right) - \left( \frac{a}{2n\pi} \right)^2 \cos \left( \frac{2n\pi x}{a} \right) \right]_0^a \\ &= \frac{a}{2} \end{aligned} \quad (4.87)$$

まあ、予想通り、まんまかにいますわな。つぎは、

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \sin^2 \left( \frac{n\pi x}{a} \right) dx \\ &= \frac{a^2}{6} \left( 2 - \frac{3}{n^2 \pi^2} \right) \end{aligned} \quad (4.88)$$

これも、宿題にしましょうか。あとは、

$$\langle p \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \left[ \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right] dx = 0. \quad (4.89)$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \left[ -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right] dx = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2}. \quad (4.90)$$

したがって、

$$\sigma_x^2 = \frac{a^2}{6} \left( 2 - \frac{3}{n^2 \pi^2} \right) - \left( \frac{a}{2} \right)^2 = \frac{a^2}{12} \left( 1 - \frac{6}{n^2 \pi^2} \right), \quad (4.91)$$

$$\sigma_p^2 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2} \quad (4.92)$$

なので、

$$\sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{n^2 \pi^2 - 6}{3}} \quad (4.93)$$

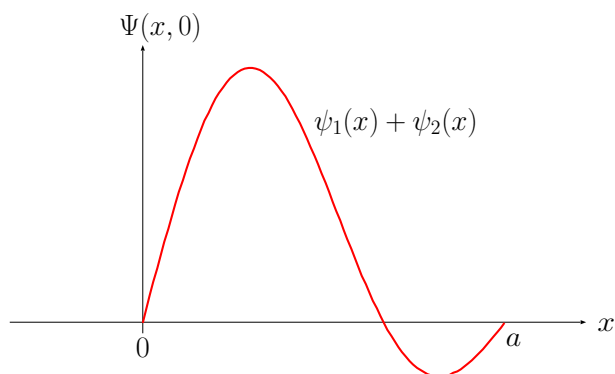
です。 $n = 1$ の基底状態で、 $\hbar/2$ の1.14倍程度。 $n$ が大きくなると不確定性が大きくなるようですね。なんにしろ、不確定性関係を満たしていることは確認できました。

[Griffiths, Problem 2.5]

次の例は、初期状態が、 $\psi_1$  と  $\psi_2$  を重ね合わせた状態だった場合を考えてみましょう。

$$\Psi(x, 0) = A(\psi_1(x) + \psi_2(x)). \quad (4.94)$$

図示するとこんな感じです。



まずは、規格化しましょうね。

$$1 = |A|^2 \int_0^a (\psi_1(x) + \psi_2(x))^* (\psi_1(x) + \psi_2(x)) dx \quad (4.95)$$

ですが、 $\psi_1$  と  $\psi_2$  は直交すること、また、すでに規格化されていることを使うと、当然

$$|A|^2 = \frac{1}{2} \quad (4.96)$$

なので、

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (4.97)$$

とすればよいです。

つぎに、波動関数をもとめましょう。

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1 e^{-iE_1 t} + \psi_2 e^{-iE_2 t}) \quad (4.98)$$

ですね。ただし、

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad E_2 = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (4.99)$$

でしたね。

$|\Psi(x, t)|^2$  も求めましょう。

$$\begin{aligned} |\Psi(x, t)|^2 &= \frac{1}{2} \left[ \psi_1^2 + \psi_2^2 + \psi_1 \psi_2 \left( e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} + e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[ \psi_1^2 + \psi_2^2 + 2\psi_1 \psi_2 \cos(3\omega t) \right] \end{aligned} \quad (4.100)$$

ただし、

$$\omega = \frac{\pi^2 \hbar}{2ma^2} \quad (4.101)$$

としました。おっと、時間に依存しますね。確率密度がうごめいております。動画はこちら。

この状態の  $\langle x \rangle$  を求めてみると、

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_0^a x |\Psi(x, t)|^2 dx \\ &= \frac{a}{2} - \frac{16a}{9\pi^2} \cos(3\omega t) \end{aligned} \quad (4.102)$$

$a/2$  を中心に振動数  $3\omega/2\pi$  で振動しているようです。その振幅は  $16a/9\pi^2$ 。だいたい、 $0.18a$  です。壁は超えてないね。しかし、壁に挟まってる粒子ですが、変な動きをしていますなあ。

$\langle p \rangle$  はどうでしょう。

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \int_0^a \Psi(x, t)^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) dx \\ &= \frac{8\hbar}{3a} \sin(3\omega t)\end{aligned}\tag{4.103}$$

こっちも振動しとりますね。ちなみに、 $\langle p \rangle = m\langle \dot{x} \rangle$  が成り立ってますよ。

この粒子のエネルギーを測ると、 $E_1$  が  $E_2$  と測定されます。その確率は  $1/2$  ずつですね。もしこの解釈が正しいなら、期待値は当然、

$$\langle H \rangle = \frac{E_1 + E_2}{2}\tag{4.104}$$

となるはずです。実際やってみると、

$$\langle H \rangle = \int_0^a \Psi(x, t)^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) \right) dx = \frac{5\pi^2 \hbar^2}{4ma^2}\tag{4.105}$$

ときちんと  $E_1$  と  $E_2$  の真ん中にでてきました。

### 4.3 ここまでのまとめ

ここで一旦、まとめておきましょう。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi : \quad \text{時間によらないシュレーディンガー方程式}\tag{4.106}$$

$E_n, \psi_n(x)$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ): 時間によらないシュレーディンガー方程式の解を与える  $E$  と解の組。

$$E_n \text{ はエネルギー。}\tag{4.107}$$

$$\int \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{nm} : \quad \{\psi_n\} \text{ は正規直交関数系。}\tag{4.108}$$

$\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$  : 定常状態。期待値が時間によらない。

$$\text{エネルギーの決まった状態。}\tag{4.109}$$

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} : \quad \text{シュレーディンガー方程式の一般解。} \quad (4.110)$$

$$c_n = \int \Psi(x, 0) \psi_n^*(x) dx : \quad c_n \text{ の求めかた。} \quad (4.111)$$

$$|c_n|^2 : \quad \text{エネルギーを } E_n \text{ に観測する確率！} \quad (4.112)$$

$$\sum_n |c_n|^2 = 1 : \quad \text{確率解釈が可能。} \quad (4.113)$$

$$\langle H \rangle = \int \Psi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \Psi dx = \int \Psi^* \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi \right) dx = \sum_n |c_n|^2 E_n$$

: エネルギーの期待値 (4.114)

## 4.4 フーリエ級数・フーリエ変換

井戸型のところで、三角関数が出てきました。しかも、初期状態の波動関数  $\Psi(x, 0)$  を三角関数の和で書き表して、その係数  $c_n$  が重要な意味を持っていました。これらは、フーリエ級数やフーリエ変換という数学のトリックです。ここで、学んでおきましょう。

### 4.4.1 三角関数で展開？

関数を三角関数の無限和で書き表すなんてことができるのでしょうか？関数  $f(x)$  を  $x$  のべきで展開するっていうのはわかる気がするけど、どうなのでしょう？

例として、 $x$  を  $\sin$  で展開できることを見てみましょう。まず、 $\log(1+z)$  っていう複素関数を考えます。とりあえず、 $z = re^{i\theta}$  として、 $-\pi < \theta < \pi$  の領域で考えます。 $z = 0$  近傍で展開すると、

$$\log(1+z) = z - \frac{z^2}{2} + \frac{z^3}{3} - \dots \quad (4.115)$$

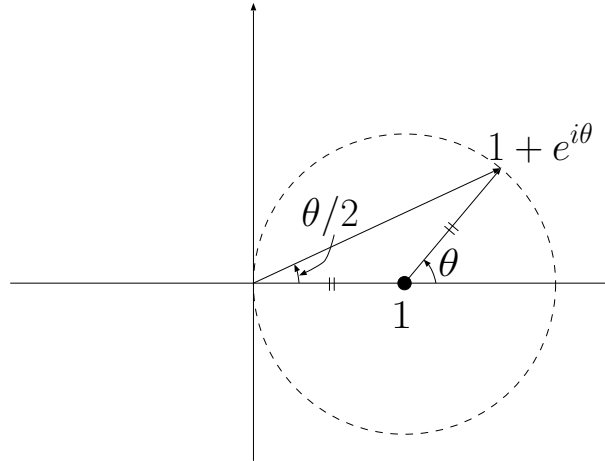
となります。この級数は  $|z| = 1$  の円周上で  $z = -1$  を除いた点では収束します。そこで、その円周上  $z = e^{i\theta}$  において、

$$\log(1 + e^{i\theta}) = e^{i\theta} - \frac{e^{2i\theta}}{2} + \frac{e^{3i\theta}}{3} - \dots \quad (4.116)$$

と表すことができます。両辺の虚数部をみると、

$$\text{Im}[\log(1 + e^{i\theta})] = \sin \theta - \frac{\sin 2\theta}{2} + \frac{\sin 3\theta}{3} - \dots \quad (4.117)$$

ですね。



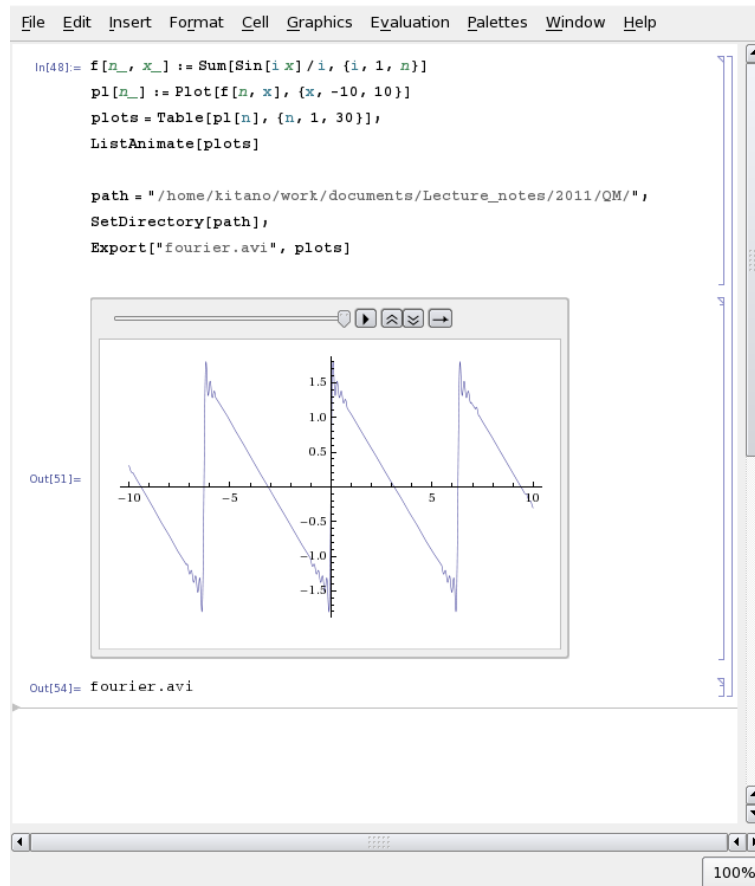
一方、この図をみると、 $1 + e^{i\theta}$  は  $c$  を正の実数として、 $ce^{i\theta/2}$  と表されることがわかります。したがって、結局、

$$\frac{\theta}{2} = \sin \theta - \frac{\sin 2\theta}{2} + \frac{\sin 3\theta}{3} - \dots \quad (4.118)$$

となりました。ただし、 $-\pi < \theta < \pi$  です。確かに、展開できてますね。すごくないですか？符号がうっとおしいので、 $\theta \rightarrow \pi - \theta$  とすると

$$\begin{aligned} \frac{\pi - \theta}{2} &= \sin(\pi - \theta) - \frac{\sin(2\pi - 2\theta)}{2} + \frac{\sin(3\pi - 3\theta)}{3} - \dots \\ &= \sin \theta + \frac{\sin(2\theta)}{2} + \frac{\sin(3\theta)}{3} + \dots \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(n\theta)}{n} \end{aligned} \quad (4.119)$$

右辺を絵に描いてみるとこんな感じです。



$n = 20$ まで足してます。収束していく様子を動画にしてみました。

なるほど、たしかに一次関数が三角関数の無限和で書き表すことができるようです。じつは、結構一般の関数についてそれができます。それが、フーリエ級数です。

展開できることの証明は、解析概論にのってますので、興味のある方は参照してください。

#### 4.4.2 フーリエ級数

関数  $f(x)$  を周期  $2L$  の周期関数としましょう。つまり、 $f(x + 2L) = f(x)$ 。このとき、この関数を三角関数で展開しようというのがフーリエ級数です。つまり、

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left( a_n \cos \frac{n\pi x}{L} + b_n \sin \frac{n\pi x}{L} \right) \quad (4.120)$$

と展開します。こんなことできる(つまり級数が収束する)のは、以下のディリクレ条件なるものを満たすときだということが知られています。



1.  $f(x)$  は区間  $(-L, L)$  で有限個の点を除いて 1 価関数。
2.  $f(x)$  は周期  $2L$ 。
3.  $f(x)$  と  $f'(x)$  は区間  $(-L, L)$  で区分的に連続。

結構むちゃな関数でもフーリエ級数は収束するんですね。

さてさて、三角関数の直交性はまえにやりましたね。もう一度、おさらいすると、 $m$  と  $n$  を整数として、

$$\int_{-L}^L \cos \frac{m\pi x}{L} dx = 2L \cdot \delta_{m0} \quad (4.121)$$

$$\int_{-L}^L \sin \frac{m\pi x}{L} dx = 0 \quad (4.122)$$

$$\int_{-L}^L \sin \frac{m\pi x}{L} \cos \frac{n\pi x}{L} dx = 0 \quad (4.123)$$

$$\int_{-L}^L \cos \frac{m\pi x}{L} \cos \frac{n\pi x}{L} dx = L \cdot \delta_{mn} \quad (4.124)$$

$$\int_{-L}^L \sin \frac{m\pi x}{L} \sin \frac{n\pi x}{L} dx = L \cdot \delta_{mn} \quad (4.125)$$

加法定理やらを駆使して、バリバリ証明しちゃってください。

この直交性を使うと、係数  $a_n$  と  $b_n$  は

$$a_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos \frac{n\pi x}{L} dx, \quad (4.126)$$

$$b_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \sin \frac{n\pi x}{L} dx \quad (4.127)$$

となります。これらをフーリエ係数と呼びます。ちなみに、任意の定数  $c$  に関して、

$$a_n = \frac{1}{L} \int_{-L+c}^{L+c} f(x) \cos \frac{n\pi x}{L} dx, \quad (4.128)$$

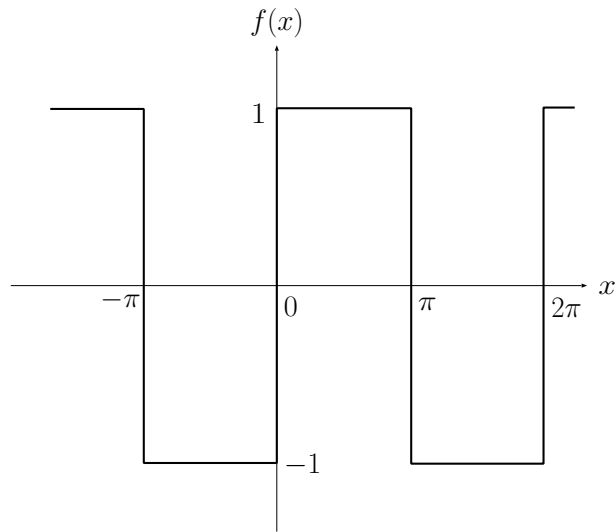
$$b_n = \frac{1}{L} \int_{-L+c}^{L+c} f(x) \sin \frac{n\pi x}{L} dx \quad (4.129)$$

です。証明してみましょう。積分を  $[-L, -L+c]$  と  $[-L+c, L]$  に分けて変数を変えて  $[-L, -L+c]$  を  $[L, L+c]$  に変えれば  $f(x)$  と三角関数の周期性から OK。

例えば、

$$f(x) = \begin{cases} -1 & (-\pi < x < 0) \\ 1 & (0 < x < \pi) \end{cases} \quad (4.130)$$

で周期  $2\pi$  という関数をフーリエ級数で表してみましょう。



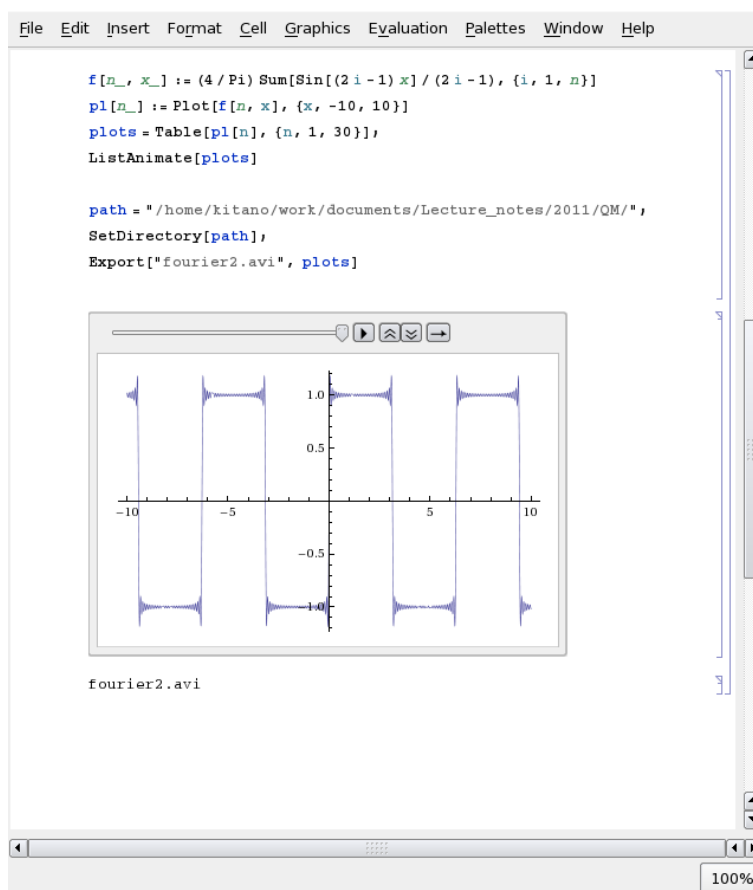
これは、奇関数なので、 $a_n$  は全部ゼロですね。  $b_n$  は、

$$\begin{aligned} b_n &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin(nx) dx \\ &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^0 \sin(nx) dx + \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \sin(nx) dx \\ &= -\frac{1}{\pi} \left[ -\frac{1}{n} \cos(nx) \right]_{-\pi}^0 + \frac{1}{\pi} \left[ -\frac{1}{n} \cos(nx) \right]_0^{\pi} \\ &= \frac{2}{n\pi} (1 - \cos n\pi) \\ &= \frac{2}{n\pi} [1 - (-1)^n] \end{aligned} \quad (4.131)$$

というわけで、

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{4}{\pi} \sum_{n=1,3,5} \frac{1}{n} \sin(nx) \\ &= \frac{4}{\pi} \left( \sin x + \frac{1}{3} \sin 3x + \frac{1}{5} \sin 5x + \dots \right) \end{aligned} \quad (4.132)$$

絵を描いてみると、収束していく様子わかりますね。こりゃすごい。動画はこちら。



前節との関連がわかりましたか？量子力学では、まず、時間に依存しないシュレディンガー方程式を解いて、各エネルギーに対応する  $\psi_n$  を求めました。井戸型の場合は、これが三角関数でしたね。これをつかって、初期条件で与えられた波動関数  $\Psi(x, 0)$  を三角関数の和でかきました。これがフーリエ展開ですね。そのフーリエ係数が  $c_n$  でした。

#### 4.4.3 フーリエ級数の複素表示

$$\cos \theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}, \quad \sin \theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i} \quad (4.133)$$

ですね。これを使うと、式 (4.120) は

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\pi x/L} \quad (4.134)$$

と書き表すことができます。ただし、

$$c_0 = \frac{a_0}{2}, \quad c_n = \frac{a_n - ib_n}{2}, \quad c_{-n} = \frac{a_n + ib_n}{2}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (4.135)$$

です。式 (4.126) と (4.127) を使うと、

$$c_0 = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(x) dx, \quad (4.136)$$

$$c_n = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(x) \left\{ \cos \frac{n\pi x}{L} - i \sin \frac{n\pi x}{L} \right\} dx, \quad (4.137)$$

$$c_{-n} = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(x) \left\{ \cos \frac{n\pi x}{L} + i \sin \frac{n\pi x}{L} \right\} dx, \quad (4.138)$$

ですね。これらはまとめて書くことができ、

$$c_n = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(x) e^{-in\pi x/L} dx, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (4.139)$$

です。きれいになりましたね。

#### 4.4.4 正規直交関数系

フーリエ級数をもうちょっと一般化して考えましょう。まず、正規直交関数系なるものを考えます。それは、

$$\int_a^b \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx = \delta_{mn} \quad (4.140)$$

であるような、関数の集まりです。井戸型ポテンシャルで出てきた、 $\psi_n$  がまさにこれですね。まあ、その場合は、フーリエ展開でしたが。

三角関数に限らず、区間  $[a, b]$  の正規直交関数系  $\phi_n$  があったとしましょう。そこで、ある関数  $f(x)$  を持ってきて、

$$c_n = \int_a^b f(x)\phi_n^*(x)dx \quad (4.141)$$

という数列を定義します。

ここで、いま任意の関数  $f(x)$  に関して

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = \int_a^b |f(x)|^2 dx, \quad (\text{パーセバルの等式}) \quad (4.142)$$

が成り立つとき、この正規直交関数系は完備(完全)であるといいます。何をいってるんでしょう？前の節で確率は足したら1であるっていうところから出てきましたね。完備っていうのは、直交関数系に他の関数  $\xi(x)$  を参加させる余地がないことを言ってます。もし、参加できるとしたら、直交性から

$$\int_a^b \xi(x)\phi_n^*(x)dx = 0 \quad (4.143)$$

がすべての  $n$  について成り立つので、 $\xi(x)$  に関して  $c_n$  はすべてゼロですね。そうすると、式(4.142)の左辺がゼロですので、 $\xi(x) = 0$  となってしまいます。

これが成り立っていると、任意の関数  $f(x)$  は  $\phi_n(x)$  で展開できます。これは、まず、

$$J = \int_a^b \left| f(x) - \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x) \right|^2 dx \quad (4.144)$$

なるものを考えます。

$$\begin{aligned}
 J &= \int_a^b \left( |f(x)|^2 - f(x)^* \sum_n c_n \phi_n(x) - f(x) \sum_m c_m^* \phi_m^*(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n c_m^* \phi_n(x) \phi_m^*(x) \right) dx \\
 &= \int_a^b |f(x)|^2 dx - \sum_n c_n \int_a^b f(x)^* \phi_n(x) dx - \sum_m c_m^* \int_a^b f(x) \phi_m^*(x) dx \\
 &\quad + \sum_n \sum_m c_n c_m^* \int_a^b \phi_n(x) \phi_m^*(x) dx \\
 &= \int_a^b |f(x)|^2 dx - \sum_n c_n c_n^* - \sum_m c_m^* c_m + \sum_n \sum_m c_n c_m^* \delta_{nm} \\
 &= \int_a^b |f(x)|^2 dx - \sum_n |c_n|^2 \\
 &= 0
 \end{aligned} \tag{4.145}$$

ってわけで、完備な場合は  $J = 0$  です。もとの定義式 (4.144) をみて、これがゼロであるためには、

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x) \tag{4.146}$$

でなければならなりませんね。つまり、完備な正規直交関数系  $\phi_n$  があつたとき、任意の関数  $f(x)$  は、それで上式のように展開できて、展開係数  $c_n$  は式 (4.141) で与えられます。(もちろん上の右辺が一様収束する場合ですけどね。)

例えば、

$$\phi_m(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{imx}, \quad (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \tag{4.147}$$

は区間  $[-\pi, \pi]$  で正規直交系をなします。これが、フーリエ級数の複素表示ですね。

#### 4.4.5 フーリエ積分

フーリエ積分やフーリエ変換はこれまで出てこなかったんですけど、そのうち使うので、もうちょっと数学的準備を続けておきましょう。

さてさて、いままで、周期関数を考えていましたが、そうでない場合も考えてみましょう。そんなときは、 $L \rightarrow \infty$  の極限をとってしまえばよいわけですね。まず、

$$f_L(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\pi x/L} \tag{4.148}$$

と

$$c_n = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f_L(x) e^{-in\pi x/L} dx \quad (4.149)$$

を組み合わせさせてみましょう。  $f_L(x)$  は例によって、周期  $2L$  の周期関数です。そうすると、

$$f_L(x) = \frac{1}{2L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-L}^L du f_L(u) e^{-in\pi u/L} e^{in\pi x/L} \quad (4.150)$$

です。ここで、

$$w_n = \frac{n\pi}{L}, \quad \Delta w \equiv w_{n+1} - w_n = \frac{\pi}{L} \quad (4.151)$$

というのを導入しましょう。これを使うと、

$$f_L(x) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \Delta w \int_{-L}^L f_L(u) e^{i(x-u)w_n} du \quad (4.152)$$

です。さて、 $L \rightarrow \infty$  の極限を考えましょう。まず、周期関数  $f_L(x)$  は一般の周期的でない関数になります。

$$f(x) = \lim_{L \rightarrow \infty} f_L(x) \quad (4.153)$$

それから、 $\Delta w \rightarrow 0$  ですので、無限和は積分に変わって、

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw \int_{-\infty}^{\infty} du f(u) e^{iw(x-u)} \quad (4.154)$$

となりました。これが、フーリエ積分公式です。まあ、このままでは、なんとも、形式的な式ですが、物理ではとっても重要です。ちなみに、上の積分が収束しないことには、意味がありませんが、その収束性は

1.  $f(x)$  と  $f'(x)$  があらゆる有限区間で区分的に連続、
2.  $f(x)$  が  $(-\infty, \infty)$  で絶対積分可能、すなわち

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)| dx < \infty \quad (4.155)$$

のときに証明されているそうです。

#### 4.4.6 フーリエ変換

フーリエ積分公式をばらして、一旦、

$$F(w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(u)e^{-i w u} du \quad (4.156)$$

という関数を定義しましょう。これを使うと、積分公式は

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(w)e^{i w x} dw \quad (4.157)$$

となります。おもしろいですね。このとき、 $F(w)$  を  $f(x)$  のフーリエ変換、 $f(x)$  は  $F(w)$  のフーリエ逆変換といいます。

式 (4.157) の形をみて、 $f(x)$  をいろんな正弦波の重ね合わせで表している様子がわかりますね。その重みが  $F(w)$  です。

例題をやってみましょう。 $a > 0$  として、

$$f(x) = \begin{cases} e^{-ax} & (x > 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases} \quad (4.158)$$

のフーリエ変換を求めましょう。

$$\begin{aligned} F(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ikx} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} e^{-ax} e^{-ikx} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[ \frac{-e^{-(a+ik)x}}{a+ik} \right]_0^{\infty} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{a+ik} \end{aligned} \quad (4.159)$$

となりました。ちなみに、もう一回逆変換してみると、

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx}}{a+ik} dk = \begin{cases} e^{-ax} & (x > 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases} \quad (4.160)$$

となるわけですね。なんだか、おもしろい積分公式ですね。留数定理をつかって、これも証明できますよね。(宿題)



#### 4.4.7 ディラックのデルタ関数

つぎに、デルタ関数  $\delta(x)$  なるものを勉強しておきましょう。とっても便利です。どんな関数かと言うと

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & (x \neq 0) \\ \infty & (x = 0) \end{cases} \quad (4.161)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (4.162)$$

です。 $x = 0$  で尖ってる関数ですね。なんだか、むちゃくちゃな関数です。この関数は  $x = 0$  で変なことになってるので、積分されて初めて意味があります。

$\delta(x - a)$  は尖ってる場所が  $x = a$  となる関数であることは明かでしょう。これを用いると、 $x = a$  で連続な関数  $f(x)$  に関して

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - a) dx = f(a) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a) dx = f(a) \quad (4.163)$$

となります。(ほんとはこっちが定義です。)

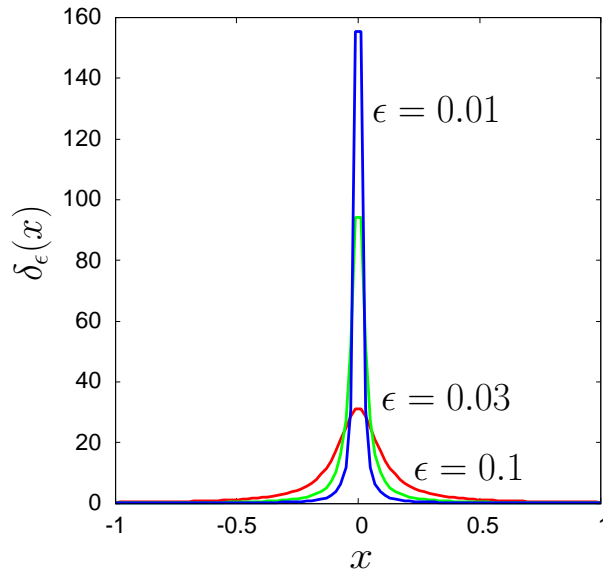
デルタ関数を関数の極限の形で理解してみましょう。 $\epsilon > 0$  として、関数  $e^{-\epsilon|k|}/\sqrt{2\pi}$  のフーリエ逆変換を考えます。

$$\begin{aligned} \delta_{\epsilon}(x) &\equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\epsilon|k|} e^{ikx} dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \left[ \frac{1}{-\epsilon + ix} e^{-\epsilon k + ikx} \right]_0^{\infty} + \frac{1}{2\pi} \left[ \frac{1}{\epsilon + ix} e^{\epsilon k + ikx} \right]_{-\infty}^0 \\ &= \frac{1}{2\pi} \frac{2\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} \end{aligned} \quad (4.164)$$

この関数は、 $\epsilon \rightarrow 0$  の極限で、 $x \neq 0$  でゼロですね。で、積分してみると、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_{\epsilon}(x) dx &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} dx \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{\epsilon}{\epsilon^2 \tan^2 \theta + \epsilon^2} \frac{\epsilon}{\cos^2 \theta} d\theta \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \\ &= 1 \end{aligned} \quad (4.165)$$

となってます。(もちろん、留数定理使ってもいいですよ。) よって、 $\delta_\epsilon(x)$  は  $\epsilon \rightarrow 0$  の極限で、 $\delta(x)$  となることがわかります。



こんな感じです。つまり、

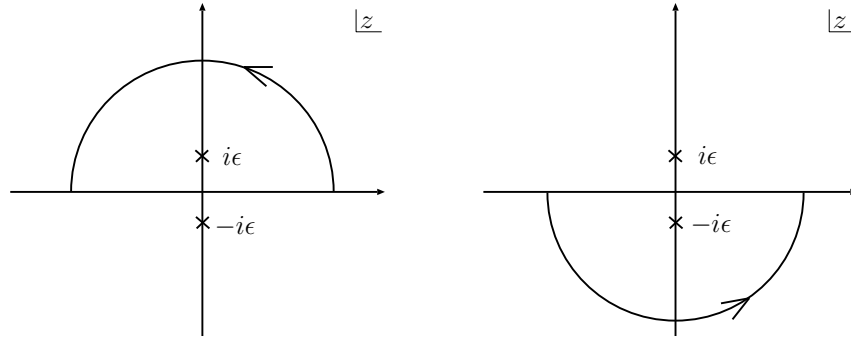
$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx - \epsilon|k|} dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk \quad (4.166)$$

です。デルタ関数は  $F(k) = 1/\sqrt{2\pi}$  のフーリエ逆変換です。波を同じ重みで全部足すと、デルタ関数になるんですねえ。(ちなみに上の表式は数学的には厳密ではありません。 $x = 0$  において極限が存在しません。)

せっかくの機会ですので、 $\delta_\epsilon(x)$  をフーリエ変換して、 $e^{-\epsilon|k|}/\sqrt{2\pi}$  に戻るかどうかやってみましょう。

$$\begin{aligned} F(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_\epsilon(x) e^{-ikx} dx = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} e^{-ikx} dx \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2\epsilon}{(x + i\epsilon)(x - i\epsilon)} e^{-ikx} dx \quad (4.167) \end{aligned}$$

ですね。これを2通りの積分路に分けて考えます。



まず、 $k > 0$  のときは、右側の積分路をとれば、半径を大きくとると弧の部分がゼロに収束します。したがって、 $z = -i\epsilon$  のポールをひろって、さらに、積分路の向きを考慮すると、

$$F(k) = -\frac{2\pi i}{(2\pi)^{3/2}} \frac{2\epsilon}{-i\epsilon - i\epsilon} e^{-\epsilon k} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\epsilon k} \quad (4.168)$$

とできました。 $k < 0$  のときは、左側の積分路をとればよくて、

$$F(k) = \frac{2\pi i}{(2\pi)^{3/2}} \frac{2\epsilon}{i\epsilon + i\epsilon} e^{\epsilon k} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\epsilon k} \quad (4.169)$$

最後に、 $k = 0$  のときは、どちらの積分路でも OK で、

$$F(k) = \frac{2\pi i}{(2\pi)^{3/2}} \frac{2\epsilon}{i\epsilon + i\epsilon} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad (4.170)$$

となります。まとめると、

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\epsilon|k|} \quad (4.171)$$

となりました。たしかに、もどってます。

デルタ関数はステップ関数の微分だということも示すことができます。ステップ関数とは、

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & \text{if } x > 0, \\ 1/2, & \text{at } x = 0, \\ 0, & \text{if } x < 0 \end{cases} \quad (4.172)$$

です。やってみましょう。 $f(x)$  を  $x = 0$  で微分可能な関数として、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \frac{d\theta(x)}{dx} dx &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{df}{dx} \theta(x) dx + [f(x)\theta(x)]_{-\infty}^{\infty} \\ &= - \int_0^{\infty} \frac{df}{dx} dx + f(+\infty) \\ &= - [f(x)]_0^{\infty} + f(+\infty) \\ &= f(0) \end{aligned} \quad (4.173)$$

たしかに、デルタ関数ですね。

他にも、いろんな関数列の極限としてデルタ関数が理解できます。

$$\delta_n(x) = \begin{cases} 0 & (x < -\frac{1}{2n}) \\ n & (-\frac{1}{2n} < x < \frac{1}{2n}) \\ 0 & (x > \frac{1}{2n}) \end{cases}, \quad (4.174)$$

$$\delta_n(x) = \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2 x^2}, \quad (4.175)$$

$$\delta_n(x) = \frac{n}{\pi} \frac{1}{1 + n^2 x^2}, \quad (4.176)$$

$$\delta_n(x) = \frac{\sin(nx)}{\pi x} = \frac{1}{2\pi} \int_{-n}^n e^{ikx} dk. \quad (4.177)$$

これらはすべて、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_n(x) f(x) dx = f(0) \quad (4.178)$$

という性質を持っています。(ただし、 $f(x)$  は性質のよい関数。上の積分ができるように  $|x| \rightarrow \infty$  でまとも。ちなみに、 $|x| \rightarrow \infty$  で発散するような関数でも、上の積分領域を  $x = 0$  を含む適当な有限区間とすれば問題ない。)

デルタ関数の性質を下にあげておきます。

$$\delta(x) = \delta(-x), \quad (4.179)$$

$$\delta'(x) = -\delta'(-x), \quad (4.180)$$

$$x\delta(x) = 0, \quad (4.181)$$

$$x\delta'(x) = -\delta(x), \quad (4.182)$$

$$\delta(ax) = a^{-1}\delta(x), \quad (a > 0), \quad (4.183)$$

$$\delta(x^2 - a^2) = (2a)^{-1} [\delta(x - a) + \delta(x + a)], \quad (a > 0), \quad (4.184)$$

$$\int \delta(a - x)\delta(x - b)dx = \delta(a - b), \quad (4.185)$$

$$f(x)\delta(x - a) = f(a)\delta(x - a). \quad (4.186)$$

適当な関数(ただし何回か微分可能なやつら)をかけて積分して証明してみてください。

#### 4.4.8 デルタ関数と完全性

$\phi_n(x)$  が  $(-\infty, \infty)$  で完備な正規直交関数系だとすると、任意の関数が

$$f(x) = \sum_n c_n \phi_n(x), \quad c_n = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \phi_n^*(x) dx \quad (4.187)$$

と展開できますよね。二つを組み合わせると

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_n \left( \int_{-\infty}^{\infty} f(y) \phi_n^*(y) dy \right) \phi_n(x) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(y) \left( \sum_n \phi_n^*(y) \phi_n(x) \right) dy \end{aligned} \quad (4.188)$$

となりますので、

$$\sum_n \phi_n(x) \phi_n^*(y) = \delta(y - x) \quad (4.189)$$

であることがわかります。この性質を完全性とよびます。

## 4.5 調和振動子

### 4.5.1 調和振動子ってなんだ？

古典論で、フックの法則っていうのやりましたよね。バネにつながれた質点の運動のやつです。

$$F = -kx = m \frac{d^2x}{dt^2} \quad (4.190)$$

ですね。この運動方程式の解は

$$x(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t) \quad (4.191)$$

ただし、

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (4.192)$$

ですね。ポテンシャルエネルギーは

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2 \quad (4.193)$$

という2次関数ですね。このポテンシャル下で運動しているやつを調和振動子とよびます。

これ、応用が広いんです。なぜかということ、一般にポテンシャル  $V(x)$  があつたとき、その極小点  $x_0$  まわりで展開すると、

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} V''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots \quad (4.194)$$

で、定数項  $V(x_0)$  は無視できて、 $V(x_0)' = 0$  ですので、極小点のまわりでは、

$$V(x) \simeq \frac{1}{2} V''(x_0)(x - x_0)^2 \quad (4.195)$$

と近似できます。ちなみに、 $x_0$  は極小点ですので、 $V''(x_0) > 0$  ですね。これは、調和振動子のポテンシャルそのものですので、「ポテンシャルの極小点まわりで振動している運動は、振幅が小さいときは近似的に調和振動子である。」ということが言えます。

さて、量子力学では、どうなるんでしょう？もちろん、ポテンシャルが

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (4.196)$$

のときのシュレーディンガー方程式をとけばよろしいわけです。古典的な角振動数  $\omega$  を使って書いてます。[ $\omega$ ] = [ $T^{-1}$ ] ですね。さて、どうするんでしたっけ？ そうです、まずは、時間によらないシュレーディンガー方程式を解くのです。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi = E\psi \quad (4.197)$$

ですね。がんばって、この微分方程式を解けばいいのですが、まずは、とても賢い代数的な方法でこれを解きます。解析的に頑張る方法は、そのあとでやりますね。

#### 4.5.2 代数的な方法 (生成消滅演算子)

まず、方程式を意味ありげな形に書き直します。

$$\frac{1}{2m} [\hat{p}^2 + (m\omega x)^2] \psi = E\psi \quad (4.198)$$

ただし、 $\hat{p}$  は微分演算子

$$\hat{p} \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad (4.199)$$

です。さてさて、ここでふと、つぎのような演算子を用意しましょう。

$$\hat{a}_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (\mp i\hat{p} + m\omega\hat{x}) \quad (4.200)$$

なんとなく、 $x$  にもハットをつけて  $\hat{x}$  としました。演算子としての作用は、単純に

$$\hat{x} : \psi(x) \rightarrow x\psi(x) \quad (4.201)$$

と掛け算です。この  $\hat{a}_+$  と  $\hat{a}_-$  をかけてみましょう。

$$\hat{a}_-\hat{a}_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega} (i\hat{p} + m\omega\hat{x})(-i\hat{p} + m\omega\hat{x}) \quad (4.202)$$

$\hat{p}$  とか  $\hat{x}$  が演算子じゃなかったら、これは、

$$\frac{1}{2\hbar m\omega} [p^2 + (m\omega x)^2] \quad (4.203)$$

と (ハミルトニアン /  $\hbar\omega$ ) となりそうですが、そうはいきません。なぜなら、

$$\hat{x}\hat{p} \neq \hat{p}\hat{x} \quad (4.204)$$

だからです。演算子の右側にはつねに関数があることを想像しましょうね。関数を微分してから  $x$  をかけるのと、 $x$  をかけてから微分するのでは、答えが変わりますよね。

きちんと、順序に気をつけると、

$$\hat{a}_- \hat{a}_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega} [\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2 - im\omega(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})] \quad (4.205)$$

です。この、 $\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}$  のことを交換関係とよびます。数だったらゼロですけど、演算子の場合にはゼロになるとはかぎりません。二つの演算子  $\hat{A}$  と  $\hat{B}$  があったときに、交換関係は

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (4.206)$$

と書きます。このカッコを使うと、

$$\hat{a}_- \hat{a}_+ = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} - \frac{i}{2\hbar} [\hat{x}, \hat{p}] \quad (4.207)$$

とかけます。ハミルトニアンにもハットつけとききました。それでは、 $\hat{x}$  と  $\hat{p}$  の交換関係はなんでしょう？ 演算子の右側には関数があることを想像するんでしたよね。それをつかって計算してみましょう。

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}] f(x) &= \left[ x \frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (xf) \right] \\ &= \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{df}{dx} - f - x \frac{df}{dx} \right) \\ &= i\hbar f(x) \end{aligned} \quad (4.208)$$

したがって、

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (4.209)$$

です。これ、むちゃくちゃ重要です。名前がついてます。「正準交換関係」っていいです。実は、これが理論の出発点と考えることもできます。これを使うと、結局、

$$\hat{a}_- \hat{a}_+ = \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} + \frac{1}{2} \quad (4.210)$$

と演算子故のおつり項がつかえましたね。したがって、

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}_- \hat{a}_+ - \frac{1}{2} \right) \quad (4.211)$$



です。それじゃあ、 $\hat{a}_+\hat{a}_-$  はどうでしょう。計算してみると、

$$\hat{a}_+\hat{a}_- = \frac{1}{2\hbar m\omega} [\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2 + im\omega(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})] = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{1}{2} \quad (4.212)$$

となります。おつりの項の符号がかわってますよね。したがって、

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = \hat{a}_-\hat{a}_+ - \hat{a}_+\hat{a}_- = 1 \quad (4.213)$$

というのがわかります。 $\hat{a}_+\hat{a}_-$  を使うとハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2} \right) \quad (4.214)$$

ともかけますね。シュレーディンガー方程式は

$$\hbar\omega \left( \hat{a}_\pm\hat{a}_\mp \pm \frac{1}{2} \right) \psi = E\psi \quad (4.215)$$

とちょっとおもしろそうな形になりました。

さて、ここからが本番です。まず、あるエネルギー  $E$  について、

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (4.216)$$

である  $\psi$  を見つけたとしましょう。そのとき、 $\hat{a}_+\psi$  もじつは、エネルギー  $(E + \hbar\omega)$  に対応するシュレーディンガー方程式の解なんです。証明してみましょう。

$$\begin{aligned} \hat{H}(\hat{a}_+\psi) &= \hbar\omega \left( \hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2} \right) (\hat{a}_+\psi) \\ &= \hbar\omega \left( \hat{a}_+\hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2}\hat{a}_+ \right) \psi \\ &= \hbar\omega\hat{a}_+ \left( \hat{a}_-\hat{a}_+ + \frac{1}{2} \right) \psi \\ &= \hat{a}_+ \left[ \hbar\omega \left( \hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega \right] \psi \\ &= \hat{a}_+(\hat{H} + \hbar\omega)\psi \\ &= \hat{a}_+(E + \hbar\omega)\psi \\ &= (E + \hbar\omega)(\hat{a}_+\psi) \end{aligned} \quad (4.217)$$

あ、ほんとだ。

同様に、 $\hat{a}_-\psi$  がエネルギー  $(E - \hbar\omega)$  に対応する解であることもわかります。やってみましょう。

$$\begin{aligned}
 \hat{H}(\hat{a}_-\psi) &= \hbar\omega \left( \hat{a}_-\hat{a}_+ - \frac{1}{2} \right) \hat{a}_-\psi \\
 &= \hbar\omega \hat{a}_- \left( \hat{a}_+\hat{a}_- - \frac{1}{2} \right) \psi \\
 &= \hat{a}_-(\hat{H} - \hbar\omega)\psi \\
 &= \hat{a}_-(E - \hbar\omega)\psi \\
 &= (E - \hbar\omega)(\hat{a}_-\psi)
 \end{aligned} \tag{4.218}$$

たしかに。こりゃべんりですね。一つ解をみつければ、自動的にそれより  $\hbar\omega$  だけ大きいエネルギーの解や小さいエネルギーの解が見つっちゃうわけです。 $\hat{a}_+$  をかければかけるほど大きいエネルギーの解はどんどん見つかるし、 $\hat{a}_-$  をかければ、どんどん小さいエネルギーの解が見つかりますね。この、 $\hat{a}_\pm$  には名前がついていて、「生成・消滅演算子」といいます。 $\hat{a}_+$  がエネルギー  $\hbar\omega$  の振動量子を生成するので「生成演算子」、 $\hat{a}_-$  が「消滅演算子」です。

ここで、ちょっと変なことに気づきます。 $\hat{a}_-$  をどんどんかけていって、解がどんどん作れるのはいいんですけど、ずっとやってたら、そのうち、エネルギーが負になっちゃいますよね。で、そのむかし、やりましたよね。 $E$  はかならず  $V_{\min}$  よりもおおきいって。つまり、そんな解は存在しないはずなんです。どうしてくれましょう？ 簡単です。 $\hat{a}_-$  をかけていったら、そのうち、

$$\hat{a}_-\psi_0 = 0 \tag{4.219}$$

となるような解にたどり着くのです。さて、どんな関数でしょう？

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left( \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \psi_0(x) = 0 \tag{4.220}$$

ですよね。つまり、

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x\psi_0, \tag{4.221}$$

$$\Rightarrow \int \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} \int x dx \tag{4.222}$$

$$\Rightarrow \ln \psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + \text{const.} \quad (4.223)$$

$$\Rightarrow \psi_0 = A \exp \left[ -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 \right] \quad (4.224)$$

ガウス関数です！ガウス積分公式で規格化できちゃいます。やっちゃいましょう。

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\omega x^2/\hbar} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \quad (4.225)$$

よって、

$$\psi_0 = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/(2\hbar)} \quad (4.226)$$

となりました。これが、きちんと  $\hat{H}\psi_0 = E_0\psi_0$  の解になっているかどうかは簡単に確かめられます。

$$\hat{H}\psi_0 = \hbar\omega \left( \hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2} \right) \psi_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega\psi_0 \quad (4.227)$$

たしかに、

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (4.228)$$

で、解になってます。これが、調和振動子の基底状態です。 $\hbar\omega$  の組み合わせできちんとエネルギーの次元になってますね。

この基底状態に  $\hat{a}_+$  をかけることによって、エネルギーの高い励起状態をつくることができます。

$$\psi_n(x) = A_n(\hat{a}_+)^n\psi_0(x), \quad (4.229)$$

エネルギーは

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad (4.230)$$

です。こうやって、「すべて」の励起状態をつくることができます。もし、こうやって作れないのがあったとすると、それに  $\hat{a}_-$  をかけつづけてどっかで消えないといけないという議論になります。そうすると、結局、また上でもとめた基底状態にたどり着きます。というわけで、上

の  $\psi_n$  ですべての解を尽くしているのです。またエネルギーがとびとびになりました。古典的には、振幅を連続的に変えて、エネルギーは連続に変えることができますけど、量子論的には、定常状態のエネルギーはとびとびになりました。つまり、観測されるエネルギーはとびとびです。

せっかくですので、最初の励起状態  $\psi_1(x)$  を求めてみましょう。

$$\begin{aligned}
 \psi_1(x) &= A_1 \hat{a}_+ \psi_0 \\
 &= \frac{A_1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left( -\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/(2\hbar)} \\
 &= \frac{A_1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} (m\omega x + m\omega x) e^{-m\omega x^2/(2\hbar)} \\
 &= A_1 \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-m\omega x^2/(2\hbar)} \tag{4.231}
 \end{aligned}$$

です。規格化しましょう。式 (3.95) を使います。

$$\begin{aligned}
 1 &= |A_1|^2 \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{2m\omega}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-m\omega x^2/(\hbar)} dx \\
 &= |A_1|^2 \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{2m\omega}{\hbar} \sqrt{\frac{2\pi}{(2m\omega/\hbar)^3}} \\
 &= |A_1|^2 \tag{4.232}
 \end{aligned}$$

おっと、 $A_1 = 1$  ですね。まあ、簡単。

ちなみに、一生懸命積分しなくても規格化はできちゃいます。 $\hat{a}_+ \psi_n$  っていうのは、エネルギーの一つ上がった状態なので、 $\psi_{n+1}$  に比例します。

$$\hat{a}_+ \psi_n = c_n \psi_{n+1}, \quad \hat{a}_- \psi_n = d_n \psi_{n-1} \tag{4.233}$$

です。 $c_n$  と  $d_n$  はなんか数です。

つぎに、こういうことに気づきます。関数  $f$  と  $g$  があるとき、

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(\hat{a}_\pm g) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_\mp f)^* g dx \tag{4.234}$$

ただし、積分が存在するとします。これは、かんたんで、

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{\infty} f^*(\hat{a}_\pm g) dx &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} f^* \left( \mp \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) g dx \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \left( \pm \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) f^* \right] g dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_\mp f)^* g dx \tag{4.235}
 \end{aligned}$$

ですね。単なる部分積分です。表面項はゼロです。そうでないと積分できませんので。これを使うと、

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_{\pm}\psi_n)^*(\hat{a}_{\pm}\psi_n)dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_{\mp}\hat{a}_{\pm}\psi_n)^*\psi_ndx \quad (4.236)$$

となります。

さらに、

$$\begin{aligned} \hat{a}_+\hat{a}_-\psi_n &= \left(\frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{1}{2}\right)\psi_n \\ &= \left(\frac{1}{\hbar\omega}E_n - \frac{1}{2}\right)\psi_n \\ &= \left[\frac{1}{\hbar\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{1}{2}\right]\psi_n \\ &= n\psi_n \end{aligned} \quad (4.237)$$

それから、

$$\begin{aligned} \hat{a}_-\hat{a}_+\psi_n &= (\hat{a}_+\hat{a}_- + 1)\psi_n \\ &= (n + 1)\psi_n \end{aligned} \quad (4.238)$$

です。とくに、 $\hat{a}_+\hat{a}_-$  という演算子は  $\psi_n$  に作用すると  $n$  に置き換わるのが面白いところです。この性質から、 $\hat{a}_+\hat{a}_-$  を「個数演算子」とよびます。

結局、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_+\psi_n)^*(\hat{a}_+\psi_n)dx &= \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_-\hat{a}_+\psi_n)^*\psi_ndx \\ &= (n + 1) \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx \\ &= n + 1 \end{aligned} \quad (4.239)$$

これは、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_+\psi_n)^*(\hat{a}_+\psi_n)dx &= |c_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n+1}|^2 dx \\ &= |c_n|^2 \end{aligned} \quad (4.240)$$

でもあるので、

$$c_n = \sqrt{n + 1} \quad (4.241)$$

ととればよいことになります。同様に、

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_- \psi_n)^* (\hat{a}_- \psi_n) dx = |d_n|^2 = n \quad (4.242)$$

ですので、

$$d_n = \sqrt{n} \quad (4.243)$$

ととれば、規格化 OK です。つまり、

$$\hat{a}_+ \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}, \quad \hat{a}_- \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1} \quad (4.244)$$

です。したがって、

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}_+ \psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{\sqrt{n-1}} (\hat{a}_+)^2 \psi_{n-2} = \cdots = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}_+)^n \psi_0 \quad (4.245)$$

です。つまり、式 (4.229) の規格化因子  $A_n$  は

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \quad (4.246)$$

とすればよろしいわけです。  $A_1 = 1$  っていうのが正しいのがわかりますね。

さて、井戸型するとき、 $\psi_n$  は直交していました。調和振動子の場合はどうでしょう？じつは、この場合も直交してます。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* (\hat{a}_+ \hat{a}_-) \psi_n dx &= n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_- \psi_m)^* (\hat{a}_- \psi_n) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{a}_+ \hat{a}_- \psi_m)^* \psi_n dx \\ &= m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx \end{aligned} \quad (4.247)$$

つまり、 $m = n$  でないかぎり、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx = 0 \quad (4.248)$$

でなければなりません。したがって、例のごとく、初期状態  $\Psi(x, 0)$  を  $\psi_n$  で展開して、係数  $c_n$  を決定してやれば、波動関数がもとまります。また、 $|c_n|^2$  はエネルギーを測定して、 $E_n$  となる確率となります。

### 4.5.3 ポテンシャルエネルギーの期待値は全エネルギーの半分なのだ

命題は、古典論では長時間平均について成り立つものですね。量子論では定常状態の期待値に対して成り立ちます。

それでは、調和振動子の  $n$  番目の励起状態のポテンシャルエネルギーの期待値を計算してみましょう。

$$\begin{aligned}\langle V \rangle &= \left\langle \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} m \omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* x^2 \psi_n dx.\end{aligned}\quad (4.249)$$

ここでも、代数的な方法が役に立ちます。まず、 $\hat{x}$  と  $\hat{p}$  を  $\hat{a}_-$  と  $\hat{a}_+$  で表してみましょう。 $\hat{a}_+$  と  $\hat{a}_-$  の定義より、

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}_+ + \hat{a}_-), \quad (4.250)$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a}_+ - \hat{a}_-), \quad (4.251)$$

ですね。ってことは、

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} [(\hat{a}_+)^2 + (\hat{a}_+\hat{a}_-) + (\hat{a}_-\hat{a}_+) + (\hat{a}_-)^2] \quad (4.252)$$

です。よって、

$$\langle V \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} \int \psi_n^* [(\hat{a}_+)^2 + (\hat{a}_+\hat{a}_-) + (\hat{a}_-\hat{a}_+) + (\hat{a}_-)^2] \psi_n dx \quad (4.253)$$

なんですが、 $\psi_n$  の直交性から

$$\langle V \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} \int \psi_n^* [(\hat{a}_+\hat{a}_-) + (\hat{a}_-\hat{a}_+)] \psi_n dx \quad (4.254)$$

となりますね。さらに、式 (4.237) と (4.238) を使えば、

$$\begin{aligned}\langle V \rangle &= \frac{\hbar\omega}{4} \int \psi_n^* (n + n + 1) \psi_n dx \\ &= \frac{\hbar\omega}{4} (n + n + 1) \int \psi_n^* \psi_n dx \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left( n + \frac{1}{2} \right)\end{aligned}\quad (4.255)$$

です。超簡単ですね。ところで、全エネルギーは

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (4.256)$$

でしたので、ポテンシャルエネルギーの期待値はちょうどその半分ってことになります。つまり、調和振動子はエネルギーをポテンシャルエネルギーと運動エネルギーで半分ずつにわけているんですね。(期待値の話ですよ。)

本当に？と思うかもしれませんが、運動エネルギーの期待値も計算してみましょう。

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2m} \int \psi_n^* \hat{p}^2 \psi_n dx \\ &= -\frac{1}{2m} \frac{\hbar m \omega}{2} \int \psi_n^* [(\hat{a}_+)^2 - (\hat{a}_+ \hat{a}_-) - (\hat{a}_- \hat{a}_+) + (\hat{a}_-)^2] \psi_n dx \\ &= -\frac{\hbar \omega}{4} \int \psi_n^* (-n - n - 1) \psi_n dx \\ &= \frac{\hbar \omega}{2} \left(n + \frac{1}{2}\right) \end{aligned} \quad (4.257)$$

となりました。たしかに、 $\langle T \rangle = \langle V \rangle = E_n/2$  となってますね。

ついでに、

$$\langle x \rangle = 0, \quad (4.258)$$

$$\langle p \rangle = 0, \quad (4.259)$$

は自明ですね。それから、上の計算から、

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\langle V \rangle}{(1/2)m\omega^2} = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (4.260)$$

$$\langle p^2 \rangle = 2m\langle T \rangle = \hbar m \omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (4.261)$$

です。したがって、不確定性は

$$\sigma_x \sigma_p = \hbar \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (4.262)$$



となりました。  $n = 0$  で不確定性が一番小さく、不確定性原理のいうところの最小値をとります。そうでしたね。このガウス型のやつは前にやったことありますね。井戸型のとときと同様、不確定性はエネルギーが高い状態ほど大きくなってます。

ところで、式 (4.258) と式 (4.259) をみて思いませんでしたか？ あれ？ 調和振動子なのに、動いてないじゃんって。そりゃそうです。定常状態ですから。動かしたかったら、いくつかのエネルギーの解を重ね合わせればよいのです。ちょっとやってみましょう。

[Griffiths, Problem 2.13]

初期状態として、

$$\Psi(x, 0) = A [3\psi_0(x) + 4\psi_1(x)] \quad (4.263)$$

をとってみましょう。まずは、規格化します。

$$\begin{aligned} 1 &= |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |3\psi_0 + 4\psi_1|^2 dx \\ &= |A|^2 (9 + 16) \\ &= 25|A|^2 \end{aligned} \quad (4.264)$$

ですので、

$$A = \frac{1}{5} \quad (4.265)$$

ととりましょう。

つぎに時間発展は

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{5} \left[ 3\psi_0 e^{-iE_0 t/\hbar} + 4\psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} \right] \quad (4.266)$$

で、

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega, \quad E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega \quad (4.267)$$

です。つまり、エネルギーを計測すると、 $(3/5)^2$  の確率で  $E_0$  を、 $(4/5)^2$  の確率で  $E_1$  となります。

確率密度は

$$\begin{aligned}
 |\Psi(x, t)|^2 &= \frac{1}{25} [9\psi_0^2 + 16\psi_1^2 + 24\psi_0\psi_1 \cos((E_1 - E_0)t/\hbar)] \\
 &= \frac{1}{25} [9\psi_0^2 + 16\psi_1^2 + 24\psi_0\psi_1 \cos(\omega t)]
 \end{aligned} \tag{4.268}$$

です。

この波動関数を使って、期待値を求めると、

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle &= \frac{1}{25} \int_{-\infty}^{\infty} x [9\psi_0^2 + 16\psi_1^2 + 24\psi_0\psi_1 \cos(\omega t)] dx \\
 &= \frac{24}{25} \cos(\omega t) \int_{-\infty}^{\infty} x \psi_0 \psi_1 dx \\
 &= \frac{24}{25} \cos(\omega t) \int_{-\infty}^{\infty} \left( \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}_+ + \hat{a}_-) \right) \psi_0 \psi_1 dx \\
 &= \frac{24}{25} \cos(\omega t) \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1 \psi_0 dx \\
 &= \frac{24}{25} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cos(\omega t)
 \end{aligned} \tag{4.269}$$

確かに、振動してますね。ついでに、

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle &= \frac{1}{25} \int_{-\infty}^{\infty} [(3\psi_0 e^{iE_0 t/\hbar} + 4\psi_1 e^{iE_1 t/\hbar}) \hat{p} (3\psi_0 e^{-iE_0 t/\hbar} + 4\psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar})] dx \\
 &= \frac{12}{25} \int_{-\infty}^{\infty} [\psi_0 \hat{p} \psi_1 e^{-i(E_1 - E_0)t/\hbar} + \psi_1 \hat{p} \psi_0 e^{i(E_1 - E_0)t/\hbar}] dx \\
 &= \frac{12}{25} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \psi_0 \left( i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (\hat{a}_+ - \hat{a}_-) \right) \psi_1 e^{-i(E_1 - E_0)t/\hbar} \right. \\
 &\quad \left. + \psi_1 \left( i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (\hat{a}_+ - \hat{a}_-) \right) \psi_0 e^{i(E_1 - E_0)t/\hbar} \right] dx \\
 &= \frac{12}{25} i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} [\psi_0 (\sqrt{2}\psi_2 - \psi_0) e^{-i(E_1 - E_0)t/\hbar} + \psi_1 \psi_1 e^{i(E_1 - E_0)t/\hbar}] dx \\
 &= -\frac{24}{25} \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \sin(\omega t)
 \end{aligned} \tag{4.270}$$

で、 $d\langle x \rangle/dt = \langle p \rangle/m$  を満たしてます。それから、 $dV/dx = -m\omega^2 x$  より、 $d\langle p \rangle/dt = -\langle dV/dx \rangle$  を満たしてることもわかります。

#### 4.5.4 解析的な方法

さてさて、代数的な方法は、便利でしたね。ここでは、解析的にがんばって解く方法を解説します。解析的な方法は、調和振動子に限らず、一般の問題に応用できますから、ここでしっかりやり方を学んでおきましょう。残念ながら、代数的方法とちがってちょっとごちゃごちゃしてます。頑張っついてきましょう。

解きたい方程式はシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi \quad (4.271)$$

ですね。新しい変数を導入します。

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (4.272)$$

次元は、

$$\left[ \sqrt{\frac{MT^{-1}}{ML^2T^{-1}}} \cdot L \right] = [1] \quad (4.273)$$

なるほど。無次元ですな。この変数を使うと、シュレーディンガー方程式は綺麗になります。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d\xi}{dx} \frac{d}{d\xi} \left( \frac{d\xi}{dx} \frac{d\psi}{d\xi} \right) + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{x^2}{\xi^2} \xi^2 = E\psi \quad (4.274)$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d}{d\xi} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d\psi}{d\xi} \right) + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar}{m\omega} \xi^2 = E\psi \quad (4.275)$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - K)\psi \quad (4.276)$$

ただし、

$$K \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (4.277)$$

です。Kも無次元量ですね。式(4.276)を解けばよいわけです。しかも、解を与えるようなKを求めれば、エネルギーもわかります。

まずは、 $\xi$  が大きい (つまり、 $x$  が大きい) ところでの振る舞いを考えましょう。方程式は

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \sim \xi^2\psi \quad (4.278)$$

ですね。この近似解は、

$$\psi(\xi) \sim Ae^{-\xi^2/2} + Be^{\xi^2/2} \quad (4.279)$$

です。どれどれ、微分してみましょう。

$$\frac{d\psi}{d\xi} \sim -A\xi e^{-\xi^2/2} + B\xi e^{\xi^2/2} \quad (4.280)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi}{d\xi^2} &\sim -A(1 - \xi^2)e^{-\xi^2/2} + B(1 + \xi^2)e^{\xi^2/2} \\ &\sim A\xi^2 e^{-\xi^2/2} + B\xi^2 e^{\xi^2/2} \\ &= \xi^2\psi \end{aligned} \quad (4.281)$$

たしかに。

で、係数が  $B$  の項は、 $\xi$  が大きいところでゼロにならないので、明らかに規格化できません。したがって、物理的に許される解は

$$\psi(\xi) \rightarrow (\dots)e^{-\xi^2/2}, \quad \text{at large } \xi, \quad (4.282)$$

でなければなりません。ってなわけで、新しい関数  $h(\xi)$  を

$$\psi(\xi) = h(\xi)e^{-\xi^2/2} \quad (4.283)$$

と定義して、 $e^{-\xi^2/2}$  部分を分離しちゃいましょう。そうすると、解くべき方程式は

$$\frac{d^2(h(\xi)e^{-\xi^2/2})}{d\xi^2} = (\xi^2 - K)h(\xi)e^{-\xi^2/2} \quad (4.284)$$

$$\Rightarrow \frac{d}{d\xi} (h'e^{-\xi^2/2} - \xi h e^{-\xi^2/2}) = (\xi^2 - K)h e^{-\xi^2/2} \quad (4.285)$$

$$\Rightarrow (h''e^{-\xi^2/2} - \xi h'e^{-\xi^2/2} - h e^{-\xi^2/2} - \xi h'e^{-\xi^2/2} + \xi^2 h e^{-\xi^2/2}) = (\xi^2 - K)h e^{-\xi^2/2} \quad (4.286)$$

$$\Rightarrow (h'' - 2\xi h' + (\xi^2 - 1)h) e^{-\xi^2/2} = (\xi^2 - K)h e^{-\xi^2/2} \quad (4.287)$$

$$\Rightarrow h'' - 2\xi h' + (K - 1)h = 0 \quad (4.288)$$

です。ちなみに、まだ何もしてません。変数を変えたり、関数を定義しなおしたりしただけです。まだ物理的に許されていない解だって除外されてません。

次なるステップは、

$$h(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j \quad (4.289)$$

と級数展開して、上の方程式を解いてみます。この級数を微分してみると、

$$h' = a_1 + 2a_2\xi + 3a_3\xi^2 + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} j a_j \xi^{j-1} \quad (4.290)$$

もう一回微分すると、

$$\begin{aligned} h'' &= 2a_2 + 3 \cdot 2a_3\xi + 3 \cdot 4a_4\xi^2 + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1)a_j \xi^{j-2} \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)(j+2)a_{j+2}\xi^j \end{aligned} \quad (4.291)$$

ですね。したがって、解くべき方程式は

$$\sum_{j=0}^{\infty} [(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j] \xi^j = 0 \quad (4.292)$$

です。この方程式、 $\xi$ がどんな値のときでも成り立たなければなりません。したがって、展開係数すべてがゼロでないなりません。よって、

$$(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j = 0, \quad (4.293)$$

ですので、

$$a_{j+2} = \frac{2j+1-K}{(j+1)(j+2)} a_j \quad (4.294)$$

という漸化式をゲットしました。

たとえば、適当な  $a_0$  をインプットにすると、

$$a_2 = \frac{1-K}{2}a_0, \quad (4.295)$$

$$a_4 = \frac{5-K}{12}a_2, \quad \dots \quad (4.296)$$

というようにつぎつぎに偶数次の係数が決まっていきます。また、 $a_1$  をインプットにすると、

$$a_3 = \frac{3-K}{6}a_1, \quad (4.297)$$

$$a_5 = \frac{7-K}{20}a_3, \quad \dots \quad (4.298)$$

と奇数次の係数が次々に決定されます。つまり、 $a_0$  と  $a_1$  を決めると全部きまるようになってきます。2階微分方程式の常ですな。未定係数が2つあります。この様に求まった解を

$$h(\xi) = h_{\text{even}}(\xi) + h_{\text{odd}}(\xi) \quad (4.299)$$

と書きましょう。ただし、

$$h_{\text{even}}(\xi) \equiv a_0 + a_2\xi^2 + a_4\xi^4 + \dots \quad (4.300)$$

$$h_{\text{odd}}(\xi) \equiv a_1\xi + a_3\xi^3 + a_5\xi^5 + \dots \quad (4.301)$$

です。

でも、作業を無限に繰り返すんでは、まだ解を求めたとは言えないですよ。全然どんな関数だかわからないし。でも、ここで、物理的な要請である、規格化可能な解となえると、状況は一変します。 $j$  が大きいところをみてみますと、漸化式 (4.294) をみるに、

$$a_{j+2} \sim \frac{2}{j}a_j \quad (4.302)$$

となります。この漸化式は  $\xi^p e^{\xi^2}$  と同じものです。(ただし、 $p$  は任意。)

$$\xi^p e^{\xi^2} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \xi^{2j+p} \quad (4.303)$$

この係数の漸化式は、

$$a_{2j+p} = \frac{(j-1)!}{j!} a_{2j+p-2} = \frac{1}{j} a_{2j+p-2} \quad (4.304)$$

これは、上のやつと同じってことがわかるでしょうか？ 納得できないときは適当な数をいれてみましょう。たとえば、 $j = 1000, p = 8$  とかいれると、

$$a_{2008} = \frac{1}{1000} a_{2006} \sim \frac{2}{2006} a_{2006} \quad (4.305)$$

ってな感じです。  $h(\xi)$  の  $\xi$  の大きいところの振る舞いは  $j$  が大きいところに支配されますので、結局、  $e^{\xi^2}$  で大きくなっていくことがわかります。

もともとの  $\psi$  でいうと、  $\xi$  が大きいところでは、  $e^{\xi^2/2}$  と振る舞うことがわかります。これって、最初に捨てようとした項（係数  $B$  のやつ）ですよ。つまり、どういうことでしょうか。  $\xi$  が大きいところでよい振る舞いをする解は「級数展開が途中で途切れるべし」ということを言っているのです。どこかに  $j$  の最大値  $n$  があって、漸化式が

$$a_{n+2} = 0 \quad (4.306)$$

となるべしということを言っています。つまり、

$$K = 2n + 1, \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (4.307)$$

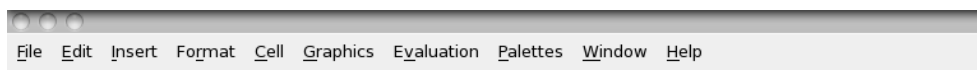
ですね。さらに、数列は偶数次と奇数次の両方ありますが、この式で切ることができるのは片方だけです。したがって、どちらか片方は最初からゼロでなければなりません。つまり、関数  $h$  は  $h_{\text{even}}$  か  $h_{\text{odd}}$  のどちらかでなければなりません。

上の式は定義式 (4.277) を用いると、エネルギーの満たすべき式

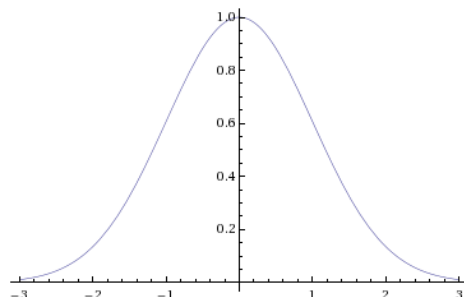
$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.308)$$

です。代数的な方法でやったのと同じ答えでした！

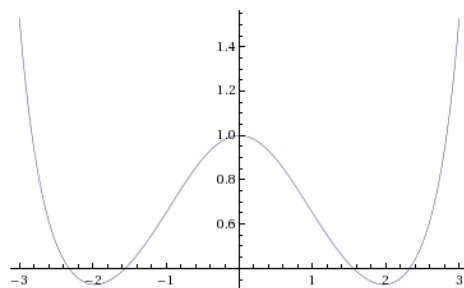
規格化可能ってところから、とりうるエネルギーの値がきまりましたね。ちょっと Mathematica であそんでみました。



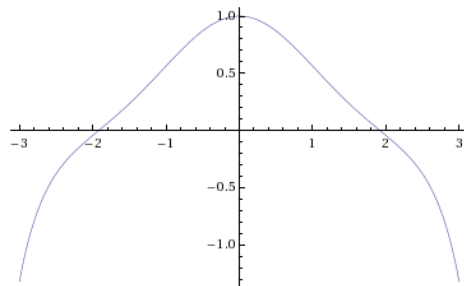
```
k = 1,  
NDSolve[{D[D[psi[x], x], x] == (x^2 - k) psi[x], psi[0] == 1, psi'[0] == 0}, psi, {x, -3, 3}]  
Plot[Evaluate[psi[x] /. %], {x, -3, 3}, PlotRange -> All]  
{psi -> InterpolatingFunction[{{-3., 3.}}, <>]}
```



```
k = 1 - 0.1,  
NDSolve[{D[D[psi[x], x], x] == (x^2 - k) psi[x], psi[0] == 1, psi'[0] == 0}, psi, {x, -3, 3}]  
Plot[Evaluate[psi[x] /. %], {x, -3, 3}, PlotRange -> All]
```



```
k = 1 + 0.1,  
NDSolve[{D[D[psi[x], x], x] == (x^2 - k) psi[x], psi[0] == 1, psi'[0] == 0}, psi, {x, -3, 3}]  
Plot[Evaluate[psi[x] /. %], {x, -3, 3}, PlotRange -> All]
```



数値的に微分方程式をとかせてますが、 $K = 1$ だとガウス関数がきちんとでますが、ちょっとずらしたやつ  $K = 0.9$  と  $K = 1.1$  では、違う方向に発散しますね。

さて、 $K = 2n + 1$  ならば、漸化式は

$$a_{j+2} = \frac{-2(n-j)}{(j+1)(j+2)} a_j \quad (4.309)$$



です。例えば、 $n = 0$  のときは、 $a_0 \neq 0$  で、 $a_2 = 0, a_4 = 0, \dots$  で、 $a_0 \neq 0$  なら  $a_1 = 0$  ととらなければならないので、結局、

$$h_0(\xi) = a_0 \quad (4.310)$$

定数です。したがって、

$$\psi_0(\xi) = a_0 e^{-\xi^2/2} = a_0 e^{-m\omega x^2/(2\hbar)} \quad (4.311)$$

です。ガウス関数でした。 $n = 1$  はどうでしょう。今度は  $a_1 \neq 0$  ですね。 $a_0 = a_2 = \dots = 0$  で、 $a_3 = a_5 = \dots = 0$  ですので、

$$h_1(\xi) = a_1 \xi \quad (4.312)$$

したがって、

$$\psi_1(\xi) = a_1 \xi e^{-\xi^2/2} \quad (4.313)$$

です。これまた、再現できましたね。調子によって、次もいきましょう。 $n = 2$  のときは、 $a_0 \neq 0, a_4 = -2a_0$  ですよ。したがって、

$$h_2(\xi) = a_0(1 - 2\xi^2) \quad (4.314)$$

です。したがって、

$$\psi_2(\xi) = a_0(1 - 2\xi^2)e^{-\xi^2/2} \quad (4.315)$$

となりました。(宿題：代数的な方法で、 $\psi_2$  をもとめてこれと比べてみよう。)

こうやって求められる関数  $h_n(\xi)$  は一般に、 $n$  次の多項式ですね。これらには名前がついていて、エルミート多項式といいます。最大次数の係数が  $2^n$  となるように  $a_0$  や  $a_1$  を決めると、

$$H_0 = 1, \quad (4.316)$$

$$H_1 = 2\xi, \quad (4.317)$$

$$H_2 = 4\xi^2 - 2, \quad (4.318)$$

$$H_3 = 8\xi^3 - 12\xi, \quad (4.319)$$

$$H_4 = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12, \quad (4.320)$$

$$H_5 = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi, \quad (4.321)$$

などなどとなっています。これをつかうと、規格化された  $\psi_n$  は

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad (4.322)$$

と書くことができます。これは、次の節でやります。

さて、この  $\psi_n$  たち、よくみると、結構変です。たとえば、無限遠でゼロになるのはいいんですけど、逆に言うと、無限遠でしかゼロにならないんです。つまり、ポテンシャルエネルギーがずっとおおきな領域にまで、粒子が存在している確率がゼロでないわけです。

古典論では、もちろん、粒子はあるところまでいったら引きかえしてきますよね。量子論では、すごい遠くのほうまでいってる確率がゼロでないんですね。それから、たとえば、 $n$  が奇数の解は中心にいる確率がゼロです。真ん中には絶対いないんですね。へんですねえ。

でも、 $n$  をすごく大きくしていくと、 $\psi_n$  はとても速く振動する関数になります。平均すると古典論の動きに似てきます。

#### 4.5.5 エルミート多項式の性質

じつは、エルミート多項式は母関数なるものがあるって、

エルミート多項式の母関数

$$e^{-z^2+2z\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H_n(\xi) \quad (4.323)$$

と書き表すことができます。右辺を  $z$  で  $n$  回微分して  $z=0$  とおくと、 $H_n(\xi)$  ですね。っていうことは左辺もそうです。こういうのを母関数とよびます。ここでは、これをエルミート多項式の定義としましょう。

で、実際に  $z$  で  $n$  回微分して  $z = 0$  とおくってのをやってみましょう。

$$\begin{aligned}
 H_n(\xi) &= \left. \frac{\partial^n}{\partial z^n} e^{-z^2+2z\xi} \right|_{z=0} \\
 &= \left. \frac{\partial^n}{\partial z^n} e^{\xi^2} e^{-(z-\xi)^2} \right|_{z=0} \\
 &= e^{\xi^2} \left. \frac{\partial^n}{\partial z^n} e^{-(z-\xi)^2} \right|_{z=0} \quad (\text{微分されているのは } z - \xi \text{ の関数なので、}) \\
 &= e^{\xi^2} (-1)^n \left. \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-(z-\xi)^2} \right|_{z=0} \quad (\text{こんなことができちゃいます。}) \\
 &= (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-\xi^2} \tag{4.324}
 \end{aligned}$$

こんな風になりました。なるほどねえ。

エルミート多項式の公式 その 1

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-\xi^2} \tag{4.325}$$

つぎは、式 (4.323) を  $z$  で 1 回だけ微分してみましょう。

$$(-2z + 2\xi)e^{-z^2+2z\xi} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^{n-1}}{(n-1)!} H_n(\xi) \tag{4.326}$$

$$\Rightarrow -2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{n+1}}{n!} H_n(\xi) + 2\xi \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H_n(\xi) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^{n-1}}{(n-1)!} H_n(\xi) \tag{4.327}$$

$$\Rightarrow -2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{(n-1)!} H_{n-1}(\xi) + 2\xi \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H_n(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H_{n+1}(\xi) \tag{4.328}$$

$$\Rightarrow -2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} n H_{n-1}(\xi) + 2\xi \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H_n(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H_{n+1}(\xi) \tag{4.329}$$

$z$  の各次の係数をあわせると、

エルミート多項式の公式 その2

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi) \quad (4.330)$$

なんていう漸化式がでてきます。

こんどは、式(4.323)を $\xi$ で微分してみましょう。

$$2ze^{-z^2+2z\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \frac{d}{d\xi} H_n(\xi) \quad (4.331)$$

$$\Rightarrow 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^{n+1}}{n!} H_n(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \frac{d}{d\xi} H_n(\xi) \quad (4.332)$$

$$\Rightarrow 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{(n-1)!} H_{n-1}(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \frac{d}{d\xi} H_n(\xi) \quad (4.333)$$

$$\Rightarrow 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} nH_{n-1}(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \frac{d}{d\xi} H_n(\xi) \quad (4.334)$$

これまた $z$ の各次の係数をあわせると、

エルミート多項式の公式 その3

$$\frac{dH_n(\xi)}{d\xi} = 2nH_{n-1}(\xi) \quad (4.335)$$

なんてのもでてきます。

これをつかうと、式(4.330)は

$$H_{n+1}(\xi) = \frac{2\xi}{2(n+1)} \frac{dH_{n+1}(\xi)}{d\xi} - \frac{2n}{4n(n+1)} \frac{d^2H_{n+1}(\xi)}{d\xi^2} \quad (4.336)$$

とできます。変形して、

$$2(n+1)H_{n+1}(\xi) = 2\xi \frac{dH_{n+1}(\xi)}{d\xi} - \frac{d^2H_{n+1}(\xi)}{d\xi^2} \quad (4.337)$$

エルミート多項式の満たす微分方程式

$$\Rightarrow \frac{d^2 H_n(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n(\xi)}{d\xi} + 2nH_n(\xi) = 0 \quad (4.338)$$

という微分方程式をみたすことがわかります。(  $n = 0$  でも OK です。 ) これはまさに、式 (4.288) に式 (4.307) を代入した微分方程式ですね。

最後に直交性を見てみましょう。これも母関数をつかうと簡単です。いま、

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} e^{-a^2+2a\xi} e^{-b^2+2b\xi} d\xi \quad (4.339)$$

ってのを考えましょう。

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\xi-a-b)^2+2ab} d\xi \\ &= e^{2ab} \sqrt{\pi} \end{aligned} \quad (4.340)$$

ですね。ガウス積分公式使いました。指数関数を展開して、

$$I = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n a^n b^n}{n!} \quad (4.341)$$

です。で、最初の表式をエルミート多項式を使ってかくと、

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{a^n b^m}{n!m!} H_n(\xi) H_m(\xi) d\xi \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{a^n b^m}{n!m!} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) d\xi \end{aligned} \quad (4.342)$$

ですね。  $a$  と  $b$  の各次数の係数を比較すると、

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) d\xi = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nm} \quad (4.343)$$

ということがわかります。確かに  $\psi_n (= e^{-\xi^2/2} H_n(\xi))$  たちは直交してますね。規格化もこれをつかえば、式 (4.322) がでます。

#### 4.5.6 調和振動子まとめ

$$\hat{H}\psi = E\psi : \quad \text{時間によらないシュレーディンガー方程式} \quad (4.344)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 : \quad \text{調和振動子のハミルトニアン} \quad (4.345)$$

$$\hat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp i\hat{p} + m\omega\hat{x}) : \quad \text{生成消滅演算子} \quad (4.346)$$

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = 1 : \quad \text{生成消滅演算子の交換関係} \quad (4.347)$$

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar : \quad \text{正準交換関係} \quad (4.348)$$

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2} \right) : \quad \text{調和振動子のハミルトニアン} \\ \text{(生成消滅演算子をつかったバージョン)} \quad (4.349)$$

$$\hat{a}_-\psi_0(x) = 0 : \quad \text{基底状態の } \psi \text{ の満たすべき式。この解はガウス関数。} \quad (4.350)$$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_+)^n\psi_0(x) : \quad \text{第 } n \text{ 励起状態の } \psi \quad (4.351)$$

$$\langle V \rangle = \langle T \rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \left( n + \frac{1}{2} \right) : \quad \text{ビリアル定理} \quad (4.352)$$

$$\psi_n(x) = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \\ \left( \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) : \quad \text{エルミート多項式を使った表式} \quad (4.353)$$

## 4.6 自由粒子

### 4.6.1 粒子は波、っていうか波の集まり

つぎに考えるのが、自由粒子です。つまり、 $V(x) = 0$ 。古典論ではもっとも簡単な、等速直線運動するやつです。量子論では、ちょっと面倒になります。まず、時間に依存しないシュレディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (4.354)$$

ですね。つまり、

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi, \quad \text{where } k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (4.355)$$

です。 $k$  の次元は  $[L^{-1}]$  です。解は簡単で、

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (4.356)$$

ですね。波動関数は、上の式を使うと、

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \\ &= A \exp\left[ik\left(x - \frac{\hbar k}{2m}t\right)\right] + B \exp\left[-ik\left(x + \frac{\hbar k}{2m}t\right)\right] \end{aligned} \quad (4.357)$$

と書き表すことができますよね。これは、まさに、波の式ですね。第一項と第二項は  $k$  の前の符号を変えただけなので、 $k$  が負の値も許すとして

$$\Psi_k(x, t) = A \exp\left[i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)\right] \quad (4.358)$$

としても OK ですね。 $\Psi_k$  をいろいろ重ね合わせれば、一般の解となります。これは、まさに波の式ですよね。ちなみに、

$$\begin{aligned} \Psi_k(x, t) &= A \exp\left[i\left\{k\left(x + \frac{\hbar k}{2m}\Delta t\right) - \frac{\hbar k^2}{2m}(t + \Delta t)\right\}\right] \\ &= \Psi_k\left(x + \frac{\hbar k}{2m}\Delta t, t + \Delta t\right) \end{aligned} \quad (4.359)$$

ですので、

$$k \equiv \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \text{with } \begin{cases} k > 0 & \Rightarrow \text{正方向に進む波} \\ k < 0 & \Rightarrow \text{負方向に進む波} \end{cases} \quad (4.360)$$

です。したがって、「自由粒子の定常状態」は進行している波で、波長は

$$\lambda = \frac{2\pi}{|k|} \quad (4.361)$$

です。 $k$ は任意なので、任意の波長で進行している波ですね。これぞ、ド・ブロイ波です。「」がついている理由はあとで明らかになります。古典論における自由粒子のエネルギーと運動量の関係は

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (4.362)$$

ですよ。いま量子論で、

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (4.363)$$

でしたので、

$$p \sim \hbar k \quad (4.364)$$

という対応関係にあることがわかります。すると、ド・ブロイの公式、 $\lambda = h/p$ がでてますね。

この波の進行する速さは

$$\begin{aligned} v_{\text{quantum}} &= \left| \frac{\Delta x}{\Delta t} \right| \\ &= \left| \frac{\hbar k}{2m} \Delta t / \Delta t \right| \\ &= \frac{\hbar |k|}{2m} \\ &= \sqrt{\frac{E}{2m}} \end{aligned} \quad (4.365)$$

ですよ。で、一方、古典的にエネルギー  $E$  で運動している粒子の速さは

$$E = \frac{1}{2} m v_{\text{classical}}^2 \quad (4.366)$$

$$\Rightarrow v_{\text{classical}} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_{\text{quantum}} \quad (4.367)$$

あれ？2倍違う。量子の方が遅いですねえ。なんか間違ってるんじゃないの？こまったなあ。このパラドックスには、もうちょっとあとで、戻ってきましょう。



実は、もっと困ったことに気づきます。波動関数を規格化してみようと思うと、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^* \Psi_k dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \quad (4.368)$$

…。規格化できません！自由粒子なんていないの？いや、そんなわけない。いるはずですよ。

調和振動子のときは、規格化できないような解は捨ててしまいました。今回、事情が違なのは、 $\psi$  が遠方で発散するのではなく、有界であるということです。有界である限り、それらを重ねあわせて、規格化可能な解を作ることができそうです。そうなんです。規格化可能な解は

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) \exp \left[ i \left( kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t \right) \right] dk \quad (4.369)$$

として、うまく  $\phi(k)$  を選ぶことによって作ることができます。これを「波束」とよび、粒子を表します。 $1/\sqrt{2\pi}$  のファクターはおまじないです。フーリエ変換を臭わせていますねえ。ちなみに  $\phi(k)$  の次元は  $[L^{1/2}]$  ですね。(これがシュレーディンガー方程式の解であることを示しましょう。)

規格化できるかどうか見てみましょう。 $\omega = \hbar k^2/(2m)$  として、

$$\begin{aligned} \int |\Psi(x, t)|^2 dx &= \frac{1}{2\pi} \int dx dk dk' \left( \phi(k') e^{ik'x - i\omega't} \right)^* \left( \phi(k) e^{ikx - i\omega t} \right) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dk dk' \phi(k')^* \phi(k) e^{-i(\omega - \omega')t} \int dx e^{i(k - k')x} \\ &= \int dk dk' \phi(k')^* \phi(k) e^{-i(\omega - \omega')t} \delta(k - k') \\ &= \int dk |\phi(k)|^2 \end{aligned} \quad (4.370)$$

となりました。したがって、 $\phi(k)$  が規格化されているような関数ならば  $\Psi$  も規格化されてるわけです。

ちなみに運動量の期待値は

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int dx dk dk' \left( \phi(k') e^{ik'x - i\omega't} \right)^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left( \phi(k) e^{ikx - i\omega t} \right) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int dx dk dk' \left( \phi(k') e^{ik'x - i\omega't} \right)^* \hbar k \left( \phi(k) e^{ikx - i\omega t} \right) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int dk dk' \hbar k \phi(k')^* \phi(k) e^{-i(\omega - \omega')t} \int dx e^{i(k - k')x} \\
 &= \int dk dk' \hbar k \phi(k')^* \phi(k) e^{-i(\omega - \omega')t} \delta(k - k') \\
 &= \int dk \hbar k |\phi(k)|^2
 \end{aligned} \tag{4.371}$$

となって時間に依存しません。運動量保存則ですな。ここで、 $\phi(k)$  をある値  $k_0$  付近でのみ値を持つ関数とすると、

$$\langle p \rangle \simeq \hbar k_0 = \frac{h}{\lambda_0} \tag{4.372}$$

ですね。運動量の観測値のぼやけ具合を無視したとき、 $p = \hbar k$  となるわけです。

エネルギーの期待値も同様に

$$\langle E \rangle = \int dk \frac{\hbar^2 k^2}{2m} |\phi(k)|^2 \tag{4.373}$$

と求められます。時間によりません。また、 $\phi(k)$  がある値  $k_0$  付近の狭い領域でのみ値をもつような関数だと、

$$\langle E \rangle \simeq \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \tag{4.374}$$

ですね。

初期状態  $\Psi(x, 0)$  が与えられていたとして、 $\Psi(x, t)$  を求めたいというのが、量子力学の問題なんですけど、この場合はどうやりましょう。いままでと同じですね。まずは、 $\phi(k)$  を求めてしまえば、解は式 (4.369) で与えられるわけですよ。  $t = 0$  において、式 (4.369) は

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{ikx} dk \tag{4.375}$$

ですね。ここから、 $\phi(k)$  を求めるわけですが、これはまさにフーリエ逆変換ですね。たちどころに、

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx \tag{4.376}$$

であることがわかります。

#### 4.6.2 簡単な例

例題をやってみましょう。初期状態が

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} A, & \text{if } -a < x < a \\ 0, & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (4.377)$$

であるとしましょう。つまり、自由粒子が  $-a < x < a$  に閉じ込められていて、 $t = 0$  で開放されたとき、その後どうなるでしょう？

まずは、規格化しときましょう。

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx \\ &= |A|^2 \int_{-a}^a dx \\ &= 2a|A|^2 \end{aligned} \quad (4.378)$$

$$\Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2a}} \quad (4.379)$$

ですね。

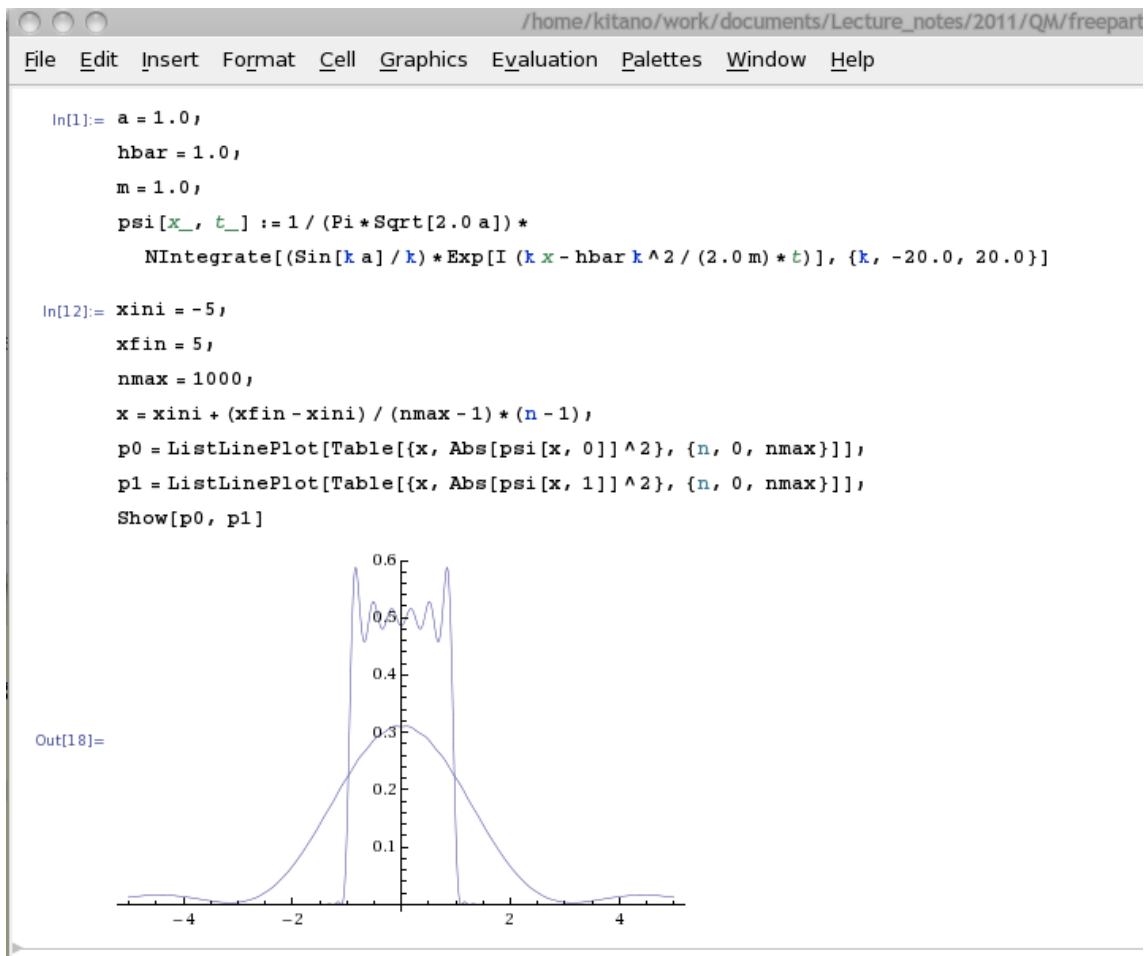
次は、フーリエ変換して、 $\phi(k)$  を求めればよいわけです。

$$\begin{aligned} \phi(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-a}^a \left( \frac{1}{\sqrt{2a}} e^{-ikx} \right) dx \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi a}} \left[ \frac{e^{-ikx}}{-ik} \right]_{-a}^a \\ &= \frac{1}{k\sqrt{\pi a}} \left( \frac{e^{ika} - e^{-ika}}{2i} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \frac{\sin(ka)}{k} \end{aligned} \quad (4.380)$$

フーリエ変換完了しました！ $\phi(k)$  を見つけられることができれば、つぎは、式 (4.369) に入れて完成です。

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\pi\sqrt{2a}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(ka)}{k} \exp \left[ i \left( kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t \right) \right] dk \quad (4.381)$$

この積分は、難しそうですね。Mathematica 先生に数値的にやらしてみると



こんな感じです。初期状態の方は、あんまり積分が収束してませんね。(端っこで飛びがでる Gibbs の現象も見えてます。) コマンドを見てわかるように、 $k$  の積分範囲は  $-20/a$  から  $20/a$  までしかとってません。なめらかになってる方は  $t = ma^2/\hbar$  での  $|\Psi|^2$  です。時間がたつと、局在していた粒子がボヤけてくるのがわかります。

ところで、 $\phi(k)$  っていうのは、どの  $k$  のモードが効いているのかっていうのを表しているんですね。式 (4.380) をみるに、 $k$  の大きいところが  $1/k$  で落ちるような効き方ですね。 $k$  の小さいところでは、 $\sin$  を展開すると、分母の  $k$  とキャンセルするので、ほぼ一定っていう感じです。つまり、 $|k| \lesssim 1/a$  程度までのモードが主に効いているわけです。

極端な例を考えてみましょう。もし、 $a$  がすごく小さい場合、つまり、初期状態の波動関数が  $x = 0$  にとっても局在しているっていうときです。このとき、 $|k|a \ll 1$  の範囲において、

$$\phi(k) \sim \sqrt{\frac{a}{\pi}} \quad (4.382)$$

ですので、 $\phi(k)$  は  $|k| \sim 1/a$  程度まで平坦です。これぞ、不確定性原理の言うところです。なにを言っているのかというと、 $a$  が小さい、つまり、位置がとてもはっきりしているようなとき、運動量を表す  $k$  の値があまりよく決まらないんですね。

反対に、 $a$  がすごく大きいような場合は、どうでしょう、 $|k| \ll 1/a$  の狭い領域において、 $\phi(k)$  は

$$\phi(k) \sim \sqrt{\frac{a}{\pi}} \quad (4.383)$$

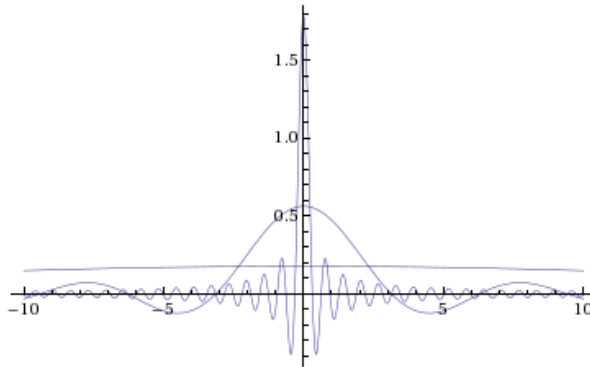
の一定値をとり、 $|k| \gg 1/a$  において、

$$\phi(k) \sim 0 \quad (4.384)$$

となりますよね。つまり、 $a$  がすごく大きくて、粒子の位置がよくわからない状態では、 $k$ 、すなわち運動量がとてもはっきりと決まっています。またもや、Mathematica 先生にやらせてもらえば、よくわかりますね。

```
In[320]:= a = .1
phi1 = Plot[Sin[k a] / (Sqrt[Pi a] * k) /. a -> 1, {k, -10, 10}, PlotRange -> All],
phi2 = Plot[Sin[k a] / (Sqrt[Pi a] * k) /. a -> 10, {k, -10, 10}, PlotRange -> All],
phi3 = Plot[Sin[k a] / (Sqrt[Pi a] * k) /. a -> 0.1, {k, -10, 10}, PlotRange -> All],
Show[phi1, phi2, phi3]
```

Out[324]=



### 4.6.3 群速度と位相速度

さて、

$$2v_{\text{quantum}} = v_{\text{classical}} \quad (4.385)$$

の問題にもどりましょう。いままでの議論から、すこし問題がクリアになってきましたね。

$$(\text{自由粒子}) = (\text{正弦波の重ね合わせ}) \quad (4.386)$$

でつくった塊(波束)でしたね。このとき、一つ一つの波の速さと波束の動く速さは別物なんです。前者を位相速度、後者を群速度と呼びます。古典的な粒子の速度  $v_{\text{classical}}$  に対応するのは群速度であって、 $v_{\text{quantum}}$  は位相速度に対応するものなのです。

では、波束が与えられたときの、群速度をどう求めましょうか？とりあえず、

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (4.387)$$

と書きましょう。ただし、 $\omega$  は波の角振動数で、我々の場合は

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (4.388)$$

ですが、今後の議論では、 $\omega(k)$  は一般の関数で結構です。ちなみに  $\omega$  と  $k$  の関係式を「分散関係」とよびます。たとえば、光とかは上の式とは違いますよね。  $m = 0$  ですから。次に、 $\phi(k)$  をどこか  $k_0$  に局在した関数としましょう。つまり、運動量がはっきりしたような関数ですね。で、

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \omega'(k_0)(k - k_0) + \dots \quad (4.389)$$

と展開しておきましょう。どうせ、式(4.387)の積分は  $k_0$  あたりしか効かないので。波動関数は

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &\simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) \exp [i(kx - \{\omega(k_0) + \omega'(k_0)(k - k_0)\} t)] dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) \exp [i(k(x - \omega'(k_0)t) + (-\omega(k_0) + k_0\omega'(k_0))t)] dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(-\omega(k_0) + k_0\omega'(k_0))t} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) e^{ik(x - \omega'(k_0)t)} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(-\omega(k_0) + k_0\omega'(k_0))t} \Psi(x - \omega'(k_0)t, 0) \end{aligned} \quad (4.390)$$

となります。なるほど、なるほど。これは面白いですな。前についでる位相は  $|\Psi|^2$  に影響しないので無視しますと、波束の進む速度(群速度)は

$$v_{\text{group}} = \frac{d\omega}{dk} \quad (4.391)$$

で与えられることがわかります。位相速度は式 (4.387) を見るに、

$$v_{\text{phase}} = \frac{\omega}{k} \quad (4.392)$$

ですよね。確かに、違うものですね。 $\omega = \hbar k^2/(2m)$  の場合は

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m}, \quad \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} \quad (4.393)$$

ですから、確かに群速度の方が 2 倍大きいですね。

#### 4.6.4 アインシュタインの式とド・ブロイの式

運動量のよく決まったような波束 (つまり、 $\phi(k)$  が  $k$  の狭い領域でのみ大きな値を持つような場合) を考えると、アインシュタインの式とド・ブロイの式が出てきます。

アインシュタインが

$$E = h\nu \quad (4.394)$$

って仮説をたてて、光電効果を見事に説明したっていうのをむかし紹介しましたね。式 (4.355) をみるに、自由粒子のエネルギーは、

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (4.395)$$

ですね。この式と  $\omega = \hbar k^2/(2m)$  から、

$$E = \hbar\omega = h\nu \quad (4.396)$$

です。確かに、成り立ってますね。

ド・ブロイの式は前に議論したとおり、

$$p = \hbar k \quad (4.397)$$

と

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (4.398)$$

から、

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (4.399)$$

ですね。

#### 4.6.5 確率の流れを求めてみる。

式 (4.358) の波動関数  $\Psi_k(x, t)$  に対して、確率の流れ (式 (3.30)) を求めてみましょう。

$$\begin{aligned} J(x, t) &= \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi_k \frac{\partial \Psi_k^*}{\partial x} - \Psi_k^* \frac{\partial \Psi_k}{\partial x} \right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} |A|^2 (-ik - ik) \\ &= \frac{\hbar k}{m} |A|^2 \end{aligned} \quad (4.400)$$

確率は、 $k > 0$  のときに  $+x$  方向に、 $k < 0$  で  $-x$  方向に流れてますね。

#### 4.6.6 ガウス型波束

つぎは、ガウス関数型の波束を考えてみましょう。初期状態を

$$\Psi(x, 0) = A e^{-ax^2} \quad (4.401)$$

としましょう。ただし、 $a > 0$  です。

まずは、規格化しましょう。

$$\begin{aligned} 1 &= |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2ax^2} dx \\ &= |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2a}} \end{aligned} \quad (4.402)$$

ですので、

$$A = \left( \frac{2a}{\pi} \right)^{1/4} \quad (4.403)$$

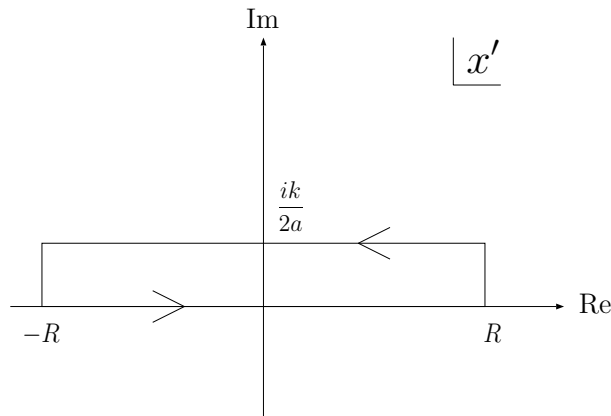
です。



つぎは、 $\Psi(x, t)$  を求めたいわけですが、そのためには、まず、フーリエ変換して  $\phi(k)$  を求めるんでしたね。

$$\begin{aligned}
 \phi(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2 - ikx} dx \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-a\left(x + \frac{ik}{2a}\right)^2 - \frac{k^2}{4a}\right] dx \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} e^{-k^2/(4a)} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-a\left(x + \frac{ik}{2a}\right)^2\right] dx \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} e^{-k^2/(4a)} \int_{-\infty + ik/(2a)}^{\infty + ik/(2a)} e^{-ax'^2} dx' \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} e^{-k^2/(4a)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax'^2} dx' \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} e^{-k^2/(4a)} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \\
 &= \left(\frac{1}{2\pi a}\right)^{1/4} e^{-k^2/(4a)} \tag{4.404}
 \end{aligned}$$

なんだかごたごたしてますが、結局、ガウス関数のフーリエ変換はまたもやガウス関数なんです。それから、途中、積分路を変更してます。(下図参照)



さてあとは、式 (4.369) から

$$\begin{aligned}
 \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k) \exp \left[ i \left( kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t \right) \right] dk \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \frac{1}{2\pi a} \right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-k^2/(4a)} \exp \left[ i \left( kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t \right) \right] dk \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \frac{1}{2\pi a} \right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-k^2/(4a)} \exp \left[ - \left( \frac{1}{4a} + \frac{i\hbar}{2m} t \right) k^2 + ikx \right] dk \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \frac{1}{2\pi a} \right)^{1/4} \exp \left[ - \frac{ax^2}{1 + 2i\hbar at/m} \right] \\
 &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ - \frac{1}{4a} (1 + 2i\hbar at/m) \left( k - \frac{2iax}{1 + 2i\hbar at/m} \right)^2 \right] dk \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \frac{1}{2\pi a} \right)^{1/4} \exp \left[ - \frac{ax^2}{1 + 2i\hbar at/m} \right] \sqrt{\frac{4a\pi}{1 + 2i\hbar at/m}} \\
 &= \left( \frac{2a}{\pi} \right)^{1/4} \frac{\exp \left[ -ax^2/(1 + 2i\hbar at/m) \right]}{\sqrt{1 + 2i\hbar at/m}} \tag{4.405}
 \end{aligned}$$

となりました。積分が実行できちゃいましたね。

次は、 $|\Psi|^2$  はどんな形でしょう。

$$|\Psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{2a}{\pi}} \frac{\exp \left[ -2ax^2/(1 + (2\hbar at/m)^2) \right]}{\sqrt{1 + (2\hbar at/m)^2}} \tag{4.406}$$

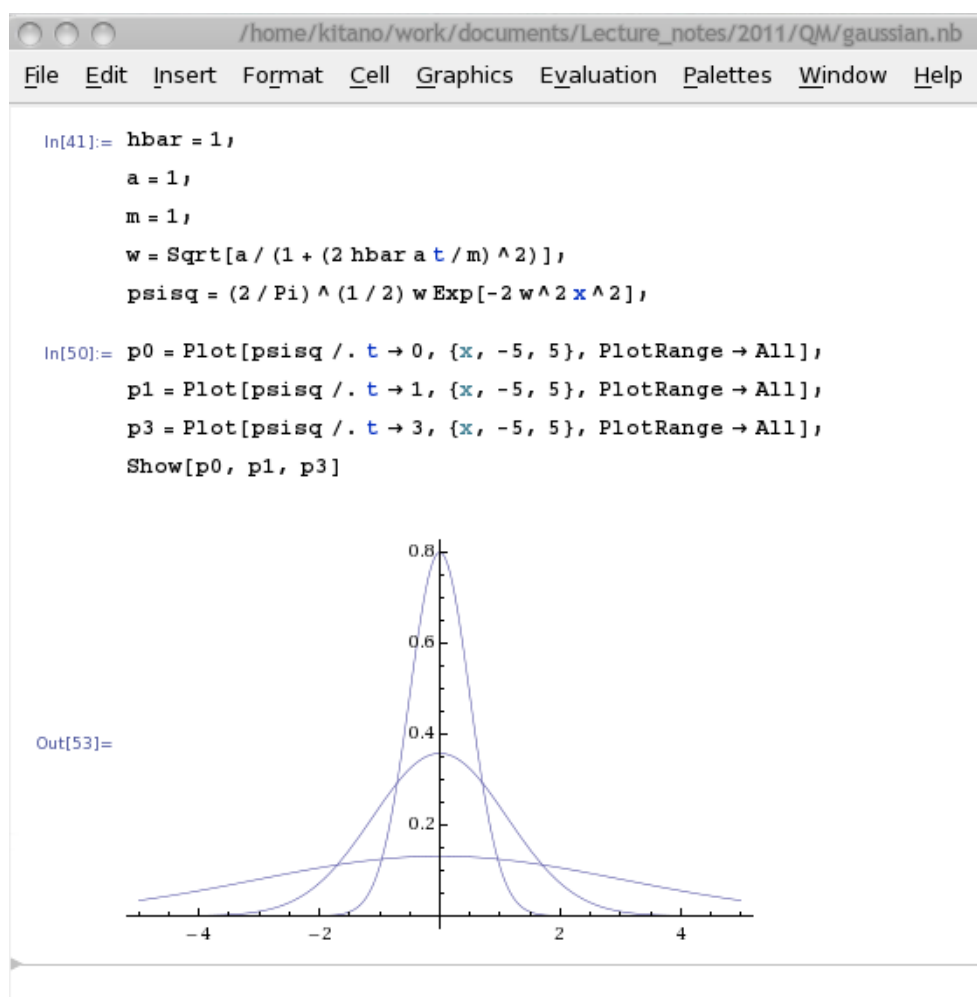
です。新たな変数

$$w \equiv \sqrt{\frac{a}{1 + (2\hbar at/m)^2}} \tag{4.407}$$

を導入すると、(  $[w] = [L^{-1}]$  )

$$|\Psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} w e^{-2w^2 x^2} \tag{4.408}$$

となります。この確率密度の時間変化をプロットしてみると、こんな感じです。



どんどん、広がっていく（つまり、位置がボヤけてくる）様子がわかりますね。

今度は、期待値や分散を求めましょう。

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx \\
 &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} w x e^{-2w^2 x^2} dx \\
 &= 0,
 \end{aligned}
 \tag{4.409}$$

奇関数の積分なのでゼロです。

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx \\
 &= \left( \frac{\hbar}{i} \right) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-2ax}{1 + 2i\hbar a t/m} |\Psi|^2 dx \\
 &= 0,
 \end{aligned} \tag{4.410}$$

これも同様。つぎは、

$$\begin{aligned}
 \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\Psi(x, t)|^2 dx \\
 &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} wx^2 e^{-2w^2 x^2} dx \\
 &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot w \cdot \sqrt{\frac{2\pi}{4^3 w^6}} \\
 &= \frac{1}{4w^2},
 \end{aligned} \tag{4.411}$$

ですね。tが大きくなると、wがちいさくなるので、位置がボヤけてるってのがここでもわかりますよね。ここでは、公式(3.95)をつかいましたよ。最後は、

$$\begin{aligned}
 \langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left( -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) dx \\
 &= \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \left( \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx \\
 &= \hbar^2 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left| \frac{-2a}{1 + 2i\hbar a t/m} \right|^2 \int_{-\infty}^{\infty} wx^2 e^{-2w^2 x^2} dx \\
 &= \hbar^2 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot 4aw^2 \int_{-\infty}^{\infty} wx^2 e^{-2w^2 x^2} dx \\
 &= \hbar^2 a
 \end{aligned} \tag{4.412}$$

ですね。これは、時間によらないようです。ってことは、

$$\sigma_x = \frac{1}{2w}, \quad \sigma_p = \hbar\sqrt{a}, \tag{4.413}$$

ですので、不確定性は

$$\begin{aligned}
 \sigma_x \sigma_p &= \frac{\hbar}{2} \cdot \frac{\sqrt{a}}{w} \\
 &= \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + (2\hbar a t/m)^2}
 \end{aligned} \tag{4.414}$$

です。したがって、不確定性が一番小さいのが  $t = 0$  です。不確定性関係のいう最小の値 ( $\hbar/2$ ) をとってますね。 $t$  が大きくなるとどんどん不確定性が大きくなってます。 $p$  がボヤけずに  $x$  がぼやけていくんですねえ。

(宿題:

$$\Phi(x, 0) = Ae^{-ax^2+ibx} \quad (4.415)$$

のときに同様の議論をやってみましょう。この時、 $\langle p \rangle$  と  $\phi(k)$  のピーク位置の関係から  $p = \hbar k$  っていうのを理解してみましょう。)

古典論では等速直線運動している粒子ですが、量子論にいくと、確かに等速運動っぽいんですけど、どんどん位置がボヤけながらうごいていく感じですかね。とにかく、

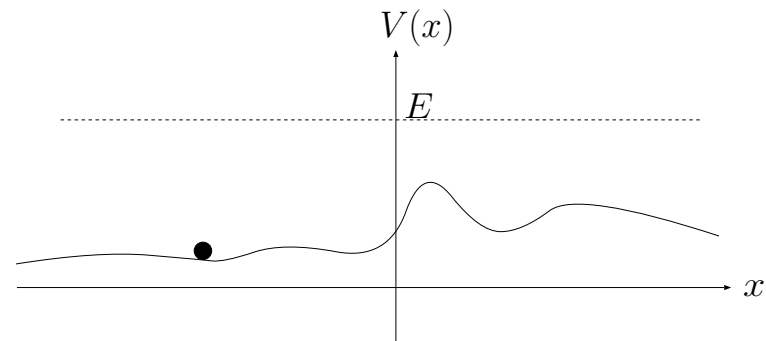
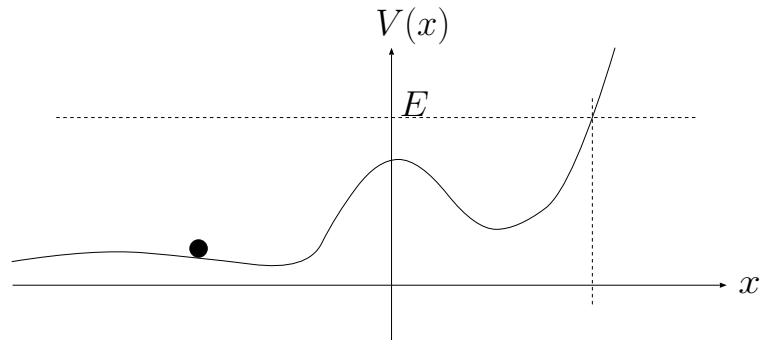
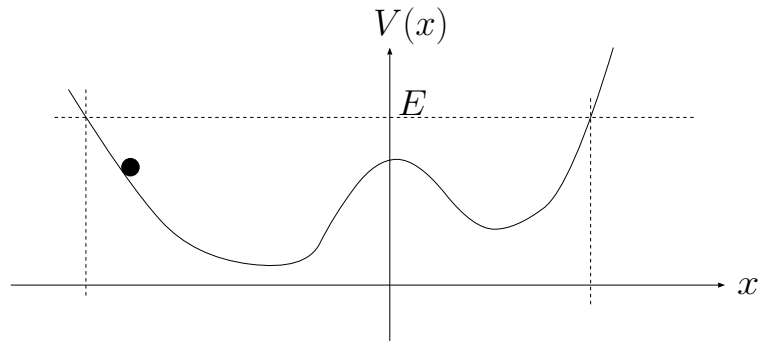
- 運動量を決めると、位置がきまらない。
- 逆に位置を決めると、運動量がきまらない…。
- 時間とともに、不確定性がおおきくなる…。

## 4.7 デルタ関数ポテンシャル

### 4.7.1 束縛状態と散乱状態

さてさて、いろいろ学びましたね。ここで、ちょっと整理しましょう。時間によらないシュレーディンガー方程式の解にはなんだか、2種類のものがありました。調和振動子とか、無限の井戸型みたいに、エネルギーがとびとびの奴ら。それから、自由粒子みたいに、エネルギーが連続な奴ら。なんなんでしょう？

古典論にも実は、それに対応するものがあります。



例えば、図の一番上のタイプだと、質点の運動は行ったり来たりですね。 $E = V$ となる点で折り返します。こういう点を「回帰点」とよびます。このように、逃げることのできない状態を束縛状態とよびます。

2番めのタイプだと、粒子が無限遠方からやってきて、どっかで折り返して、また無限遠方へ帰っていきます。これを、散乱状態と呼ぶことにしましょう。ポテンシャルの形やエネルギーによっては、両方の状態が許されたり、片方しかなかったりしますね。

量子力学では、ちょっとおもしろいことがあります。あとで出てきますが、「トンネル効果」なるものあって、有限の高さのバリアは、乗り越えられちゃいます。なので、束縛されてい

るかどうかで重要なのは、無限遠方での振る舞いだけで、

$$\begin{cases} E < V(-\infty) \text{ and } E < V(\infty) & \Rightarrow \text{束縛状態} \\ E > V(-\infty) \text{ or } E > V(\infty) & \Rightarrow \text{散乱状態} \end{cases} \quad (4.416)$$

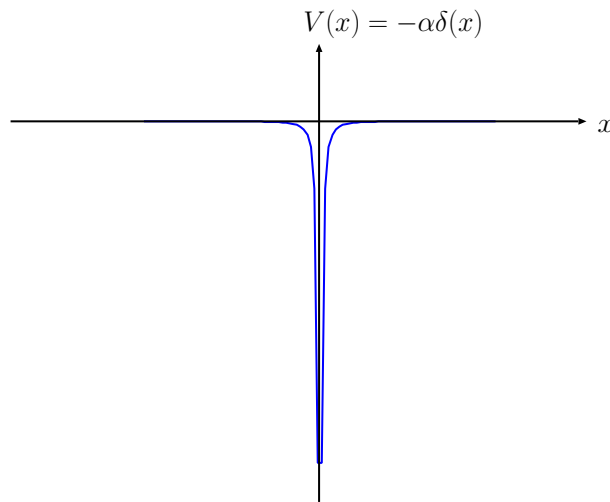
となります。無限遠方で無限大となるようなポテンシャル（調和振動子や無限の井戸）のときは、束縛状態しかありません。逆に、自由粒子のときは、散乱状態しかありません。でも、一般には、両方ありえたりします。

#### 4.7.2 デルタ関数井戸

ポテンシャルが

$$V(x) = -\alpha\delta(x) \quad (4.417)$$

と、デルタ関数で与えられている場合を考えてみましょう。 $\alpha$  は正の数です。次元は  $[\alpha] = [\text{energy}][L]$  ですね。（デルタ関数の次元に注意！）一体なんなのかよくわからない状況ですが、とにかく、針穴のようなポテンシャルがある場合の粒子について考えてみましょう。



時間によらないシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha\delta(x)\psi = E\psi \quad (4.418)$$

ですね。じつは、 $E$  の符号によって、落ちてる奴（束縛状態、 $E < 0$ ）と落ちない奴（散乱状態、 $E > 0$ ）の両方があります。

### 4.7.3 束縛状態

まずは、束縛状態を見てみましょう。 $x < 0$ の領域をみると、 $V(x) = 0$ ですので、

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \kappa^2\psi \quad (4.419)$$

ただし、

$$\kappa = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} \quad (4.420)$$

です。 $E < 0$ をかんがえてますので、 $\kappa$ は実数、しかも正ですよ。これは、簡単に解けちゃいますね。一般解は

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} \quad (4.421)$$

です。規格化ができるためには、 $x \rightarrow -\infty$ で $\psi \rightarrow 0$ とならなければなりませんので、 $A = 0$ です。したがって、

$$\psi(x) = Be^{\kappa x}, \quad (x < 0), \quad (4.422)$$

ですね。全く同じ議論を $x > 0$ についてやると、

$$\psi(x) = Fe^{-\kappa x}, \quad (x > 0), \quad (4.423)$$

です。

えらい簡単ですね。あとは、この二つの解をつなげればよろしいわけです。さあ、どうつなげましょうか？一般のルールです。

$$\left\{ \begin{array}{l} 1. \quad \psi \quad \text{は常に連続、} \\ 2. \quad \frac{d\psi}{dx} \quad \text{はポテンシャルが無限にならない限り連続。} \end{array} \right. \quad (4.424)$$

どういうことでしょうか？シュレーディンガー方程式を積分してみると、わかった気になります。 $[-\epsilon, \epsilon]$ の領域で積分してみましょう。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \int_{-\epsilon}^{\epsilon} V(x)\psi(x) dx = E \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x) dx \quad (4.425)$$



ですね。ε → 0 の極限をとってみましょう。右辺は、ψ(x) が連続であろうがなかろうが、ゼロですね。無限に飛んでる場合は、確率解釈がおかしくなるので考えません。左辺の第一項は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[ \frac{d\psi}{dx} \Big|_{\epsilon} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-\epsilon} \right] \quad (4.426)$$

で、dψ/dx の飛びを表します。第2項は V(x) がデルタ関数のときは、

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} (-\alpha \delta(x)) \psi(x) dx = -\alpha \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \psi(0) = -\alpha \psi(0) \quad (4.427)$$

ですね。デルタ関数の性質を使いましたよ。したがって、

$$\frac{d\psi}{dx} \Big|_{+} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0) \quad (4.428)$$

となりました。有限な飛びですので、ψ(x) は積分すれば、連続ですね。なるほど。

ってことは、つなげ方は、まず、x = 0 における ψ の連続性から、

$$\psi(x) = \begin{cases} B e^{\kappa x}, & (x < 0) \\ B e^{-\kappa x} & (x \geq 0) \end{cases} \quad (4.429)$$

です。さらに、dψ/dx の飛びを合わせなければならないので、

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dx} \Big|_{+} - \frac{d\psi}{dx} \Big|_{-} &= -B\kappa - B\kappa \\ &= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0) \\ &= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} B \end{aligned} \quad (4.430)$$

したがって、

$$\kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \quad (4.431)$$

となりました。つまり、

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \quad (4.432)$$

です。束縛状態として許されるエネルギーが決定されました。最後に、規格化しましょう。

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx \\ &= 2|B|^2 \int_0^{\infty} e^{-2\kappa x} dx \\ &= \frac{|B|^2}{\kappa} \end{aligned} \quad (4.433)$$

なので、

$$B = \sqrt{\kappa} = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} \quad (4.434)$$

ととれば OK です。なんか、どっかでやった計算ですよ。そうです、規格化をならったときに最初にやった例はこれです。

というわけで、デルタ関数型のポテンシャルのときは、束縛状態は一つだけで、

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2}, \quad E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \quad (4.435)$$

です。図を描いてみましょうね。粒子は、穴近辺に局在してますね。まあ、そりゃそうだ。

#### 4.7.4 散乱状態

つぎは、散乱状態を考えてみましょう。  $E > 0$  ですね。  $x < 0$  におけるシュレーディンガー方程式は

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi \quad (4.436)$$

ただし、

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (4.437)$$

です。右辺の符号が束縛状態のときと違います。したがって、一般解は

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (4.438)$$

です。たしかに、規格化できないけど、有界な解となっております。今度は  $A$  も  $B$  もゼロでなくて OK ですね。  $x > 0$  でも同様に

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \quad (4.439)$$

です。  $\psi(x)$  での連続性から、

$$F + G = A + B \quad (4.440)$$

です。一階微分の方は、

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_+ = ik(F - G) \quad (4.441)$$

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_- = ik(A - B) \quad (4.442)$$

なので、飛びは、

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_+ - \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_- = ik(F - G - A + B) \quad (4.443)$$

です。

$$\psi(0) = A + B \quad (4.444)$$

ですので、式 (4.428) より、

$$ik(F - G - A + B) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A + B) \quad (4.445)$$

$$\Rightarrow F - G = (1 + 2i\beta)A - (1 - 2i\beta)B, \quad \text{where } \beta \equiv \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \quad (4.446)$$

です。

さて、こまりました。未知変数がいっぱい  $A, B, F, G, k$  に対して、方程式が 2 つしかありませんので、解けません。規格化もできないので、条件になりません。

ところで、今なにやってるんでしたっけ？ 散乱状態でしたよね。つまり、粒子がどっからやってきて、ポテンシャルによって、散乱されるっていうのを考えていたのです。以下では、粒子が  $+x$  方向へ入射した場合を考えましょう。粒子っていうのは、実際には波束でしたよね。なんですが、ここで波束をつくり始めると、計算が面倒になるでしょうし、話がややこしくなりそうです。

というわけで、すこし強引ですが、このまま波束を導入せずに話を進めてしまいましょう。

まずは、 $\psi e^{-iEt/\hbar}$  で表される「定常状態」の確率の流れを見てみましょう。 $x < 0$  の領域では、

$$\begin{aligned}
 J(x,t) &= \frac{i\hbar}{2m} \left( \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \\
 &= \frac{i\hbar}{2m} \left( Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \right) \left( ikAe^{ikx} - ikB^{-ikx} \right)^* + \text{c.c.} \\
 &= \frac{i\hbar}{2m} \left( -ik|A|^2 + ik|B|^2 + ikAB^* e^{2ikx} - ikA^* B e^{-2ikx} \right) + \text{c.c.} \\
 &= \frac{\hbar k}{m} (|A|^2 - |B|^2) \tag{4.447}
 \end{aligned}$$

となります。定常状態なので、 $t$  には依存しませんね。しかも、 $x$  にも依存せずに確率が一様に流れていることがわかります。 $x > 0$  の領域では、

$$J(x,t) = \frac{\hbar k}{m} (|F|^2 - |G|^2) \tag{4.448}$$

ですよ。つまり、何を言っているのかというと、

$$\begin{cases}
 Ae^{ikx} : & x < 0 \text{ の領域で、} +x \text{ 方向へ進む波} \Rightarrow \text{入射波} \\
 Be^{-ikx} : & x < 0 \text{ の領域で、} -x \text{ 方向へ進む波} \Rightarrow \text{反射波} \\
 Fe^{ikx} : & x > 0 \text{ の領域で、} +x \text{ 方向へ進む波} \Rightarrow \text{透過波} \\
 Ge^{-ikx} : & x > 0 \text{ の領域で、} -x \text{ 方向へ進む波} \Rightarrow \text{反対方向からの入射波}
 \end{cases} \tag{4.449}$$

という解釈ができます。今考えている  $+x$  方向への入射の場合は、 $Ge^{-ikx}$  の成分はありませんね。したがって、

$$G = 0 \tag{4.450}$$

とできます。

つまるところ、

$$J_{\text{inc}} = \frac{\hbar k}{m} |A|^2, \quad J_{\text{ref}} = \frac{\hbar k}{m} |B|^2, \quad J_{\text{trans}} = \frac{\hbar k}{m} |F|^2, \tag{4.451}$$

と名前をつけると、 $J_{\text{inc}}$  が入射する確率密度の流れ、 $J_{\text{ref}}$  が反射する確率密度の流れ、 $J_{\text{trans}}$  が透過する確率密度の流れを表していることがわかります。したがって、反射する確率  $R$  (反射率) と透過する確率  $T$  (透過率) はそれぞれ、

$$R = \frac{J_{\text{ref}}}{J_{\text{inc}}} = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad T = \frac{J_{\text{trans}}}{J_{\text{inc}}} = \frac{|F|^2}{|A|^2} \tag{4.452}$$

で与えられますね。この組み合わせは、式 (4.440) と (4.446) から求めることができ、

$$( \text{式 (4.440)} - \text{式 (4.446)} ): \quad 0 = -2i\beta A + (2 - 2i\beta)B \Rightarrow B = \frac{i\beta}{1 - i\beta} A \quad (4.453)$$

$$( \text{式 (4.440)} \text{ と上の式} ): \quad F = \frac{1}{1 - i\beta} A \quad (4.454)$$

$$\Rightarrow R = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2}, \quad T = \frac{1}{1 + \beta^2} \quad (4.455)$$

です。きちんと、

$$R + T = 1 \quad (4.456)$$

と確率が保存してます。もう一度、 $\beta$  の定義を復活させて、

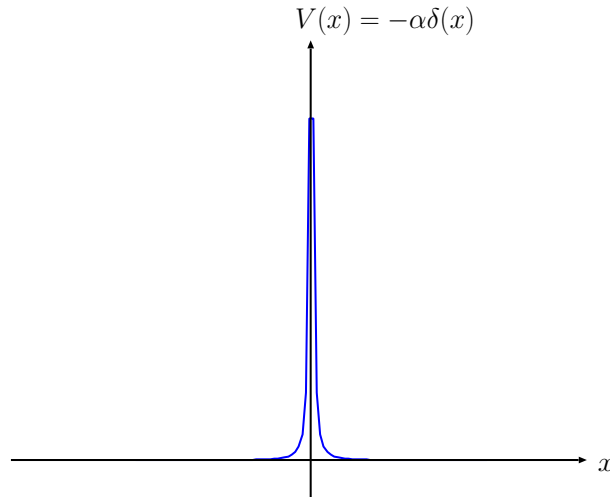
$$R = \frac{1}{1 + (2\hbar^2 E / m\alpha^2)}, \quad T = \frac{1}{1 + (m\alpha^2 / 2\hbar^2 E)} \quad (4.457)$$

です。反射率や透過率がエネルギーに依存しとります。しかも、エネルギーをあげると透過率が 1 に近づくようになってます。なるほどね。

実際に波束をつくって、計算してみると、上の反射と透過の確率は近似的になりたちます。つまり、ほとんどエネルギーの決まった粒子 ( $\sigma_p$  が小さい波束) の反射率と透過率は上で与えられるのです。

#### 4.7.5 デルタ関数型障壁とトンネル効果

さて、いままで  $V(x) = -\alpha\delta(x)$  で、 $\alpha > 0$  としてきましたが、 $\alpha$  の符号をひっくり返すと、井戸型じゃなくて、ポテンシャルの壁があるときの問題となります。



当然、このときは、束縛状態はありません。式 (4.431) で右辺と左辺の符号が合いませんね。

散乱状態の方を考えてみると、 $\beta$  の符号が変わるだけで、あとはまったく同じです。しかも、反射率 ( $R$ ) と透過率 ( $T$ ) は  $\beta$  の符号に依存しません。ってことは、答えは同じです。

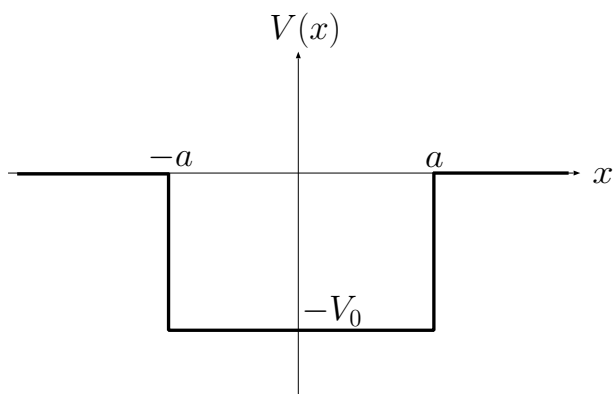
ここで、ちょっと変なことに気づきます。デルタ関数型のポテンシャルってことは、壁の高さが無限大です。つまり、古典的には粒子はこれを乗り越えられないのです。つまり、 $T = 0$ 。しかし、量子力学では、 $T$  はゼロではないです。ポテンシャルをすり抜けてます。これぞ、かの有名な「トンネル効果」です。逆に、ポテンシャルの溝があっても、跳ね返されることがあるのを上で見ましたね。面白いですね。(かといって、溝や壁に向かって行って、実験しようとは思わない方がいいと思いますよ。)

## 4.8 有限井戸型ポテンシャル

さて、もうちょっと例題をやってみましょう。次は、有限の深さの井戸です。

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & \text{for } -a \leq x \leq a \\ 0, & \text{for } |x| > a \end{cases} \quad (4.458)$$

のときを考えましょう。ただし、 $V_0 > 0$  とします。



この場合も、束縛状態  $E < 0$  と散乱状態  $E > 0$  がありますので、束縛状態から見ていきましょう。

#### 4.8.1 束縛状態

まずは、 $x < -a$  で解きましょう。ポテンシャルがないので、時間によらないシュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (4.459)$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = \kappa^2\psi, \quad \kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (4.460)$$

です。 $E < 0$  を考えてますので、 $\kappa$  は正の実数です。次元は  $[L^{-1}]$ 。方程式は簡単に解けて、

$$\psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x} \quad (4.461)$$

ですね。例によって、遠方 ( $x \rightarrow -\infty$ ) で発散しないようにするには、 $A = 0$  です。つまり、

$$\psi(x) = Be^{\kappa x}, \quad (x < -a) \quad (4.462)$$

ですね。

つぎは、 $-a < x < a$  の領域です。こちらも同様に

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi \quad (4.463)$$

$$\Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -l^2\psi, \quad l \equiv \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} \quad (4.464)$$

です。  $E > V_{\min}$  の定理 (Section 4.1.5) により、  $l$  もまた、正の実数で、次元は  $[L^{-1}]$ 。したがって、一般解は

$$\psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx), \quad (-a < x < a) \quad (4.465)$$

ですね。

最後に、  $x > a$  の領域では、  $x < -a$  のときと同じ議論から

$$\psi(x) = F e^{-\kappa x}, \quad (x > a) \quad (4.466)$$

ですね。

さてさて、境界条件を課していきますか。でもその前に、  $V(x) = V(-x)$  の問題のときは、何かありましたよね。そうそう、  $\psi(x)$  は奇関数か偶関数のどちらかになるの定理です (Section 4.1.4)。分けて考えたほうが楽です。まずは、偶関数の方を考えましょう。つまり、

$$\psi(x) = \begin{cases} F e^{-\kappa x} & (x > a) \\ D \cos(lx) & (0 < x < a) \\ \psi(-x) & (x < 0) \end{cases} \quad (4.467)$$

ですよ。これで、境界条件たち、つまり  $\psi$  と  $d\psi/dx$  の連続性を要求すれば OK です。

$x = a$  における  $\psi$  の連続性から

$$F e^{-\kappa a} = D \cos(la) \quad (4.468)$$

です。それから、  $d\psi/dx$  の連続性から、

$$-\kappa F e^{-\kappa a} = -lD \sin(la) \quad (4.469)$$

ですね。割り算すると

$$\kappa = l \tan(la) \quad (4.470)$$

となります。  $\kappa$  も  $l$  もエネルギーによってますから、これはエネルギーに対する条件ですね。ちょっと、書き直してみますね。

$$\xi \equiv la, \quad \eta \equiv \kappa a \quad (4.471)$$



と無次元量  $\xi$  と  $\eta$  を導入すると、

$$\frac{\eta}{a} = \frac{\xi}{a} \tan \xi \quad (4.472)$$

$$\Rightarrow \eta = \xi \tan \xi \quad (4.473)$$

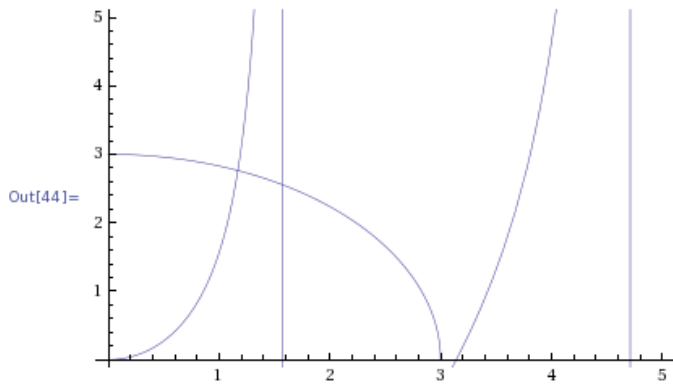
それから、 $\kappa$  と  $l$  の定義式より、

$$\begin{aligned} \xi^2 + \eta^2 &= (l^2 + \kappa^2)a^2 \\ &= \left( \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2} + \frac{-2mE}{\hbar^2} \right) a^2 \\ &= \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (4.474)$$

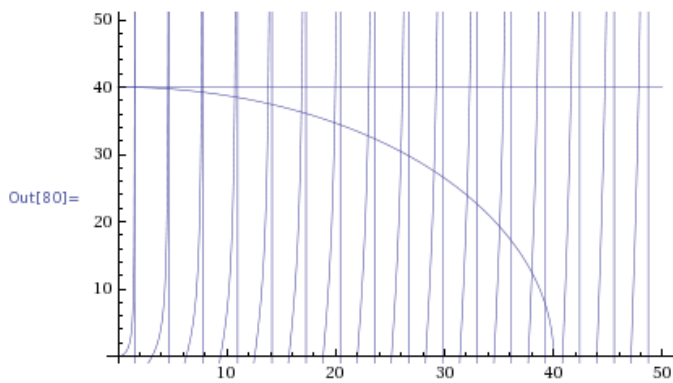
とこの組み合わせで定数になります。式 (4.473) と式 (4.474) の二つの曲線の交点を求めれば、それが、許されるエネルギーとなります。ただし、 $\xi > 0, \eta > 0$  ですよ。

Mathematica 先生にお絵描きしてもらいますとこんな感じです。

```
In[39]:= eta = xi Tan[xi],  
p1 = Plot[eta, {xi, 0, 5}],  
  
c = 3,  
eta = Sqrt[c^2 - xi^2],  
p2 = Plot[eta, {xi, 0, c}],  
Show[p1, p2, PlotRange -> {{0, 5}, {0, 5}}]
```



```
In[73]:= eta = xi Tan[xi],  
p1 = Plot[eta, {xi, 0, 50}],  
  
c = 40,  
eta = Sqrt[c^2 - xi^2],  
p2 = Plot[eta, {xi, 0, c}],  
  
eta = c,  
p3 = Plot[eta, {x, 0, 50}],  
Show[p1, p2, p3, PlotRange -> {{0, 50}, {0, 50}}]
```



たしかに交点は存在しますね。ここで、二つの極限を考えてみましょう。

- とっても井戸が深いとき。

つまり、 $V_0$  が  $\hbar^2/2ma^2$  に比べてとても大きいときを考えてみましょう。 $\xi - \eta$  平面上の円の半径が大きいときです。すごく大きくなると絵を見てわかるように、曲線の交点はいっぱい出てきます。しかも、その交点の位置は

$$\xi \simeq \frac{n\pi}{2}, \quad (n = 1, 3, 5 \dots) \quad (4.475)$$

のところになります。つまり、

$$\frac{2ma^2(E_n + V_0)}{\hbar^2} \simeq \frac{n^2\pi^2}{4} \quad (4.476)$$

$$\Rightarrow E_n + V_0 \simeq \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2} \quad (4.477)$$

となります。たしかに、無限に深い井戸のときの結果を再現できてますね。(  $n = 2, 4, 6, \dots$  の方は奇関数の方から出る予定。)

それから、有限井戸のときは、交点の数は有限個ですね。したがって、束縛状態は有限個です。

- とっても井戸が浅いとき。

つまり、半径がとっても小さいときです。しかし、絵をみてわかるように、どんなに小さい半径でも、一つだけ交点は存在しますね。つまり、どんなに浅い井戸でも束縛状態が一つ存在するんですね。

あとは、規格化すれば、 $F$  と  $D$  がもとまってめでたしめでたし。面倒なので Mathematica 先生にやってもらいましょう。例として、3つの束縛状態があるような場合についてやってみます。

$$V_0 = 30\hbar^2/(ma^2) \quad (4.478)$$

というポテンシャルの深さにしておきますと、図のように3つ解があります。

File Edit Insert Format Cell Graphics Evaluation Palettes Window Help

```

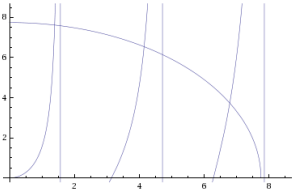
In[58]:= hbar = 1;
m = 1;
a = 1;

v0 = 30;

In[62]:= eta = .;
xi = .;

r0 = Sqrt[(2 m v0 a^2 / hbar^2)] // N;
eta = xi Tan[xi];
p1 = Plot[eta, {xi, 0, r0*1.1}];
eta = Sqrt[r0^2 - xi^2];
p2 = Plot[eta, {xi, 0, r0*1.1}];
Show[p1, p2, PlotRange -> {{0, r0*1.1}, {0, r0*1.1}}]

```



```

In[70]:= xi = .;
eta = .;
eq = xi Tan[xi] - Sqrt[r0^2 - xi^2];
sol = FindRoot[eq == 0, {xi, 1}]
kappa = xi Tan[xi] /. sol
energy = -(kappa^2 hbar^2 / (2 m)) /. kappa -> eta / a

```

Out[73]= {xi -> 1.39033}

Out[74]= 7.62017

Out[75]= -29.0335

Untitled-4\*

File Edit Insert Format Cell Graphics Evaluation Palettes Window Help

```

eta = xi Tan[xi];
el = xi / a;
kappa = eta / a;

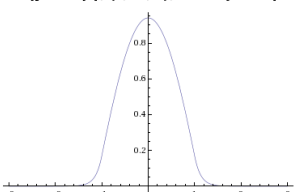
f = 1;
d = f E^(-kappa a) / Cos[el a];

psi1[x_] := If[x > a, f E^(-kappa x), 0]
psi2[x_] := If[x > 0 && x < a, d Cos[el x], 0]
psi3[x_] := If[x < 0, psi1[-x] + psi2[-x], 0]
psi[x_] := psi1[x] + psi2[x] + psi3[x]

int = Integrate[psi[x]^2, {x, -Infinity, Infinity}];
psiNorm[x_] := psi[x] / Sqrt[int];

Plot[psiNorm[x], {x, -3, 3}, PlotRange -> All]

```



Out[88]=

---

File Edit Insert Format Cell Graphics Evaluation Palettes Window Help

```

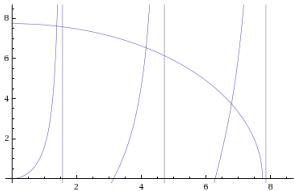
In[58]:= hbar = 1;
m = 1;
a = 1;

v0 = 30;

In[62]:= eta = .;
xi = .;

r0 = Sqrt[(2 m v0 a^2 / hbar^2)] // N;
eta = xi Tan[xi];
p1 = Plot[eta, {xi, 0, r0*1.1}];
eta = Sqrt[r0^2 - xi^2];
p2 = Plot[eta, {xi, 0, r0*1.1}];
Show[p1, p2, PlotRange -> {{0, r0*1.1}, {0, r0*1.1}}]

```



```

In[80]:= xi = .;
eta = .;
eq = xi Tan[xi] - Sqrt[r0^2 - xi^2];
sol = FindRoot[eq == 0, {xi, 4}]
kappa = xi Tan[xi] /. sol
energy = -(kappa^2 hbar^2 / (2 m)) /. kappa -> eta / a

```

Out[92]= {xi -> 4.14738}

Out[93]= 6.54211

Out[94]= -21.3996

Untitled-4\*

File Edit Insert Format Cell Graphics Evaluation Palettes Window Help

```

In[95]:= xi = xi /. sol;
eta = xi Tan[xi];
el = xi / a;
kappa = eta / a;

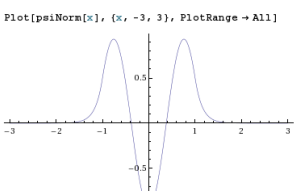
f = 1;
d = f E^(-kappa a) / Cos[el a];

psi1[x_] := If[x > a, f E^(-kappa x), 0]
psi2[x_] := If[x > 0 && x < a, d Cos[el x], 0]
psi3[x_] := If[x < 0, psi1[-x] + psi2[-x], 0]
psi[x_] := psi1[x] + psi2[x] + psi3[x]

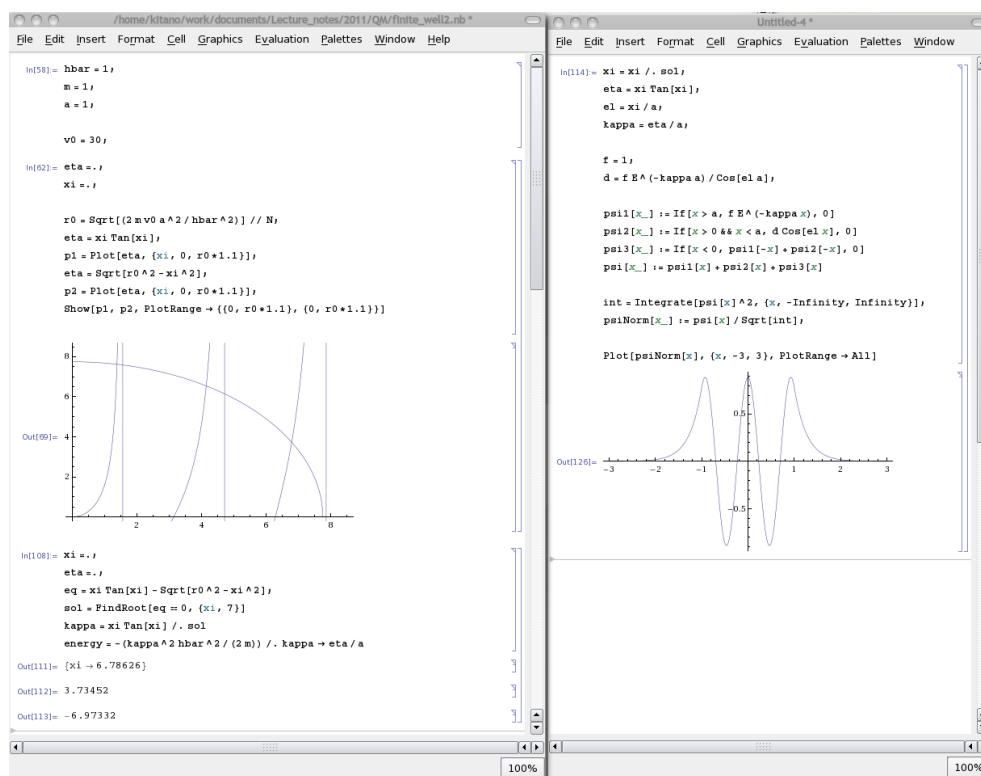
int = Integrate[psi[x]^2, {x, -Infinity, Infinity}];
psiNorm[x_] := psi[x] / Sqrt[int];

Plot[psiNorm[x], {x, -3, 3}, PlotRange -> All]

```



Out[107]=



たしかに、ちゃんとうまくつながってますね。エネルギーが

$$E_1 = -29.0\hbar^2/(ma^2), \quad E_3 = -21.4\hbar^2/(ma^2), \quad E_5 = -6.97\hbar^2/(ma^2), \quad (4.479)$$

と増えていくにつれて、 $\psi$  の節が 0 こ、2 こ、4 こと増えていってます。間があいてるのは、奇関数の解をまだ考慮してないからですね。横軸は  $x/a$  ですので、 $\psi$  は井戸の端 ( $x = \pm a$  の点) をはみ出ていることがわかります。束縛されているけど、回帰点より向こう側で粒子を発見する確率がゼロではないんですね。

奇関数の方もやりますか。奇関数なので、今度は

$$\psi(x) = \begin{cases} Fe^{-\kappa x} & (x > a) \\ C \sin(lx) & (0 < x < a) \\ -\psi(-x) & (x < 0) \end{cases} \quad (4.480)$$

ですね。また、 $x = a$  で解をつなぐために、

$$Fe^{-\kappa a} = C \sin(la), \quad -\kappa Fe^{-\kappa a} = lC \cos(la) \quad (4.481)$$

です。したがって、今度は

$$\kappa = -l \cot(la) \Rightarrow \eta = -\xi \cot(\xi) \quad (4.482)$$

となりました。また、Mathematica 先生にお願いするとこの様に解が見つかりますね。

The image displays four Mathematica notebook windows arranged in a 2x2 grid, showing the process of solving a problem. Each window contains code and its corresponding output.

**Top-Left Window:** Contains initial code defining parameters  $hbar=1, m=1, a=1, v_0=30$  and a function  $\eta(x)$ . It plots  $\eta(x)$  for  $x \in [0, 8]$ . The plot shows a curve that starts at  $\eta \approx 8$  and decreases, with several vertical asymptotes.

**Top-Right Window:** Shows the solution for  $x_1$  using `FindRoot`. The solution is  $x_1 \rightarrow 2.77517$ . It then defines  $\kappa$  and  $\text{energy}$ . The plot shows  $\text{psiNorm}[x]$  for  $x \in [-3, 3]$ , which is a smooth curve with a peak near  $x=0$ .

**Bottom-Left Window:** Shows the same code as the top-left, but with `FindRoot` range changed to  $\{x_1, 5\}$ . The solution is  $x_1 \rightarrow 5.49461$ .

**Bottom-Right Window:** Shows the resulting  $\text{psiNorm}[x]$  plot for the second case, which is a smooth curve with two peaks, one near  $x=0$  and another near  $x=1$ .

エネルギーは小さい方が  $E_1$  と  $E_3$  の間に、大きい方は  $E_3$  と  $E_5$  の間にありますね。節の数も奇数個です。(そりゃそうだろ。)

奇関数の場合は、ポテンシャルをあまり浅くすると解がなくなるようです。

$$\eta > 0 \Rightarrow \xi > \frac{\pi}{2} \quad (4.483)$$

ですので、円の半径が  $\pi/2$  以下、つまり

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} < \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \quad (4.484)$$

となると交点がありません。つまり、

$$V_0 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \quad (4.485)$$

では奇関数の解はなくて、束縛状態はただ一つになります。

井戸がとっても深いときは、交点が

$$\xi \simeq \frac{n\pi}{2}, \quad (n = 2, 4, 6, \dots) \quad (4.486)$$

のところになります。したがって、偶関数のときに予定していたのがちゃんとでてますね。

#### 4.8.2 散乱状態

つぎは、 $E > 0$  の散乱状態について考えましょう。 $x < -a$  では、

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad (x < -a) \quad (4.487)$$

ですね。ただし、

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (4.488)$$

です。井戸のなかでは、 $V(x) = -V_0$  ですので、

$$\psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx), \quad (-a < x < a) \quad (4.489)$$

です。ただし、

$$l \equiv \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar} \quad (4.490)$$

です。最後に、井戸の右側では、

$$\psi(x) = Fe^{ikx} \quad (4.491)$$

ですね。前にやったときと同じく、右からくる波はないとしました。

それでは、解を接続しましょう。  $x = -a$  での連続性から

$$Ae^{ik(-a)} + Be^{-ik(-a)} = C \sin(-la) + D \cos(-la) \quad (4.492)$$

$$\Rightarrow Ae^{-ika} + Be^{ika} = -C \sin(la) + D \cos(la) \quad (4.493)$$

です。  $d\psi/dx$  の連続性から

$$ikAe^{ik(-a)} - ikBe^{-ik(-a)} = lC \cos(l(-a)) - lD \sin(l(-a)) \quad (4.494)$$

$$\Rightarrow ikAe^{-ika} - ikBe^{ika} = lC \cos(la) + lD \sin(la) \quad (4.495)$$

ですね。  $x = a$  でも同様にやれば、

$$C \sin(la) + D \cos(la) = Fe^{ika}, \quad (4.496)$$

$$lC \cos(la) - lD \sin(la) = ikFe^{ika} \quad (4.497)$$

ですね。4つ式があるので、  $A, B, C, D, F$  の比は決定できるはず。

$A, B, C, D$  を  $F$  で表してみましょう。まずは、  $C$  と  $D$  を解きますか。式 (4.496) と式 (4.497) から、

$$\begin{aligned} & (\text{式 (4.496)}) \times l \sin(la) + (\text{式 (4.497)}) \times \cos(la) \\ & \Rightarrow lC \sin^2(la) + lC \cos^2(la) = lFe^{ika} \sin(la) + ikFe^{ika} \cos(la) \\ & \Rightarrow lC = lFe^{ika} \left( \sin(la) + \frac{ik}{l} \cos(la) \right) \\ & \Rightarrow C = Fe^{ika} \left( \sin(la) + \frac{ik}{l} \cos(la) \right) \end{aligned} \quad (4.498)$$



$$\begin{aligned}
& (\text{式 (4.496)}) \times l \cos(la) - (\text{式 (4.497)}) \times \sin(la) \\
& \Rightarrow lD \cos^2(la) + lD \sin^2(la) = lF e^{ika} \cos(la) - ikF e^{ika} \sin(la) \\
& \Rightarrow lD = lF e^{ika} \left( \cos(la) - \frac{ik}{l} \sin(la) \right) \\
& \Rightarrow D = F e^{ika} \left( \cos(la) - \frac{ik}{l} \sin(la) \right) \tag{4.499}
\end{aligned}$$

です。これをつかって、 $A$ と $B$ を処理しましょう。

$$\begin{aligned}
& (\text{式 (4.493)}) \times (ik) + (\text{式 (4.495)}) \\
& \Rightarrow 2ikAe^{-ika} = C(-ik \sin(la) + l \cos(la)) + D(ik \cos(la) + l \sin(la)) \\
& = F e^{ika} \left( \sin(la) + \frac{ik}{l} \cos(la) \right) (-ik \sin(la) + l \cos(la)) \\
& \quad + F e^{ika} \left( \cos(la) - \frac{ik}{l} \sin(la) \right) (ik \cos(la) + l \sin(la)) \\
\Rightarrow A & = \frac{1}{2ik} e^{2ika} F \left[ (-ik - ik) \sin^2(la) + \left( l + \frac{k^2}{l} + l + \frac{k^2}{l} \right) \sin(la) \cos(la) + (ik + ik) \cos^2(la) \right] \\
& = \frac{1}{2ik} e^{2ika} F \left[ (-ik)(1 - \cos(2la)) + \left( l + \frac{k^2}{l} \right) \sin(2la) + (ik)(1 + \cos(2la)) \right] \\
& = e^{2ika} F \left[ \cos(2la) + \frac{k^2 + l^2}{2ikl} \sin(2la) \right] \tag{4.500}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& (\text{式 (4.493)}) \times (ik) - (\text{式 (4.495)}) \\
& \Rightarrow 2ikBe^{ika} = C(-ik \sin(la) - l \cos(la)) + D(ik \cos(la) - l \sin(la)) \\
& = F e^{ika} \left( \sin(la) + \frac{ik}{l} \cos(la) \right) (-ik \sin(la) - l \cos(la)) \\
& \quad + F e^{ika} \left( \cos(la) - \frac{ik}{l} \sin(la) \right) (ik \cos(la) - l \sin(la)) \\
\Rightarrow B & = \frac{1}{2ik} F \left[ (-ik + ik) \sin^2(la) + \left( \frac{k^2}{l} - l - l + \frac{k^2}{l} \right) \sin(la) \cos(la) + (-ik + ik) \cos^2(la) \right] \\
& = \frac{1}{2ik} F \left( \frac{k^2}{l} - l \right) \sin(2la) \\
& = F \cdot \frac{k^2 - l^2}{2ikl} \sin(2la) \tag{4.501}
\end{aligned}$$

なかなか面倒でしたね。デルタ関数のときと同様に、反射率と透過率を計算できます。

$$\begin{aligned}
 R &= \frac{|B|^2}{|A|^2} \\
 &= \frac{\left| \frac{k^2 - l^2}{2ikl} \sin(2la) \right|^2}{\left| \cos(2la) + \frac{k^2 + l^2}{2ikl} \sin(2la) \right|^2} \\
 &= \frac{\frac{(k^2 - l^2)^2}{4k^2 l^2} \sin^2(2la)}{\cos^2(2la) + \frac{(k^2 + l^2)^2}{4k^2 l^2} \sin^2(2la)} \\
 &= \frac{\frac{(k^2 - l^2)^2}{4k^2 l^2} \sin^2(2la)}{1 + \left( \frac{(k^2 + l^2)^2}{4k^2 l^2} - 1 \right) \sin^2(2la)} \\
 &= \frac{\frac{(k^2 - l^2)^2}{4k^2 l^2} \sin^2(2la)}{1 + \frac{(k^2 - l^2)^2}{4k^2 l^2} \sin^2(2la)} \\
 &= \frac{(k^2 - l^2)^2 \sin^2(2la)}{4k^2 l^2 + (k^2 - l^2)^2 \sin^2(2la)} \\
 &= \frac{V_0^2 \sin^2(2la)}{4E(E + V_0) + V_0^2 \sin^2(2la)} \tag{4.502}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 T &= \frac{|F|^2}{|A|^2} \\
 &= \frac{1}{\left| \cos(2la) + \frac{k^2 + l^2}{2ikl} \sin(2la) \right|^2} \\
 &= \frac{1}{\cos^2(2la) + \frac{(k^2 + l^2)^2}{4k^2 l^2} \sin^2(2la)} \\
 &= \frac{4k^2 l^2}{1 + (k^2 - l^2)^2 \sin^2(2la)} \\
 &= \frac{4E(E + V_0)}{4E(E + V_0) + V_0^2 \sin^2(2la)} \tag{4.503}
 \end{aligned}$$

となりました。  $R + T = 1$  になってますよね。適当な入射エネルギーに対して、  $T < 1$  となるようですので、ポテンシャルの凹み(！)によって反射されてます。古典的にはそんなことは起こりませんよね。でも、  $\sin(2la) = 0$  を満たす特別なエネルギーのときには、  $T = 1$  となって、完全に透過します。つまり、エネルギーが

$$2la = \frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E_n + V_0)} = n\pi \tag{4.504}$$

$$\Rightarrow E_n + V_0 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2a)^2} \tag{4.505}$$

をみたとときに完全に透過です。これって、無限に深い井戸のときのエネルギーですよ。こういうのを共鳴現象とよびます。

波束の場合について、Mathematica 先生に動画を作ってもらいました。動画たちはこちら。

## 4.9 ポテンシャル障壁とトンネル効果

井戸型をひっくり返して、壁のポテンシャルの場合もやってみましょう。

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{for } -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{for } |x| > a \end{cases} \quad (4.506)$$

で、 $V_0 > 0$  の場合です。この場合、 $|x| \rightarrow \infty$  で  $V \rightarrow 0$  で、さらに  $V_{\min} = 0$  ですので、束縛状態はありません。したがって、散乱問題を考えましょう。 $|x| \geq a$  の領域では、井戸型のとときと同じなので、 $\psi$  は式 (4.487) と (4.491) で与えられます。これをそのまま使しましょう。

井戸の中については3つの場合がありますので、それぞれ、場合分けして考えていきます。

- $E < V_0$  の場合。

古典的には、壁を乗り越えられないような場合です。この場合は、

$$E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi \quad (4.507)$$

から、

$$\psi(x) = iC' \sinh(l'x) + D' \cosh(l'x), \quad (-a \leq x \leq a) \quad (4.508)$$

で、

$$l' = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (4.509)$$

です。

双曲線関数

$$\cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2}, \quad \sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}. \quad (4.510)$$

虚変数の三角関数として、

$$\cosh x = \cos(ix), \quad \sinh x = -i \sin(ix) \quad (4.511)$$

と書くこともできます。

$$\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1 \quad (4.512)$$

です。

つまり、井戸型のために  $A, B$  を  $F$  で表すって計算をしましたが、その計算のところで、

$$C \rightarrow C', \quad D \rightarrow D', \quad l \rightarrow il' \quad (4.513)$$

とすれば OK です。よって、

$$A = e^{2ika} F \left[ \cosh(2l'a) + \frac{k^2 - l'^2}{-2kl'} i \sinh(2l'a) \right], \quad (4.514)$$

$$B = F \cdot \frac{k^2 + l'^2}{-2kl'} i \sinh(2l'a). \quad (4.515)$$

ここから、

$$\begin{aligned} T &= \frac{|F|^2}{|A|^2} \\ &= \frac{1}{\cosh^2(2l'a) + \frac{(k^2 - l'^2)^2}{4k^2 l'^2} \sinh^2(2l'a)} \\ &= \frac{4k^2 l'^2}{4k^2 l'^2 (1 + \sinh^2(2l'a)) + (k^2 - l'^2)^2 \sinh^2(2l'a)} \\ &= \frac{4k^2 l'^2}{4k^2 l'^2 + (k^2 + l'^2)^2 \sinh^2(2l'a)} \\ &= \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2(2l'a)} \end{aligned} \quad (4.516)$$

となりました。

- $E = V_0$  の場合。

この場合は、壁の中で、

$$0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} \quad (4.517)$$

ですので、一般解は

$$\psi(x) = C''x + D'' \quad (4.518)$$

ですね。これを用いて頑張ると、

$$A = -ie^{2ika}(i + ka)F, \quad B = -ikaF \quad (4.519)$$

となって、

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{1 + (ka)^2} \\ &= \frac{\hbar^2}{\hbar^2 + 2ma^2V_0} \end{aligned} \quad (4.520)$$

これは、式 (4.516) の  $E \rightarrow V_0$  の極限に一致します。

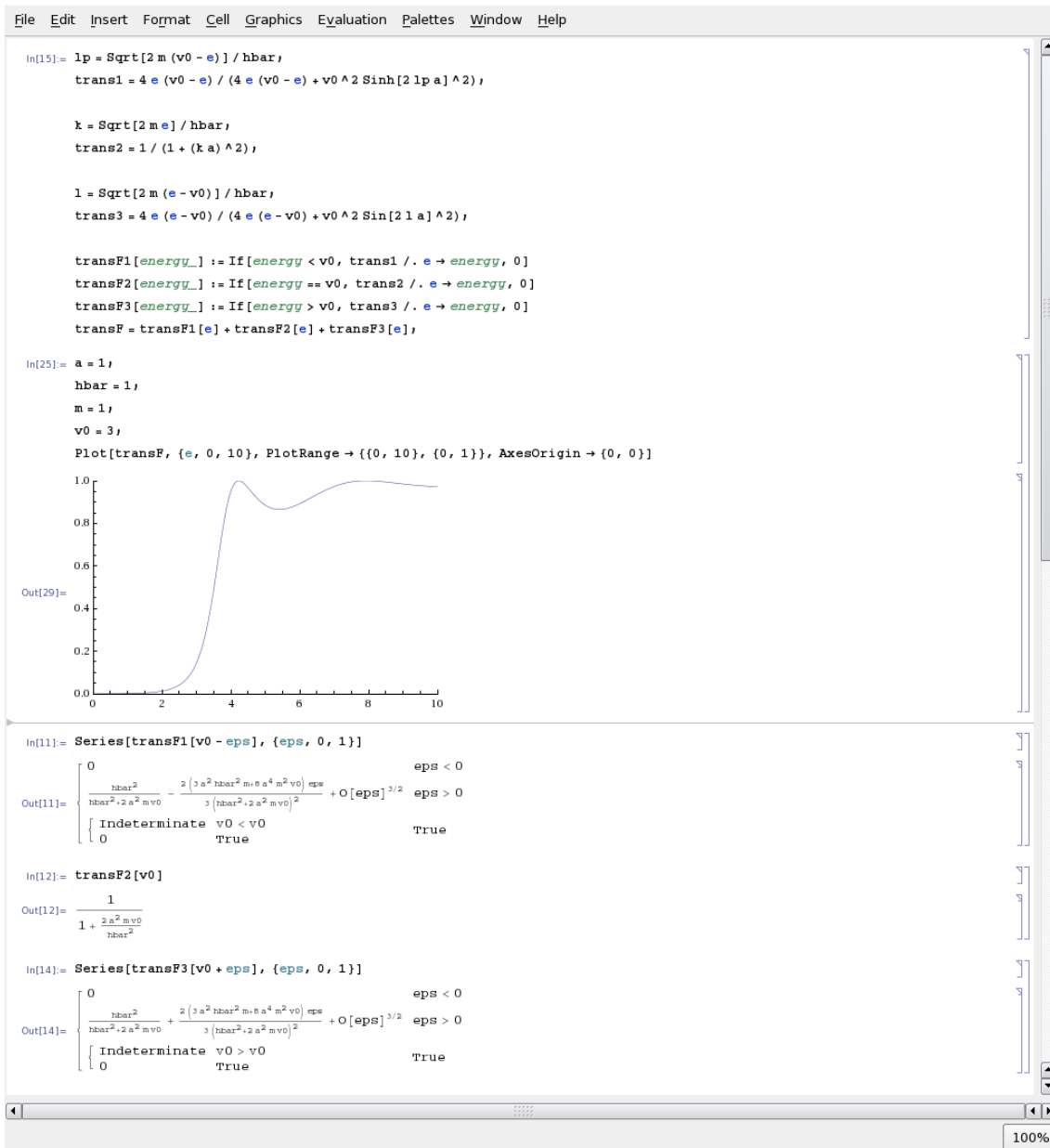
- $E > V_0$  の場合

この場合は、井戸型のとくと完全に同じで、

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2(2la)} \quad (4.521)$$

ですね。

まとめると、



のようになります。とくに、 $E < V_0$  のときでも透過していることがわかります。これぞ、トンネル効果です。動画もあるよ。

#### 4.9.1 Gamov の透過因子

長方形のポテンシャル障壁のとき、エネルギーが  $E < V_0$  のときの透過率  $T$  は、式 (4.516) でした。この式で、

$$l'a = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} a \gg 1 \quad (4.522)$$

の場合を考えてみましょう。(ちゃんと無次元量になってますか?) つまり、 $\hbar$  が小さいと思えるようなマクロな場合ですね。このとき、

$$\sinh^2(2l'a) \simeq \frac{e^{4l'a}}{4} \quad (4.523)$$

ですので、

$$\begin{aligned} T &\simeq \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-4l'a} \\ &= \exp \left[ -4l'a + \log \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \right] \\ &\simeq e^{-4l'a} \end{aligned} \quad (4.524)$$

となります。

前節では、壁の厚さ  $d = 2a$  ですから、

$$T \simeq e^{-2l'd} \quad (4.525)$$

ですね。

一般に長方形じゃない場合でも、ポテンシャルを長方形を並べたものだと近似すると、

$$\begin{aligned} T &\simeq \exp \left[ -2 \sum_i l'_i \Delta x \right] \\ &\simeq \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(V(x) - E)} dx \right] \end{aligned} \quad (4.526)$$

という近似式を得ることができます。これを Gamov の透過因子と呼びます。

## Chapter 5

# 量子力学の理論体系

これまで、いろいろな問題を解いてみて、量子力学の仕組みが少しずつわかってきましたよね。ここでは、その一般論を学びましょう。すこし、議論が抽象的ですが、そのうち慣れます。

### 5.1 ヒルベルト空間

量子力学を構成するのは、「波動関数」と「演算子」の2つです。波動関数はスカラー倍や足し算が定義されているので、ベクトルだと思えることができます。また、演算子について、 $\hat{x}$  や  $\hat{p}$ 、またこれらの足し算や掛け算でつくった  $Q(x, p)$  も線形演算子であるってことは見ましたね。これら、演算子は波動関数にかかります。つまり、

$$\text{量子力学の世界} = \text{線形代数} \quad (5.1)$$

です。

関数がベクトルっていうイメージわいてますか？ベクトルはベクトル空間に住んでますけど、関数もそうです。関数を元とする空間ってのがあります。その空間なんですけど、物理をやってるので関数全部でつくった空間ってわけにはいかないんですね。そうです。波動関数となるためには、規格化できなければなりません。

$$\int |\Psi|^2 dx = 1 \quad (5.2)$$

ですね。ってなわけで、関数のうち、「2乗可積分」という条件を満たすやつらだけでできた空間ってのを考えます。

$$\int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty \quad (5.3)$$



を満たす  $f(x)$  の集合です。これを「ヒルベルト空間」といいます。積分範囲を  $a$  から  $b$  までにしましたが、物理の問題のほとんどの場合で  $-\infty$  から  $\infty$  ですよ。

これからは、関数もベクトルっぽく書きましょう。つまり、

$$|f\rangle \tag{5.4}$$

こんな風に。これを縦ベクトルの気分で使いましょう。ベクトル空間っていても、関数の場合はその次元(基底の数)は無限です。(フーリエ級数展開を思い出そう!)それでも、線形代数で習った定理は結構成り立ちます。

ベクトル空間ができたなら、つぎは内積を定義してみたくになりますよね。自然な定義は

$$\langle f|g\rangle \equiv \int_a^b f(x)^* g(x) dx \tag{5.5}$$

です。 $\langle f|$ ってというのは、横ベクトル(みたいなもん)です。この定義から

$$\langle g|f\rangle = \langle f|g\rangle^* \tag{5.6}$$

っていうのがわかります。

つぎに、ベクトルの正規直交系ってのはその名のごとく、

$$\langle f_m|f_n\rangle = \delta_{mn} \tag{5.7}$$

なるベクトル(つまり関数)の組  $\{f_n\}$  です。これらが、完全系をなしているときは、例のごとく、すべての関数はこれらの線形結合で書き表すことができます。

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x) \tag{5.8}$$

ですね。ベクトルの表式では

$$|f\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |f_n\rangle \tag{5.9}$$

です。このとき、

$$\begin{aligned} \langle f_n|f\rangle &= \langle f_n| \left( \sum_{m=1}^{\infty} c_m |f_m\rangle \right) \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} c_m \delta_{nm} \\ &= c_n \end{aligned} \tag{5.10}$$

ですね。式 (5.9) と式 (5.10) を組み合わせると、

$$|f\rangle = \sum_n |f_n\rangle \langle f_n|f\rangle \quad (5.11)$$

となります。フーリエの積分公式っていうのはこんな感じですよ。

## 5.2 物理量 (観測可能量・オブザーバブル)

物理量は線形演算子でしたね。じつは、そのなかでも特別なやつなんです。

### 5.2.1 エルミート演算子

物理量  $Q(x, p)$  の期待値を求めるルールは

$$\langle Q \rangle = \int \Psi^* \hat{Q} \Psi dx \quad (5.12)$$

でしたね。 $\hat{Q}$  は線形演算子です。ベクトルと行列の言葉では、

$$\langle Q \rangle = \langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle \quad (5.13)$$

ですね。ここで、物理量の期待値は実数でないと困ります。つまり、

$$\langle Q \rangle^* = \langle Q \rangle \quad (5.14)$$

したがって、内積の性質から、

$$\langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle = \langle \hat{Q} | \Psi | \Psi \rangle \quad (5.15)$$

でなければならないということです。つまり、物理量を表す演算子はあらゆる関数  $f(x)$  に対して、

$$\langle f | \hat{Q} | f \rangle = \langle \hat{Q} | f | f \rangle \quad (5.16)$$

を満たします。このような演算子を「エルミート演算子」と呼びます。つまり、

$$\text{物理量はエルミート演算子！} \quad (5.17)$$

です。

ここで、二つの関数  $g_1(x), g_2(x)$  の和にたいして上のルールを適用してみます。

$$\langle g_1 + g_2 | \hat{Q} | g_1 + g_2 \rangle = \langle g_1 | \hat{Q} | g_1 \rangle + \langle g_1 | \hat{Q} | g_2 \rangle + \langle g_2 | \hat{Q} | g_1 \rangle + \langle g_2 | \hat{Q} | g_2 \rangle \quad (5.18)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q} | g_1 + g_2 \rangle | g_1 + g_2 \rangle &= \langle \hat{Q} | g_1 \rangle | g_1 \rangle + \langle \hat{Q} | g_1 \rangle | g_2 \rangle + \langle \hat{Q} | g_2 \rangle | g_1 \rangle + \langle \hat{Q} | g_2 \rangle | g_2 \rangle \\ &= \langle g_1 | \hat{Q} | g_1 \rangle + \langle \hat{Q} | g_1 \rangle | g_2 \rangle + \langle \hat{Q} | g_2 \rangle | g_1 \rangle + \langle g_2 | \hat{Q} | g_2 \rangle \end{aligned} \quad (5.19)$$

この2つは等しいので、

$$\langle g_1 | \hat{Q} | g_2 \rangle + \langle g_2 | \hat{Q} | g_1 \rangle = \langle \hat{Q} | g_1 \rangle | g_2 \rangle + \langle \hat{Q} | g_2 \rangle | g_1 \rangle \quad (5.20)$$

があらゆる関数  $g_1, g_2$  について成り立ちます。こんどは、 $g_1 + ig_2$  に対して、式 (5.16) のルールを適用してみます。

$$\langle g_1 + ig_2 | \hat{Q} | g_1 + ig_2 \rangle = \langle g_1 | \hat{Q} | g_1 \rangle + i \langle g_1 | \hat{Q} | g_2 \rangle - i \langle g_2 | \hat{Q} | g_1 \rangle + \langle g_2 | \hat{Q} | g_2 \rangle \quad (5.21)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q} | g_1 + ig_2 \rangle | g_1 + ig_2 \rangle &= \langle \hat{Q} | g_1 \rangle | g_1 \rangle + i \langle \hat{Q} | g_1 \rangle | g_2 \rangle - i \langle \hat{Q} | g_2 \rangle | g_1 \rangle + \langle \hat{Q} | g_2 \rangle | g_2 \rangle \\ &= \langle g_1 | \hat{Q} | g_1 \rangle + i \langle \hat{Q} | g_1 \rangle | g_2 \rangle - i \langle \hat{Q} | g_2 \rangle | g_1 \rangle + \langle g_2 | \hat{Q} | g_2 \rangle \end{aligned} \quad (5.22)$$

この2つが等しいので、

$$\langle g_1 | \hat{Q} | g_2 \rangle - \langle g_2 | \hat{Q} | g_1 \rangle = \langle \hat{Q} | g_1 \rangle | g_2 \rangle - \langle \hat{Q} | g_2 \rangle | g_1 \rangle \quad (5.23)$$

があらゆる関数の組  $g_1, g_2$  について成り立ちます。式 (5.20) と (5.23) により、結局、

$$\langle g_1 | \hat{Q} | g_2 \rangle = \langle \hat{Q} | g_1 \rangle | g_2 \rangle \quad (5.24)$$

があらゆる関数の組について成り立つということです。

ちゃんとエルミートになってるでしょうか？たとえば、位置演算子  $\hat{x}$  は明らかにエルミートですよ。

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{x} | g \rangle &= \int f^* x g dx \\ &= \int (x f)^* g dx \\ &= \langle \hat{x} f | g \rangle \end{aligned} \quad (5.25)$$

たしかに。では、運動量はどうでしょう？

$$\begin{aligned}
 \langle f|\hat{p}g\rangle &= \int f^* \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} g dx \\
 &= \left[ f^* \frac{\hbar}{i} g \right]_{-\infty}^{\infty} - \int \frac{\hbar}{i} \left( \frac{d}{dx} f^* \right) g dx \\
 &= \int \left( \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} f \right)^* g dx \\
 &= \langle \hat{p}f|g\rangle
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

たしかに。虚数単位の  $i$  が絶妙ですな。無限遠方で関数がゼロになることを使いました。

もうちょっと、エルミート演算子になれておきましょう。まず、エルミート共役ってものを定義しましょう。それは、ある演算子  $\hat{O}$  があつたとき、

$$\langle f|\hat{O}g\rangle = \langle \hat{O}^\dagger f|g\rangle \tag{5.27}$$

があらゆる関数  $f, g$  について成り立つとき、 $\hat{O}^\dagger$  は  $\hat{O}$  のエルミート共役といいます。エルミート演算子とは

$$\hat{O}^\dagger = \hat{O} \tag{5.28}$$

をみたく演算子ですね。

ちなみに、ある演算子  $\hat{O}$  にたいして、

$$\begin{aligned}
 \langle f|\hat{O}^\dagger g\rangle &= \langle \hat{O}^\dagger g|f\rangle^* \\
 &= \langle g|\hat{O}f\rangle^* \\
 &= \langle \hat{O}f|g\rangle
 \end{aligned} \tag{5.29}$$

なので、

$$\left(\hat{O}^\dagger\right)^\dagger = \hat{O} \tag{5.30}$$

ですね。それから、

$$\begin{aligned}
 \langle f|\hat{O}^\dagger(a_1g_1 + a_2g_2)\rangle &= \langle \hat{O}f|a_1g_1 + a_2g_2\rangle \\
 &= a_1\langle \hat{O}f|g_1\rangle + a_2\langle \hat{O}f|g_2\rangle \\
 &= a_1\langle f|\hat{O}^\dagger g_1\rangle + a_2\langle f|\hat{O}^\dagger g_2\rangle
 \end{aligned} \tag{5.31}$$

ですので、 $\hat{O}^\dagger$  は線形演算子です。

適当な線形演算子  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  の和について考えてみましょう。

$$\begin{aligned}\langle f | (\hat{A} + \hat{B}) g \rangle &= \langle f | \hat{A} g \rangle + \langle f | \hat{B} g \rangle \\ &= \langle \hat{A}^\dagger f | g \rangle + \langle \hat{B}^\dagger f | g \rangle \\ &= \langle (\hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger) f | g \rangle\end{aligned}\tag{5.32}$$

つまり、

$$(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger\tag{5.33}$$

積はどうでしょうか？

$$\begin{aligned}\langle f | \hat{A} \hat{B} g \rangle &= \langle \hat{A}^\dagger f | \hat{B} g \rangle \\ &= \langle \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger f | g \rangle\end{aligned}\tag{5.34}$$

つまり、

$$(\hat{A} \hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger\tag{5.35}$$

です。順番が入れ替わることに注意です。

とくに、 $\hat{Q}_1$  と  $\hat{Q}_2$  をエルミート演算子とすると、

$$(\hat{Q}_1 + \hat{Q}_2)^\dagger = \hat{Q}_1 + \hat{Q}_2\tag{5.36}$$

なので、「エルミート演算子の和はエルミート演算子」です。積については注意が必要で、

$$(\hat{Q}_1 \hat{Q}_2)^\dagger = \hat{Q}_2 \hat{Q}_1\tag{5.37}$$

と順番が入れ替わります。つまり、 $\hat{Q}_1 \hat{Q}_2 = \hat{Q}_2 \hat{Q}_1$  なら、 $\hat{Q}_1 \hat{Q}_2$  はエルミート演算子です。例えば、 $\hat{Q}_1^2$  とかはエルミート演算子です。 $\hat{Q}_1^3$  も  $(\hat{Q}_1^2) \hat{Q}_1$  とすれば、エルミートであることがわかりますね。つまり、 $\hat{Q}_1^n$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) はエルミート演算子です。ここから、ハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})\tag{5.38}$$

は

$$\hat{H}^\dagger = \frac{\hat{p}^{\dagger 2}}{2m} + V(\hat{x}^\dagger) = \hat{H} \quad (5.39)$$

となって、エルミート演算子であることがわかります。

## 5.2.2 固有状態

定常状態っていうのやりましたよね。これって、エネルギーのきまった状態でした。それでは、他の物理量  $\hat{Q}$  の決まった状態っていうのも考えることができます。そういうのを  $\hat{Q}$  の固有状態っていういます。

いま、 $\hat{Q}$  の固有状態を  $|\Psi\rangle$  とすると、分散がゼロになるはずなので、

$$\begin{aligned} \sigma_Q^2 &= \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2 \quad (\langle Q \rangle \text{ に } q \text{ って名前をつける}) \\ &= \langle (Q - q)^2 \rangle \\ &= \langle \Psi | (\hat{Q} - q)^2 \Psi \rangle \quad (\hat{Q} \text{ はエルミート演算子なので、}) \\ &= \langle (\hat{Q} - q)\Psi | (\hat{Q} - q)\Psi \rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (5.40)$$

です。自分自身との内積がゼロになるのは、ゼロベクトルのみなので、

$$|(\hat{Q} - q)\Psi\rangle = 0 \quad (5.41)$$

つまり、関数の言葉では

$$\hat{Q}\Psi = q\Psi \quad (5.42)$$

でなければなりません。これは、固有方程式ですね。つまり、 $\Psi$  は  $\hat{Q}$  の固有関数で、 $q$  はその固有値です。そうです、

$$\text{ある物理量 } \hat{Q} \text{ の決まった状態 (固有状態) とは、} \hat{Q} \text{ の固有関数} \quad (5.43)$$

なのです。 $\hat{Q}$  の固有状態で  $\hat{Q}$  の観測をすると、いつもある値  $q$  となります。

もちろん、例としては、ハミルトニアン  $\hat{H}$  ですね。

$$|\hat{H}\Psi\rangle = E|\Psi\rangle, \quad (\hat{H}\Psi(x, t) = E\Psi(x, t) \text{ の意味ですよ}) \quad (5.44)$$

っていうのを満たす状態  $\Psi$  は

$$\Psi = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (5.45)$$

でしたよね。ただし、 $\psi$  と  $E$  は時間によらないシュレーディンガー方程式の解とそれに対応する  $E$  ですね。

### 5.3 エルミート演算子あれこれ

エルミート演算子の固有関数、つまり、物理量の固有状態について考察しましょう。エネルギーのときにあったように、固有値がとびとびの場合と、連続的な場合と両方あります。とびとびの場合はまあ、いいのですが、連続的な場合は、固有関数が規格化できなくなりましたね。でもそれを足し合わせて規格化できるのをつくりました。ちょっと面倒ですね。というわけで、最初はとびとびからいきましょう。

#### 5.3.1 とびとび固有値の場合

1. 固有値は実数。

証明： $f$  をエルミート演算子  $\hat{Q}$  の固有関数とすると、

$$\hat{Q}f = qf \quad (5.46)$$

ですね。 $q$  は固有値です。で、

$$\langle f|\hat{Q}f\rangle = \int f^* qf dx = q\langle f|f\rangle \quad (5.47)$$

ですね。さらに、

$$\langle \hat{Q}f|f\rangle = \int (qf)^* f dx = q^*\langle f|f\rangle \quad (5.48)$$

ですね。エルミート演算子の定義からこの二つは等しいです。 $f$  はゼロでないので、結局、

$$q = q^* \quad (5.49)$$

です。

2. 異なる固有値に対応する固有関数は直交している。

証明：  $f$  と  $g$  を異なる固有値に対応する、エルミート演算子  $\hat{Q}$  の固有関数とすると、

$$\hat{Q}f = qf, \quad \hat{Q}g = q'g \quad (5.50)$$

です。そこで、

$$\langle f | \hat{Q}g \rangle = q' \langle f | g \rangle \quad (5.51)$$

それから、

$$\langle f | \hat{Q}g \rangle = \langle \hat{Q}f | g \rangle = q^* \langle f | g \rangle \quad (5.52)$$

ですね。  $q$  は実数なので、

$$q' \langle f | g \rangle = q \langle f | g \rangle \quad (5.53)$$

です。仮定より、  $q' \neq q$  ですので、

$$\langle f | g \rangle = 0 \quad (5.54)$$

です。つまり、直交してます。

これが、時間によらないシュレーディンガー方程式の解たち  $\psi_n$  が直交していた理由です。

$\psi_n$  はハミルトニアン固有関数なので、直交してるんですね。

それから、同じ固有値をもつ固有関数が複数あった場合（縮退という）でも、固有関数を直交するように選ぶことができます。グラム・シュミット直交化法を使えばいいんです。

つまり、たとえば、  $|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle$  が同じ固有値に対応する固有関数だった場合、その線形結合もやはり固有関数で固有値は同じですよ。なので、

$$|e'_1\rangle = \frac{|e_1\rangle}{\sqrt{\langle e_1 | e_1 \rangle}}, \quad (5.55)$$

$$|e'_2\rangle = c_2 (|e_2\rangle - \langle e'_1 | e_2 \rangle |e'_1\rangle) \quad (5.56)$$

として、  $c_2$  を適当に選べば、規格化された  $|e'_1\rangle$  に直交するベクトルにできます。3つめも

$$|e'_3\rangle = c_3 (|e_3\rangle - \langle e'_1 | e_3 \rangle |e'_1\rangle - \langle e'_2 | e_3 \rangle |e'_2\rangle) \quad (5.57)$$



とすれば、 $|e'_1\rangle$  と  $|e'_2\rangle$  に直交したベクトルが作れますね。もっとあってもこれを繰り返せばいいんですね。こうやって作ったやつらを独立な固有関数として採用すれば、

$$\text{「エルミート演算子の固有関数は直交関数系にとれる。」} \quad (5.58)$$

ということになります。

### 3. 物理量の固有関数は完備。(完全系をなす。)

有限次元の線形代数 ( $n \times n$  行列です) のときは、直交した独立なベクトルを  $n$  個もってくれば、あらゆるベクトルはその線形結合で書き表すことができました。しかも、一意に。これぞ、完備(完全)ってことでしたね。ヒルベルト空間みたいに次元が無限のときは、一般にはそうもいかないようですが、完全性は確率解釈になくはならない性質でしたね。(確率は足して1になるっていうのが、完全性でした。)したがって、ここで、こういうことにします。

「物理量を表すエルミート演算子の固有関数たちは完備な直交関数系をなす。」

$$(5.59)$$

### 5.3.2 連続的な固有値の場合

連続固有値の場合は、固有関数が規格化できませんでした。なので、内積が存在しないかもしれないので、前の節のように簡単に直交性やら固有値が実数やらということは、簡単には議論できません。例をつかって、理解していきましょう。

例：運動量の固有関数

$f_p(x)$  を  $\hat{p}$  の固有関数で、その固有値を  $p$  とすると

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} f_p(x) = p f_p(x) \quad (5.60)$$

ですね。一般解は

$$f_p(x) = A_p e^{ipx/\hbar} \quad (5.61)$$

です。この関数は規格化できませんね。  $p$  によらずに。したがって、運動量演算子の固有関数はヒルベルト空間にいません。

でもまあここで、 $p$  を実数に制限して議論を進めてみます。すると、直交性の性質は確かにもっていることがわかります。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} f_{p'}^*(x) f_p(x) dx &= A_{p'}^* A_p \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')x/\hbar} dx \\ &= A_{p'}^* A_p 2\pi\hbar \delta(p-p') \end{aligned} \quad (5.62)$$

です。

$$A_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (5.63)$$

と選ぶと、

$$f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (5.64)$$

で、

$$\langle f_{p'} | f_p \rangle = \delta(p-p') \quad (5.65)$$

となります。たしかに、直交っぽいですね。異なる固有値に関してはゼロになってます。これをもって、「ディラックの直交性」と呼びましょう。デルタ関数の次元を調べてください。 $p$  で積分して1になるんですから、 $[p^{-1}]$  の次元を持っています。左辺の次元とつじつまがあってますか？

さらに、完全性もどきの性質ももっています。っていうのは、ヒルベルト空間内のどんな関数も  $f_p(x)$  を重ね合わせてつくれるってものです。

$$\begin{aligned} f(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} c(p) f_p(x) dp \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) e^{ipx/\hbar} dp \end{aligned} \quad (5.66)$$

とできます。これは、フーリエ逆変換そのものですね。ちょっと  $\hbar$  がウザいですけど。  $c(p)$  が重みの関数ですね。  $f(x)$  が与えられていたときに  $c(p)$  が知りたかったらそれはフーリエ変換で

$$c(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ipx/\hbar} dx \quad (5.67)$$

とすればよろしいわけです。つまり、

$$c(p) = \langle f_p | f \rangle \quad (5.68)$$

です。

ここでやっと、ド・ブロイの公式が理解できます。

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \quad (5.69)$$

でしたね。運動量の固有関数が  $e^{ipx/\hbar}$  と正弦波であることがわかりました。しかも、その波長が確かに上で与えられるものになってます。たしかに、粒子(波束)は正弦波の重ね合わせで、運動量がよくきまった粒子(つまり、運動量の狭い範囲を重ね合わせた波束)に関しては、その粒子は波動の性質をもち、その波長は粒子の運動量と上の関係にあるわけです。

例：位置の固有関数

次は、位置の演算子  $\hat{x}$  についても考えてみましょう。運動量のとくと同様に、 $g_a(x)$  を  $\hat{x}$  の固有関数で、その固有値を  $a$  とします。そうすると、

$$\hat{x}g_a(x) = xg_a(x) = ag_a(x) \quad (5.70)$$

となるわけです。こんな性質をもっている関数、もう知ってますね。そうです、デルタ関数ですね。

$$g_a(x) = A_a\delta(x - a) \quad (5.71)$$

です。 $A_a$  は「規格化」定数。と言っても、やっぱり規格化できません。つまり、ヒルベルト空間にはいません。それでも、運動量のとくのように、ディラックの直交性を持ちます。

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} g_a^*(x)g_b(x)dx &= A_a^*A_b \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a)\delta(x - b)dx \\ &= A_a^*A_b\delta(a - b) \\ &= |A_a|^2\delta(a - b) \end{aligned} \quad (5.72)$$

です。したがって、任意の  $a$  について、 $A_a = 1$  と選ぶと、

$$g_a(x) = \delta(x - a) \quad (5.73)$$

で、

$$\langle g_a|g_b \rangle = \delta(a - b) \quad (5.74)$$

と、確かにディラックの直交性を持っていることがわかります。さらに、この固有関数は「完全性」ももっています。つまり、ヒルベルト空間内のどんな関数  $f(x)$  も  $g_a(x)$  の重ね合わせで作ることができます。

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(a)g_a(x)da \quad (5.75)$$

と表すことができます。当然、

$$c(a) = f(a) \quad (5.76)$$

とすれば、この等式が成り立ちますよね。

まとめると、エルミート演算子の固有値が連続的な場合、その演算子の固有関数は規格化できないので、ヒルベルト空間にはいません。でも、実固有値に対応する固有関数はディラックの直交性をもち、また完全性も持っています。

## 5.4 一般化された統計的解釈

さてさて、これまでは、波動関数  $\Psi(x, t)$  が与えられたら、時刻  $t$  に粒子を  $a < x < b$  に見つける確率が

$$P_{ab}(t) = \int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (5.77)$$

で与えられるという、ボルの統計的解釈というのに基づいた議論をしてきました。

それでは、位置でなはい他の物理量  $\hat{Q}(x, p)$  を観測してある値  $q$  に観測する確率はどのように計算したらよいのでしょうか？ エネルギーについてのときだけは、やりましたよね。ルールは、こうでした。

- 時間によらないシュレーディンガー方程式の解をあたえるような  $E$  のみが観測される。
- 時間によらないシュレーディンガー方程式の解  $\psi_n(x)$  とそれを与えるエネルギー  $E_n$  があつたとき、 $E_n$  に観測する確率  $P_n$  は

$$\begin{aligned} P_n &= |c_n|^2 \\ &= \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\Psi(x, 0)dx \right|^2 \\ &= |\langle \psi_n | \Psi(t=0) \rangle|^2 \end{aligned} \quad (5.78)$$

でした。  $t = 0$  としていますが、他の時刻でも同じ答えになりますよね。

他の物理量のときも同様です。ここで、一般のルールを設定します。波動関数  $\Psi(x, t)$  が与えられていて、物理量  $\hat{Q}(x, p) = Q\left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)$  を観測すると以下のようになります。まず、 $\hat{Q}$  の固有値がとびとび（離散的）なとき、

$$|\hat{Q}f_n\rangle = q_n|f_n\rangle \quad (5.79)$$

として、 $|f_n\rangle$  は規格化されているとします。そのとき、

統計的解釈のルール

- 観測されるのは  $\hat{Q}$  の固有値  $q_n$  のどれか。
- で、時刻  $t$  において、 $q_n$  に観測する確率  $P_n(t)$  は、

$$P_n(t) = |c_n(t)|^2, \quad \text{ただし、} c_n(t) = \langle f_n|\Psi(t)\rangle \quad (5.80)$$

である。

$\hat{Q}$  の固有値が連続的な場合でも同様に、

$$|\hat{Q}f_q\rangle = q|f_q\rangle \quad (5.81)$$

として、 $|f_q\rangle$  がディラックの直交性を持っている（つまり、デルタ関数で規格化されている）とします。このとき、

統計的解釈のルール（連続固有値バージョン）

- 時刻  $t$  において、 $Q$  を  $a < q < b$  に観測する確率  $P_{ab}(t)$  は、

$$P_{ab}(t) = \int_a^b |c_q(t)|^2 dq, \quad \text{ただし、} c_q(t) = \langle f_q|\Psi(t)\rangle \quad (5.82)$$

である。

以上のルールでいままでやってきたことが全部すっきりしますよね。

物理量の固有関数は完全系をはるので、波動関数  $\Psi(x, t)$  はその固有関数で展開できます。

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|f_n\rangle \quad (5.83)$$

こうですね。ここから、 $c_n(t)$  は

$$c_n(t) = \langle f_n | \Psi(t) \rangle \quad (5.84)$$

ってというのは、直交性からあきらかですね。で、ルールによると、これの絶対値の2乗が確率ってわけです。つまり、

$$\text{「 確率は波動関数を固有関数で展開した係数の絶対値の2乗 」} \quad (5.85)$$

なのです。

ルールがちゃんとなってるかのチェックとして、確率が足したら1になるかどうかというのを調べてみましょう。これは、エネルギーのときにやったのと同じで、波動関数の規格化からしたがいいます。

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle \\ &= \sum_n \sum_m c_n^*(t) c_m(t) \langle f_n | f_m \rangle \\ &= \sum_n \sum_m c_n^*(t) c_m(t) \delta_{nm} \quad (\text{直交性!}) \\ &= \sum_n |c_n(t)|^2 \end{aligned} \quad (5.86)$$

示せました。期待値のルールとの整合性もチェックできます。

$$\begin{aligned} \langle Q(t) \rangle &= \int \Psi^*(x, t) \hat{Q} \Psi(x, t) dx \\ &= \langle \Psi(t) | \hat{Q} \Psi(t) \rangle \\ &= \sum_n \sum_m c_n^*(t) c_m(t) \langle f_n | \hat{Q} f_m \rangle \\ &= \sum_n \sum_m c_n^*(t) c_m(t) q_m \langle f_n | f_m \rangle \\ &= \sum_n \sum_m c_n^*(t) c_m(t) q_m \delta_{nm} \\ &= \sum_n |c_n(t)|^2 q_n \end{aligned} \quad (5.87)$$

ですので、確かに確率からもとめた期待値と、昔導入した期待値のルールは同じものになります。

どれどれ、このルールにしたがって、位置  $x$  を  $a < x < b$  に観測する確率を求めてみましょう。まず、規格化された位置演算子  $\hat{x}$  の固有関数は、

$$g_q(x) = \delta(x - q) \quad (5.88)$$

でしたね。この関数で、状態  $\Psi(x, t)$  を展開すると、

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c_q(t) g_q(x) dx \quad (5.89)$$

で、

$$\begin{aligned} c_q(t) &= \langle g_q | \Psi(t) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - q) \Psi(x, t) dx \\ &= \Psi(q, t) \end{aligned} \quad (5.90)$$

ですね。したがって、求める確率は

$$\begin{aligned} P_{ab}(t) &= \int_a^b |c_q(t)|^2 dq \\ &= \int_a^b |\Psi(q, t)|^2 dq \end{aligned} \quad (5.91)$$

です。たしかに、最初に設定したルールどおりですね。

それじゃあ、運動量はどうでしょう？ 規格化された運動量の固有関数は

$$f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (5.92)$$

でした。したがって、

$$\langle f_p | \Psi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \Psi(x, t) dx \quad (5.93)$$

ですね。これはとっても重要な関数なので、名前がついてて、「運動量空間の波動関数」といいます。

運動量空間の波動関数

$$\Phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \Psi(x, t) dx \quad (5.94)$$

フーリエ逆変換すると、

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \Phi(p, t) dp \quad (5.95)$$

ですね。運動量を  $p_0 < p < p_1$  に観測する確率は、 $\Phi(p, t)$  をもちいて

$$P_{01}(t) = \int_{p_0}^{p_1} |\Phi(p, t)|^2 dp \quad (5.96)$$

となります。

## 5.5 不確定性原理

まえにやりましたね。

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (5.97)$$

っていうの。これを示しましょう。

### 5.5.1 一般化された不確定性原理

まず、一般に物理量  $\hat{A}$  があつたとき、分散は

$$\sigma_A^2 = \langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi(t) | (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi(t) \rangle = \langle f | f \rangle \quad (5.98)$$

とかくことができます。ただし、 $f \equiv (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi$  ですね。他の物理量  $\hat{B}$  についても同様に、

$$\sigma_B^2 = \langle g | g \rangle \quad (5.99)$$

ただし、 $g \equiv (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi$  です。シュワルツの不等式（証明は後ほど）を使うと、

$$\begin{aligned} \sigma_A^2 \sigma_B^2 &= \langle f | f \rangle \langle g | g \rangle \\ &\geq |\langle f | g \rangle|^2 \\ &= (\operatorname{Re} [\langle f | g \rangle])^2 + (\operatorname{Im} [\langle f | g \rangle])^2 \\ &\geq (\operatorname{Im} [\langle f | g \rangle])^2 \\ &= \left( \frac{1}{2i} [\langle f | g \rangle - \langle g | f \rangle] \right)^2 \end{aligned} \quad (5.100)$$



となります。つぎに、

$$\begin{aligned}
 \langle f|g \rangle &= \langle (\hat{A} - \langle A \rangle)\Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle)\Psi \rangle \\
 &= \langle \hat{A}\Psi | \hat{B}\Psi \rangle - \langle A \rangle \langle \Psi | \hat{B}\Psi \rangle - \langle B \rangle \langle \hat{A}\Psi | \Psi \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle \\
 &= \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle
 \end{aligned} \tag{5.101}$$

ですね。 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ がエルミート演算子であることを使ってます。同様に、

$$\langle g|f \rangle = \langle BA \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle \tag{5.102}$$

ですね。したがって、結局、

一般化された不確定性原理

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left( \frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right)^2 \tag{5.103}$$

を得ます。重要なのは、これは、確率解釈からの帰結であって、「原理」というわけではありません。

シュワルツの不等式の証明

$$|\gamma\rangle = |\beta\rangle - \frac{\langle \alpha | \beta \rangle}{\langle \alpha | \alpha \rangle} |\alpha\rangle \tag{5.104}$$

なるものを定義すると、

$$\begin{aligned}
 \langle \gamma | \gamma \rangle &= \left( \langle \beta | - \frac{\langle \alpha | \beta \rangle^*}{\langle \alpha | \alpha \rangle} \langle \alpha | \right) \left( |\beta\rangle - \frac{\langle \alpha | \beta \rangle}{\langle \alpha | \alpha \rangle} |\alpha\rangle \right) \\
 &= \langle \beta | \beta \rangle - \frac{|\langle \alpha | \beta \rangle|^2}{\langle \alpha | \alpha \rangle} - \frac{|\langle \alpha | \beta \rangle|^2}{\langle \alpha | \alpha \rangle} + \frac{|\langle \alpha | \beta \rangle|^2}{\langle \alpha | \alpha \rangle} \\
 &= \langle \beta | \beta \rangle - \frac{|\langle \alpha | \beta \rangle|^2}{\langle \alpha | \alpha \rangle} \\
 &\geq 0
 \end{aligned} \tag{5.105}$$

したがって、

$$|\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \leq \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \tag{5.106}$$

ですね。 $\langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0$ も使いましたよ。

たとえば、 $\hat{A} = \hat{x}$ 、 $\hat{B} = \hat{p}$ としてみましょう。そうすると、

$$\begin{aligned}\sigma_x^2 \sigma_p^2 &\geq \left( \frac{1}{2i} \langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle \right)^2 \\ &= \left( \frac{1}{2i} \langle i\hbar \rangle \right)^2 \quad (\text{正準交換関係}) \\ &= \left( \frac{\hbar}{2} \right)^2\end{aligned}\tag{5.107}$$

となって、その昔やった不確定性原理が導けました。

一般化された不確定性原理の言うところは、

$$\text{「交換しない物理量が両方とも決まっているような状態はない。」}\tag{5.108}$$

ってことです。つまり、 $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ の時、片方がきまった値をとる状態(固有状態、 $\sigma_A = 0$ )はもう片方の固有状態ではないってことです。なぜなら、 $\sigma_B = 0$ は不確定性原理に反するから。

### 5.5.2 最小波束

$\sigma_x \sigma_p = \hbar/2$ となるような波動関数はどんな形なのでしょう？もう知ってますよね。そうです、ガウス関数でした。なぜそうなのか、シュワルツの不等式から理解できます。

式(5.100)で、一つ目の不等号が等号となるのは、 $g(x) = cf(x)$ の時ですね。二つめは、実部を捨て去ってるので、 $c\langle f|f \rangle$ は純虚数のときに等号になります。 $\langle f|f \rangle$ はその定義から実数ですので、結局、

$$g(x) = ia f(x), \quad \text{ただし、} a \text{は実数}\tag{5.109}$$

のとき、不確定性が最小となります。 $g$ と $f$ の定義を復活させると、

$$(\hat{p} - \langle p \rangle)\Psi = ia(\hat{x} - \langle x \rangle)\Psi\tag{5.110}$$

$$\Rightarrow \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \langle p \rangle \right) \Psi(x, t) = ia(x - \langle x \rangle)\Psi(x, t)\tag{5.111}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) = \frac{i}{\hbar} (ia(x - \langle x \rangle) + \langle p \rangle) \Psi(x, t)\tag{5.112}$$

ってことは、ある時刻  $t = t_0$  において、上の式を  $x$  についての微分方程式と見ますと

$$\Rightarrow \log \Psi(x, t_0) + C_0 = \frac{i}{\hbar} \left[ ia \left( \frac{x^2}{2} - \langle x \rangle x \right) + \langle p \rangle x \right] \quad (5.113)$$

$$\Rightarrow \Psi(x, t_0) = A e^{-a(x-\langle x \rangle)^2/2\hbar} e^{i\langle p \rangle x/\hbar} \quad (5.114)$$

ですね。ある時刻  $t_0$  で、波動関数がガウス関数型になったとき、そのとき、不確定性が最小になります。

### 5.5.3 エネルギーと時間の不確定性

位置と運動量の不確定性を

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (5.115)$$

と書くことがあります。似たような表記として

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \quad (5.116)$$

なんてのもよく見かけますが、これは観測値の分散に関する関係式だとは思わない方がいいです。ちょっと違うものです。っていうのは、時刻  $t$  っていうのは観測する量ではなくて、状態を記述するラベルとっておいた方がすっきりします。

それでは、式 (5.116) を導出してみましょう。まずは、一般論から。ある物理量  $\hat{Q}$  の期待値の時間変化を考えてみましょう。ここでは、 $\hat{Q}$  は陽に時間に依存していてもよいとしましょう。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle Q \rangle &= \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \hat{Q} \Psi(t) \rangle \\ &= \left\langle \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} \middle| \hat{Q} \Psi(t) \right\rangle + \left\langle \Psi(t) \middle| \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \Psi(t) \right\rangle + \left\langle \Psi(t) \middle| \hat{Q} \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} \right\rangle \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \langle \hat{H} \Psi | \hat{Q} \Psi(t) \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi(t) | \hat{Q} \hat{H} \Psi(t) \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle \end{aligned} \quad (5.117)$$

なんだか、おもしろい式がでてきましたね。もう一回書いときましょう。

$$\frac{d}{dt}\langle Q \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle \quad (5.118)$$

たとえば、 $\hat{Q}$  が陽に時間によらないとき、物理量  $\hat{Q}$  の期待値の時間発展はハミルトニアンによって記述されるわけですね。なんだか、古典論のときの式 (2.40) と似てますね。

さてさて、次は  $\hat{H}$  と  $\hat{Q}$  の不確定性関係を考えましょう。ここからは、 $\hat{Q}$  は陽に時間によらないとしましょう。

$$\sigma_H^2 \sigma_Q^2 \geq \left( \frac{1}{2i} \langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle \right)^2 \quad (5.119)$$

でしたね。この式に上の時間発展の式を代入すると、

$$\sigma_H^2 \sigma_Q^2 \geq \left( \frac{1}{2i} \frac{\hbar}{i} \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right)^2 = \left( \frac{\hbar}{2} \right)^2 \left( \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right)^2 \quad (5.120)$$

したがって、

$$\sigma_H \sigma_Q \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right| \quad (5.121)$$

ここで、 $\Delta E \equiv \sigma_H$  として、さらに、

$$\Delta t \equiv \frac{\sigma_Q}{|d\langle Q \rangle/dt|} \quad (5.122)$$

と  $\Delta t$  を「定義」します。そうすると、

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (5.123)$$

となりますね。つまり、ある物理量  $\hat{Q}$  に対して、その物理量の期待値が標準偏差の分だけ変化するのにかかる時間を  $\Delta t$  としたとき、その時間が小さいとエネルギーはよく決まらないってことです。エネルギーがよく決まっているような状態では、あらゆる物理量がゆっくりとしか変化していないってなわけですね。これが、「エネルギーと時間の不確定性関係」です。

これの、もっとも極端な例はすでにやりましたね。定常状態です。定常状態ではあらゆる物理量の期待値が変化しませんので、 $\Delta t \rightarrow \infty$  です。なので、 $\Delta E = 0$  となれるわけです。

## 5.6 ディラックの記法

いままで、波動関数  $\Psi(x, t)$  とか  $|\Psi(t)\rangle$  が状態を表す「ベクトル」として話を進めてきました。暗黙のうちにはこれらは位置  $x$  の関数ですね。ここで、もっと抽象化して話を進めることができます。

まず、状態  $|\mathcal{S}(t)\rangle$  っていうのを、特に位置の関数としてではなく、ヒルベルト空間に住んでいる「状態ベクトル」として導入します。また、物理量などの演算子はベクトルをベクトルにうつす「線形演算子」です。つまり、

$$\hat{Q}|\alpha\rangle = |\beta\rangle \quad (5.124)$$

です。

これまで、 $\langle\alpha|\beta\rangle$  みたいな形で内積をとってましたけど、 $\langle\alpha|$  なるものを独立なものとして扱うことができます。まあ、横ベクトルのようなもんですよ。もうちょっと真面目にいうと、 $\langle\alpha|$  っていうのは、ベクトル  $|\beta\rangle$  を複素数  $\langle\alpha|\beta\rangle$  へうつす写像として導入します。ディラック流に名前をつけて、 $\langle\alpha|$  をブラ、 $|\beta\rangle$  をケットと呼びます。二つあわせてブラケット（カッコ）となります。ブラとケットの集合は独立なベクトル空間をなします。また、ブラベクトルとケットベクトルには 1 対 1 の対応 ( $|\alpha\rangle \leftrightarrow \langle\alpha|$ ) があります。まあ、難しくいってるだけで、単に縦ベクトルと横ベクトルで大丈夫です。

内積はいままで関数の積 ( $f^*g$ ) の積分として定義してましたが、これも抽象化されて、次の性質をもつものとなります。

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*, \quad (5.125)$$

$$\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0, \quad (5.126)$$

ただし、0 になるときは  $|\alpha\rangle$  はゼロベクトル。また、

$$\langle\alpha|(a|\beta_1\rangle + b|\beta_2\rangle) = a\langle\alpha|\beta_1\rangle + b\langle\alpha|\beta_2\rangle. \quad (5.127)$$

演算子のエルミート共役は次のように定義されます。

$$\hat{Q}|\alpha\rangle = |\beta\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\alpha|\hat{Q}^\dagger = \langle\beta| \quad (5.128)$$

$\hat{Q}^\dagger$  っていうのはそれはそれで、ケットにかかる線形演算子です。こうすると、

$$\langle \gamma | \hat{Q} | \alpha \rangle^* = \langle \gamma | \beta \rangle^* = \langle \beta | \gamma \rangle = \langle \alpha | \hat{Q}^\dagger | \gamma \rangle \quad (5.129)$$

ですね。つまり、

$$\langle \gamma | \hat{Q} | \alpha \rangle^* = \langle \alpha | \hat{Q}^\dagger | \gamma \rangle \quad (5.130)$$

が任意の  $\langle \alpha |$ 、 $| \gamma \rangle$  について成り立ちます。それから、

$$\begin{aligned} \langle \gamma | \hat{Q}^\dagger | \alpha \rangle^* &= \langle \alpha | (\hat{Q}^\dagger)^\dagger | \gamma \rangle \quad (\text{式 (5.130) の左辺を代入}) \\ &= (\langle \alpha | \hat{Q} | \gamma \rangle^*)^* = \langle \alpha | \hat{Q} | \gamma \rangle \quad (\text{式 (5.130) の右辺を代入}) \end{aligned} \quad (5.131)$$

ですので、

$$(\hat{Q}^\dagger)^\dagger = \hat{Q} \quad (5.132)$$

ですね。また、エルミート演算子とは例によって

$$\hat{Q}^\dagger = \hat{Q} \quad (5.133)$$

が成り立つような演算子で、観測可能量はエルミート演算子です。

$\{|e_n\rangle\}$  を正規直交基底 ( 完備な正規直交系 ) とすると、その定義より、

$$\langle e_m | e_n \rangle = \delta_{mn} \quad (5.134)$$

ですね。ここで、基底 ( つまり完全系 ) をなしているってことは、あらゆるベクトルが  $|e_n\rangle$  で展開できて、

$$|\alpha\rangle = \sum_n |e_n\rangle \langle e_n | \alpha \rangle \quad (5.135)$$

ですね。(  $\langle e_m |$  を左からかけてみれば確かめられます。 ) つまり、ベクトルをベクトルへうつす線形演算子として、

$$\sum_n |e_n\rangle \langle e_n | \quad (5.136)$$

っていうのを考えると、それは、恒等変換の演算子 ( $\equiv 1$ ) なのですね。

完全性

$$\sum_n |e_n\rangle\langle e_n| = 1 \quad (5.137)$$

同様に、 $\{|e_z\rangle\}$  を連続固有値に対するディラック直交規格化された基底とすると、

連続的な場合

$$\langle e_{z'}|e_z\rangle = \delta(z - z'), \quad (5.138)$$

$$\int |e_z\rangle\langle e_z| dz = 1. \quad (5.139)$$

ですね。たとえば、 $|x\rangle$  と  $|p\rangle$  をそれぞれ、位置演算子  $\hat{x}$ 、運動量演算子  $\hat{p}$  のディラック規格化された固有ベクトルとして、

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \quad \hat{p}|p\rangle = p|p\rangle, \quad (5.140)$$

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x - x'), \quad \langle p'|p\rangle = \delta(p - p'), \quad (5.141)$$

$$\int |x\rangle\langle x| dx = 1, \quad \int |p\rangle\langle p| dp = 1. \quad (5.142)$$

我々の考えているヒルベルト空間はもはや位置  $x$  の関数の集まりっていうもんじゃなくともっと抽象的に状態ベクトルの集まりです。この状態ベクトルを基本的なものとして、量子力学を構成してみましょう。といっても、それほど変わりません。これまでの量子力学のルールは

量子力学のルール、波動関数バージョン

位置演算子  $\hat{x}$  と運動量演算子  $\hat{p}$  について、

$$\hat{x}\Psi(x, t) = x\Psi(x, t), \quad \hat{p}\Psi(x, t) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \quad (5.143)$$

で、物理量は  $\hat{x}$  や  $\hat{p}$  の積や和でつくったエルミート演算子。ハミルトニアンもその一つで、

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(x, t) \quad (5.144)$$

物理量  $\hat{Q}$  に対して、

$$\hat{Q}\phi_n(x) = q_n\phi_n(x), \quad \int \phi_m^*(x)\phi_n(x) dx = \delta_{mn} \quad (5.145)$$

とすると、観測値は  $q_n$  のどれかで、 $q_n$  に観測する確率は

$$P_n(t) = \left| \int \phi_n^*(x)\Psi(x, t) dx \right|^2. \quad (5.146)$$

でした。これと等価なのが、以下のルールです。

量子力学のルール、状態ベクトルバージョン

位置演算子  $\hat{x}$  と運動量演算子  $\hat{p}$  について、 $\hat{x}$  の固有ベクトルを  $|x\rangle$  とすると、

$$\langle x|\hat{x}|S(t)\rangle = x\langle x|S(t)\rangle, \quad \langle x|\hat{p}|S(t)\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle x|S(t)\rangle \quad (5.147)$$

で、物理量は  $\hat{x}$  や  $\hat{p}$  の積や和でつくったエルミート演算子。ハミルトニアンもその一つで、

$$i\hbar \frac{d}{dt} |S(t)\rangle = \hat{H}|S(t)\rangle. \quad (5.148)$$

物理量  $\hat{Q}$  に対して、

$$\hat{Q}|q_n\rangle = q_n|q_n\rangle, \quad \langle q_m|q_n\rangle = \delta_{mn} \quad (5.149)$$

とすると、観測値は  $q_n$  のどれかで、 $q_n$  に観測する確率は

$$P_n(t) = |\langle q_n|S(t)\rangle|^2. \quad (5.150)$$

まあ、ほとんどおなじですわな。

等価だっていうのは、すぐわかります。対応は、

$$\Psi(x, t) = \langle x|S(t)\rangle \quad (5.151)$$



逆は  $\int dx|x\rangle\langle x|$  をかければ

$$|S(t)\rangle = \int dx \Psi(x,t) |x\rangle \quad (5.152)$$

です。つまり、波動関数  $\Psi(x,t)$  っていうのは状態ベクトルを位置の固有ベクトルで展開したときの展開係数です。

さらに、波動関数バージョンでいうところの演算子  $\hat{A}$  (関数にかかる) と状態ベクトルバージョンでの演算子  $\hat{A}'$  (ケットにかかる) との対応は

$$\hat{A}' = \int dx |x\rangle \hat{A} \langle x| \quad (5.153)$$

です。ちょっとややこしいですね。左辺はただ、状態ベクトルにかかる演算子。右辺はまず、状態ベクトルを波動関数に直して、演算子をかけたものを係数として状態ベクトルを作るのですね。まあ、こう考えると、左辺のほうが便利ですね。たとえば、

$$\hat{x} = \int dx' |x'\rangle x' \langle x'|, \quad \hat{p} = \int dx' |x'\rangle \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} \langle x'| \quad (5.154)$$

ですね。

どれどれ、シュレーディンガー方程式をみてみましょう。

$$i\hbar \frac{d}{dt} |S(t)\rangle = \hat{H} |S(t)\rangle \quad (5.155)$$

でしたね。  $\langle x|$  をかけると

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x|S(t)\rangle = \langle x|\hat{H}|S(t)\rangle \quad (5.156)$$

ですね。それで、

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad (5.157)$$

とすれば、式 (5.147) を用いて、

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(x,t) \quad (5.158)$$

とたしかにシュレーディンガー方程式になりました。

式 (5.147) を使って状態空間の演算子としての  $\hat{x}$  と  $\hat{p}$  の間に正準交換関係が成り立つことをみましょう。

$$\begin{aligned}
 \langle x | [\hat{x}, \hat{p}] | \mathcal{S}(t) \rangle &= x \langle x | \hat{p} | \mathcal{S}(t) \rangle - \langle x | \hat{p} \hat{x} | \mathcal{S}(t) \rangle \\
 &= x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle x | \mathcal{S}(t) \rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle x | \hat{x} | \mathcal{S}(t) \rangle \\
 &= x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle x | \mathcal{S}(t) \rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x \langle x | \mathcal{S}(t) \rangle \\
 &= i\hbar \langle x | \mathcal{S}(t) \rangle
 \end{aligned} \tag{5.159}$$

ですね。  $|x\rangle$  を掛けて、  $x$  で積分すると、

$$\int dx |x\rangle \langle x | [\hat{x}, \hat{p}] | \mathcal{S}(t) \rangle = i\hbar \int dx |x\rangle \langle x | \mathcal{S}(t) \rangle \tag{5.160}$$

$$\Rightarrow [\hat{x}, \hat{p}] | \mathcal{S}(t) \rangle = i\hbar | \mathcal{S}(t) \rangle \tag{5.161}$$

です。  $| \mathcal{S}(t) \rangle$  は任意なので、

$$\Rightarrow [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \tag{5.162}$$

ってというのが、演算子として成り立つことが分かりますね。基底によらずに。

実は、逆も示すことができます。つまり、正準交換関係を満たす  $\hat{x}$  と  $\hat{p}$  に対して、式 (5.147) を導くことができます。やってみましょう。まず、おもむろに

$$\left( 1 - \frac{i\hat{p}\epsilon}{\hbar} \right) |x\rangle \tag{5.163}$$

なるベクトルを考えます。  $\epsilon$  は任意の実数、  $|x\rangle$  は  $\hat{x}$  の固有ベクトルです。このベクトルに  $\hat{x}$  をかけると、

$$\begin{aligned}
 \hat{x} \left( 1 - \frac{i\hat{p}\epsilon}{\hbar} \right) |x\rangle &= \hat{x}|x\rangle - \frac{i\epsilon}{\hbar} \hat{x}\hat{p}|x\rangle \\
 &= x|x\rangle - \frac{i\epsilon}{\hbar} (i\hbar + \hat{p}\hat{x})|x\rangle \quad (\text{固有ベクトルの性質と交換関係}) \\
 &= x|x\rangle - \frac{i\epsilon}{\hbar} (i\hbar + \hat{p}x)|x\rangle \quad (\text{固有ベクトルの性質}) \\
 &= (x + \epsilon) \left( 1 - \frac{i\hat{p}\epsilon}{\hbar} \right) |x\rangle + O(\epsilon^2)
 \end{aligned} \tag{5.164}$$

ですね。一方、

$$\hat{x}|x + \epsilon\rangle = (x + \epsilon)|x + \epsilon\rangle \quad (5.165)$$

ですから、

$$\left(1 - \frac{i\hat{p}\epsilon}{\hbar}\right)|x\rangle = A|x + \epsilon\rangle + O(\epsilon^2) \quad (5.166)$$

であることがわかります。Aは何か複素数ですが、 $\epsilon \rightarrow 0$ で  $A \rightarrow 1$ です。A = 1ととって、むしろ  $|x + \epsilon\rangle$  を定義することにします。そうすると、そのように定義された  $|x + \epsilon\rangle$  は  $O(\epsilon^2)$  を無視するオーダーできちんと規格化されてます。

$$\begin{aligned} \langle x' + \epsilon|x + \epsilon\rangle &= \langle x'| \left(1 + \frac{i\hat{p}\epsilon}{\hbar}\right) \left(1 - \frac{i\hat{p}\epsilon}{\hbar}\right) |x\rangle + O(\epsilon^2) \\ &= \langle x'|x\rangle + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (5.167)$$

結局、

$$\left(1 - \frac{i\hat{p}\epsilon}{\hbar}\right)|x\rangle = |x + \epsilon\rangle + O(\epsilon^2) \quad (5.168)$$

ですな。つまり、 $\epsilon$ を小さい数だとすると、 $1 - i\hat{p}\epsilon/\hbar$ は  $\hat{x}$ の固有値を  $\epsilon$ だけずらす演算子だということがわかります。上の式を変形すれば、

$$\hat{p}|x\rangle = -\frac{\hbar}{i} \frac{1}{\epsilon} (|x + \epsilon\rangle - |x\rangle) + O(\epsilon^2) \quad (5.169)$$

ですね。任意の状態ベクトルに対応するブラ  $\langle S(t)|$  をかけて、 $\epsilon \rightarrow 0$ の極限をとると、

$$\langle S(t)|\hat{p}|x\rangle = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle S(t)|x\rangle \quad (5.170)$$

$$\Rightarrow \langle x|\hat{p}|S(t)\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle x|S(t)\rangle \quad (5.171)$$

と示ことができました。ってことは式 (5.147) の代わりに正準交換関係を量子力学のルールとして採用して、次のようにできます。

位置演算子  $\hat{x}$  と運動量演算子  $\hat{p}$  っていうのがあって、

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (5.172)$$

で、物理量は  $\hat{x}$  や  $\hat{p}$  の積や和でつくったエルミート演算子。ハミルトニアンもその一つで、

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\mathcal{S}(t)\rangle = \hat{H} |\mathcal{S}(t)\rangle. \quad (5.173)$$

物理量  $\hat{Q}$  に対して、

$$\hat{Q} |q_n\rangle = q_n |q_n\rangle, \quad \langle q_m | q_n \rangle = \delta_{mn} \quad (5.174)$$

とすると、観測値は  $q_n$  のどれかで、 $q_n$  に観測する確率は

$$P_n(t) = |\langle q_n | \mathcal{S}(t) \rangle|^2. \quad (5.175)$$

だいぶ、整理されてきましたね。

ちなみに、式 (5.170) を形式的に解くと、

$$|x\rangle = e^{-i\hat{p}(x-a)/\hbar} |a\rangle \quad (5.176)$$

となります。ここの  $x$  は演算子じゃないですよ。  $a$  は任意の実数です。ただし、 $|a\rangle$  は

$$\hat{x}|a\rangle = a|a\rangle \quad (5.177)$$

となる  $\hat{x}$  の固有値  $a$  に対応する固有ベクトルです。こうしとけば、 $x = a$  でつじつまがあつてますね。式 (5.176) をもって、 $\hat{p}$  は空間並進の生成子と呼びます。  $a$  から  $x$  に進んでますので。

左から  $\langle p|$  をかけると、

$$\begin{aligned} \langle p|x\rangle &= \langle p|e^{-i\hat{p}(x-a)/\hbar}|a\rangle \\ &= \langle p|a\rangle e^{-ip(x-a)/\hbar} \\ &= \langle p|0\rangle e^{-ipx/\hbar} \quad (a = 0 \text{ ととった。}) \end{aligned} \quad (5.178)$$

ですね。で、規格化から、

$$\begin{aligned}
 \delta(p - p') &= \langle p|p' \rangle \\
 &= \int dx \langle p|x \rangle \langle x|p' \rangle \\
 &= \int |\langle p|0 \rangle|^2 e^{i(p'-p)x/\hbar} dx \\
 &= |\langle p|0 \rangle|^2 2\pi \delta((p' - p)/\hbar) \\
 &= |\langle p|0 \rangle|^2 2\pi \hbar \delta(p' - p)
 \end{aligned} \tag{5.179}$$

ですね。したがって、

$$|\langle p|0 \rangle| = \left| \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right| \tag{5.180}$$

というのがわかります。  $p$  によらずに。つまり、位相を適当に選べば、式 (5.178) と式 (5.180) より

$$\langle x|p \rangle = \langle p|x \rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \tag{5.181}$$

というのがわかります。

運動量空間の波動関数は

$$\Phi(p, t) = \langle p|\mathcal{S}(t) \rangle \tag{5.182}$$

と表すことができます。これは、実際、

$$\begin{aligned}
 \Phi(p, t) &= \int dx \langle p|x \rangle \langle x|\mathcal{S}(t) \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-ipx/\hbar} \Psi(x, t)
 \end{aligned} \tag{5.183}$$

ですので、まえに出てきた定義と同じですね。運動量の固有状態を位置の固有関数、つまり座標で表す操作がフーリエ変換ということがわかるでしょうか？

シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\mathcal{S}(t) \rangle = \hat{H} |\mathcal{S}(t) \rangle \tag{5.184}$$

を形式的に解くと、

$$|\mathcal{S}(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\mathcal{S}(0)\rangle \quad (5.185)$$

となります。ここで、ハミルトニアン固有状態を  $|n\rangle$  としましょう。

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (5.186)$$

ですね。するとシュレーディンガー方程式の解に完全系  $1 = \sum_n |n\rangle\langle n|$  をぶち込むと、

$$\begin{aligned} |\mathcal{S}(t)\rangle &= \sum_n e^{-i\hat{H}t/\hbar}|n\rangle\langle n|\mathcal{S}(0)\rangle \\ &= \sum_n |n\rangle\langle n|\mathcal{S}(0)\rangle e^{-iE_n t/\hbar} \end{aligned} \quad (5.187)$$

ですね。位置表示では、

$$\Psi(x, t) = \sum_n \langle x|n\rangle\langle n|\mathcal{S}(0)\rangle e^{-iE_n t/\hbar} \quad (5.188)$$

です。ここから、その昔やった  $\psi_n(x)$  や  $c_n$  との対応は

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle, \quad c_n = \langle n|\mathcal{S}(0)\rangle \quad (5.189)$$

ってのがわかります。 $\psi_n(x)$  は時間によらないシュレーディンガー方程式の解ですね。確率  $|c_n|^2$  の表式には、 $x$  は入ってきません。もちろん完全系をはさんで、

$$\begin{aligned} c_n &= \langle n|\mathcal{S}(0)\rangle \\ &= \int dx \langle n|x\rangle\langle x|\mathcal{S}(0)\rangle \\ &= \int dx \psi_n^* \Psi(x, 0) \end{aligned} \quad (5.190)$$

とすると、昔でてきた表式になりますね。ちなみに、時間によらないシュレーディンガー方程式は

$$\langle x|\hat{H}|n\rangle = E_n\langle x|n\rangle \quad (5.191)$$

です。

状態にはいろんな表し方があって、

$$\begin{aligned}
 |S(t)\rangle &= \int dx \Psi(x, t) |x\rangle \quad (\text{位置の固有関数による展開}) \\
 &= \int dp \Phi(p, t) |p\rangle = \int dp dx \Phi(p, t) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} |x\rangle \quad (\text{運動量の固有関数による展開}) \\
 &= \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle = \int dx \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x) |x\rangle \quad (\text{エネルギーの固有関数による展開}) \\
 &= \sum_n |q_n\rangle \langle q_n | S(t)\rangle \quad (\text{任意の物理量 } \hat{Q} \text{ の固有関数による展開}) \quad (5.192)
 \end{aligned}$$

です。講義の最初の方では、波動関数が主役でしたが、それには親玉の状態ケットがあって、波動関数はそれを位置の固有関数で展開した係数ですね。というわけで、これからは特に波動関数を使わなくても量子力学を議論できます。

状態  $|S(t)\rangle$  における物理量  $\hat{Q}$  の期待値は

$$\langle Q \rangle = \langle S(t) | \hat{Q} | S(t) \rangle \quad (5.193)$$

と書き表すことができます。なぜなら、 $q_n$  に観測する確率が  $|\langle q_n | S(t) \rangle|^2$  なので、期待値は

$$\begin{aligned}
 \langle Q \rangle &= \sum_n q_n |\langle q_n | S(t) \rangle|^2 \\
 &= \sum_n \langle S(t) | \hat{Q} | q_n \rangle \langle q_n | S(t) \rangle \\
 &= \langle S(t) | \hat{Q} | S(t) \rangle \quad (5.194)
 \end{aligned}$$

となります。

さてさて、このヒルベルト空間において、演算子っていうのは、ベクトルをベクトルにうつす「線形変換」で、

$$|\beta\rangle = \hat{Q} |\alpha\rangle \quad (5.195)$$

でしたね。 $|\alpha\rangle$ 、 $|\beta\rangle$  をある正規直交基底  $\{|e_n\rangle\}$  で展開すると、

$$|\alpha\rangle = \sum_n |e_n\rangle \langle e_n | \alpha \rangle = \sum_n a_n |e_n\rangle, \quad |\beta\rangle = \sum_n |e_n\rangle \langle e_n | \beta \rangle = \sum_n b_n |e_n\rangle, \quad (5.196)$$

ただし、

$$a_n = \langle e_n | \alpha \rangle, \quad b_n = \langle e_n | \beta \rangle \quad (5.197)$$

ですね。この基底において、 $a_n$  を  $b_n$  にうつすのが  $\hat{Q}$  の役割です。それは、行列

$$Q_{mn} \equiv \langle e_m | \hat{Q} | e_n \rangle \quad (5.198)$$

が担っています。なぜかという、式 (5.195) を展開して、

$$\sum_n b_n |e_n\rangle = \sum_n a_n \hat{Q} |e_n\rangle \quad (5.199)$$

$$\Rightarrow \sum_n b_n \langle e_m | e_n \rangle = \sum_n a_n \langle e_m | \hat{Q} | e_n \rangle \quad (5.200)$$

$$\Rightarrow \sum_n b_n \delta_{mn} = \sum_n a_n \langle e_m | \hat{Q} | e_n \rangle \quad (5.201)$$

$$\Rightarrow b_m = \sum_n a_n \langle e_m | \hat{Q} | e_n \rangle \quad (5.202)$$

$$\Rightarrow b_m = \sum_n Q_{mn} a_n \quad (5.203)$$

となりました。たしかに。

2 準位の例：

二つの線形独立な状態がある系を考えてみましょう。たとえば、 $K^0 - \bar{K}^0$  の系なんかですね。

$$|K^0\rangle, |\bar{K}^0\rangle \quad (5.204)$$

と二つの状態がありますが、量子力学ではこいつらが混ざった状態っていうのがあって、

$$|S(t)\rangle = a(t)|K^0\rangle + b(t)|\bar{K}^0\rangle \quad (5.205)$$

で、規格化から

$$|a(t)|^2 + |b(t)|^2 = 1 \quad (5.206)$$



です。

こいつらのハミルトニアンは行列要素は  $h$  と  $g$  を実数として

$$\langle K^0 | \hat{H} | K^0 \rangle = \langle \bar{K}^0 | \hat{H} | \bar{K}^0 \rangle = h \quad (5.207)$$

$$\langle K^0 | \hat{H} | \bar{K}^0 \rangle = \langle \bar{K}^0 | \hat{H} | K^0 \rangle = g \quad (5.208)$$

と表されます。(近似的にです。ほんとは CP の破れを考慮しなければおもしろくありません。)

つまり、

$$|K^0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\bar{K}^0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.209)$$

と書くと、

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} h & g \\ g & h \end{pmatrix} \quad (5.210)$$

です。

さて、初期条件が  $|\mathcal{S}(0)\rangle = |K^0\rangle$  で与えられていたとき、時刻  $t$  での状態ベクトルを求めましょう。

シュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\mathcal{S}(t)\rangle = \hat{H} |\mathcal{S}(t)\rangle \quad (5.211)$$

でしたね。やるべきことは簡単で、ハミルトニアン  $\hat{H}$  の固有値  $E_n$  と固有ベクトル  $|n\rangle$  を求めてしまえば、答えは

$$|\mathcal{S}(t)\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \mathcal{S}(0) \rangle e^{-iE_n t / \hbar} \quad (5.212)$$

でした。

式 (5.210) の固有値と固有ベクトルは

$$\hat{H} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = (h+g) \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad (5.213)$$

$$\hat{H} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = (h-g) \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad (5.214)$$

なので、答えは、

$$\begin{aligned} |S(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i(h+g)t/\hbar} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i(h-g)t/\hbar} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \\ &= e^{-iht/\hbar} \begin{pmatrix} \cos(gt/\hbar) \\ -i \sin(gt/\hbar) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.215)$$

となります。はじめ、 $|K^0\rangle$  だったのに、時間がたつにつれて振動する様子がわかります。これが  $K^0 - \bar{K}^0$  振動です。

## 5.7 Heisenberg 描像・Heisenberg 方程式

状態の時間発展は、シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} |S(t)\rangle = \hat{H} |S(t)\rangle \quad (5.216)$$

で表されますね。それから、物理量  $\hat{Q}$  の期待値は

$$\langle Q \rangle = \langle S(t) | \hat{Q} | S(t) \rangle \quad (5.217)$$

でした。

いままで、このように、状態ベクトルが時間に依存して刻一刻と変わっていくという描像をとっていました。これを「シュレーディンガー描像」といいます。まあ、なんともわかりやすい描像ですよ。

そうではなくて、状態ベクトルは時間によらず、演算子の方が時間によるっていう描像をとることもできます。これを「ハイゼンベルグ描像」といいます。難しいことを言っているようですが、何のことはありません。ただ単に、時間変数の押し付けあいです。まず、シュレーディンガー方程式を形式的にとくと、

$$|S(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |S(0)\rangle \quad (5.218)$$

と書くことができます。ただし、 $\hat{H}$  は陽に時間によらないとします。exp の肩に演算子がのっかっていますが、これは、exp の展開の無限級数によって定義されているとしましょう。

これを用いると、物理量  $\hat{Q}$  の期待値は

$$\langle Q \rangle = \langle S(0) | e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{Q} e^{-i\hat{H}t/\hbar} | S(0) \rangle \quad (5.219)$$

ですよね。ここで、ハイゼンベルグ描像の状態ベクトルと演算子を次のように定義します。

$$|S\rangle_H \equiv |S(0)\rangle, \quad (5.220)$$

$$\hat{Q}_H \equiv e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{Q} e^{-i\hat{H}t/\hbar}. \quad (5.221)$$

こうすると、まず、状態は時間に依存しませんが、演算子が時間に依存するようになります。物理量  $\hat{Q}$  の期待値は

$$\langle Q \rangle = {}_H\langle S | \hat{Q}_H | S \rangle_H \quad (5.222)$$

とシュレーディンガー描像と同じ形です。

それで、そのむかし、期待値の時間発展の方程式っていうのをやりましたよね。式 (5.118) です。もう一回書くと、

$$\frac{d}{dt} \langle Q \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle \quad (5.223)$$

でした。ハイゼンベルグ描像にいくと、状態ベクトルは時間に依存しませんので、これはそのまま、演算子の時間発展の方程式になって、

$$\frac{d}{dt} \hat{Q}_H = \frac{1}{i\hbar} [\hat{Q}_H, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{Q}_H}{\partial t} \quad (5.224)$$

となります。ちなみに、ハミルトニアン  $\hat{H}$  のハイゼンベルグ表示はそのままですよね。  $\hat{H}_H = \hat{H}$ 。これをハイゼンベルグ方程式とよびます。これが、ハイゼンベルグ描像での運動方程式ですね。

位置演算子  $\hat{x}$  と運動量演算子  $\hat{p}$  について、

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (5.225)$$

で、物理量は  $\hat{x}$  や  $\hat{p}$  の積や和でつくった演算子。ハミルトニアンもその一つで、

$$\frac{d}{dt}\hat{Q}_H = \frac{1}{i\hbar}[\hat{Q}_H, \hat{H}] + \frac{\partial\hat{Q}_H}{\partial t} \quad (5.226)$$

物理量  $\hat{Q}_H$  に対して、

$$\hat{Q}_H|q_n(t)\rangle = q_n|q_n(t)\rangle, \quad \langle q_m(t)|q_n(t)\rangle = \delta_{mn} \quad (5.227)$$

とすると、観測値は  $q_n$  のどれかで、 $q_n$  に観測する確率は

$$P_n(t) = |\langle q_n(t)|S\rangle|^2. \quad (5.228)$$

固有状態  $|q_n(t)\rangle$  は演算子が時間によるので、やっぱり時間によりますよね。でも、固有値はよりません。混乱してはいけません。時間によらないのは状態ベクトル  $|S\rangle$  であって、別に、時間によるベクトルを考えたっていいですよ。シュレーディンガー描像で、

$$\hat{Q}|q_n\rangle = q_n|q_n\rangle \quad (5.229)$$

と書いたとき、 $q_n$  も  $|q_n\rangle$  も時間によりません。これをつかって、

$$e^{i\hat{H}t}\hat{Q}e^{-i\hat{H}t}e^{i\hat{H}t}|q_n\rangle = q_n e^{i\hat{H}t}|q_n\rangle \quad (5.230)$$

ですね。左から  $e^{i\hat{H}t}$  をかけました。これを次のように書き換えます。

$$\hat{Q}_H|q_n(t)\rangle = q_n|q_n(t)\rangle, \quad |q_n(t)\rangle = e^{i\hat{H}t}|q_n\rangle \quad (5.231)$$

と、固有値は時間によらないですね。固有ベクトルはよります。

$\hat{Q}_H$  が陽に時間によらなくて、さらに  $\hat{H}$  と可換なとき、 $\hat{Q}_H$  は保存量を表します。

$$\frac{d}{dt}\hat{Q}_H = 0. \quad (5.232)$$

もっとも簡単な例はハミルトニアンそのものですね。

$$\frac{d}{dt}\hat{H} = 0. \quad (5.233)$$

これは、エネルギー保存則です。

## 5.8 正準量子化

量子力学を構成しているのは

$$[\hat{x}, \hat{x}] = 0, \quad [\hat{p}, \hat{p}] = 0, \quad \frac{1}{i\hbar}[\hat{x}, \hat{p}] = 1, \quad (5.234)$$

$$\frac{d}{dt}\hat{Q}_H = \frac{1}{i\hbar}[\hat{Q}_H, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{Q}_H}{\partial t}, \quad (5.235)$$

って関係式たちでした。この形にすると、古典論との対応がよくわかります。古典論にもそっくりな式たち、式(2.41)と(2.40)がありました。

$$\{x, x\}_{\text{P.B.}} = 0, \quad \{p, p\}_{\text{P.B.}} = 0, \quad \{x, p\}_{\text{P.B.}} = 1 \quad (5.236)$$

$$\frac{dQ}{dt} = \{Q, H\}_{\text{P.B.}} + \frac{\partial Q}{\partial t} \quad (5.237)$$

そうなんです。古典論から量子論への移行もしくはその逆は

$$\frac{1}{i\hbar}[\quad, \quad] \leftrightarrow \{ \quad, \quad \}_{\text{P.B.}} \quad (5.238)$$

によって行われていることがわかります。この様に、ポアソン括弧を交換関係に置き換える量子化方法を「正準量子化」とよびます。

エーレンフェストの定理ってやりましたよね。 $\hat{x}$ や $\hat{p}$ の期待値の時間発展は古典論の $x$ と $p$ のそれに等しいってやつ。これは確かに式(5.238)の主張するところです。思い出しますと、

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad (5.239)$$

として、古典論では

$$\{x, H\}_{\text{P.B.}} = \frac{\partial x}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial x}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial x} = \frac{p}{m}, \quad \{p, H\}_{\text{P.B.}} = \frac{\partial p}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial p}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial x} = -V'(x) \quad (5.240)$$

ですね。量子論では

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{2m} [\hat{x}, \hat{p}^2] = \frac{\hat{p}}{m}, \quad \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}, \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}, V(\hat{x})] = -V'(\hat{x}). \quad (5.241)$$

たしかに、同じような答えがでます。ってことは、つまり同じ方程式が出てくるということです。これはすごいことを言ってます。古典論があったとき、古典論の運動方程式を  $x$  と  $p$  で書きます。そうすると、量子論の運動方程式(ただしハイゼンベルグ描像)はそっくりそのまま、 $x$  を  $\hat{x}$  に、 $p$  を  $\hat{p}$  に変えちゃえば得られるっていうんです。なんだ、簡単じゃん。ただし、演算子の順序に不定性がでますので、そういうときは注意が必要ですが。シュレーディンガー方程式を最初に見たら、なんで、これがニュートンの運動方程式を含んでいるのか良くわかりませんよね。でも、ハイゼンベルグ描像にいくと、運動方程式は同じ形なんですね。ただ、数から演算子に格上げしただけなんです。

なんで、括弧を変えても同じ方程式がでてくるのでしょうか？これは、ポアソン括弧と交換関係は両方とも交代性、線形性を持ち、ライブニッツ則が同じなので、 $x$  と  $p$  に関して同じ関係を設定しておけば、それらの関数についても同じ関係(順序を除いて)が帰結されてしまうからです。

### 5.8.1 ビリアル定理

ポアソンカッコを交換関係に置き換えると量子力学っていうのを踏まえると、ビリアル定理が両方で成り立つことが簡単にわかります。

まず、ビリアル定理っていうのは、運動が有限領域に限られているときは、

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2} \langle xV' \rangle \quad (5.242)$$

であるという主張です。古典論では、長時間平均の意味で、量子論では、定常状態における期待値の意味で成り立ちます。

まず、古典論からいきましょうか。 $xp$  なる量を考えまして、その時間発展は

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(xp) &= \{xp, H\}_{\text{P.B.}} \\ &= \frac{\partial(xp)}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial(xp)}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial x} \\ &= \frac{p^2}{m} - xV'(x) \\ &= 2T - xV' \end{aligned} \quad (5.243)$$

となりました。両辺長時間平均をとると、

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} [xp]_0^t = 2\langle T \rangle - \langle xV' \rangle \quad (5.244)$$

ですね。左辺は運動が有限領域の時はゼロですので、(5.242)は示されました。

量子論バージョンもまったく同様です。ハイゼンベルグ方程式から

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle \hat{x}\hat{p} \rangle &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}\hat{p}, \hat{H}] \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[ \hat{x}\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right] \\ &= \frac{\hat{p}^2}{m} - \hat{x}V'(\hat{x}) \\ &= \hat{T} - \hat{x}V'(\hat{x})\end{aligned}\tag{5.245}$$

となります。交換関係の定義と正準交換関係を使えばできます。期待値をとれば

$$\frac{d}{dt}\langle xp \rangle = 2\langle T \rangle - \langle xV' \rangle\tag{5.246}$$

ですね。定常状態においては、左辺はゼロですので、(5.242)は示されました。その昔、調和振動子の時に  $\langle T \rangle = \langle V \rangle$  を示しましたよね。これは、 $V \propto x^2$  でしたので、そうなるのです。

# Appendix A

## 次元の整理

$\epsilon_0 = \mu_0 = 1$  という単位系 (MKS 単位系) をとると、Maxwell 方程式は

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho, \quad (\text{A.1})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (\text{A.2})$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (\text{A.3})$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mathbf{j} \quad (\text{A.4})$$

となります。次元は以下のようになります。

$$[e] = [M^{1/2}L^{3/2}T^{-1}], \quad (\text{A.5})$$

$$[\mathbf{E}] = [M^{1/2}L^{-1/2}T^{-1}], \quad (\text{A.6})$$

$$[\mathbf{B}] = [M^{1/2}L^{-1/2}T^{-1}], \quad (\text{A.7})$$

$$[\phi] = [M^{1/2}L^{1/2}T^{-1}], \quad (\text{A.8})$$

$$[\mathbf{A}] = [M^{1/2}L^{1/2}T^{-1}], \quad (\text{A.9})$$