

量子力学第一講義ノート

今村洋介

平成 24 年 12 月 25 日

目次

1	シュレーディンガー方程式の導入	3
1.1	プランク定数	3
1.2	二重スリットの実験	5
1.3	量子論を用いて説明のできる代表的な現象	7
1.4	分散関係と波動方程式	9
1.5	シュレーディンガー方程式	10
2	物理量と演算子	13
2.1	確率解釈	13
2.2	物理量と演算子	16
2.3	位置演算子とディラックの δ -関数	18
3	測定と演算子	22
3.1	量子力学における測定	22
3.2	toy model (波動関数が有限次元ベクトルで表される場合)	23
3.3	エルミート演算子と物理量	27
3.4	縮退	32
3.5	円周上の粒子	34
3.6	規格化条件 (連続固有値の場合)	36
3.7	同時測定可能性	39
3.8	不確定性原理	41
4	エネルギースペクトル	46
4.1	定常状態	46
4.2	境界条件	47
4.3	離散スペクトルと連続スペクトル	50
4.4	波動関数の性質	55

5	シュレーディンガー方程式の解	56
5.1	井戸型ポテンシャル (深さ ∞)	56
5.2	井戸型ポテンシャル (深さ有限)	60
5.3	δ -関数型ポテンシャル	63
6	古典的運動との関係	65
6.1	古典極限	65
6.2	半古典近似	68
7	波束	72
7.1	位相速度と群速度	72
7.2	波束の運動	75
8	反射と透過	77
8.1	確率の流れ	77
8.2	反射率と透過率	78
8.3	トンネル効果	83
8.4	ガモフの透過因子	85
8.5	散乱行列	87
8.6	準安定状態	91
9	状態ベクトル	93
9.1	ブラケット記法	93
9.2	演算子の行列表示	96
9.3	ユニタリー変換	97
9.4	座標表示と運動量表示	99
10	時間発展	101
10.1	トンネル効果による準位の分裂	101
10.2	時間発展演算子	106
10.3	対称性と保存量	108
11	調和振動子	114
11.1	定常状態	114
11.2	古典極限	118
11.3	古典回帰点近傍での波動関数	120
11.4	エルミート多項式	122
11.5	昇降演算子	124
11.6	調和振動子とエネルギー量子	127
11.7	コヒーレント状態	128

1 シュレーディンガー方程式の導入

19 世紀後半から 20 世紀初頭にかけて、古典物理学では説明のできない現象がいくつも発見された。それらのうちのあるものは光速に近い運動や強い重力を含む現象に関するものであり、特殊および一般相対性理論によって解決された。相対性理論まで含めた、マクロな現象を扱う理論のことを古典論と呼ぶ。「マクロ」というのは物質を連続体とみなせるような大きなスケールを指す。

これに対し、「ミクロ」な物理現象、すなわち分子、原子レベルの小さなスケールにおいては古典論によって説明のつかない現象があることが明らかになった。古典論によって説明できないミクロな現象を扱うために生まれたのが量子論であり、とくに古典力学によって扱われてきた現象を量子論的に取り扱う枠組みを量子力学という。

1.1 プランク定数

まず、量子力学が生まれるきっかけとなった、古典力学では説明のつかない現象の代表例として黒体放射について触れておこう。内部が空洞になった箱を温めると、壁から電磁波が放射され、空洞内に電磁波が満ちた状態になる。この内部の電磁波のエネルギー密度は壁の材質に依存しないことが知られており、黒体放射と呼ばれる。

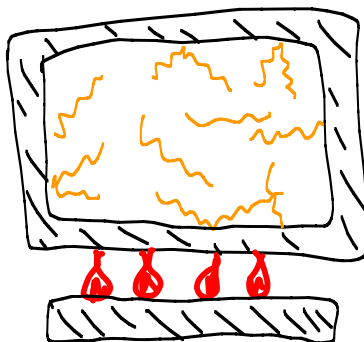


図 1: 黒体放射

この電磁波のエネルギー密度 \mathcal{E} を測定してみると、温度 T の 4 乗に比例することが知られている。(ステファン・ボルツマンの法則)

$$\mathcal{E} \propto T^4 \quad (1)$$

この法則を古典電磁気学で説明できるかどうか考えてみよう。そのために、(1) に現れる量の次元(単位)を調べてみよう。 \mathcal{E} はエネルギー密度であるから、単位は(MKS 単位系では)

$$\mathcal{E} : \text{J}/\text{m}^3 \quad (2)$$

である。温度 T の単位はケルビン K であるが、統計力学によれば、温度はエネルギーに関係していて、ボルツマン定数

$$k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K} \quad (3)$$

を用いれば、エネルギーに変換することができる。

$$k_B T : \text{J}. \quad (4)$$

従って、ステファン・ボルツマンの法則を

$$\mathcal{E} = a(k_B T)^4 \quad (5)$$

と表わすと、比例係数 a の単位は

$$a : \frac{1}{\text{J}^3 \text{m}^3} \quad (6)$$

である。古典電磁気学でこの比例係数を導出できるだろうか。黒体輻射は壁の材質等には依存しないので、計算に用いることのできる物理量は光速 c くらいしかない。従ってどうやっても比例定数 a を導出することは不可能である。つまり、黒体輻射は古典電磁気学では説明できない現象なのである。

この問題をきっかけとして量子力学が生まれた。詳細はここでは説明しないが、黒体輻射を説明するために、プランク (Max Planck) は今日プランク定数ばれ、と呼ばれる定数

$$\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \quad (7)$$

を導入 (1899) することで黒体輻射の問題を解決した。(\hbar は角運動量や作用と同じ次元を持つ。)

プランク定数と光速を組み合わせることで、上記の数係数を次のように与えることができる。

$$a \sim \frac{1}{(\hbar c)^3} \quad (8)$$

量子力学を用いて黒体輻射を数係数まで含めて真面目に計算すると、次の結果が得られる。

$$\mathcal{E} = \frac{\pi^2 (k_B T)^4}{15 (\hbar c)^3} \quad (9)$$

これは、実験結果とぴったり一致している。

プランク定数には次の二つがあり、どちらもよく用いられる。

プランク定数

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}, \quad \hbar \equiv \frac{h}{2\pi} = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}. \quad (10)$$

この定数は、ミクロとマクロの境目を与える、極めて重要なものである。ステファ

ン・ボルツマンの法則の式のように、 \hbar を含む式は古典物理学では得ることができない。

古典力学は、量子力学において $\hbar = 0$ の近似を行ったものであるということが出来る。上記のステファン・ボルツマンの法則において $\hbar = 0$ とするとエネルギー密度が発散してしまうが、古典電磁気学を用いた計算を行うと、実際にエネルギーが発散してしまうことが知られている。

1.2 二重スリットの実験

量子力学の特徴は、全ての運動を「波」として扱うことにある。このことを最も分かりやすい形で見せてくれるのが二重スリットの実験である。

電子がどこに当たったかを検出できるスクリーンに向けて電子銃から電子を放出する。電子銃の出力を十分弱くして、個々の電子が十分識別できるだけの時間的間隔においてスクリーンにぶつかるようにする。電子銃とスクリーンの間に細い穴が一つ空いたスリット（単スリット）を配置した場合には、電子銃とスリットを結ぶ線の延長線とスクリーンが交わる位置を中心として、電子の衝突した位置が分布するのが観測されるであろう。これは電子が波であるとしても、粒子であ

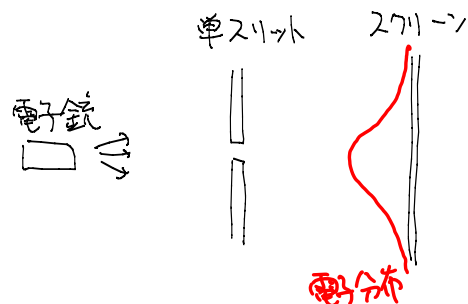


図 2: 単スリット

るとしても説明することができる。粒子が波であれば、スリットを通り抜けたときに波が回折によって広がるであろうし、電子が粒子であったとしても、スリットの影響を受けてその軌道が変化したとすれば説明できそうである。

粒子と波の違いが顕著に表れるのは、スリットが二つある場合である。電子銃とスクリーンの間に置くスリットを二重スリット（二つのスリット A と B が平行に開いたもの）に置き換えて同じ実験を行ってみる。古典的な粒子の描像をそのまま当てはめれば、実験結果は単スリットの結果を二つ重ね合わせたものになると期待される。しかしながら実際に実験してみると、スクリーン上の電子の分布はあたかも電子が波であるような、干渉縞を生成する。

この実験結果は、電子が粒子としてある軌道にそって電子銃からスクリーンまで到達したと考えてしまうと説明することができない。もしそのような解釈が可能であるとすれば、全ての電子は A の穴を通った電子と B の穴を通った電子の二



図 3: 二重スリット (左) 電子が古典的粒子であった場合に期待される観測結果 (右) 実際に観測される結果

つのグループに分けられるはずである。そうすると、それぞれのグループの電子のスクリーン上での分布は単スリットの場合と同じになるはずであり、二つのグループの分布をあわせたものは、単スリットの場合の結果を単に重ね合わせたものになるはずである。しかし実際の実験結果はそうはならず、干渉縞が現れるのである。

このような干渉縞は、電子を一つずつ発射したときにも現れるということを強調しておこう。このことから、異なるスリットを通り抜けた二つの電子が何らかの相互作用をして干渉縞を生成するという可能性は除外される。また、干渉縞は、多数の電子が衝突した点を統計的に処理して初めて得られることも協調しておこう。それぞれの電子が衝突するのはスクリーン上の一点であり、その点の多い場所と少ない場所をグラフで表した結果として干渉縞が現れる。従って、干渉縞が表しているのは、そこに電子が到達する確率のようなものを表していると考えることができる。

このように、電子は古典的な粒子や波としては解釈できない、それら両方の性質を併せ持つものである。このような、電子などの粒子が粒子性と波動性を持つという考え方は1924年にルイ・ド・ブロイによって提案された。粒子の運動に付随する波の事は「ド・ブロイ波」(de Broglie wave) または「物質波」と呼ばれる。

ド・ブロイ波が提唱された背景には、それまで波であると信じられてきた光が実は粒子の性質も併せ持つことが明らかになったということがある。(アインシュタインの光量子説(1905)やコンプトン効果の発見(1923)など。)二重スリットの実験は、電子だけではなく、光に対しても行われている。この場合にも干渉縞が現れるのはもちろんであるが、光を十分弱くすると、電子の場合と同様にポツポツとあたかも粒子のように光がぶつかるのが観測される。つまり、光も電子も同じように、粒子と波の性質を併せ持つようにふるまう。

実は量子力学においては全ての粒子が波の性質と粒子的な性質を持っているものとして扱われる。そして波としての性質と粒子としての性質は密接に関係している。古典的な粒子の運動状態を表わす重要な物理量としてエネルギーと運動量がある。また、波の状態は波長や振動数によって表わされる。ものが粒子と波の

両方の性質を併せ持つとすれば、これら粒子としての性質を表す量と波としての性質を表す量の間には何らかの関係があるのが自然である。

実は、波の性質と粒子の性質を結びつける役割を果たしているのがプランク定数である。運動量 p と波長 λ の間に以下のような関係があることが知られている。

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k. \quad (11)$$

この関係式によって運動量によって決まる波長はド・ブロイ波長と呼ばれる。また、エネルギー E と振動数 ν の間にも次の比例関係がある。

$$E = h\nu = \hbar\omega. \quad (12)$$

波長 λ や振動数 ν の代わりに、次の関係式によって定義される波数 k や角振動数 ω を用いるのが便利である。

$$\text{波数 } k = \frac{2\pi}{\text{波長}\lambda}, \quad \text{角振動数}\omega = 2\pi\text{振動数}\nu. \quad (13)$$

(角振動数のことを単に振動数と呼ぶ場合もある。)

1.3 量子論を用いて説明のできる代表的な現象

光や電子が波と粒子の性質を併せ持つとすることで初めて説明できる代表的な現象について触れておこう。以下では古典論においてどのような困難が存在し、それが量子論においてどのように解決されるのかについて述べるが、以下の説明は非常に大雑把なものであり、正確さを欠くことを断っておく。量子論においてこれらの問題がどのように解決されるかを正しく理解するには、量子力学はもとより統計力学や電磁気学をしっかりと学習していくことが必要である。

原子内の電子の安定性

古典論における困難 古典電磁気学によると、加速度運動する荷電粒子は電磁波を発生させる。この現象は制動放射と呼ばれる。制動放射によって単位時間あたりに放出されるエネルギーは次の公式によって与えられる。

$$P = \frac{q^2 a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \quad (14)$$

ただし q は粒子の電荷、 a は粒子の加速度である。これを原子核の周りを円運動する電子に適用すると、電子は電磁波を放射してエネルギーを失い、原子核に落下していくはずである。これは実際に観測される原子の安定性と合致しない。

問題 1.1 原子内の電子の運動を古典的に扱った時に電子が原子核に落下するまでの時間の程度を見積もれ。

量子論による説明 量子力学によると、粒子のエネルギーは状況によっては離散的な値しか取ることができない。原子中の電子についてはボーアの量子化条件

$$m_e v r = n \hbar \quad (15)$$

を満足する運動だけが許される。これにより電子はエネルギーを放出することができなくなり、電子が安定であることが説明される。

光電効果

古典論における困難 振動数 ν の光を金属に当てたときに放出される電子のエネルギーは

$$E = h\nu - W \quad (16)$$

と与えられる。放出される電子の個数は光の強度に依存するが、それぞれの電子のエネルギーは光の振動数のみに依存する。 W は仕事関数と呼ばれ、金属の種類によって決まる。これは古典電磁気学では説明できない。

量子論による説明 電磁波が当たった電子にはエネルギー量子 $h\nu$ に一致するエネルギーが与えられると仮定し、仕事関数 W は金属内部から外部へ出てくるときに費やされるエネルギーであると仮定すればこの実験結果は説明される。アインシュタインは、このようなことが起こるのは電磁波がエネルギー $h\nu$ を持つ粒子の集まりであるためであるという説を唱えた。(1905) この粒子は光量子または光子と呼ばれる。

コンプトン効果

古典論における困難 物質中の電子による X 線の散乱により、X 線の波長が以下のように変化する。(1923, コンプトン)

$$\Delta\lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta) \quad (17)$$

ただし θ は X 線の散乱角である。これも古典電磁気学では説明が困難な現象である。

量子論による説明 光子はエネルギーだけではなく、波長によって定まる運動量

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k. \quad (18)$$

を持つ粒子であると仮定すれば、電子との散乱による波長の変化は電子の持つ運動量の変化としてうまく説明することができる。

問題 1.2 光子が (11) や (12) で与えられる運動量、エネルギーを持つとして、コンプトン効果の式 (17) を光子と電子の弾性衝突の結果として導出せよ。

1.4 分散関係と波動方程式

量子力学は波を用いてミクロな現象を記述する。その波のことを波動関数と呼ぶ。これはド・ブロー波、物質波などと呼ばれていたが、今日では波動関数と呼ばれる。

量子力学によって物理現象を扱うためには、次の二つを明らかにする必要がある。

- 波動関数がどのような法則によって変化していくのか。
- 波動関数が与えられたときに、そこから系の情報をどのように引き出すのか。

前者は古典力学における運動方程式に相当するものである。後者における「系の情報」というのは、エネルギーや運動量など、測定によって得られる量のことである。波長や振動数が定義できるような単純な波の場合には、関係式 (12) および (11) によって運動量とエネルギーが得られることはすでに述べたとおりである。もう一度書いておこう。

$$p = \hbar k, \quad E = \hbar \omega. \quad (19)$$

力が作用していない自由粒子に対しては、運動量 p とエネルギー E の間には次の関係が成り立つ。

$$\frac{1}{2m} p^2 = E \quad (20)$$

エネルギーと振動数、運動量と波数の関係を用いると、波の波数と振動数の間の関係式（分散関係）を得ることができる。

$$\frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \hbar \omega. \quad (21)$$

この分散関係を満たすような波の代表例は単色波

$$\psi(x, t) = A e^{ikx - i\omega t} \quad (22)$$

である。ただし、右辺の k と ω は分散関係を満足するものとする。

時刻 $t = 0$ において、これは次のように与えられる。

$$\psi(x, t = 0) = Ae^{ikx} \quad (23)$$

一般に、ある時刻での任意の波の形が与えられると、次のように平面波の重ね合わせとして表わすことができる。¹ (フーリエ展開、フーリエ変換)

$$\psi(x, t) = \sum_k A(k)e^{ikx} \quad (24)$$

(より一般には、無限個の k の波を重ねる必要があるため、そのような場合は k の和は積分によって表される。)そして、分散関係はそれぞれの平面波がそれ以降の t に対して (22) のように時間発展すべきこと表わしている。(ただし、重ね合わせたそれぞれの平面波が互いに影響を及ぼさずに独立に時間発展することを仮定している。)つまり、分散関係が分かると、波の時間発展が分かる。

(22) の平面波は常に波動方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (25)$$

を満足する。この方程式は線形であるから、(22) の重ね合わせもやはりこの式を満足する。(25) は自由粒子の波動関数の時間発展を与える波動方程式である。

1.5 シュレーディンガー方程式

これまで、ミクロな系におけるさまざまな現象が、粒子が波の性質を併せ持つことを示唆していることを述べた。この波は波動関数と呼ばれる。

量子力学においては、系の状態は波動関数を与えることによって決まる。このような状態のことを、(位置や運動量などを与えることによって決まる古典的な状態と区別して) 量子状態と呼ぶ。古典力学における典型的な問題は、ある時刻における粒子の位置や運動量を与えたときに、それ以降の時刻で粒子がどのように運動するかを決めるというものである。量子力学においては波動関数が系の全ての情報を与えるから、ある時刻における波動関数が与えられたときにそれ以降の波動関数が時間とともにどのように変化するかを決めるということが重要な問題となる。

まず、最も基本的な場合として、ある運動量 p を持って一定の速度で運動する自由粒子に対応する波動関数を考えよう。関係式 (11) によれば、波動関数は波長 $\lambda = h/p$ の波である。このような波としては、たとえば正弦波が考えられる。

$$\psi(x) = A \sin(kx + \delta), \quad A, \delta \in \mathbf{R}. \quad (26)$$

¹これは物理数学第2 (第4学期) で学びます。

k は運動量 p に対応する波数 $k = p/\hbar$ である。これを運動量 p の粒子に対応する波動関数とみなすことができるであろうか？

波動関数は運動の全ての情報を含んでいる。従って、波動関数を見れば粒子が左右どちらに進んでいるのか判定できなければならない。しかし、正弦波 (26) は左右を入れ替えてもやはり正弦波であり、座標 x の原点をずらせば左右を入れ替える前と全く同じ形にすることができる。このため、(26) の波動関数は運動量 p の粒子の波動関数としては不適當である。

(26) の代わりに次の関数を考えてみよう。

$$\psi(x) = A \exp(ikx), \quad A \in \mathbb{C}. \quad (27)$$

今度は、左右の向きを入れ替えると、

$$\psi(x) = A \exp(i(-k)x), \quad A \in \mathbb{C}. \quad (28)$$

となり、 x をずらしても元に戻すことはできない。また、(27) と (28) を比較すると、 k が $-k$ になっており、向きをひっくり返すと運動量の向きが反転することとつじつまが合っている。従って、(27) を運動量 $p = \hbar k$ の粒子の波動関数と見なすのが良いように思われる。(27) と (28) のどちらが運動量 $p = \hbar k$ の粒子で、どちらが $p = -\hbar k$ の粒子を表わしているのかということはここでの議論だけからは決めることができない。実は、この二つは $i = \sqrt{-1}$ の定義を変えれば互いに入れ替わるから、どちらを運動量 $p = \hbar k$ の粒子と思っても全く問題ない。この授業では、(27) のほうが運動量 $p = \hbar k$ の粒子を表わしているという約束にしておく。(27) のような波を単色波と呼ぶ。

単色波 (27) が時刻 $t = 0$ における波の形を与えているとしよう。 $t \geq 0$ における波の時間変化は、波の振動数 ω が与えられれば次の式によって与えられる。

$$\psi(x) = A \exp(ikx - i\omega t), \quad A \in \mathbb{C}. \quad (29)$$

ここで、 ω は正であるとする。 $i\omega t$ の前の符号は、波の進行方向が粒子の進行方向に一致するように選んだ。すなわち、 k が正 (負) であればこれは x 軸の正 (負) の方向に進行する波を表わしており、対応する粒子の運動の向きに一致する。(ただし、この速度は実は粒子の運動の速度とは一致しない。これについては後に詳しく述べる。)

波動関数 (29) から運動量やエネルギーの情報を引き出すには、次の演算子を定義するのが便利である。

ただし、 \hat{k} や $\hat{\omega}$ は、次のような演算子を表している。

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (30)$$

演算子とは、関数に作用してそれを別の関数へと変化させるもののことである。(30) のように、微分を含む演算子は微分演算子と呼ばれる。変数や関数と区別す

るために、しばしばハット付の文字によって表される。(29) に与えた単色波にこれらの演算子を作用させると次のようになる。

$$\hat{p}\psi = \hbar k\psi, \quad \hat{E}\psi = \hbar\omega\psi. \quad (31)$$

あるいは

$$\hat{p}\psi = p\psi, \quad \hat{E}\psi = E\psi. \quad (32)$$

が成り立つ。(30) において定義された演算子 \hat{p} と \hat{E} はそれぞれ運動量演算子およびエネルギー演算子と呼ばれる。

(25) に与えた自由粒子の波動方程式は次のように表すことができる。

$$\frac{1}{2m}\hat{p}^2\psi(x,t) = \hat{E}\psi(x,t) \quad (33)$$

これに単色波 (29) を代入すると、演算子 \hat{p} と \hat{E} は運動量 p とエネルギー E に置き換わる。 $E = p^2/(2m)$ が成り立つから、この波動方程式が確かに成り立つことがわかる。逆に、エネルギーと運動量の関係式において

$$p \rightarrow \hat{p}, \quad E \rightarrow \hat{E} \quad (34)$$

という置き換えを行った上で波動関数に作用させれば、波動方程式が得られる。

ここまでは、自由粒子の場合について考えてきたが、ポテンシャルを含むような場合に一般化しよう。古典力学において、エネルギーを運動量 p と位置 x の関数として表したものはハミルトニアンと呼ばれる。自由粒子の場合には

$$H(p,x) = \frac{1}{2m}p^2 \quad (35)$$

であるが、ポテンシャル $U(x)$ によって表される保存力を受けて運動する粒子の場合にはハミルトニアンは

$$H(p,x) = \frac{1}{2m}p^2 + U(x) \quad (36)$$

と与えられる。右辺第 1 項は運動エネルギー、第 2 項は位置エネルギーである。この場合に波動関数が従うべき方程式もやはり (34) の置き換えによって得られる。

$$\hat{H}\psi(x,t) = \hat{E}\psi(x,t) \quad (37)$$

ただし、 $\hat{H} = H(\hat{p},x)$ である。 \hat{H} はハミルトニアン演算子と呼ばれる。演算子の具体形を代入すれば次の微分方程式が得られる。

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right)\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) \quad (38)$$

この式は (1 次元上の粒子に対する) シュレーディンガー方程式と呼ばれる。

ある時刻 $t = t_0$ における波動関数 $\psi(x,t_0)$ が与えられると、それ以降の波動関数はこのシュレーディンガー方程式によって一意的に定まる。

2 物理量と演算子

系が持つ物理量を指定することで状態が決まる古典力学とは異なり、量子力学では系の状態は波動関数を用いて与えられ、系の物理量に関する情報は、波動関数とその物理量に対応する演算子を組み合わせることによって得られる。

2.1 確率解釈

量子力学において、波動関数は系の全ての情報を含んでいる。しかし、波動関数が与えられたとしても、系に対する全ての物理量が定まるわけではない。

たとえば、最も簡単な物理量の一つである位置について考えてみよう。二重スリットの実験が示すことは、波動関数は物質そのものを表わすのではなく、粒子が存在する確率（正確には確率密度）を与えるということである。存在確率密度は、ある区間 $x_1 \leq x \leq x_2$ に粒子が存在する確率を $P(x_1, x_2)$ とするとき、次の式によって定義される。

$$P(x_1, x_2) = \int_{x_1}^{x_2} \rho(x) dx \quad (39)$$

あるいは、関数 $\rho(x)$ がほとんど一定とみなせるような微小区間 Δx を取れば、

$$P(x, x + \Delta x) = \rho(x) \Delta x \quad (40)$$

と書くこともできる。

$\psi(x, t) = 0$ であるところには、粒子は存在せず、 $\psi(x, t)$ が 0 から離れるほど存在する確率は大きくなる。確率密度 ρ は 0 または正の実数で無ければならないから、波動関数 ψ （一般には複素関数）をそのまま確率密度とみなすわけにはいかない。結論からいうと、確率密度 $\rho(x, t)$ は電磁波の強度に類似した次の式によって与えられる。

$$\rho(x, t) \propto |\psi(x, t)|^2. \quad (41)$$

ただし、比例係数は x や t に依存しない定数である。

比例係数を求めるには、確率を全て合わせると 1 になることを用いればよい。比例係数を N として次のように置こう。

$$\rho(x, t) = N |\psi(x, t)|^2 \quad (42)$$

確率は全てを合計すると 1 になるはずであるから、(42) の左辺は x の全区間で積分したときに次の式が成り立つ。

$$1 = N \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx \quad (43)$$

この式の積分はしばしば関数 ψ のノルムと呼ばれる。ここで右辺の積分が収束したとすると、この式から係数 N が決まる。

$$N = \left(\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx \right)^{-1} \quad (44)$$

(この定数が時間に依存しないことはあとで示す。)

$$N = |c|^2 \quad (45)$$

を満足する複素数 c を用いて ψ の代わりにそれを c 倍した新しい波動関数 $\tilde{\psi}$ を定義しよう。

$$\tilde{\psi}(x, t) = c\psi(x, t) \quad (46)$$

これは規格化された波動関数といい、次の性質を満足する。

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{\psi}(x, t)|^2 dx = 1. \quad (47)$$

規格化された波動関数が満足するこの式を規格化条件と呼ぶ。規格化された波動関数を用いると、粒子の存在確率密度の式は次のように簡単になって便利である。

$$\rho(x, t) = |\tilde{\psi}(x, t)|^2. \quad (48)$$

関係式 (45) からは定数 c の位相は定まらないことは重要である。つまり、規格化条件 (47) を課したとしても波動関数の位相を変化させる自由度は残っている。これに関して、次のことは重要である。

波動関数全体の位相の違いは物理的意味を持たない。

実は、このことは電荷の保存、あるいは確率の保存などに関係した深い物理的意味を持つが、ここでは触れない。

上で強調したように、規格化された波動関数を定義できるのは (43) の右辺の積分 (波動関数のノルム) が収束する場合だけである。これは、ある有限の区間のみを粒子が運動することができ、その区間の外側では波動関数が急速に 0 に近づく場合である。通常我々が目にする系ではこの条件は成り立っている。たとえば、ある粒子の運動を調べる実験を実験室内で行ったとすれば、その粒子は確実に実験室内にいると考えられるから、波動関数が 0 でない領域は有限であり、積分は収束する。

しかし、計算を行う際には便宜上規格化できない波動関数を扱うことがしばしばある。たとえば一様に無限に広がる単色波のような理想化された状態である。無限に広がる単色波には無限に広い領域を運動する粒子が対応しており、有限の区間で検出される確率は無限に小さい。それでも、場所ごとの存在確率の相対的な

比を議論することには意味がある。そのような場合には波動関数を無理に規格化せず、その相対的な大きさの比だけを問題にする。

$\rho = |\psi|^2$ を存在確率密度と解釈できるためには、この関数がいくつかの条件を満足しなければならない。例えば、確率の合計は常に時間によらず 1 でなければならないから、

$$\frac{d}{dt} \left(\int \psi^* \psi dx \right) = 0 \quad (49)$$

でなければならない。(ここでは波動関数が規格化できる場合のみを考えておく。) これは、ある場所で ρ が減少すれば、別の場所ではその分だけ ρ が増加していることを意味する。たとえば、 $x = x_0$ で x 軸を二つの部分に分けると、 $x \leq x_0$ における減少分と $x_0 \leq x$ における増加分は一致する。

$$-\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{x_0} \rho dx = \frac{d}{dt} \int_{x_0}^{\infty} \rho dx \quad (50)$$

この両辺の値は、単位時間の中に $x = x_0$ を通して左から右へ移行する確率の量を表している。これを確率の流れという。ここでは J によって確率の流れを表すことにしよう。つまり、 J は次のように定義することができる。

$$J(x, t) = -\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^x \rho(x', t) dx' \quad (51)$$

この両辺を x で微分すると、次の式を得る。

$$\frac{\partial}{\partial x} J(x, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t). \quad (52)$$

これは確率に対する連続の式と呼ばれる。(同様の式は、保存量一般に対して成り立つ。たとえば、 ρ と J を電荷密度と電流とすれば、連続の式 (366) は電荷の保存を表す。) 定常状態においては、(366) の右辺は 0 になり、 $\partial_x J = 0$ を得るから、確率の流れは位置によらない。

確率密度 ρ は波動関数を用いて $\rho = |\psi|^2$ と表されている。同様に、確率の流れ J も波動関数の二次形式として与えることができる。 J の表式を得るために、定義式 (51) を時間に依存するシュレーディンガー方程式を用いて変形してみよう。

$$\begin{aligned} J &= -\int_{-\infty}^x \frac{\partial \rho}{\partial t} dx \\ &= -\int_{-\infty}^x \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) dx \\ &= -\int_{-\infty}^x \left[\psi^* \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + U \right) - \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + U \right) \psi \right] dx \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^x \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi \right) dx \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^x \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) dx. \end{aligned} \quad (53)$$

二行目から三行目への変形では時間に依存するシュレーディンガー方程式を用いた。最後の式は微分の積分であるから積分を実行できる。 $x = -\infty$ において波動関数が0になることを仮定すれば、確率の流れを波動関数によって表した次の式を得る。

$$J = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right). \quad (54)$$

2.2 物理量と演算子

量子力学では、演算子を用いた計算を多用する。ここで演算子の基本的な事柄についてまとめておこう。

演算子とは、関数に作用してそれを別の関数に変化させるものである。しばしばハット付きの記号を用いて表わされる。関数 $f(x)$ にある演算子 \hat{A} を作用させて $g(x)$ が得られるということ

$$g = \hat{A}f \quad (55)$$

のように表す。二つの演算子 \hat{A} と \hat{B} があり、任意の関数に作用させたときにこれらが同じ結果を与えるなら、これら二つの演算子は等しいといい、次のように表わす。

$$\hat{A} = \hat{B} \quad (56)$$

線形演算子 線形演算子とは、次の性質を満足する演算子のことをいう。

$$\hat{A}(c\psi + c'\psi') = c\hat{A}\psi + c'\hat{A}\psi', \quad c, c' \in \mathbb{C}. \quad (57)$$

ただし ψ と ψ' は任意の関数、 c と c' は任意の複素数である。量子力学において用いられる演算子は全て線形演算子である。

ψ と ψ' をベクトル、 \hat{A} を行列だとしても同じ関係が成り立つ。演算子と行列のこのような類似は以下でもしばしば現れる。演算子の性質を理解する際に、「行列ではどうなるか？」と考えるのも教育的である。

固有関数・固有値 ある関数 $\psi(x)$ に対して線形演算子 \hat{A} を作用させて得られる関数 $\hat{A}\psi(x)$ がもとの関数の定数倍になっているとき、すなわち

$$\hat{A}\psi(x) = a\psi(x) \quad (58)$$

であるとき、 $\psi(x)$ は線形演算子 \hat{A} の固有関数であるといい、定数 a のことを固有値と呼ぶ。

簡単な演算子の例をいくつか表1に与える。

問題 2.1 表1の中で、線形演算子はどれか？

表 1: (線形とは限らない) 演算子の例。ここでは変数 x だけの関数に作用するものに限った。名称や記号は一般的ではないものも含む。

微分演算子	d/dx	$f(x) \rightarrow df(x)/dx$
並進演算子	\hat{T}	$f(x) \rightarrow f(x-1)$
鏡映演算子	\hat{R}	$f(x) \rightarrow f(-x)$
2乗演算子	\hat{sq}	$f(x) \rightarrow f(x)^2$
たす1演算子	\hat{inc}	$f(x) \rightarrow f(x)+1$
恒等演算子	$\hat{1}$	$f(x) \rightarrow f(x)$

問題 2.2 表 1 の演算子のうち、線形であるものに注目し、それぞれに対して、固有関数の例を一つずつ与えよ。また、その固有関数に属する固有値を求めよ。

問題 2.3 関数 $f=0$ に任意の線形演算子を作用させると 0 になることを示せ。

量子力学において用いられる演算子は全て線形演算子である。以下では、特に強調する場合を除き、線形演算子のことを単に演算子と呼ぶ。

シュレーディンガー方程式 $\hat{H}\psi = E\psi$ に現れる演算子 \hat{E} と \hat{H} がどちらも線形演算子であることから、 $\psi(x, t)$ がシュレーディンガー方程式の解であったとき、その定数倍 $c\psi(x, t)$ もやはり解である。また、シュレーディンガー方程式の二つの解 $\psi_1(x, t)$ と $\psi_2(x, t)$ が与えられたとき、それらの任意の線形結合

$$\psi(x, t) = c_1\psi_1(x, t) + c_2\psi_2(x, t) \quad c_1, c_2 \in \mathbb{C} \quad (59)$$

もやはりシュレーディンガー方程式の解である。

線形演算子の演算について簡単にまとめておこう。演算子を用いた計算は、それが作用する関数をあらわに書いておくとわかりやすくなる。

演算子の和 二つの演算子 \hat{A} と \hat{B} があるとき、その和 $\hat{A} + \hat{B}$ を次の式によって定義する。

$$(\hat{A} + \hat{B})f = \hat{A}f + \hat{B}f. \quad (60)$$

演算子の定数倍 ある演算子 \hat{A} の定数倍 $c\hat{A}$ は次の式によって定義される。

$$(c\hat{A})f = c(\hat{A}f) \quad (61)$$

符号および差 マイナスと差は次のように定義される。

$$(-\hat{A})f = -(\hat{A}f), \quad \hat{A} - \hat{B} = \hat{A} + (-\hat{B}). \quad (62)$$

演算子の積 二つの演算子 \hat{A} と \hat{B} の積 $\hat{A}\hat{B}$ は最初に \hat{B} を作用させてそのあとに \hat{A} を作用させる演算を表す。つまり

$$(\hat{A}\hat{B})f = \hat{A}(\hat{B}f) \quad (63)$$

一般に、 $\hat{A}\hat{B}$ と $\hat{B}\hat{A}$ は異なることに注意しよう。

例題 2.1 3 つの演算子の積に対して結合律 $(\hat{A}\hat{B})\hat{C} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C})$ が成り立つことを示せ。

解答: 任意の関数 f に対して $((\hat{A}\hat{B})\hat{C})f = (\hat{A}(\hat{B}\hat{C}))f$ が成り立つことを示せばよい。これは演算子の積の定義を繰り返し用いることで次のように示すことができる。

$$((\hat{A}\hat{B})\hat{C})f = (\hat{A}\hat{B})(\hat{C}f) = \hat{A}(\hat{B}(\hat{C}f)) = \hat{A}((\hat{B}\hat{C})f) = (\hat{A}(\hat{B}\hat{C}))f \quad (64)$$

恒等演算子 関数を変化させないような演算子を恒等演算子という。恒等演算子を $\hat{1}$ によって表そう。定義より明らかに、任意の演算子 \hat{X} に対して

$$\hat{X}\hat{1} = \hat{1}\hat{X} = \hat{X} \quad (65)$$

が成り立つ。

逆演算子 ある演算子 \hat{A} に対して $\hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B} = \hat{1}$ を満足する演算子 \hat{B} を \hat{A} の逆演算子と呼び、 \hat{A}^{-1} と表す。

逆演算子は任意の演算子に対して存在するわけではない。(逆行列と同様)

問題 2.4 逆演算子が存在しない線形演算子の例を与え、それが逆演算子を持たないことを示せ。

問題 2.5 逆演算子は存在したとすればただ一つであること、すなわち、ある演算子 \hat{A} に対して

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} = \hat{1}, \quad \hat{A}\hat{C} = \hat{C}\hat{A} = \hat{1} \quad (66)$$

が成り立つとすれば、 $\hat{B} = \hat{C}$ であることを示せ。

2.3 位置演算子とディラックの δ -関数

以前に、運動量 p 、エネルギー E を持つ自由粒子の波動関数が次の関係を満たすことを述べた。

- 運動量 p を持つ粒子の波動関数は

$$\hat{p}\psi = p\psi \quad (\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}) \quad (67)$$

を満足する。

- エネルギー E を持つ粒子の波動関数は

$$\hat{E}\psi = E\psi \quad (\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}) \quad (68)$$

を満足する。

同様なことは、位置に対しても成り立つ。すなわち

- 位置 x_0 にある粒子の波動関数は

$$\hat{x}\psi = x_0\psi \quad (69)$$

を満足する。

ただし、位置演算子 \hat{x} は次のように定義される。

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x), \quad \forall\psi(x) \quad (70)$$

すなわち、 \hat{x} は x を掛けるという操作を表わす演算子である。((70) は \hat{x} の固有値が x と言っているのではないことに注意しよう。固有値は座標に依存しない定数でなければならない。)

(70) の定義からもわかるように、 \hat{x} と書いても x と書いても実質的には同じことである。ハミルトニアン演算子を作る際に、運動量は p から \hat{p} に置き換えたのに対して x はそのままにしていたが、実は x に対しても演算子 \hat{x} への置き換えを暗に行っていたと思ってもよい。

$$\hat{H} = H(\hat{p}, x) = H(\hat{p}, \hat{x}). \quad (71)$$

位置が x_0 であるような状態の波動関数、すなわち、式

$$\hat{x}\psi(x) = x_0\psi(x) \quad (72)$$

を満足する位置演算子の固有関数がどのような形をしているかを考えてみよう。この式は、次のように書き換えることができる。

$$(x - x_0)\psi(x) = 0. \quad (73)$$

従って、 $x \neq x_0$ においては $\psi(x) = 0$ である。つまり、波動関数 ψ は $x = x_0$ においてのみ 0 でない値を取り、図 4 のような形をしている。この図からもわかる

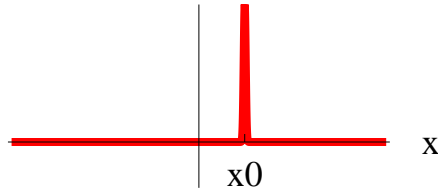


図 4: 位置演算子 \hat{x} の固有状態の例

ように、粒子の存在確率が 0 で無いのは点 $x = x_0$ だけであり、粒子は確実にその点に存在しているといえる。

このような、ある点でのみ 0 でない関数を与えるために、ディラックの δ -関数を用いる。ディラックの δ -関数は次の二つの関係を満足するものとして定義される。

δ 関数の定義

- 任意の関数 f に対して

$$\delta(x)f(x) = \delta(x)f(0) \quad (74)$$

が成り立つ。(これより、 $x \neq 0$ において $\delta(x) = 0$ がいえる。)

- 全実数にわたり積分すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx = 1 \quad (75)$$

が成り立つ。($x \neq 0$ では $\delta(x) = 0$ なので、0 を含む区間であればどこで積分しても 1 になる。) これにより、 $\delta(0)$ の大きさが決まる。

グラフにすると図 5 のようになる。厳密には δ -関数は関数ではないことに注意し

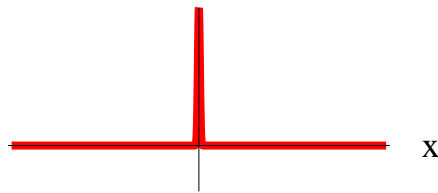


図 5: ディラックの δ -関数

よう。(超関数と呼ばれるものの一種である。) $\delta(x)$ が全実数を定義域として定義された関数であれば、 $\delta(x)$ は任意の x において有限の値を持たなければならない。特に $\delta(0)$ も有限でなければならない。しかし、これでは (75) の積分は 0 になってしまい、条件を満足することができない。従って、 $\delta(0)$ は有限の値ではなく、発散量であるとみなす必要がある。条件 (75) はこの発散の度合いを決める式であり、(74) は両辺において $x = 0$ における発散の度合いが同じであることを意

味する式である。

このように、発散する量を直接扱うことを避けたいければ、 δ 関数は常に積分の中だけに現れるものとし、次の性質によって δ 関数を定義することもできる。

— δ 関数の別の定義 —

- 任意の関数 f に対して

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0) \quad (76)$$

が成り立つ。

そして、 δ 関数は常に積分の中だけで用いるというように約束をすることもできる。しかし、その利便性から、 $\delta(x)$ はあたかも関数であるように扱うことが多い。(この授業でもそのように扱う。)

δ 関数は次のように極限として定義するのもしばしば便利である。

— δ 関数のさらに別の定義 —

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} F\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \quad (77)$$

ただし、 $F(x)$ は次の条件を満足する関数。

$$\int F(x) dx = 1. \quad (78)$$

たとえば、 $F(x)$ として次の関数を取ることができる。

$$F(x) = \begin{cases} 1 & (|x| \leq 1/2) \\ 0 & (|x| \geq 1/2) \end{cases} \quad (79)$$

問題 2.6 (77) によって定義される δ 関数が (76) を満足することを示せ。ただし、極限と積分の順序の交換が可能であることなどは仮定してよい。

(74) において x を $x - x_0$ で置き換え、 $f(x - x_0)$ のことを $g(x)$ で置き換えることで得られる次の関係式は、 δ 関数を使った計算においてよく用いられる。

$$\delta(x - x_0)g(x) = \delta(x - x_0)g(x_0) \quad (80)$$

この関係式を用いれば、次の波動関数が位置演算子 \hat{x} の固有関数であり、その固有値が x_0 であることがわかる。

$$\psi(x) = \delta(x - x_0). \quad (81)$$

この波動関数は規格化条件 (47) によって規格化することはできないこと、つまりノルムが発散することを示しておこう。

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{\infty} |\delta(x - x_0)|^2 dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0)\delta(x - x_0)dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0)\delta(x_0 - x_0)dx \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0)\delta(0)dx \\
 &= \delta(0) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0)dx \\
 &= \delta(0) \\
 &= +\infty.
 \end{aligned} \tag{82}$$

二つ目の等号で公式 (80) を用いた。

3 測定と演算子

3.1 量子力学における測定

これまで、エネルギー、運動量、位置の演算子と波動関数の関係を見てきたが、この関係は次のように一般化できる。

1. ある物理量 A に対して線形演算子 \hat{A} が対応する。
2. 物理量 A の値が a である状態の波動関数 ψ は \hat{A} の固有関数であり、その固有値が a である。このような状態は物理量 A の固有状態であると言われる。

2にある「物理量 A の値が a である状態」というのは、 A の測定を行ったときに必ず a が得られるような状態という意味である。一般には、ある状態の波動関数が与えられたとしても、その状態に対してある物理量の測定を行ったときに得られる測定値は一意的に決まらない。たとえば物理量として粒子の位置を考えると、二重スリットの実験からも分かるとおり、波動関数は粒子がそれぞれの位置にある確率密度を与えるだけであり、粒子の位置を実際に測定したときに得られる値を一意的に決めることはできない。このことは他の物理量に対してもいえる。2が主張しているのは、波動関数 ψ がもし \hat{A} の固有関数であれば、 A の測定を行ったときに a が得られる確率が 100% であり、それ以外の値が得られないということである。

物理量の測定に関連する重要な概念として、物理的連続性がある。

物理的連続性

物理量 A の測定を二回行うことを考える。ある時刻に始めの測定を行い、測定結果として a_1 を、さらにその後に二回目の測定を行い、測定結果として a_2 を得たとする。もし二つの測定の時間間隔が十分小さければ、二つの測定結果は一致する。

一回目の測定を行う前の波動関数が \hat{A} の固有関数とは限らない任意の関数であったとしよう。このとき、一回目の測定結果 a_1 がいくらになるか前もって決まらない。しかし、物理的連続性より、間隔をおかずに二回目の測定を行った結果は $a_2 = a_1$ になるはずであるから、一回目の測定の直後は系の波動関数は固有値として a_1 を持つ \hat{A} の固有関数になっているはずである。つまり、一回目の測定は波動関数の形を \hat{A} の固有関数へと変化させたのである。これはしばしば波束の収縮と呼ばれる。(位置を測定した場合に波動関数が図4のような形に変化する

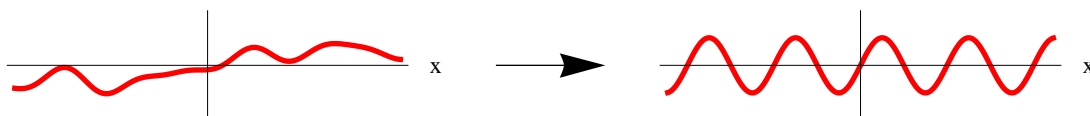


図 6: 波束の収縮 (運動量を測定した場合)

ることを考えれば、このように呼ばれる理由も理解できるであろう。)

古典力学における測定は、できる限り系に影響を与えないように注意しながら行うのが普通であるが、上記の議論は、量子力学においてはそのようなことが不可能であることを意味している。このことに関してしばしば挙げられる例として、粒子の位置を測定することを考えよう。粒子の位置は、それを単に見れば知ることができる。しかし「見る」という操作は、対称に光をぶつけて跳ね返ってきた光をとらえるという操作であるから、対象が小さければ、光の衝突により、系は乱される。量子力学においては、どのような測定においても系の変化を避けることはできない。

3.2 toy model (波動関数が有限次元ベクトルで表される場合)

波動関数と物理量の間関係を考えていくにあたって、座標 x が連続的な実数値ではなく、有限個の値 $x = 1, 2, \dots, n$ のみをとるような toy model を考えてみよう。これは n 個の箱があり、そのうちのどれかに粒子が入っているような状況を考えても良い。箱の中で粒子がどのような運動をしているかということに気にならない場合、あるいは箱の中の粒子の運動が一意的であり、粒子の状態を記述するのにどの箱に入っているかということ以上の情報を必要としない場合には、粒子の状態を表す波動関数は n 個の成分を持つ縦ベクトルとして表すことができる。ここ

ではそのようなベクトルを太字で表すことにする。

$$\boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}. \quad (83)$$

適当に規格化をしておけば、 k 番目の箱に粒子が入っている確率は $|\psi_k|^2$ によって与えられる。そのために必要な規格化条件は、全確率が 1 であるという条件から、次のように与えられる。

$$\boldsymbol{\psi}^\dagger \boldsymbol{\psi} \equiv \sum_{k=1}^n \psi_k^* \psi_k = 1. \quad (84)$$

ただし、 $\boldsymbol{\psi}^\dagger$ は $\boldsymbol{\psi}$ のエルミート共役であり、

$$\boldsymbol{\psi}^\dagger = \boldsymbol{\psi}^{*T} = \left(\psi_1^* \quad \psi_2 \quad \cdots \quad \psi_n \right) \quad (85)$$

と定義される横ベクトルである。エルミート共役を用いて定義した積

$$\boldsymbol{\psi}_1^\dagger \boldsymbol{\psi}_2 = \sum_{k=1}^n \psi_{1,k}^* \psi_{2,k} \quad (86)$$

は $\boldsymbol{\psi}_1$ と $\boldsymbol{\psi}_2$ のエルミート内積と呼ばれる。

物理量 A に対応する線形演算子を \hat{A} としよう。 $\boldsymbol{\psi}$ が n 次元ベクトルであるから、それに対する線形変換を与える演算子は $n \times n$ 行列に他ならない。

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}. \quad (87)$$

物理量 A の期待値 \bar{A} は次のように与えられる。

$$\bar{A} = \boldsymbol{\psi}^\dagger \hat{A} \boldsymbol{\psi}. \quad (88)$$

物理量は通常実数によって表される。(実数値を持つ二つの物理量を一つの複素数として表すこともできるが、これは単なる表現の問題である。ここでは物理量を表すのに実数を用いることにする。)従って、(88) は任意の波動関数 $\boldsymbol{\psi}$ に対して実数でなければならない。これは \hat{A} が

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A} \quad (89)$$

を満足するエルミート行列であることを意味している。ただし \hat{A}^\dagger は行列に対するエルミート共役であり、次のように定義される。

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}^{*T} = \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* & \cdots & A_{n1}^* \\ A_{12}^* & A_{22}^* & \cdots & A_{n2}^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{1n}^* & A_{2n}^* & \cdots & A_{nn}^* \end{pmatrix}. \quad (90)$$

エルミート行列は次の性質を持つ。

- 固有値は全て実数である。
- 異なる固有値に属する固有ベクトルはエルミート内積のもとで直交する。

(自分で証明してみよ。)

$n \times n$ エルミート行列は最大 n 個の固有値を持つ。固有値の数が少ない場合には、 n 個の固有値のいくつかがつたまたま一致しているとみなすことができる。 n 個の異なる固有値を持つ場合には、対応する固有ベクトル $\psi_{(k)}$ ($k = 1, 2, \dots, n$) は互いに直交するから、適当に規格化することで次の条件を満たす正規直交系にすることができる。

$$\psi_{(k)}^\dagger \psi_{(l)} = \delta_{kl}. \quad (91)$$

この正規直交系は n 本の線形独立なベクトルを含むから、 n 成分の任意のベクトルはこれらを用いて展開することができる。このことを $\psi_{(k)}$ が完全系をなすという。

$$\psi = \sum_{k=1}^n c_k \psi_{(k)}. \quad (92)$$

c_k は適当な係数である。

演算子の例として、粒子のいる位置 (箱の番号) を与える位置演算子を考えてみよう。

$$\hat{x} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & n \end{pmatrix}. \quad (93)$$

固有ベクトルは

$$\psi_{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{(2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \cdots \quad \psi_{(n)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \quad (94)$$

であり、それぞれ次の式を満たす。

$$\hat{x}\psi_{(k)} = k\psi_{(k)}. \quad (95)$$

これらのベクトルが正規完全直交系をなしているのは明らかである。任意のベクトルは (92) のように展開することができ、その展開係数 c_k は次のように表すことができる。

$$c_k = \psi_{(k)}^\dagger \psi. \quad (96)$$

また、一般の状態に対して位置を測定して k である確率 P_k は

$$P_k = |\psi_k|^2 = |c_k|^2 \quad (97)$$

と表すことができる。

以上のことを一般の物理量 A に対して一般化すると、次のようになる。

物理量 A に対応するエルミート行列を \hat{A} とする。 \hat{A} の固有値 a_k に属する固有ベクトルを $\psi_{(k)}$ とする。(ここでは \hat{A} は異なる n 個の固有値 a_1, \dots, a_n を持つと仮定しておく。) 適当に規格化することでこれらは正規直交完全系をなす。

$$\psi_{(k)}^\dagger \psi_{(l)} = \delta_{kl} \quad (98)$$

これらのベクトルを用いることで一般の状態を

$$\psi = \sum_{k=1}^n c_k \psi_{(k)} \quad (99)$$

と展開することができ、その展開係数は

$$c_k = \psi_{(k)}^\dagger \psi \quad (100)$$

と表すことができる。このとき、波動関数 ψ の状態に対して A の測定を行うと、固有値 a_k が確率

$$P_k = |c_k|^2 \quad (101)$$

で得られる。

このルールを用いて、次のことを確認せよ。

- 固有状態 $\psi_{(k)}$ に対して A の測定を行うと必ず固有値 a_k が得られる。
- 期待値が (88) によって与えられる。

3.3 エルミート演算子と物理量

波動関数が連続的な変数 x の関数である場合に物理量 A の測定を行った場合に、どのような値がどんな確率で得られるかということをもとめておく。§3.2 で考えた toy model の場合の内積の定義などを適当に変更すればよい。

ここでは以下の 3 つのルールから出発することにしよう。

ルール 1 ある物理量 A に対して、 A が確定した状態

$$\psi_1, \psi_2, \dots \quad (102)$$

が存在し、状態 ψ_n に対して A を測定すれば必ず値 a_n が得られる。(ここでは a_n が離散的な値を取り、全て異なることを仮定しておく。)

ルール 2 任意の状態 ψ は、上記 ψ_n を用いて

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n \quad (103)$$

のように展開できる。(「 ψ_n は完全系をなす」という。)

ルール 3 状態 ψ に対して A を測定したときに a_n が得られる確率は

$$P_n = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi dx \right|^2 \quad (104)$$

によって与えられる。

ただし、これらのルールが適用できるためには、波動関数は次のように規格化されていないといけない。

$$\int |\psi|^2 dx = \int |\psi_m|^2 dx = 1. \quad (105)$$

この規格化条件は上記の 3 つのルールとは独立なものではなく、上記のルールと、確率を全部あわせると 1 になるということを組み合わせることで得ることができる。

ルール 3 において、状態 ψ として ψ_m を取ってみよう。ルール 1 より、状態 ψ_m に対して A の測定を行えば必ず a_m が得られるはずであり、 a_n が得られる確率は次のように与えられる。

$$P_n = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* \psi_m dx \right|^2 = \delta_{mn} \quad (106)$$

ただし δ_{mn} はクロネッカーのデルタ

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & (m = n) \\ 0 & (m \neq n) \end{cases} \quad (107)$$

である。従って、波動関数の組 $\{\psi_m\}$ は次の正規直交条件を満足するはずである。

$$\int \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn} \quad (108)$$

この条件が満足されるとき、関数の組 $\{\psi_m\}$ は正規直交系をなすという。

いくつか言葉の定義を与えておこう。二つの関数 $f(x)$ と $g(x)$ が与えられたときに、積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x)dx \quad (109)$$

は f と g のエルミート内積、あるいは単に内積と呼ばれる。内積が 0 であるような二つの関数は互いに直交しているといわれる。この積分で $f = g$ としたものの、すなわち

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)f(x)dx \quad (110)$$

は関数 f のノルムと呼ばれる。 $\{\psi_m\}$ が正規直交系をなすとは、全ての関数のノルムが 1 であり、系に含まれる任意の異なる二つの関数が直交することを意味する。ノルムが 1 であるということは、規格化条件 (105) を満足するという他に他ならない。

ルール 3 の積分に現れる ψ_n と ψ の内積にルール 2 の展開式を代入し、正規直交条件を用いると、

$$\int \psi_n^* \left(\sum_k c_k \psi_k \right) dx = \int \psi_n^* \psi dx = \sum_k c_k \int \psi_n^* \psi_k dx = \sum_k c_k \int \delta_{nk} = c_n \quad (111)$$

従って、 f_n が得られる確率は展開係数の絶対値の二乗である。

$$P = |c_n|^2 \quad (112)$$

ルール 2 のように展開される任意の状態 ψ のノルムは

$$\begin{aligned} \int \psi^* \psi dx &= \int \left(\sum_m c_m^* \psi_m^* \right) \left(\sum_n c_n \psi_n \right) dx \\ &= \sum_{m,n} c_m^* c_n \int \psi_m^* \psi_n dx \\ &= \sum_{m,n} c_m^* c_n \delta_{m,n} \\ &= \sum_n |c_n|^2 \\ &= \sum_n P_n \end{aligned} \quad (113)$$

となり、全確率を与える。従ってこの値は 1 でなければならない。つまり、状態 ψ は規格化条件 (105) を満足する。

物理量 A に対して、 A の取り得る値 a_n とそれぞれの確率 P_n が分かると、 A の測定結果に対する期待値 \bar{A} を計算することができる。

$$\begin{aligned}
 \bar{A} &= \sum_n P_n a_n = \sum_n \left| \int \psi_n^*(x) \psi(x) dx \right|^2 a_n \\
 &= \sum_n \left| \int \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx \right| a_n \left| \int \psi_n^*(y) \psi(y) dy \right| \\
 &= \sum_n \left(\int \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx \right) a_n \left(\int \psi_n^*(y) \psi(y) dy \right) \\
 &= \int \int \psi^*(x) A(x, y) \psi(y) dx dy \tag{114}
 \end{aligned}$$

ただし、二変数関数

$$A(x, y) = \sum_n \psi_n(x) a_n \psi_n^*(y) \tag{115}$$

を定義した。

ここまで述べてきたルールの中では、 A が確定値を取る波動関数と確定値の対 (ψ_m, a_m) ($m = 1, 2, 3, \dots$) を用いて、測定に関するルールを与えた。その際には演算子 \hat{A} は用いていなかった。実は、演算子 \hat{A} は次のように定義することができる。

$$\hat{A}\psi(x) = \int A(x, y)\psi(y)dy \tag{116}$$

ただし関数 $A(x, y)$ は (115) によって (ψ_m, a_m) を用いて定義された関数である。(116) によって定義された演算子 \hat{A} は線形演算子であり、 $A(x, y)$ は演算子 \hat{A} の積分核、あるいは単に核と呼ばれる。このように定義された演算子 \hat{A} が、§3.3 で述べた性質、すなわち、

- 物理量 A の値が a である状態の波動関数 ψ は \hat{A} の固有関数であり、その固有値が a である。

を満足することは簡単に分かる。実際に \hat{A} を ψ_n に作用させ、定義式 (116) を用

いと、このことを確認することができる。

$$\begin{aligned}
 \hat{A}\psi_n(x) &= \int A(x,y)\psi_n(y)dy \\
 &= \int \sum_m \psi_m(x)a_m\psi_m^*(y)\psi_n(y)dy \\
 &= \sum_m \psi_m(x)a_m \int \psi_m^*(y)\psi_n(y)dy \\
 &= \sum_m \psi_m(x)a_n\delta_{mn} \\
 &= a_n\psi_n(x)
 \end{aligned} \tag{117}$$

途中で $\{\psi_m\}$ の正規直交条件を用いた。

期待値の式 (114) は演算子 \hat{A} を用いて次のように書くこともできる。

$$\bar{A} = \int \psi^*(x)\hat{A}\psi(x)dx \tag{118}$$

一般に、演算子の固有値は実数とは限らないが、実数の物理量に対応する演算子は、固有値が実数であるものでなければならない。この条件を満たすものはエルミート演算子である。

エルミート演算子の定義を与える前にいくつかの用語を定義しておく。ある演算子を \hat{A} 、その核を $A(x,y)$ とする。このとき

- $A^*(x,y)$ を核とする演算子を \hat{A}^* と書き、 \hat{A} の複素共役という。次の式が成り立つ。

$$\hat{A}^*f^* = (\hat{A}f)^* \quad \forall f. \tag{119}$$

(これを \hat{A}^* の定義であると思っても良い。)

- $A(y,x)$ を核とする演算子を $\tilde{\hat{A}}$ と書き、 \hat{A} の転置と呼ぶ。次の式が成り立つ。

$$\int (\tilde{\hat{A}}f)gdx = \int f(\hat{A}g)dx \quad \forall f, g. \tag{120}$$

(これを $\tilde{\hat{A}}$ の定義であると思っても良い。)

- $A^*(y,x)$ を核とする演算子を \hat{A}^\dagger と書き、 \hat{A} のエルミート共役、あるいは単に共役と呼ぶ。次の関係が成り立つ。

$$\int (\hat{A}^\dagger f)^*gdx = \int f^*(\hat{A}g)dx \quad \forall f, g. \tag{121}$$

(これを \hat{A}^\dagger の定義であると思っても良い。)

- 演算子 \hat{A} がその複素共役 \hat{A}^* と一致するとき、 \hat{A} は実演算子であるという。
- 演算子 \hat{A} がそのエルミート共役 \hat{A}^\dagger と一致するとき、 \hat{A} はエルミート演算子、あるいは自己共役演算子であるという。

エルミート演算子は、物理量に対応する演算子として必要な次の性質を持つ。

エルミート演算子の性質

1. 固有値が実数である。
2. 異なる固有値を持つ固有関数は直交する。

まず、1 から示そう。 \hat{A} をエルミート演算子とし、 ψ をその固有関数、 a を対応する固有値とする。エルミート演算子が満足する式 (121) に対して $f = g = \psi$ を代入し、 $\hat{A}\psi = a\psi$ を用いると、

$$a^* \int \psi^* \psi dx = a \int \psi^* \psi dx \quad (122)$$

が得られる。関数 ψ が 0 でなければ、両辺にある積分は正の実数であるから、 $a^* = a$ が成り立つ。つまり、固有値 a は実数である。次に 2 を示そう。 ψ と ψ' を \hat{A} の固有関数とし、対応する固有値をそれぞれ a, a' とする。つまり、

$$\hat{A}\psi = a\psi, \quad \hat{A}\psi' = a'\psi' \quad (123)$$

の二つの式が成り立つとする。エルミート演算子が満足する式 (121) に対して $f = \psi, g = \psi'$ を代入し、固有値 a, a' が実数であることを用いれば

$$a \int \psi^* \psi' dx = a' \int \psi^* \psi' dx \quad (124)$$

が得られる。従って、もし二つの固有値 a と a' が異なれば、次の式が成り立つ。

$$\int \psi^* \psi' dx = 0. \quad (125)$$

つまり ψ と ψ' は直交する。

補足：ハミルトニアン¹のエルミート性について

ハミルトニアンはエネルギーに対応する演算子であるから、エルミート演算子でなければならないが、ハミルトニアン¹のエルミート性は確率の保存とも密接に関係している。全確率 $\int |\psi|^2 dx$ の時間微分を計算してみよう。波動関数は時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi \quad (126)$$

を満足するものと仮定するが、ハミルトニアン \hat{H} の形は特に指定しない。すると、

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \left(\int \psi^* \psi dx \right) &= \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dx + \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi dx \\
 &= \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dx + \left[\int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dx \right]^* \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* \hat{H} \psi dx + \left[\frac{1}{i\hbar} \int \psi^* \hat{H} \psi dx \right]^* \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* \hat{H} \psi dx - \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* \hat{H}^\dagger \psi dx \quad (127)
 \end{aligned}$$

となる。確率が保存するためにはこの式が 0 にならなければならないが、任意の波動関数に対してそれが成り立つためには $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$ 、すなわち、 \hat{H} はエルミート演算子でなければならない。

補足終わり

3.4 縮退

ここまではしばしばある演算子 \hat{A} の固有値 a_m が全て異なる場合について考えた。そこで述べたことを、固有値の中に同じものが存在する場合に拡張するに当たって、注意すべきことをいくつかあげておこう。

演算子 \hat{A} の二つの線形独立な固有関数 ψ_1 と ψ_2 が同じ固有値 a を持つとき、これらの状態は縮退しているという。このとき、 ψ_1 と ψ_2 の任意の 0 でない線形結合

$$\alpha\psi_1 + \beta\psi_2 \quad \alpha, \beta \in \mathbf{C} \quad (128)$$

もやはり \hat{A} の固有関数であり、固有値は a である。すなわち、縮退した状態がある場合には、固有関数の選び方が無限に存在する。例えば、 ψ_1, ψ_2 の代わりに

$$\psi'_1 = \alpha\psi_1 + \beta\psi_2, \quad \psi'_2 = \gamma\psi_1 + \delta\psi_2, \quad \alpha\delta - \beta\gamma \neq 0 \quad (129)$$

によって定義された ψ'_1 と ψ'_2 を独立な固有関数として用いることもできる。このように、線形独立な固有関数の選び方を変更することを、基底の取替えという。ここでは二つの線形独立な波動関数が縮退している場合を例としてあげたが、3 つ以上の線形独立な波動関数が縮退していた場合も同様である。

縮退がない場合、このような不定性はないので、演算子 \hat{A} が与えられると、§3.3 において用いた波動関数の完全系 $\{\psi_m\}$ は定数因子を除き一意的に定まる。そして、関数のノルムが 1 になるように規格化すれば、それらは正規直交条件を満足することが保障される。

一方、縮退がある場合には、波動関数の完全系 $\{\psi_m\}$ のとり方に上で述べたような任意性がある。従って、それぞれの関数のノルムを 1 に取ったとしても、そ

れらが正規直交条件を満足するとは限らない。つまり、異なる二つの波動関数が直交するとは限らない。

しかしそのような場合であっても、上で述べたような基底の取替えを行えば必ず正規直交条件を満足するようにすることができる。例えば、演算子 \hat{A} の縮退した固有状態を ψ_1 、 ψ_2 としよう。これらは一般に直交しないので、行列

$$A_{ij} = \int \psi_i^* \psi_j dx \quad (130)$$

とすると A_{12} および A_{21} は 0 とは限らない。しかし ψ_2 の代わりに

$$\psi'_2 = \psi_2 - \frac{A_{12}}{A_{11}} \psi_1 \quad (131)$$

を用いれば

$$\int \psi_1^* \psi'_2 dx = \int \psi_1^* \left(\psi_2 - \frac{A_{12}}{A_{11}} \psi_1 \right) dx = A_{12} - \frac{A_{12}}{A_{11}} A_{11} = 0 \quad (132)$$

であり、 (ψ_1, ψ'_2) は互いに直交する。同様な基底の取替えは、何重に縮退していた場合でも行うことができ、正規直交条件を満足する固有関数の組 $\{\psi_m\}$ を取ることができる。

測定による状態の変化についても、縮退がない場合とある場合でどのような違いが出るかを見ておこう。物理量 A の測定を行うことを考えよう。測定前の状態 ψ_{before} が \hat{A} の固有関数を用いて次のように展開されたとしよう。

$$\psi_{\text{before}} = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 + c_3 \psi_3 + c_4 \psi_4 + c_5 \psi_5 + \dots \quad (133)$$

この状態に対して A の測定を行い、その結果 ψ_3 に対応する固有値 a_3 が得られたとしよう。

もし縮退がなければ、固有値 a_3 が得られたということは状態が ψ_3 であることが確定したことを意味し、波束の収縮の結果、測定後の波動関数は次のようになる。

$$\psi_{\text{after}} \propto c_3 \psi_3. \quad (134)$$

しかし、もし縮退があり、 $a_3 = a_4$ であった場合には、固有値 a_3 が得られたとしても状態 ψ_3 なのかそれとも ψ_4 なのかは定まらない。従って、測定後の波動関数にはこれら二つの項が残される。

$$\psi_{\text{after}} \propto c_3 \psi_3 + c_4 \psi_4. \quad (135)$$

一般に、ある物理量 A の測定を行って測定値 a が得られたとき、測定後の波動関数は次のように与えられる。

$$\psi_{\text{after}} = \hat{P}_a^A \psi_{\text{before}} \quad (136)$$

ただし、 \hat{P}_a^A は次の積分核を持つ演算子であり、(133) のような展開式の中から固有値が a の波動関数の部分を取り出す役割を果たす。

$$P_a^A(x, y) = \sum_{a_m=a} \psi_m(x) \psi_m^*(y). \quad (137)$$

右辺の和は $a_m = a$ を満足する全ての m について取る。

状態 ψ_{after} に対して A の測定を行ったとき a が得られる可能性が 0 である場合には $\hat{P}_a^A \psi_{\text{before}} = 0$ である。逆に、確率 1 で a が得られる場合には $\hat{P}_a^A \psi_{\text{before}} = \psi_{\text{before}}$ である。

3.5 円周上の粒子

波動関数 $\psi(x)$ が連続的な座標 x の関数であって、しかも演算子の固有値が離散的になる例としてよく挙げられるものに円周上の粒子の運動量固有状態がある。

円周上にいる粒子を考えよう。円周に沿った粒子の座標を x とする。周長を L とすると、座標 x と $x + L$ は同じ点であるから、波動関数は次の周期境界条件を満足しなければならない。²

$$\psi(x + L) = \psi(x). \quad (138)$$

運動量演算子は $\hat{p} = -i\hbar(d/dx)$ であるが、これがエルミートであることは部分積分を用いて示すことができる。(やってみよ。) 固有関数は

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ipx/\hbar} \quad (139)$$

である。ただし、(138) を満足するためには運動量固有値 p は次の値をとらなければならない。

$$p = \frac{2\pi\hbar}{L} n, \quad n \in \mathbf{Z}. \quad (140)$$

そこで、整数 n によってラベルされた波動関数を

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{2\pi i n x / L} \quad (141)$$

によって定義する。これらは正規直交完全系をなす。すなわち

$$\oint \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn} \quad (142)$$

²正確には「満足しなければならない」という表現は強すぎる。波動関数の位相は測定することができないから、 $\psi(x)$ と $\psi(x + L)$ は位相の分だけずれていてもいいからである。ここでは周期境界条件に従うことを仮定する。

を満足し、任意の波動関数を

$$\psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \psi_n(x) \quad (143)$$

のように展開することができる。係数 c_n は

$$c_n = \oint \psi_n^* \psi dx \quad (144)$$

によって与えられる。(143) と (144) はフーリエ展開に他ならない。

積分核を用いた演算子の構成法の例として次の性質を持つ「右回り演算子」を構成してみよう。

- 右回り（運動量が正）の状態に対しては 1 を与え、
- 左回り（運動量が負）の状態に対しては -1 を与え、
- 運動量が 0 の状態に対しては 0 を与える。

この演算子を \hat{A} とすれば、固有関数としては運動量の固有関数 (141) をそのまま用いることができる。そして固有値は次のように与えられる。

$$a_1 = a_2 = \cdots = +1, \quad a_{-1} = a_{-2} = \cdots = -1, \quad a_0 = 0. \quad (145)$$

従って、積分核は定義 (115) に従い次のように与えられる。

$$\begin{aligned} A(x, y) &= \sum_n \psi_n(x) a_n \psi_n^*(y) \\ &= \frac{1}{L} \sum_{n=1}^{\infty} e^{2\pi i n(x-y)/L} - \frac{1}{L} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-2\pi i n(x-y)/L} \\ &= \frac{i}{L} \cot \left[\frac{\pi}{L}(x-y) \right] \end{aligned} \quad (146)$$

従って、演算子 \hat{A} の波動関数 $\psi(x)$ への作用は次のようになる。

$$\hat{A}\psi(x) = \frac{i}{L} \oint \cot \left[\frac{\pi}{L}(x-y) \right] \psi(y) dy \quad (147)$$

(cot が持つ極については主値積分として扱う。) これはヒルベルト変換として知られている。

3.6 規格化条件 (連続固有値の場合)

これまで、波動関数の規格化条件として

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = \delta_{mn} \quad (148)$$

を用いてきた。しかしこれは必ずしもうまくいくとは限らない。例えば、無限に伸びた直線上の粒子の波数固有状態

$$\psi_k(x) \propto e^{ikx} \quad (149)$$

を考えてみると、

- k は連続値を取る。このような場合にはクロネッカーのデルタ $\delta_{kk'}$ は使えない。
- 固有関数のノルムが発散するので (148) によって規格化することができない。

という問題がある。

このような場合にはしばしば x の範囲を有限の長さに制限しておき、その後で長さを無限大にする極限を取るという方法が用いられる。ここでは周期境界条件

$$\psi(x) = \psi(x + L) \quad (150)$$

を取り、あとで $L \rightarrow \infty$ の極限を取ることを考えよう。

(150) によって x の範囲を長さ L に制限すると、波動関数を (148) によって規格化することができる。

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \quad (151)$$

この固有関数が (150) を満足するために波数 k は次のように与えられるものだけが許される。

$$k = \frac{2\pi}{L} n. \quad (152)$$

一般の状態は次のように展開することができる。

$$\psi(x) = \sum_k c_k \psi_k(x) \quad (153)$$

係数は次のように与えられる。

$$c_k = \int \psi_k(x)^* \psi(x) dx \quad (154)$$

これらを用いることで、例えばある状態 $\psi(x)$ に対して波数の測定を行ったときにある範囲の値が得られる確率などを計算することができる。それは周長 L の円周

上の粒子に対する結果であるが、計算を行った後で $L \rightarrow \infty$ の極限を取れば、直線上の粒子に対する結果を得ることができる。

以上の手続きに特に問題はないのであるが、一つ不満な点としては、最終的に $L \rightarrow \infty$ の極限を取るにもかかわらず、計算の途中では L が現れてしまう点である。この点を解消するには、固有関数 $\psi_k(x)$ と展開係数 c_k の規格化を次のように変更しておくのがよい。(規格化を変更した新しい固有関数と展開係数を $\bar{\psi}_k(x)$ および \bar{c}_k によって表す。)

$$\begin{aligned}\bar{\psi}_k(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} = \sqrt{\frac{L}{2\pi}} \psi_k(x), \\ \bar{c}_k &= \sqrt{\frac{L}{2\pi}} c_k.\end{aligned}\tag{155}$$

すると、これまでに与えた式から L を取り除くことができる。

- まず、(155) に与えた $\bar{\psi}_k(x)$ の関数形に L が現れない。

- 規格化条件は

$$\int \bar{\psi}_k^* \bar{\psi}_{k'} dx = \frac{L}{2\pi} \delta_{kk'}\tag{156}$$

となるが、この右辺は $L \rightarrow \infty$ の極限でディラックのデルタ関数になる。その結果、規格化条件から L 依存性がなくなる。

$$\int \bar{\psi}_k^* \bar{\psi}_{k'} dx = \delta(k - k').\tag{157}$$

- 一般の波動関数の展開式 (153) は

$$\bar{\psi}(x) = \frac{2\pi}{L} \sum_k \bar{c}_k \bar{\psi}_k(x)\tag{158}$$

となるが、係数に表れている $2\pi/L$ は k の取りうる飛びとびの値の間隔であるから、 $L \rightarrow \infty$ の極限において和が積分に置き換わる。

$$\bar{\psi}(x) = \int dk \bar{c}_k \bar{\psi}_k(x)\tag{159}$$

- 係数の式 (154) は形を変えず、次のように与えられる。

$$\bar{c}_k = \int \bar{\psi}_k(x)^* \psi(x) dx\tag{160}$$

(159) と (160) は $\psi(x)$ と \bar{c}_k が互いにフーリエ変換の関係にあることを言っている。

- 波数の測定の結果 $k_1 \leq k \leq k_2$ が得られる確率は

$$P = \sum_{k=k_1}^{k_2} |c_k|^2 = \frac{2\pi}{L} \sum_{k=k_1}^{k_2} |\bar{c}_k|^2 \quad (161)$$

であるが、 $L \rightarrow \infty$ の極限において和が積分になる。

$$P = \int_{k_1}^{k_2} dk |\bar{c}_k|^2 \quad (162)$$

つまり、 $|\bar{c}_k|^2$ は k に対する確率密度関数である。

このように、固有状態が連続的な固有値でラベルされる場合には、クロネッカーのデルタの代わりにディラックのデルタ関数を、固有値に対する和の代わりに固有値に対する積分を用いて規格化を定義しておくとう便利である。

波数の固有状態以外の例を二つだけ挙げておこう。まず一つ目は運動量の固有状態である。運動量と波数は $p = \hbar k$ の関係にあるので、運動量の固有状態は波数の固有状態でもあるのだが、規格化についてはどちらを用いるかで違いが現れる。運動量演算子の固有関数を次のようにおく。

$$\psi_p(x) = N_p e^{ipx/\hbar} \quad (163)$$

これに正規直交条件

$$\int \psi_p^*(x) \psi_{p'}(x) dx = \delta(p - p') \quad (164)$$

を課して係数 N_p を決定しよう。左辺に (163) を代入して計算すると、

$$\begin{aligned} \text{左辺} &= \int (N_p e^{ipx/\hbar})^* (N_{p'} e^{ip'x/\hbar}) dx \\ &= N_p^* N_{p'} \int e^{-i(p-p')x/\hbar} dx \\ &= 2\pi N_p^* N_{p'} \delta\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right) \\ &= 2\pi \hbar N_p^* N_{p'} \delta(p - p') \end{aligned} \quad (165)$$

が得られる。従って規格化条件を満足するためには

$$2\pi \hbar N_p^* N_{p'} = 1 \quad (166)$$

であればよいから、

$$N_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} \quad (167)$$

とおけばよい。よって、規格化された運動量波動関数は

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \quad (168)$$

である。

連続的スペクトルを持つもう一つの物理量の例として位置を考えてみよう。位置 x がある値 x_0 に確定した状態は波動関数

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0) \quad (169)$$

によって与えられる。この ψ_{x_0} は正しく正規直交条件を満足することが簡単に確認できる。

$$\int \psi_{x_1}^*(x) \psi_{x_2}(x) dx = \delta(x_1 - x_2) \quad (170)$$

3.7 同時測定可能性

§3.1において述べたように、ミクロな系における測定は系に影響を与えずに行うことはできず、物理量 A の測定は波動関数を \hat{A} の固有関数に変化させる。このことは、二つの物理量を同時に測定しようとしたときに困難を生じる。

二つの物理量 A と B の測定を行うことを考えよう。 A の測定をある時刻に行い測定値 a を、その直後に間をおかずに B の測定を行い測定値 b を得たとする。これらの測定によって波動関数は（後に測定を行った B に対応する）演算子 \hat{B} の固有状態になっているであろう。従って、さらに間をおかずに \hat{B} の測定を再び行えば、確率 1 で測定値 b を得るはずである。それでは A と B の測定のあとに A の測定を行ったらどうなるであろうか。

一般には最初の A の測定を行うことで得られた波動関数はそのすぐ後の B の測定によって破壊されてしまうから、そのあとに再び A の測定を行っても始めと同じ測定値 a が得られるとは限らない。しかし、 A と B の組み合わせによっては、 B の測定を行った後であっても状態が A の固有状態であり、 A を測定すると確率 1 で a を与える。このようなとき、二つの物理量 A と B は同時測定可能であるという。

二つの物理量 A と B が同時測定可能であるために演算子 \hat{A} と \hat{B} が満足すべき条件を求めよう。そのために §3.4 で定義された演算子 \hat{P}_a^A を用いるのが便利である。この演算子は次の性質を満足する。

$$\sum_a \hat{P}_a^A = \hat{1}, \quad \sum_a a \hat{P}_a^A = \hat{A}, \quad \hat{P}_a \hat{A} = \hat{A} \hat{P}_a = a \hat{P}_a, \quad \hat{P}_a^A \hat{P}_{a'}^A = \delta_{aa'} \hat{P}_a^A \quad (171)$$

最後の式は物理的連続性を表す。

ある状態 ψ に対して始めに A の測定を行い a が得られたとすると、そのあとの状態の波動関数は $\hat{P}_a^A \psi$ に比例する。そしてさらに B の測定を行い、 b が得られたとすれば、波動関数は $\hat{P}_b^B \hat{P}_a^A \psi$ に比例する。同時測定可能である条件は、この状態に対してさらに A の測定を行ったとき、 a 以外の値が得られないということである。従って、次のように書くことができる。

$$\hat{P}_{a'}^A \hat{P}_b^B \hat{P}_a^A = 0 \quad \text{for } a \neq a' \quad (172)$$

あるいは、次のように書くこともできる。

$$(a' - a)\hat{P}_{a'}^A\hat{P}_b^B\hat{P}_a^A = 0. \quad (173)$$

(173) に b をかけて、 a', b, a 全てに対して和を取ってみよう。(171) を用いると、

$$0 = \sum_{a', b, a} (a'b\hat{P}_{a'}^A\hat{P}_b^B\hat{P}_a^A - ba\hat{P}_{a'}^A\hat{P}_b^B\hat{P}_a^A) = \hat{A}\hat{B}\hat{1} - \hat{1}\hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (174)$$

が得られる。従って物理量 A と B が同時測定可能であれば

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad (175)$$

が成り立つ。ただし、 \hat{A} と \hat{B} の交換関係

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (176)$$

を定義した。(175) は二つの演算子の積が順序に依存しないことを意味する。このとき二つの演算子は可換であるといわれる。

逆、すなわち二つの演算子が可換であり (175) が成り立つとき (173) が成り立つことは、以下のように示すことができる。まず、(175) が成り立つとき、 0 または正の整数 n に対して $[\hat{A}, \hat{B}^n] = 0$ が成り立つことはすぐに分かる。(\hat{B}^n は \hat{B} を n 個掛けたものである。) この式に対して左から $\hat{P}_{a'}^A$, 右から \hat{P}_a^A を作用させ (171) を用いると次の式を得る。

$$\sum_b b^n (a' - a) \hat{P}_{a'}^A \hat{P}_b^B \hat{P}_a^A = 0. \quad (177)$$

b に対する和は全ての異なる固有値にわたって行われるが、この式が任意の $n \geq 0$ に対して成り立つためには、それぞれの b ごとにこの式が成り立つ必要がある。こうして (173) が示された。

可換な二つの行列に対して次のことが成り立つことは重要である。

\hat{A} と \hat{B} が可換である場合、この二つの演算子の同時固有関数によって完全系を張ることができる。つまり、完全系をなす関数の系 ψ_m として

$$\hat{A}\psi_m = a_m\psi_m, \quad \hat{B}\psi_m = b_m\psi_m \quad (178)$$

のように \hat{A} と \hat{B} の両方の固有関数となっているものを取りることができる。

もしこのような完全系を取れることを仮定すると、 \hat{A} と \hat{B} が可換であることは直ちに示すことができる。まず、任意の関数 ψ を (178) を満たす \hat{A} と \hat{B} の同時固有関数 ψ_n によって展開しよう。

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n. \quad (179)$$

この関数に $\hat{A}\hat{B}$ を作用させると、

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \sum_n c_n \hat{A}\hat{B}\psi_n = \sum_n c_n b_n \hat{A}\psi_n = \sum_n c_n b_n a_n \psi_n. \quad (180)$$

同様に、 $\hat{B}\hat{A}$ を作用させると、

$$\hat{B}\hat{A}\psi = \sum_n c_n \hat{B}\hat{A}\psi_n = \sum_n c_n a_n \hat{B}\psi_n = \sum_n c_n a_n b_n \psi_n. \quad (181)$$

この二つは明らかに等しい。従って、 $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ が成り立つ。

3.8 不確定性原理

位置演算子 \hat{x} と運動量演算子 \hat{p} の交換関係を計算してみよう。 f を任意の関数として、 $[\hat{x}, \hat{p}]$ を作用させてみると、

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}]f &= \hat{x}\hat{p}f - \hat{p}\hat{x}f \\ &= -i\hbar \left(x \frac{d}{dx} f - \frac{d}{dx} (xf) \right) \\ &= -i\hbar (xf' - (xf' + f)) \\ &= i\hbar f \end{aligned} \quad (182)$$

となるから、交換関係は次のように与えられる。

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (183)$$

このことは、位置と運動量が同時確定不可能であることを意味している。

位置と運動量の不確定性が実験において具体的にどのように現れるかを見るために、簡単な例として図7にある単スリットの実験を考える。左側の電子銃から一つずつ打ち出された電子は、幅 d のスリットを通過し右側のスクリーンに衝突する。それぞれの電子は、スクリーンのある一点に衝突するが、実験を繰り返せば、図にあるような干渉縞が現れる。横方向に x 軸を、縦方向に y 軸をとる。電

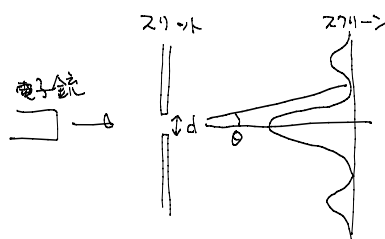


図 7: 単スリット実験

子銃から発射される電子の横方向の運動量を p_x としよう。このとき波動関数の波長 λ と次のように関係している。

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p_x} \quad (184)$$

この実験において、電子がスリットを通過した直後の y 座標の不確定性（あいまいさ）を Δy 、運動量の縦方向の成分 p_y の不確定性を Δp_y としよう。位置と運動量が同時測定不可能であるということは、 Δy と Δp_y をどちらも 0 にすることはできないということの意味している。そのことを見るために、 Δy と Δp_y を具体的に見積もってみよう。

スリットを通過した直後の電子は、 y 方向についてはスリットの幅の範囲内に存在していると考えられるから、位置の不確定性は単純に

$$\Delta y = d \quad (185)$$

である。運動量 p_y のあいまいさは、運動量ベクトル (p_x, p_y) の向きのあいまいさから決めることができる。電子が波の性質をもつことを考慮すると、スリットを通過した際に回折が起こり、スクリーンにはある幅を持った干涉縞が現れる。この幅はスリットの幅 d よりも大きいが、これはスリットを通過したあとの電子の運動の向きに不確定性があり、スクリーンに衝突する位置が決まらないためであると解釈することができる。従って、スリットから見たこの干涉縞の広がり角度を θ とすれば、運動量 p_y のあいまいさは

$$\Delta p_y = \theta p_x \quad (186)$$

と与えることができる。（ θ は小さいと仮定した。）干涉縞の幅 θ の定義は一意的ではないが、ここでは干涉縞の中心から最初の暗線までの角度として定義しよう。（ここでは数係数を無視した、大雑把な見積もりを行う。）この角度 θ は、スリットの上端を通る電子と、下端を通る電子の経路の長さの差が波の波長 λ であるという条件から決めることができる。（図 8）スリットの幅 d よりも波長 λ が十分小

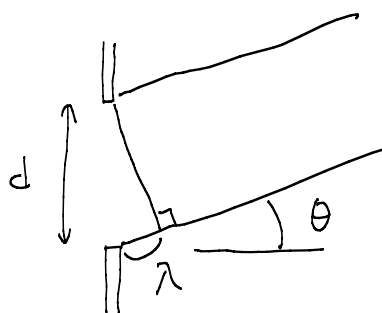


図 8: 単スリットにおける回折

さいと仮定すると、角度 θ は

$$\theta = \frac{\lambda}{d} \quad (187)$$

によって与えられる。以上の式を組み合わせれば、

$$\Delta p_y = \theta p_x = \frac{\lambda}{d} p_x = \frac{1}{d} p_x \frac{2\pi\hbar}{p_x} \sim \frac{\hbar}{d} \quad (188)$$

が得られる。ここでは数係数を無視する大雑把な見積もりを行っているから、途中で 2π の因子を無視した。(185) と (188) を組み合わせれば

$$\Delta y \Delta p_y \sim \hbar. \quad (189)$$

という結果が得られる。

ここでは、 y 方向の位置と運動量の関係を見たが、 x 方向についても同様である。つまり、交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ の右辺に現れる \hbar という定数は、位置と運動量のあいまいさ Δx と Δp の積が少なくとも \hbar 程度の大きさを持ち、これら二つを同時に 0 にできないことを意味している。

$$\Delta x \Delta p \gtrsim \hbar \quad (190)$$

量子力学においては、この限界を超えて測定を行うことは原理的にできない。このことを不確定性原理という。

不確定性原理は、位置 x と波長 λ を同時に確定させることができないという波の一般的な性質の帰結として理解することができる。ある波の位置の不確定性が Δx 程度であったと仮定しよう。これは、波が Δx 程度の幅に広がっており、その領域の外ではほとんど 0 になっていることを意味する。このような波に対して、

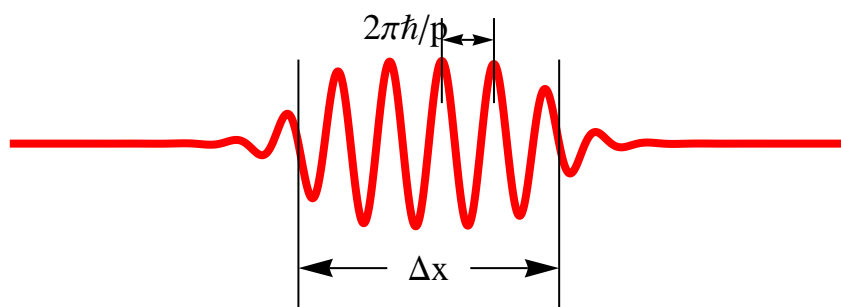


図 9: 波束

波長 λ をどの程度正確に決めることができるだろうか、波の波長を決めるためには、区間 Δx において波の数 n を数え、区間の幅を n で割ればよい。つまり、波長は次のように与えられる。

$$\lambda = \frac{\Delta x}{n} \quad (191)$$

しかし、区間 Δx の端の部分では、波の振幅は小さくなり、どこまでの波を数えるかというあいまいさがある。このため、波の数 n には ± 1 程度のあいまいさが

あり、それと関係した波長 λ に対してもあいまいさがあることになる。 n のあいまいさと λ のあいまいさの関係は、それらの関係 (191) の両辺を微分した式

$$d\lambda = -\frac{\Delta x}{n^2} dn \quad (192)$$

から読み取ることができる。波長のあいまいさ $\Delta\lambda$ と波の数のあいまいさ $\Delta n \sim 1$ はどちらも正数として定義されるので、それらの関係は

$$\Delta\lambda = \frac{\Delta x}{n^2} \Delta n \sim \frac{\Delta x}{n^2} = \frac{\lambda^2}{\Delta x} \quad (193)$$

となる。 λ ではなく、波数 $k \sim 1/\lambda$ のあいまいさを計算してみると、

$$\Delta k = \frac{\Delta\lambda}{\lambda^2} = \frac{1}{\Delta x} \quad (194)$$

のように Δx の逆数になる。量子力学における、波動関数の波数 k と運動量 p の関係 $p = \hbar k$ を用いれば、この関係式が不確定性関係 (190) と同じものであることがわかる。

ここまでは、 Δx や Δp の定義は大雑把で、不確定性関係も数係数については詳しく見てこなかった。より厳密な不確定性関係の不等式を与えるためには、 Δx や Δp を厳密に定義する必要がある。ここでは x と p の不確かさを次のように定義しよう。

$$\Delta x^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2, \quad \Delta p^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2. \quad (195)$$

ただし、演算子 \hat{A} に対してその期待値を $\langle \hat{A} \rangle$ と表わした。つまり、 ψ を規格化された波動関数として

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi dx \quad (196)$$

である。計算を簡単にするために、ここでは $\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{p} \rangle = 0$ の場合を考えることにする。

不確定性関係を得るために、次の式から出発する。

$$\int \left| ax\psi + \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx \geq 0 \quad (197)$$

ψ は任意の規格化された波動関数、 a は任意の実数である。被積分関数は負ではないので、この不等式が成り立つことは明らかであろう。この式の左辺は以下のような部分の和として与えられる。

$$\int |ax\psi|^2 dx = a^2 \Delta x^2, \quad (198)$$

$$\int \left| \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx = \int \psi^* \left(-\frac{d^2}{dx^2} \right) \psi dx = \frac{1}{\hbar^2} \Delta p^2, \quad (199)$$

$$\int \left(ax\psi^* \frac{d\psi}{dx} + \frac{d\psi^*}{dx} ax\psi \right) dx = \int \left(ax\psi^* \frac{d\psi}{dx} - a\psi^* \frac{d}{dx}(x\psi) \right) dx = -a \int \psi^* \psi dx = -a \quad (200)$$

これらをもとの不等式に代入すると、

$$a^2 \Delta x^2 - a + \frac{1}{\hbar^2} \Delta p^2 \geq 0 \quad (201)$$

が得られる。これは (197) を書き換えただけであるから、任意の ψ 、 a に対して成り立つはずである。

(201) の右辺は a の二次関数である。 a によらずこの不等式が成り立つということは、二次関数の判別式が負または 0 であるはずである。

$$-\frac{1}{4\Delta x^2} + \frac{\Delta p^2}{\hbar^2} \geq 0 \quad (202)$$

この不等式を整理すれば、不確定性関係

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (203)$$

が得られる。これが厳密な不確定性関係である。

不確定性ができるだけ小さくなるような関数すなわち (203) の等号が成り立つような関数を求めよう。(そのような波動関数は最小波束と呼ばれる。) 等号が成り立つ場合、すなわち判別式が 0 である場合には、(201) の左辺は放物線の頂点

$$a = \frac{1}{2\Delta x^2} \quad (204)$$

において 0 になる。これは a の値がこのように与えられるときに (197) の積分が 0 になることを意味する。(197) の被積分関数は負にはならないから、その積分が 0 であるということは、被積分関数がいいたるところ 0 であることを意味している。すなわち、波動関数 ψ は次の微分方程式を満足する。

$$\frac{1}{2\Delta x^2} x\psi + \frac{d\psi}{dx} = 0 \quad (205)$$

この微分方程式を解くと

$$\psi = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} \Delta x^{1/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\Delta x^2}\right) \quad (206)$$

が得られる。係数は規格化条件によって決めた。これは図 10 のような関数である。

ここまでは、位置と運動量の間不確定性関係について考えてきたが、同様なことは、時刻とエネルギーについても成り立つ。時刻の演算子 \hat{t} (これは、 $\hat{x} = x$ と同

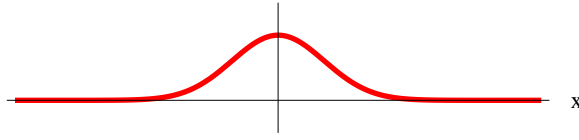


図 10: $\Delta x \Delta p$ が最小になる波動関数の例

様に、単に時刻 t を掛けるという演算子である。) とエネルギー演算子 $\hat{E} = i\hbar\partial/\partial t$ の間の交換関係は

$$[\hat{t}, \hat{E}] = -i\hbar \quad (207)$$

となる。このことは、時刻のあいまいさ Δt と、エネルギーのあいまいさ ΔE の間にも不確定性関係

$$\Delta t \Delta E \gtrsim \hbar \quad (208)$$

が成り立つことを表わしている。

4 エネルギースペクトル

4.1 定常状態

ミクロな系を解析する上で重要な情報の一つとして、その系がどのようなエネルギーをとりえるかというものがある。例えば、原子内の電子のエネルギーは飛び飛びの値しかとらないが、このことが原子の安定性を保証しているということは §1 で述べたとおりである。

ある状態がエネルギー E を持つとする。これは、その波動関数 $\psi(x, t)$ がエネルギー演算子 $\hat{E} = i\hbar\partial/\partial t$ の固有関数であり、固有値が E であることを意味する。すなわち、 $\psi(x, t)$ は次の微分方程式を満足する。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = E \psi(x, t). \quad (209)$$

この微分方程式は簡単に解くことができ、次の一般解を持つ。

$$\psi(x, t) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \psi(x). \quad (210)$$

ただし、 $\psi(x)$ は x の関数である。この解は、時間経過とともに波動関数の位相だけが変化する。以前に述べたように、波動関数の位相が変化しても物理量に影響を与えず、系は時間に依存しない状態にあるとみなすことができる。このような状態は定常状態と呼ばれる。 t に依存しない関数 $\psi(x)$ も $\psi(x, t)$ 同様 (定常状態の) 波動関数と呼ばれる。

エネルギー固有状態 = 定常状態

定常状態においては、時間変化がないが、だからといって質点が動いていないというわけではない。

このことは、以下のように説明することができる。定常状態においては、エネルギーが確定している。つまり、エネルギーの不確かさ ΔE が 0 である。従って、不確定性関係 $\Delta E \Delta t \sim \hbar$ により、時間的な不確定性は無限大である。つまり、粒子がある点を「いつ」通過するのかといった情報は失われている。(図 11) この結

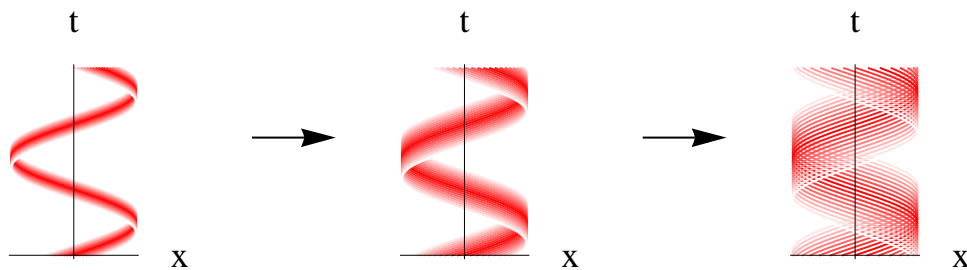


図 11: エネルギーを確定させると、時間的情報が失われる。

果、どの時刻においても系の様子は同じに見える。

定常状態の波動関数 (210) を (38) に与えたシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \quad (211)$$

に代入すると、 $\psi(x)$ に対する次の微分方程式を得る。

$$\left(-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (212)$$

これは時間に依存しないシュレーディンガー方程式と呼ばれる。これに対して (211) は時間に依存するシュレーディンガー方程式と呼ばれる。

4.2 境界条件

定常状態の波動関数は (212) に与えた時間に依存しないシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (213)$$

を満足する。一般のポテンシャル $U(x)$ に対してこの方程式を厳密に解くことは難しいが、ポテンシャルの漸近形を次のように仮定することで $|x|$ が大きいところの波動関数の振る舞いを調べてみよう。

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} U(x) = U_1, \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} U(x) = U_2. \quad (214)$$

x が正で大きいところでは、近似的に $U(x) = U_1$ であるから、シュレーディン

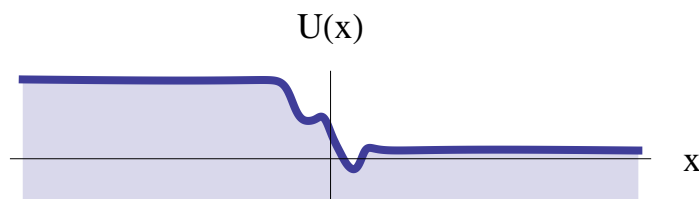


図 12: 遠方 ($x \rightarrow \pm\infty$) において定数に漸近するポテンシャル

ガー方程式は

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_1) \psi(x) \quad (215)$$

となる。二つの場合に分けて考えよう。

$E < U_1$ の場合 このとき、古典的には粒子がこの領域に来ることはない。

$$b^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_1 - E), \quad b > 0 \quad (216)$$

によって正の実数 b を定義しておく、シュレーディンガー方程式は

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = b^2 \psi(x) \quad (217)$$

となり、一般解が次のように与えられる。

$$\psi(x) = c_1 e^{bx} + c_2 e^{-bx}, \quad c_1, c_2 \in \mathbf{C}. \quad (218)$$

もし $c_1 \neq 0$ であれば、波動関数 $\psi(x)$ は $x \rightarrow \infty$ で指数関数的に発散する。このことは、粒子の存在確率は $x \rightarrow \infty$ に集中していることを表わしており、粒子が有限の範囲内で見出される確率は 0 になる。このような状況は物理的なものではない。従って、物理的な波動関数を得るためには $c_1 = 0$ という条件を課す必要がある。

この条件のように、系の境界領域において波動関数の振る舞いを決める条件のことを境界条件と呼ぶ。

$E > U_1$ の場合 このとき、古典的には粒子は $x \rightarrow \infty$ の広い領域を運動できる。

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_1), \quad k > 0 \quad (219)$$

によって正の実数 k を定義しておく、シュレーディンガー方程式は

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -k^2\psi(x) \quad (220)$$

となり一般解は

$$\psi(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}, \quad c_1, c_2 \in \mathbf{C} \quad (221)$$

である。この解の二つの項はどちらも発散しないので、境界条件を課す必要はない。第1項は運動量 $p = \hbar k$ を持ち、 x の正の方向に運動する粒子を、第2項は運動量 $p = -\hbar k$ を持ち、 x の負の方向に運動する粒子を与えている。

ここまでは、 $x \rightarrow +\infty$ の漸近領域に注目してきたが、全く同様なことは $x \rightarrow -\infty$ に対しても成り立つ。

$E < U_2$ の場合 粒子は古典的には $x \rightarrow -\infty$ に到達することはできない。

$$b'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_2 - E), \quad b' > 0 \quad (222)$$

を定義しておく、シュレーディンガー方程式の解は

$$\psi(x) = c'_1 e^{b'x} + c'_2 e^{-b'x}. \quad (223)$$

となり、 $x \rightarrow -\infty$ で発散しないためには境界条件

$$c'_2 = 0 \quad (224)$$

を課す必要がある。

$E < U_2$ の場合 粒子は古典的に $x \rightarrow -\infty$ の側の広い領域を運動できる。

$$k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_2), \quad k' > 0 \quad (225)$$

によって k' を定義しておく、シュレーディンガー方程式の一般解は

$$\psi(x) = c'_1 e^{ik'x} + c'_2 e^{-ik'x} \quad (226)$$

となる。どちらの項も発散しないので境界条件は不要。それぞれの項は運動量 $p = \pm \hbar k'$ で運動する粒子を表す。

4.3 離散スペクトルと連続スペクトル

先ほどの $x \rightarrow \pm\infty$ での漸近形についての議論に基づき、 $-\infty < x < +\infty$ 全体における解について考えよう。時間に依存しないシュレーディンガー方程式は二階の線形常微分方程式である。微分方程式の一般論より、次のことが成り立つ。

時間に依存しないシュレーディンガー方程式の一般解は二つの積分定数を持つ。すなわち、エネルギー固有値 E それぞれに対して二つの線形独立な解 ψ_1 と ψ_2 が存在し、一般解は次のように与えられる。

$$\psi(x) = A\psi_1(x) + B\psi_2(x), \quad A, B \in \mathbb{C}. \quad (227)$$

ただし、このように与えられた解が常に境界条件を満足するとは限らない。境界条件が係数 A と B に対してどのような条件を課すかを考えてみよう。

まず、 $x \rightarrow +\infty$ での振る舞いについて見てみる。

$E < U_1$ の場合 独立な二つの解 $\psi_1(x)$ と $\psi_2(x)$ はシュレーディンガー方程式の解であるから、以下のように振舞うはずである。

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= c_{11}e^{bx} + c_{12}e^{-bx}, \\ \psi_2(x) &= c_{21}e^{bx} + c_{22}e^{-bx} \end{aligned} \quad (228)$$

ただし b は §4.2 と同様に定義した。このとき一般解は

$$\psi(x) = (Ac_{11} + Bc_{21})e^{bx} + (Ac_{12} + Bc_{22})e^{-bx} \quad (229)$$

となるが、この波動関数が $x \rightarrow +\infty$ で発散しないためには A と B が次の条件を満足しなければならない。

$$Ac_{11} + Bc_{21} = 0. \quad (230)$$

$E > U_1$ の場合 この場合には ψ_1 も ψ_2 も $x \rightarrow +\infty$ において発散しないから、一般解の係数 A と B は任意の値が許される。つまり、境界条件を課す必要はない。

全く同様の考察を $x \rightarrow -\infty$ における振る舞いに対して行えば

$E < U_2$ の場合 線形独立な波動関数 ψ_1 と ψ_2 は $x \rightarrow -\infty$ において次のように振舞う。

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= c'_{11}e^{b'x} + c'_{12}e^{-b'x}, \\ \psi_2(x) &= c'_{21}e^{b'x} + c'_{22}e^{-b'x} \end{aligned} \quad (231)$$

b' は §4.2 と同様に定義した。 $\psi = A\psi_1 + B\psi_2$ が $x \rightarrow -\infty$ で発散しないためには A と B は境界条件

$$Ac'_{12} + Bc'_{22} = 0 \quad (232)$$

を満足する必要がある。

$E > U_2$ の場合 ψ_1 と ψ_2 は $x \rightarrow -\infty$ で発散しないので、境界条件は不要。

つまり、 $x \rightarrow \infty$ においても $x \rightarrow -\infty$ においても、その領域に粒子が到達することが古典的に不可能であるときには、係数 A と B に対して境界条件が課される。 $x \rightarrow \pm\infty$ における条件を組み合わせると、以下のようなになる。

$E > U_1, U_2$ の場合 A と B に対して境界条件は課されない。従って、独立な二つの解が常に存在する。つまり、同じエネルギー固有値 E を持つ二つの状態が存在する。(二重に縮退している。)

$E > U_1, E < U_2$ または $E < U_1, E > U_2$ の場合 A と B に対して一つの境界条件が課される。従って、エネルギー固有値 E を持つ状態は一つだけである。

$E < U_1, U_2$ の場合 この場合、古典的には x が正の側も負の側もポテンシャルの壁に阻まれ、粒子は有限の領域から外へ出ることができない。このような状態を束縛状態と呼ぶ。

このとき、 A と B に対して $x \rightarrow \pm\infty$ においてそれぞれ条件が課される。

$$\begin{aligned} Ac_{11} + Bc_{21} &= 0 \\ Ac'_{12} + Bc'_{22} &= 0. \end{aligned} \quad (233)$$

従って、解は一般には存在しない。($A = B = 0$ だけが解である。) しかしもし二つの条件式が一致すれば、0 でない解が一つ許される。このようなことが起こるためには係数行列の行列式が 0 であればよい。

$$\begin{vmatrix} c_{11} & c_{21} \\ c'_{12} & c'_{22} \end{vmatrix} = 0 \quad (234)$$

c_{11} など、この行列式の成分は、シュレーディンガー方程式の右辺に現れるエネルギー E に依存しているから、この式はエネルギーに対して条件を課す。このことから、束縛状態においては (234) が成り立つようなとびとびのエネルギーの値でのみ状態が存在する。

取り得るエネルギーの値の集合はエネルギースペクトル、あるいは単にスペクトルと呼ばれる。そのうち、連続的な値を取る部分を連続スペクトル、離散的な値のみが許される部分を離散スペクトルと呼ぶ。以上をまとめて図示したのが図 14 である。

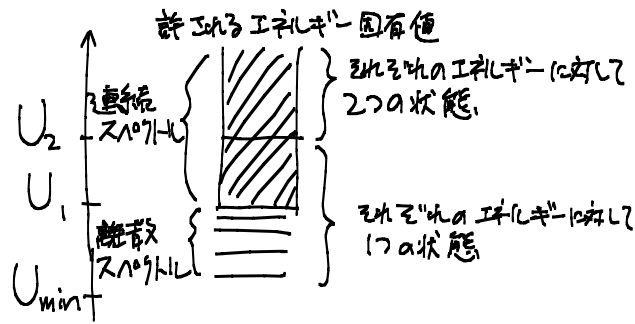


図 13: エネルギースペクトルの例

エネルギーが最低の状態のことを基底状態という。それ以外の、基底状態よりもエネルギーが高い状態のことを励起状態という。

図 14 において、状態はそのエネルギーによって 3 つに分けることができる。つまり、 $U_2 < E$ である状態 (a)、 $U_1 < E < U_2$ である状態 (b)、そして $E < U_1$ である状態 (c) である。(ここでは $U_1 < U_2$ と仮定した。) これらはそれぞれ、図 14 に与えた古典的運動に対応している。(a) は、粒子は $x = \pm\infty$ のどちらにも到達

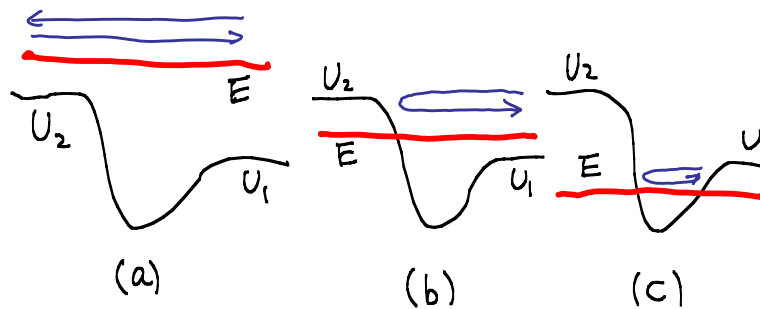


図 14: 古典的運動 3 通り

することができ、右から左への運動と左から右への運動の二通りがある。これが、状態が二重に縮退していることに対応する。(b) では粒子が $x = -\infty$ へは到達することができないから、左側から運動してきた粒子はポテンシャルに跳ね返されて再び左側へ戻っていく。(c) は粒子は有限の領域に閉じ込められており、このような状態は束縛状態と呼ばれる。

束縛状態では、波動関数は遠方で指数関数的に 0 になる。

$$\psi \overset{x \rightarrow +\infty}{\sim} e^{-bx}, \quad \psi \overset{x \rightarrow -\infty}{\sim} e^{b'x}. \quad (235)$$

従って、積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx \quad (236)$$

が収束し、規格化可能である。つまり、次の関係が成り立つ。

束縛状態 ↔ 離散スペクトル ↔ 規格化可能状態

(235) は、束縛状態の波動関数が（適当に位相因子を選ぶことで）遠方で実になることを意味している。時間に依存しないシュレーディンガー方程式は実数のみを含むから、遠方で波動関数が実であることは、波動関数がいたるところ実であることを意味する。

例題 4.1 束縛状態の運動量期待値はいくらになるか求めよ。

解答: 1次元束縛状態の波動関数は実数であり、無限遠方で0になる。よって

$$\begin{aligned}
 \bar{p} &= \int \psi^* \hat{p} \psi dx \\
 &= \int \psi (-i\hbar) \frac{d}{dx} \psi dx \\
 &= -\frac{i\hbar}{2} \int \frac{d}{dx} \psi^2 dx \\
 &= -\frac{i\hbar}{2} \left[\frac{d}{dx} \psi^2 \right]_{-\infty}^{\infty} \\
 &= 0
 \end{aligned} \tag{237}$$

これは、束縛状態が往復運動であり、運動量が正である確率と負である確率が一致するためである。

任意のエネルギー固有状態のエネルギーはポテンシャルの最低値 U_{\min} よりも小さくなることはない。すなわち次の式が成り立つ。

$$E \geq U_{\min} \tag{238}$$

古典的には、これは運動エネルギーが負にならないことを用いて簡単に示されるが、量子力学においても同様であり、以下のように示すことができる。

まず、 $E < U_{\min}$ と仮定してみよう。このとき明らかに $E < U_1$ かつ $E < U_2$ であるから、そのような状態が存在したとすれば束縛状態であり、規格化可能であるはずである。そこで次のように規格化されているとしよう。

$$\int |\psi|^2 dx = 1. \tag{239}$$

このとき、運動エネルギー演算子を $\hat{K} = \hat{p}^2/2m$ とおくと、その期待値に対して

$$\int \psi^* \hat{K} \psi dx = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^* \frac{d^2}{dx^2} \psi dx = \frac{\hbar^2}{2m} \int \left| \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx \geq 0 \tag{240}$$

が成り立つ。これは古典力学において、運動エネルギーが負にならないことに対応する式である。また、

$$\int \psi^* U \psi dx \geq U_{\min} \int |\psi|^2 dx = U_{\min} \quad (241)$$

が成り立つ。(240) と (241) を加えると、

$$\int \psi^* \hat{H} \psi \geq U_{\min} \quad (242)$$

が得られる。ここで、 ψ が \hat{H} の固有状態であり固有値が E であるとすれば、

$$E \geq U_{\min} \quad (243)$$

が得られる。これは明らかに仮定 $E < U_{\min}$ に反しているから、仮定が間違っていること、つまり、(238) が成り立つことを意味している。

$E < U_1$ または $E < U_2$ のときに縮退が無いことは上で説明したとおりであるが、別の証明を与えておこう。まず、 ψ_1 と ψ_2 が同じエネルギー固有値 E を持つと仮定しよう。すなわちどちらも同じ微分方程式を満足する。

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \psi_1'' + (U - E) \psi_1'' &= 0, \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \psi_2'' + (U - E) \psi_2'' &= 0. \end{aligned} \quad (244)$$

ただし、 x による微分をダッシュによって表した。示したいのは、これら二つの関数が実は定数係数を除いて等しく、同じ状態を表わす波動関数であるということである。まず、上の式を組み合わせて次の式を得る。

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2} (U - E) = \frac{\psi_2''}{\psi_2} \quad (245)$$

あるいは

$$\psi_1'' \psi_2 - \psi_1 \psi_2'' = 0. \quad (246)$$

これは

$$(\psi_1' \psi_2 - \psi_1 \psi_2')' = 0. \quad (247)$$

と書くことができるから、

$$\psi_1' \psi_2 - \psi_1 \psi_2' = \text{const} \quad (248)$$

が得られる。この左辺はロンスキアンと呼ばれる。ここで、 $E < U_1$ または $E < U_2$ であるという仮定により、波動関数は $x \rightarrow \pm\infty$ の少なくとも一方で 0 になる。このことから、(248) の右辺の定数が 0 であることがわかる。つまり、

$$\psi_1' \psi_2 - \psi_1 \psi_2' = 0 \quad (249)$$

あるいは

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2}. \quad (250)$$

これを積分することにより、次の式が得られる。

$$\log \psi_1 = \log \psi_2 + \text{const.} \quad (251)$$

これは ψ_1 と ψ_2 が比例していることを表しており、従って ψ_1 と ψ_2 は同じ状態を表す波動関数である。

4.4 波動関数の性質

ポテンシャル $U(x)$ が滑らかな連続関数であれば、時間に依存しないシュレーディンガー方程式の解 $\psi(x)$ もやはり滑らかである。以下で考える例では、ポテンシャル $U(x)$ は必ずしも滑らかな関数ではない。そのような場合、時間に依存しないシュレーディンガー方程式を解く際には、ポテンシャルが折れ曲がったり、不連続に変化したりする点において波動関数がどのように振舞うかを知ることが重要である。

波動関数の基本的な性質として次のことが成り立つ。

- [1] 波動関数は連続である。
- [2] ポテンシャル $U(x)$ が有界（発散しない）であれば、波動関数は滑らか（ ψ' が連続）である。

[1] の仮定を満足しないようなポテンシャルを無理やり構成することは可能であるが、物理的な問題においてそのようなものは現れない。（少なくともこの授業では現れない。）そこで [1] については証明を与えることはせず、単に仮定することにする。

[2] を証明しておこう。時間に依存しないシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi = (E - U)\psi \quad (252)$$

をある微小区間 $x_0 - \epsilon < x < x_0 + \epsilon$ で積分すると、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(x_0 + \epsilon) - \psi'(x_0 - \epsilon)] = \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} (E - U)\psi dx \quad (253)$$

が得られる。[1] の仮定より右辺の被積分関数は有界であるから $\epsilon \rightarrow 0$ の極限で 0 になる。よって

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \psi'(x_0 + \epsilon) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \psi'(x_0 - \epsilon). \quad (254)$$

つまり、 $\psi'(x)$ は $x = x_0$ において連続である。

さらに詳しくポテンシャルと波動関数の振る舞いを調べていこう。そのために、シュレーディンガー方程式を、波動関数 ψ が与えられたときにそこからポテンシャル U を決める式

$$U = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi''}{\psi} + E \quad (255)$$

とみなし、いろいろな振る舞いをする波動関数に対して、そのような波動関数を与えるポテンシャルがどのようなものかを試してみるのがよい。

たとえば、波動関数がある領域で完全に 0 になるのはどのような場合かを見てみよう。(15) に与えたように、もとは滑らかな波動関数から出発して、 $x < 0$ の領域で 0 になるような波動関数へと変化させてみる。その結果、(255) によって与

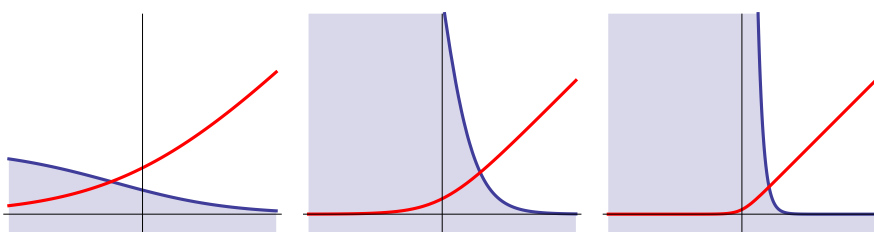


図 15: 負の領域で 0 であるような波動関数を与える極限。赤い線が波動関数であり、青い線は対応するポテンシャルを与える。

えられるポテンシャルは $x < 0$ の部分で正の無限大に発散することが分かる。このような解析より、波動関数は一般に次の性質を満たすことがわかる。

- [3] $U(x)$ が幅が 0 でないある区間で $+\infty$ であるとき、その区間で波動関数は 0 である。
- [4] ポテンシャルが $x > x_0$ で有限、 $x < x_0$ で $+\infty$ である場合、 $x = x_0$ において波動関数は連続、しかし $\psi'(x)$ は不連続でも良い。

すなわち、ポテンシャルが急に発散する点においては次の固定端条件を課す必要がある。

$$\psi(x)|_{x=x_0} = 0. \quad (256)$$

5 シュレーディンガー方程式の解

5.1 井戸型ポテンシャル (深さ ∞)

最も簡単な例として、井戸型ポテンシャルと呼ばれる図 17 のようなポテンシャルを考えよう。つまり、 $U(x)$ は次のように与えられる。

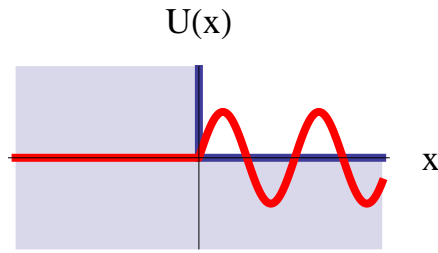


図 16: 固定端条件を満足する波動関数の例

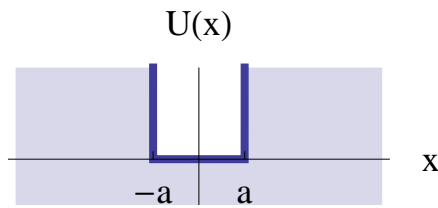


図 17: 無限に深い井戸型ポテンシャル

$$U(x) = 0 \quad (-a < x < a), \quad U(x) = +\infty (|x| > a) \quad (257)$$

このようなポテンシャルのもとでは、粒子は $|x| \leq a$ の領域から外へ出ることはできない。従って、箱の中に閉じ込められた粒子を表していると考えられる。

ルール [3] より、波動関数は領域 $|x| < a$ の外側では 0 である。領域の中では $U = 0$ であるから、シュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi = E\psi \quad (258)$$

を満足する。エネルギースペクトルの一般論より、このポテンシャルについては束縛状態のみが存在し、それらのエネルギーは負ではない。そこで、次の式によって k を定義するのが便利である。

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (259)$$

この k を用いれば、シュレーディンガー方程式は次のように書くことができる。

$$\psi'' = -k^2\psi. \quad (260)$$

この微分方程式の一般解は

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (261)$$

である。領域の両端 $x = \pm a$ で波動関数が 0 になるという条件を課そう。

$$\psi(a) = Ae^{ika} + Be^{-ika} = 0, \quad \psi(-a) = Ae^{-ika} + Be^{ika} = 0. \quad (262)$$

この二つの式を組み合わせることで、係数 A と B の間に次の関係が成り立つことがわかる。

$$A^2 = B^2. \quad (263)$$

すなわち、 $B = \pm A$ である。

$B = A$ の場合には波動関数は

$$\psi = A(e^{ikx} + e^{-ikx}) = 2A \cos kx \quad (264)$$

となり、 $B = -A$ の場合には

$$\psi = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA \sin kx \quad (265)$$

となる。

さらに、条件 (262) の片方を用いることで、 k に対して条件が課される。波動関数が偶関数 (264) の場合には、(262) より次の条件が得られる。

$$\cos ka = 0 \quad \rightarrow \quad k = \frac{\pi}{2a}n, \quad n = 1, 3, 5, 7, \dots \quad (266)$$

波動関数が奇関数 (265) の場合には

$$\sin ka = 0 \quad \rightarrow \quad k = \frac{\pi}{2a}n, \quad n = 2, 4, 6, 8, \dots \quad (267)$$

となる。 $n = 0$ だと波動関数が完全に 0 になってしまうので許されないことに注

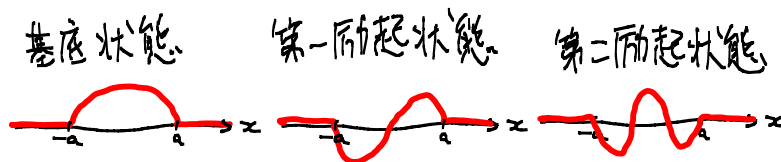


図 18: 無限に深い井戸型ポテンシャル中の波動関数の例

意。従って、エネルギー固有値は次のように与えられる。

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi n}{2a} \right)^2, \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (268)$$

$n = 0$ が許されないということは、(ポテンシャルの底が $U(x) = 0$ であるにもかかわらず) エネルギーが 0 にならないことを意味する。これは、粒子がある有限の範囲内に閉じ込められると、粒子の位置の不確定性 Δx が有限になるために、不確定性原理のために粒子の運動量の不確定性 Δp が 0 になることができず、粒子が完全に静止できないためである。

束縛状態なので、波動関数を規格化することができる。規格化された波動関数は次のように与えられる。

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin kx \quad \text{or} \quad \frac{1}{\sqrt{a}} \cos kx. \quad (269)$$

ここで考えた例も含め、一次元の束縛状態の波動関数に対して次のことが成り立つことが知られている。

振動定理 (node-counting theorem)

束縛状態の波動関数の (両端を除く) 節の数はエネルギーがより低い状態の数に一致する。

この定理より、基底状態の波動関数は節を持たない。また、ポテンシャルが対称なとき、束縛状態においては偶関数と奇関数が交互に現れることがわかる。

次の性質は、以下で問題を解く際に便利である。

ポテンシャル $U(x)$ が偶関数であるとき、 $\psi(x)$ は偶関数または奇関数に取ることができる。

ここで、「取ることができる」ということの意味について先に述べておこう。もし縮退がない状態であれば、波動関数は全体の係数を除き一意的に定まる。しかし、縮退がある場合には、それらの波動関数の任意の重ね合わせも同じ時間に依存しないシュレーディンガー方程式を満足するので、独立な波動関数をどのように取るかは任意性がある。このような場合に上の定理が主張するのは、うまく線形独立な波動関数を選べばそれらを全て偶関数または奇関数に選ぶことができるということである。

このことを踏まえたうえで [5] を証明しておこう。ポテンシャルが偶関数、すなわち $U(-x) = U(x)$ のとき $\psi(x)$ がシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (270)$$

の解であったとしよう。このとき、 $x \rightarrow -x$ の置き換えを行うと、

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(-x) + U(x)\psi(-x) = E\psi(-x) \quad (271)$$

が得られる。すなわち、

$$\tilde{\psi}(x) \equiv \psi(-x) \quad (272)$$

も同じシュレーディンガー方程式を満足する。

もし $\psi(x)$ と $\tilde{\psi}(x)$ が数係数を除き同じ関数であるとしてみよう。つまり、

$$\psi(-x) = a\psi(x) \quad (273)$$

が成り立つとしてみよう。このとき x に $-x$ を代入すれば、

$$\psi(x) = a\psi(-x) \quad (274)$$

(273) と (274) を組み合わせれば、 $a = \pm 1$ が得られる。 $a = +1$ の場合には $\psi(x)$ は偶関数、 $a = -1$ の場合には $\psi(x)$ は奇関数である。

$\psi(x)$ と $\tilde{\psi}(x)$ が線形独立である場合には

$$a\psi(x) + b\tilde{\psi}(x) \quad (275)$$

によって与えられる任意の関数がやはりシュレーディンガー方程式の解になっている。そこで独立な解として次の二つを選ぶことができる。

$$\begin{aligned} \psi_{\text{even}}(x) &= \psi(x) + \tilde{\psi}(x), \\ \psi_{\text{odd}}(x) &= \psi(x) - \tilde{\psi}(x). \end{aligned} \quad (276)$$

これらはそれぞれ偶関数、奇関数である。

5.2 井戸型ポテンシャル (深さ有限)

次の例として、ある領域の中と外で異なる値を取るポテンシャル上を運動する粒子について考えよう。このようなポテンシャルは、金属内の電子などをモデル

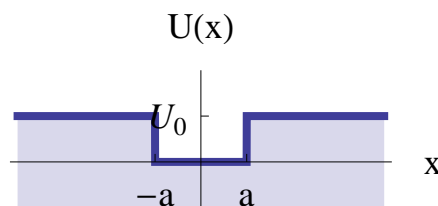


図 19: 深さが有限の井戸型ポテンシャル

化した際に現れる。 $U_0 \rightarrow \infty$ の極限では先ほど考えた深さが無限大の井戸型ポテンシャルに帰着する。

このようなポテンシャル上での古典的粒子の運動は次のようになる。

$E > U_0$ のとき 粒子は $-\infty$ から $+\infty$ またはその逆に運動する。

$0 < E < U_0$ のとき 粒子は $x = \pm a$ の間を往復運動する。

これに対し、量子論的にはエネルギースペクトルに関する一般論より

$E > U_0$ のとき 連続スペクトル、二重に縮退、規格化不可能

$0 < E < U_0$ のとき 離散スペクトル、縮退なし、規格化可能

であると期待される。 $x = \pm a$ においてポテンシャルは不連続であるが、§4.4において与えた波動関数の性質 [2] より、波動関数は連続である。従って、 $x = \pm a$ によって分けられる 3 つの領域でシュレーディンガー方程式の解を求め、それらを滑らかにつなぎ合わせることで全領域での解を得ることができる。

ここでは $0 < E < U_0$ であると仮定して束縛状態の解を求めてみよう。

$$b = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} \quad (277)$$

を定義しておくると便利である。すると、井戸の内部 ($-a < x < a$) でのシュレーディンガー方程式は

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \quad (278)$$

であり、解は e^{ikx} と e^{-ikx} の線形結合である。井戸の外 ($|x| > a$) ではシュレーディンガー方程式は

$$\psi'' - b^2\psi = 0. \quad (279)$$

であり、その解は e^{bx} と e^{-bx} の線形結合である。波動関数は、これらの微分方程式を満足することに加え、 $x = \pm a$ において滑らかであり、 $x \rightarrow \pm\infty$ において ψ は有限でなければならないという条件が課される。

ポテンシャルが偶関数であるから、§4.4 において与えた波動関数の性質 [5] より、波動関数は偶関数または奇関数としてよい。まずは偶関数の場合を考えよう。上記のシュレーディンガー方程式の解は、それぞれの領域において次のように与えられる。

$$\psi = Ae^{bx} \quad (x \leq -a), \quad \psi = B \cos(kx) \quad (-a \leq x \leq a), \quad \psi = Ae^{-bx} \quad (a \leq x). \quad (280)$$

井戸の外側での波動関数の形を決めるのに、 $x \rightarrow \pm\infty$ で 0 になることを用いた。波動関数が $x = \pm a$ で連続であるということより

$$Ae^{-ba} = B \cos ka \quad (281)$$

を得る。さらに、点 $x = \pm a$ において滑らかでなければならない(つまり、 ψ' が連続でなければならない)という条件から

$$bAe^{-ba} = kB \sin ka \quad (282)$$

を得る。(281) と (282) の比を取ることで、 A と B を含まない次の式を得ることができる。

$$b = k \tan ka \quad (283)$$

b も k もそれらの定義 (277) を通してエネルギー E に依存している。従って、(283) を解くことによって離散的なエネルギーの値を得ることができる。この方程式を E について解析的に解くことはできないが、グラフを用いて値を数値的に求めるのは簡単である。 k と b は定義 (277) より次の関係式を満足する。

$$b^2 + k^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2} \quad (284)$$

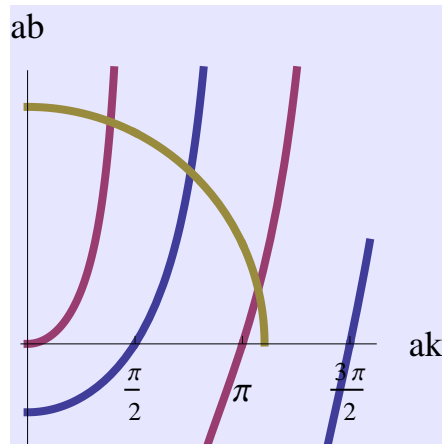


図 20: (283) のグラフを赤、(287) のグラフを青、(284) のグラフを黄で描いた。

従って、(283) と (284) のグラフを k - b 平面上に描き、それらの交点を求めることで、 k と b の値が求まる。(b と k はどちらも正なので、第一象限だけを見ればよい。) 実際に図示すると、図 20 のようになる。

同様にして、波動関数が奇関数である場合も考えることができる。各領域での波動関数は (280) の代わりに次のようになる。

$$\psi = -Ae^{bx} \quad (x \leq -a), \quad \psi = B \sin(kx) \quad (-a \leq x \leq a), \quad \psi = Ae^{-bx} \quad (a \leq x). \quad (285)$$

$x = \pm a$ における接続条件からは

$$Ae^{-ba} = B \sin ka, \quad bAe^{-ba} = -kB \cos(ka) \quad (286)$$

の条件が得られ、これらの比を取ること

$$b = -k \cot ka \quad (287)$$

を得る。今度は (287) と (284) を連立させて解くことで、 b と k が決まる。これも、グラフを用いて解くことができる。

図 20 からグラフの交点を読み取ると、束縛状態の個数は波動関数が偶関数であるものと奇関数であるものをあわせて

$$\left[\frac{ak}{\pi/2} \right] + 1 \quad (288)$$

であることがわかる。ただしここで用いた $[\dots]$ はガウス記号であり、 $[x]$ は x を超えない最大の整数を表す。

波動関数の概形を図示すると、図 21 のようになる。解は次のようになる。ポテンシャルの井戸の外側 (古典的には粒子が来ることが許されない領域) であっても粒子が存在する確率が 0 ではないことに注意しよう。

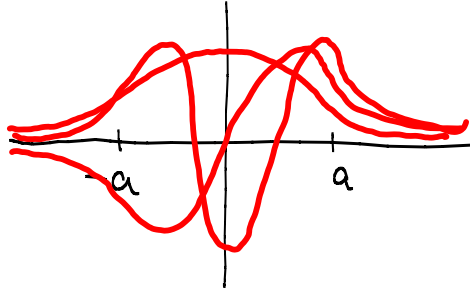


図 21: 箱型ポテンシャル上の束縛状態の波動関数

5.3 δ -関数型ポテンシャル

§5.2 において考えた有限の深さの井戸型ポテンシャルのエネルギーの原点をずらしたものを図 22 に与えた。このポテンシャルにおいて、ポテンシャルのグラフ

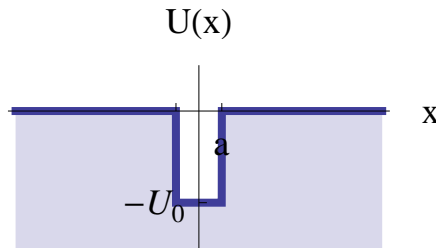


図 22: 井戸型ポテンシャル。ポテンシャルのグラフと x 軸に囲まれた長方形領域の面積を有限に保ちつつ U_0 を無限大にする極限で δ -関数型ポテンシャルに移行する。

と x 軸に囲まれた面積 $2aU_0 = Z$ を一定にしながら $a \rightarrow 0, U_0 \rightarrow \infty$ の極限をとると、 δ -関数型ポテンシャル

$$U(x) = -Z\delta(x) \quad (289)$$

が得られる。シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - Z\delta(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (290)$$

である。ここでは $Z > 0$ を仮定する。(つまり、ポテンシャルは負の値をとる。) 束縛状態 ($E < 0$) があるかどうかをしらべてみよう。

$x \neq 0$ では

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (291)$$

なので、一般解は

$$\psi = Ae^{bx} + Be^{-bx} \quad (292)$$

である。ただし、

$$b = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE} \quad (293)$$

によって b を定義した。 $\pm\infty$ で発散しないためには

$$\begin{cases} \psi = Ae^{bx} & (x < 0) \\ \psi = Be^{-bx} & (x > 0) \end{cases} \quad (294)$$

でなければならない。

波動関数は $x = 0$ で連続でなければならないから、 $A = B$ であり、波動関数はまとめて

$$\psi(x) = Ae^{-b|x|} \quad (295)$$

と与えることができる。 $x = 0$ で ψ' は連続ではないことに注意。グラフの折れ曲がり方に対する情報を得るために、シュレーディンガー方程式を $-\epsilon \sim \epsilon$ で積分する。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d\psi}{dx} \right]_{-\epsilon}^{+\epsilon} - Z\psi(0) = E \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \psi(x) dx \quad (296)$$

そして $\epsilon \rightarrow 0$ の極限を取れば、 $x = 0$ における波動関数の折れ曲がり具合を決める次の式が得られる。

$$\psi'(+0) - \psi'(-0) = -\frac{2mZ}{\hbar^2} \psi(0) \quad (297)$$

ここに (295) を代入すると、

$$b = \frac{mZ}{\hbar^2} \quad (298)$$

が得られる。ここから、エネルギー固有値が一意的に次のように決まる。

$$E = -\frac{b^2 \hbar^2}{2m} = -\frac{mZ^2}{2\hbar^2}. \quad (299)$$

束縛状態が存在すれば一つだけであることは以下のような考察からもわかる。仮に束縛状態が二つ以上存在したとしてみよう。すると、§5.1 に与えた振動定理より第一励起状態の波動関数は奇関数である。ということは $\psi(0) = 0$ であり、粒子が原点に存在する確率は 0 である。ということは粒子はポテンシャル ($x = 0$ においてのみ 0 でない) の影響を受けないはずであり、束縛状態にはならない。これは仮定に反するから、束縛状態は二つ以上は存在しないということが結論される。

係数 A は波動関数の規格化により定めることができる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2b|x|} dx = |A|^2 \frac{1}{b}. \quad (300)$$

つまり A は (位相の不定性を除き) $A = \sqrt{b}$ と決まり、規格化された波動関数は次のように与えられる。(図 23)

$$\psi(x) = \sqrt{b} e^{-b|x|} \quad (301)$$

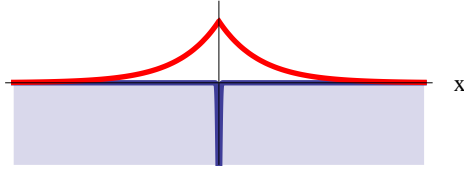


図 23: δ 関数型ポテンシャル上の束縛状態の波動関数

6 古典的運動との関係

6.1 古典極限

量子力学において、 $\hbar \rightarrow 0$ の極限をうまく取ることによって、古典力学を得ることができる。このとき、波動関数に対応するのは何であろうか。

時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$\hat{H}(\hat{p}, x)\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi \quad (302)$$

の解について考えよう。自由粒子（つまりポテンシャルが $U(x) = 0$ ）であれば、

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \quad (303)$$

が解となる。この波動関数自体は $\hbar \rightarrow 0$ の極限を取ると意味の無いものになってしまう。古典的に意味がありそうなのは、位相部分から i/\hbar という因子を取り除いた $px - Et$ の部分である。そこで一般の場合の解を次のように置いてみよう。

$$\psi = \exp \frac{i}{\hbar} S(x, t). \quad (304)$$

上記の自由粒子の場合には

$$S(x, t) = px - Et \quad (305)$$

であり、古典的にも何らかの意味を持ちそうである。

古典極限を取ったときに、関数 $S(x, t)$ がどのような方程式を満足するかを見てみよう。ハミルトニアンが

$$H(\hat{p}, x) = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + U(x) \quad (306)$$

と与えられる場合に、(304) を時間に依存するシュレーディンガー方程式に代入してみると、次の式を得る。

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 - i\hbar \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \right] + U(x) = -\frac{\partial S}{\partial t} \quad (307)$$

よって、 $\hbar \rightarrow 0$ の極限では

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + U = -\frac{\partial S}{\partial t} \quad (308)$$

が得られる。これは、古典力学（解析力学）におけるハミルトン・ヤコビ方程式であり、その解である関数 $S(x, t)$ は作用関数

$$S(x, t) = \int_{t_0}^t L(x, \dot{x}) dt \quad (309)$$

である。

ハミルトン・ヤコビ方程式の一般形は

$$H \left(p = \frac{\partial S}{\partial x}, x \right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (310)$$

である。時間に依存するシュレーディンガー方程式に対して、定常状態の波動関数

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi(x) \quad (311)$$

を代入すると、時間に依存しないシュレーディンガー方程式が得られるが、このことに対応して、ハミルトン・ヤコビ方程式に対して

$$S(x, t) = S(x) - Et \quad (312)$$

を代入すると、時間に依存しないハミルトン・ヤコビ方程式が得られる。

$$H \left(p = \frac{\partial S}{\partial x}, x \right) = E \quad (313)$$

この式は時間に依存しないシュレーディンガー方程式の $\hbar \rightarrow 0$ 極限として得ることもできる。

実際には $\hbar \neq 0$ なので、波動関数 $\psi \propto e^{iS}$ は正確な解ではない。より正確な解を求めるために、 S を \hbar でテーラー展開し、波動関数を

$$\psi = \exp \left(\frac{i}{\hbar} S \right), \quad S = S^{(0)} + \hbar S^{(1)} + \hbar^2 S^{(2)} + \dots \quad (314)$$

のように置こう。先ほどの $\hbar = 0$ と置いて求めた S は、この展開の最初の項 $S^{(0)}$ に対応する。 $S^{(1)}$ 、 $S^{(2)}$ などの項を順に求めていけば、原理的にはいくらでも正確な波動関数を求めることができる。このように、 \hbar が小さいとしてべき展開し、そのべきの低いほうから波動関数を求めていく近似法を WKB 近似（Wentzel-Kramers-Brillouin 近似）と呼ぶ。

$S^{(0)}$ がハミルトン・ヤコビ方程式の解として得られることは既に見たので、次のオーダー、 $S^{(1)}$ を計算して、それがどのような意味を持つかを見てみよう。 $\psi = e^{iS/\hbar}$ を時間に依存しないシュレーディンガー方程式に代入すると、次の式を得る。

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{dS}{dx} \right)^2 - i\hbar \frac{d^2 S}{dx^2} \right] + U(x) = E. \quad (315)$$

((307) の右辺を E で置き換えたものである。) この段階では何の近似も行っていない。ここに (314) にある S の展開式を代入し、 \hbar の次数ごとに整理しよう。 \hbar^0 の部分は次のハミルトン・ヤコビ方程式を与える。念のためもう一度書いておくと

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dS^{(0)}}{dx} \right)^2 + U(x) = E. \quad (316)$$

である。この解は

$$\frac{dS^{(0)}}{dx} = p(x) = \pm \sqrt{2m(E - U(x))} \quad (317)$$

を積分することによって得られる。 $p(x)$ は点 x における古典的運動量である。これまでは無視していた \hbar^1 のオーダーの式はどのようなかという、

$$2 \frac{dS^{(0)}}{dx} \frac{dS^{(1)}}{dx} - i \frac{d^2 S^{(0)}}{dx^2} = 0. \quad (318)$$

となる。これは次のように変形することができる。

$$\frac{dS^{(1)}}{dx} = \frac{i}{2} \frac{d^2 S^{(0)}}{dx^2} \bigg/ \frac{dS^{(0)}}{dx} = \frac{i}{2} \frac{d}{dx} \log \frac{dS^{(0)}}{dx} = \frac{i}{2} \frac{d}{dx} \log p(x). \quad (319)$$

最後の等号で (317) を用いた。両辺を積分すると、

$$S^{(1)} = \frac{i}{2} \log p(x) + \text{const.} \quad (320)$$

この項まで考慮して波動関数を書いてみると、

$$\psi = \exp \frac{i}{\hbar} (S^{(0)} + \hbar S^{(1)}) = \text{const} \frac{1}{p(x)^{1/2}} \exp \frac{i}{\hbar} S^{(0)} \quad (321)$$

が得られる。 $S^{(1)}$ の影響は $p(x)^{-1/2}$ という因子に現れている。これは、粒子の存在確率密度 $|\psi|^2$ が $p(x)^{-1}$ に比例することを意味している。このことは、古典的な存在確率がある微小区間における粒子の滞在時間に比例しており、滞在時間はその区間を通過する際の運動量に反比例することとつじつまが合っている。

6.2 半古典近似

1次元の系では、時間に依存しないハミルトン・ヤコビ方程式 (313) は簡単に解くことができる。 $U(x) < E$ であるような領域において、次の関数を定義しよう。

$$p_{\pm}(x) = \pm\sqrt{2m(E - U(x))} \quad (322)$$

これは、エネルギー E を持つ質点が点 x を通過するときの運動量である。運動の方向それぞれに対応して $p_+(x)$ と $p_-(x)$ を定義した。この関数を用いれば、時間に依存しないハミルトン・ヤコビ方程式 (313) は

$$\frac{dS(x)}{dx} = p_{\pm}(x) \quad (323)$$

と書くことができる。従って、積分することにより次の解を得る。

$$S_{\pm}(x) = \int p_{\pm}(x) dx \quad (324)$$

$S_{\pm}(x)$ それぞれが積分定数の不定性を持つが、これはあとで決める。 $S_{\pm}(x)$ が求まれば、波動関数は近似的に

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar}S_+(x)} + e^{\frac{i}{\hbar}S_-(x)} \quad (325)$$

と与えられる。それぞれの項の係数は自由に選ぶことができるが、それは $S_{\pm}(x)$ の定義に繰り込んであるものとする。

このような近似を行う場合には、近似が悪くなるのはどのような場合かを常に気にする必要がある。ハミルトン・ヤコビ方程式を得る手続きを振り返ってみると、(307) の括弧の中の二つの項

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 - i\hbar\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \quad (326)$$

において第2項が第1項よりも十分に小さいと仮定して無視した。しかし $\partial S/\partial x = 0$ の点ではこれが成り立たず、近似が悪くなる。ハミルトン・ヤコビ方程式の解については $p = \partial S/\partial x$ は運動量であるから、 $\partial S/\partial x = 0$ という点は運動量が0である点、すなわち全エネルギー E がポテンシャルエネルギー $U(x)$ と等しくなり、粒子が運動の向きを変える点である。このような点のことを古典回帰点と呼ぶ。(図24)

古典回帰点においては、上で行った近似が良くないので、真面目にシュレーディンガー方程式を解く必要がある。ここでは問題を簡単にするために、ポテンシャルが急激に立ち上がり、古典回帰点 $x = x_*$ においては固定端条件 $\psi(x_*) = 0$ が課される場合を考えてみよう。 $S_{\pm}(x)$ のうち、 $S_+(x)$ を積分定数まで含めて定義す

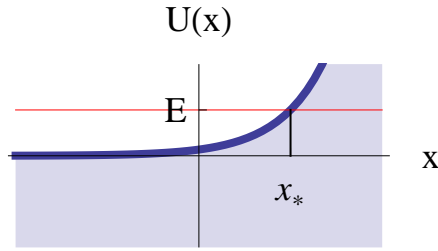


図 24: 古典回帰点

るために、基準点 x_0 を定め、そこからの積分として $S_+(x)$ を次のように定義することにする。

$$S_+(x) = \int_{x_0}^x p_+(x) dx \quad (327)$$

このとき、(325) の第 2 項に現れる $S_-(x)$ の定数部分は波動関数が固定端条件を満足するように決めなければならない。すなわち

$$e^{\frac{i}{\hbar} S_-(x_*)} = -e^{\frac{i}{\hbar} S_+(x_*)} \quad (328)$$

が成り立たなければならない。この両辺の対数を取ることにより

$$\frac{S_-(x_*)}{\hbar} = \frac{S_+(x_*)}{\hbar} - \pi. \quad (329)$$

が得られる。(対数は多価関数であるためにさらに 2π の整数倍を右辺に加えることもできるが、ここでは無視する。) よって、 $S_-(x)$ は次のように与えることができる。

$$\begin{aligned} \frac{S_-(x)}{\hbar} &= \frac{S_-(x_*)}{\hbar} + \frac{1}{\hbar} \int_{x_*}^x p_-(x) dx \\ &= \frac{S_+(x_*)}{\hbar} - \pi + \frac{1}{\hbar} \int_{x_*}^x p_-(x) dx \\ &= \frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{x_*} p_+(x) dx - \pi + \frac{1}{\hbar} \int_{x_*}^x p_-(x) dx. \end{aligned} \quad (330)$$

(327) と (330) を次のように表すと、その意味がわかりやすくなる。

$$\frac{S_+(x)}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \int_{C_1} p dx, \quad \frac{S_-(x)}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \int_{C_2} p dx - \pi. \quad (331)$$

ただし、 C_1 は寄り道せずに x_0 から x_* へ移動する経路、 C_2 は x_0 から出発して一旦古典回帰点 x_* に行き、 x まで戻る経路である。(図 25) 積分はそれぞれの経路に沿って行い、 p の符号は運動の向きに従って選ぶ。 $S_-(x)$ の式にある $-\pi$ という寄与は、古典回帰点における反射の際の位相のずれとみなすことができる。

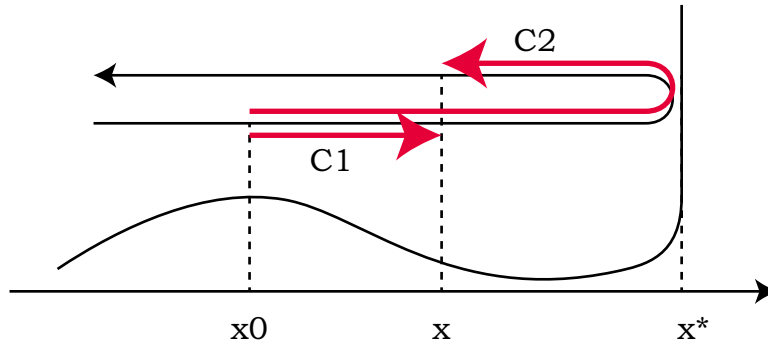


図 25: 半古典近似の波動関数に寄与する古典的経路

一般には、波動関数は次のように与えられる。

$$\psi(x) = \sum_C \exp \frac{i}{\hbar} S_C(x) \quad (332)$$

ただし、 C は基準点 x_0 を x をつなぐ運動を表す経路であり、 $S_C(x)$ はそれぞれの経路ごとに次のように与えられる関数である。

$$\frac{S(x)}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \int_C p dx - \Delta_C \quad (333)$$

ただし Δ_C は古典回帰点における位相のずれである。複数回古典回帰点で跳ね返った場合には、それら全てに関する位相のずれを加える必要がある。ここでは近似的に固定端条件を用いたために $\Delta = \pi$ であったが、一般には $\Delta = \pi$ とは限らない。たとえば、 $E - U(x)$ が連続的に正から負に転じるような古典回帰点においては

$$\Delta = \frac{\pi}{2} \quad (334)$$

であることが知られている。

(333) の積分において、積分を行う経路の向きは必ずしも粒子の運動の向きに一致しなくても良いことを注意しておこう。たとえば図 26 では経路 C_2 の向きは運動の向きに一致するが、経路 C_1 は運動の向きとは逆である。さらに、経路が運動

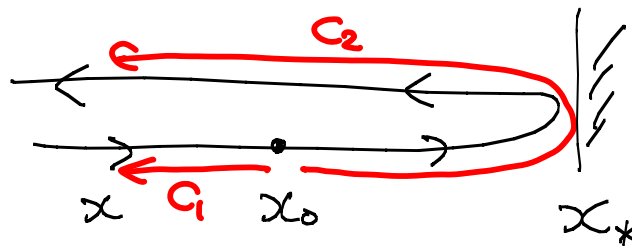


図 26: 基準点 x_0 と x をつなぐ経路が運動の向きと逆になる例

の向きと逆である場合、古典回帰点における位相のずれの符号を逆にしなければならないことに注意。

二つの古典回帰点が存在する束縛状態の場合を考えよう。この場合、運動は循環的になり、基準点 x_0 から経路上のある点まで行く方法が複数存在する。図 25 においても、 x_0 と x を指定したときに二つの経路 C_1 と C_2 が存在したが、これら二つの経路は x における二つの異なる運動の向きに対応する。しかし、運動が循環的である場合には、 x_0 と x において運動の向きを指定してもなお複数の経路が存在する。たとえば図 27 において、 x_0 において右向きに運動する粒子と x において右向きに運動する運動する粒子をつなぐ経路が C と C' の二つ存在する。これら二つ以外にも、運動の経路を何週もして x_0 から x へ至っても良いので、無限個の経路の選び方がある。この経路の選び方に波動関数が依存しないためには、

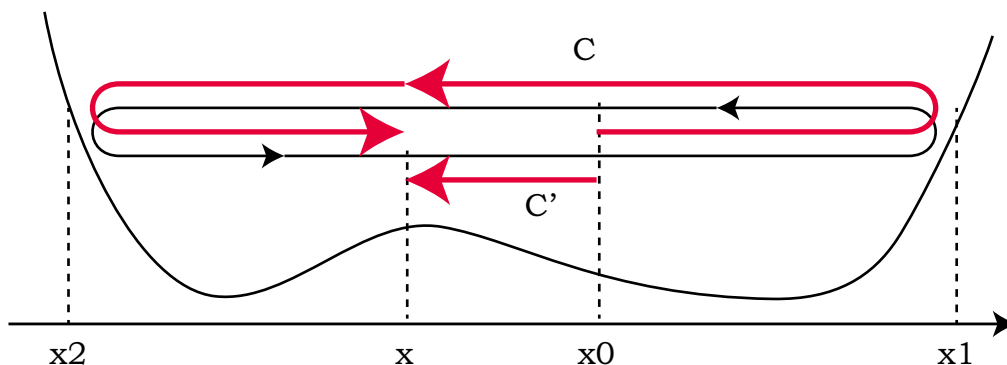


図 27: 井戸中を往復運動する粒子

$$\frac{1}{\hbar} S_C(x) - S_{C'}(x) = 2\pi n \quad (335)$$

でなければならない。 n は任意の整数である。右辺が 0 でなく $2\pi n$ となっているのは、 2π の整数倍の位相のずれは波動関数 $\exp(S/\hbar)$ に影響を与えないからである。この条件は、運動にそって一周する経路上の積分を用いて次のように表すのが便利である。

$$\frac{1}{\hbar} \oint p dx - (\Delta_1 + \Delta_2) = 2\pi n \quad (336)$$

左辺の積分は運動の向きに経路を一周する経路上での積分であり、 Δ_1 と Δ_2 は二つの古典回帰点についての位相のずれである。この式はボア・ゾンマーフェルトの量子条件と呼ばれる。左辺に現れる積分は、位相平面 (x - p 平面) 上で、周期運動を表す閉曲線が囲む面積を表している。被積分関数中の $p(x)$ は座標 x のほかに質点のエネルギー E にも依存する。従って、この式は E に対する条件式となっており、これを解くことにより許されるエネルギー準位を近似的に求めることができる。

問題 6.1 ボア・ゾンマーフェルトの量子条件を用いて次のポテンシャル中の質点のエネルギー順位を決定せよ。

1. 無限に深い井戸型ポテンシャル

$$U(x) = +\infty \quad (|x| > 0), U(x) = 0 \quad (|x| < 0). \quad (337)$$

(古典回帰点での位相のずれは $\Delta_1 = \Delta_2 = \pi$)

2. 調和振動子ポテンシャル

$$U(x) = \frac{k}{2}x^2. \quad (338)$$

(古典回帰点での位相のずれは $\Delta_1 = \Delta_2 = \pi/2$)

7 波束

7.1 位相速度と群速度

ここまでは主に定常状態について調べてきた。定常状態においては時間の情報は失われているため、質点の座標の時間的变化によって表される古典的な運動との関係がはっきりしない。ここでは、時間的に変化する波動関数によって記述される系を調べることで、古典力学と量子力学の間関係を見ていこう。

まずは一番簡単な例としてポテンシャルが $U(x) = 0$ である自由粒子の場合を考える。エネルギー固有状態の波動関数は次のように与えられる。

$$\psi = e^{ikx - i\omega t} \quad (339)$$

この波動関数は、運動量とエネルギーが

$$p = \hbar k, \quad E = \hbar\omega \quad (340)$$

である粒子を表わしている。ただし、これらは分散関係

$$\frac{p^2}{2m} = E \quad (341)$$

を満足する。同じエネルギーと運動量を持つ古典的粒子の速度 v_{cl} は

$$v_{cl} = \frac{p}{m} \quad (342)$$

によって与えられる。

波動関数 (339) によって表される波が進む速度、すなわち位相

$$\phi = kx - \omega t \quad (343)$$

が一定である点が進む速度 v_{phase} (位相速度と呼ばれる) は

$$v_{\text{phase}} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} \quad (344)$$

である。(341) を用いると

$$v_{\text{phase}} = \frac{p}{2m} \quad (345)$$

であり、これは古典的な粒子の速度 (342) とは異なっている。これは、量子力学において波動関数の位相は物理的な意味を持たないため、位相が一定の点の速度として定義される位相速度も物理的な意味を持たないためである。

それでは、波動関数から、質点の速度に関する情報を得るためにはどうすれば良いであろうか。位相と異なり、波動関数の絶対値の二乗 $|\psi|^2$ は質点の存在確率という意味を持つ。従って、もし波動関数が空間のある点の周りでのみ 0 でない値を持ち、その点が時間とともに移動するなら、その移動速度を古典的な質点の速度とみなしても良いであろう。上記の単色波では $|\psi|^2 = \text{const}$ であり、何か動いているということを見て取ることはできなかった。

$|\psi|^2$ の時間変化として運動が現れるためには、異なるエネルギー固有値を持つ複数の波を重ね合わせる必要がある。ここでは単純な例として、極めて近い二つの波数 k_1 と k_2 および振動数 ω_1 と ω_2 を持つ波の重ね合わせを考えよう。

$$\psi = e^{ik_1x - i\omega_1t} + e^{ik_2x - i\omega_2t} \quad (346)$$

波数 k_i と振動数 ω_i は分散関係 (341) を満足しているとする。このように二つの波を重ね合わせると、振幅がゆっくりと変化する「うなり」が発生する。(図 28) 実際にこの波に対して $|\psi|^2$ を計算してみると、

$$|\psi|^2 = |e^{ik_1x - i\omega_1t}(1 + e^{i\Delta kx - i\Delta\omega t})| = |1 + e^{i\Delta kx - i\Delta\omega t}| = 2 + 2\cos(\Delta kx - \Delta\omega t) \quad (347)$$

となり、波数 Δk 、振動数 $\Delta\omega$ の波が現れる。ただし

$$\Delta k = k_2 - k_1, \quad \Delta\omega = \omega_2 - \omega_1 \quad (348)$$

である。この波は、 $|\psi|^2$ の変化の波であるから、位相の変化の波とは異なり物理

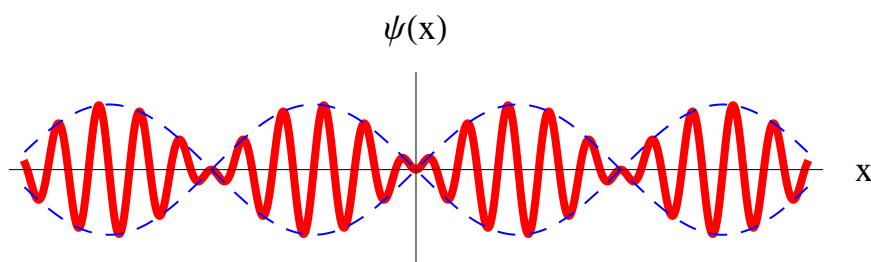


図 28: うなり

的な意味を持つものである。この波は

$$v_{\text{group}} = \frac{\Delta\omega}{\Delta k} \quad (349)$$

で移動していくことがわかる。 k_1 と k_2 は非常に近いと仮定したが、 $\Delta k \rightarrow 0$ の極限では、

$$v_{\text{group}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} \quad (350)$$

と与えられる。これは群速度と呼ばれる。(341) の分散関係を用いれば

$$v_{\text{group}} = \frac{p}{m} \quad (351)$$

となり、これが古典的粒子の速度に一致する。

粒子の速度 ↔ 波動関数の群速度

ここで考えた例では $|\psi|^2$ は無限に連なる周期関数であり、粒子が存在する位置は定まらないが、連続的な波長の波を重ね合わせることによって空間上のある領域に局在化した波を作ることができる。そのような、空間的に局在した波は波束と呼ばれる。(図 29) 現実の粒子は、その位置がある程度定まっている場合が多い

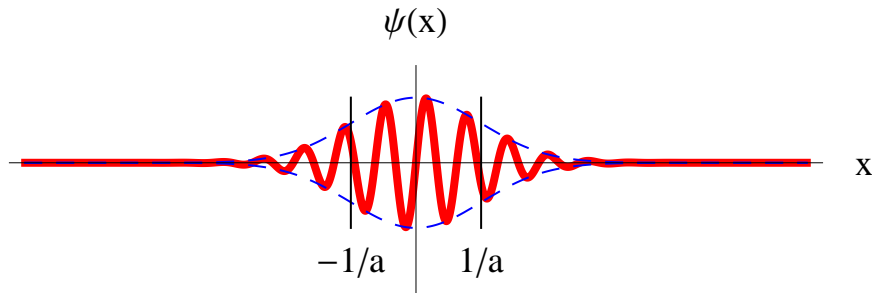


図 29: 波束の例

が、そのような粒子は量子力学においては波束として表わされる。

波束は連続的な波数を持つ波の重ね合わせとして次のように与えることができる。

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int f(k) e^{ik(x-x_0) - i\omega(k)t} dk \quad (352)$$

ただし、 $f(k)$ は k_0 のまわりに値を持つ、図 30 のような実関数であるとする。 ψ

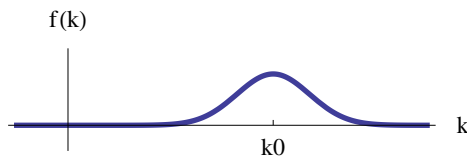


図 30: 入射波の k 表示

に対する規格化条件は関数 f に対する規格化条件を与える。

$$\int |\psi(x)|^2 dx = \int |f(k)|^2 dk = 1. \quad (353)$$

x 空間での波動関数 (352) がどこで大きな値を持つかを調べよう。(352) の積分値が大きくなるのは $f(k) \neq 0$ であるような k の範囲、すなわち k_0 のまわりで \exp 因子の位相が変化しないところである。つまり、そのような x は次の式から求めることができる。

$$\left. \frac{d}{dk}(kx - kx_0 - \omega(k)t) \right|_{k=k_0} = x - x_0 - \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k=k_0} t = 0. \quad (354)$$

群速度

$$v_{\text{group}} = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} \quad (355)$$

を用いると、

$$x = x_0 + v_{\text{group}}t. \quad (356)$$

が得られ、 $t = 0$ で $x = x_0$ を出発し、速度 v_{group} で移動する波束を表わすことがわかる。これにより、一般の波束についてもその速度が群速度によって与えられることが示された。

7.2 波束の運動

一般のポテンシャル上を運動する粒子について、座標や運動量の時間変換がどのように表されるかを見てみよう。

一般に、エルミート演算子 \hat{A} に対してその期待値は

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi dx \quad (357)$$

と表される。この期待値の時間変化を見るには、右辺の波動関数の時間変化を時間に依存するシュレーディンガー方程式を用いて書き換えればよい。実際に計算してみると次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle &= \frac{d}{dt} \int \psi^* \hat{A} \psi dx \\ &= \int \psi^* \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} dx + \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{A} \psi dx \\ &= \int \psi^* \hat{A} \left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi \right) dx + \int \left(\frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi \right)^* \hat{A} \psi dx \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* \hat{A} \hat{H} \psi dx - \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* \hat{H} \hat{A} \psi dx \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* [\hat{A}, \hat{H}] \psi dx \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle \end{aligned} \quad (358)$$

途中でハミルトニアン演算子がエルミートであることを用いた。これは古典力学におけるハミルトン方程式

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} \quad (359)$$

に対応する。ただし $\{*,*\}$ はポアソン括弧であり次のように定義される。

$$\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial x}. \quad (360)$$

\hat{A} として、座標演算子 \hat{x} および運動量演算子 \hat{p} を代入すると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle, \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle = -\langle V'(\hat{x}) \rangle. \end{aligned} \quad (361)$$

が得られる。これらは古典的な関係式において、変数を量子力学的な期待値に置き換えただけの形をしている。このように、期待値に対して古典的な運動方程式がなりたつことをエーレンフェストの定理という。

上で与えた期待値の時間微分とハミルトン方程式の対応において、演算子の交換関係が古典力学におけるポアソン括弧に対応していた。実際、交換関係とポアソン括弧に対して次のことが成り立つ。

\hat{p} と \hat{x} の多項式として表された 3 つの演算子 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ が

$$\frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C} \quad (362)$$

を満足するとする。 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ において

$$\hat{x} \rightarrow x, \quad \hat{p} \rightarrow p, \quad \hbar \rightarrow 0 \quad (363)$$

という置き換えを行って得られる x と p の関数をそれぞれ A, B, C とすると、

$$\{A, B\} = C \quad (364)$$

が成り立つ。

問題 7.1 交換関係とポアソン括弧について上記の関係が成り立つことを示せ。(線形性より、 $A = \hat{x}^k \hat{p}$ 、 $\hat{B} = \hat{x}^m \hat{p}^n$ の場合に示せば十分である。)

8 反射と透過

8.1 確率の流れ

§2.1 において述べたように、粒子の存在確率密度 ρ と確率の流れ j は次のように与えられる。

$$\rho = |\psi|^2, \quad J = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right). \quad (365)$$

これらは次の連続の式を満足する。

$$\frac{\partial}{\partial x} J(x, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t). \quad (366)$$

この式は、確率密度が時間とともに変化しても全体としては一定に保たれていることを表している。定常状態においては ρ や J は時間とともに変化しないから (366) の右辺は 0 である。従って、定常状態においては J は座標 x に依存しない定数になる。

波動関数の規格化に関する補足

ここまでは、波動関数は一つの粒子の運動を表すものと仮定し、 $\rho = |\psi|^2$ はその一つの粒子の存在確率密度を表すものと解釈してきた。しかし、実験を行う際にはしばしば同じような運動をする複数の粒子を同時に扱う。たとえば、二重スリットの実験において、同じ運動量を持つ電子を次々にスリットに向けて打ち出す場合には、複数の電子が全て同じ波動関数によって表される。このような場合、波動関数の規格化を変更し、 $\rho = |\psi|^2$ がある点における粒子の密度の期待値を表すように取るのが便利である。(全体の粒子の個数が 1 である場合には、ある点での粒子の密度の期待値は粒子の存在確率密度にほかならない。) この規格化法は、無限に広い領域に無限個の粒子が存在し、その密度が 0 でないある有限の値を取るような場合に特に便利である。この規格化法を採用した場合、 J は単位時間にある点を通る粒子の個数の期待値になる。複数の粒子をこのように取り扱うことができるのは、粒子が互いに影響を与えず、しかも全て同じ運動をしている場合だけであることを注意しておく。補足終わり

いくつかの具体的な例で流れ J を求めておこう。

例題 8.1 確定した運動量 p を持つ状態 $\psi = Ae^{ipx/\hbar}$ に対して確率の流れ J を求めよ。

波動関数を (54) に代入すれば直ちに次の結果を得る。

$$J = -\frac{i\hbar}{2m} \left(i\frac{p}{\hbar}|A|^2 + i\frac{p}{\hbar}|A|^2 \right) = \frac{p}{m}|A|^2 = v\rho \quad (367)$$

ただし、最後の等号で確率密度が $\rho = |A|^2$ であり粒子の速度が $v = p/m$ であることを用いた。この場合、流れが密度と速度の積になっているが、これは電流が電荷密度と電荷の速度の積になることと同様である。

例題 8.2 波動関数 ψ が実関数 ($\psi = \psi^*$) であるとき、 J を求めよ。

波動関数が実関数になるという状況は、たとえば束縛状態において実現される。流れの式 (54) において $\psi^* = \psi$ を用いれば、流れが 0 となることがわかる。

$$J = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi\psi' - \psi'\psi) = 0. \quad (368)$$

これは、束縛状態のような往復運動については、粒子がある点を右から左へ横切る確率と左から右に横切る確率が一致し、それらが打ち消しあうためである。

例題 8.3 運動量の異なる二つの単色波の重ね合わせ

$$\psi = Ae^{ipx/\hbar} + Be^{ip'x/\hbar} \quad (369)$$

に対して確率の流れを求めよ。

流れの式 (54) に波動関数を代入して整理すれば、次の結果を得る。

$$J = \frac{p}{m}|A|^2 + \frac{p'}{m}|B|^2 + \frac{p+p'}{m} \operatorname{Re} \left(B^* A e^{i(p-p')x/\hbar} \right) \quad (370)$$

第 1 項は運動量 p の単色波に対する流れ、第 2 項は運動量 p' の単色波に対する流れである。第 3 項は二つの波の干渉によって現れる項である。このように、波動関数が二つの波動関数の和で与えられたとしても、一般には確率の流れは重ねあわされたそれぞれの波動関数に対する流れの和にはならない。(これは確率密度 $\rho = |\psi|^2$ に対しても同様である。)

ただし、特に重要な $p + p' = 0$ の場合、すなわち、大きさが等しく逆向きの運動量を持つ二つの単色波の重ね合わせ

$$\psi = Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar} \quad (371)$$

の場合にはこの干渉項が 0 になり、流れの密度はそれぞれの波の流れの密度の和となる。

$$J = \frac{p}{m}|A|^2 - \frac{p}{m}|B|^2. \quad (372)$$

8.2 反射率と透過率

遠方から飛んできた粒子が何かにぶつかり、その運動を変化させて再び遠方に飛び去るという状況は、力学の問題においてしばしば現れる。1 次元の運動においては、飛んできた粒子が反転してもと来た方向に戻っていく場合と、そのまま反対側へ飛び去っていく場合が考えられる。量子力学においてはこれらの二つの場合がどのような確率で起こるかを計算することが重要な問題となる。

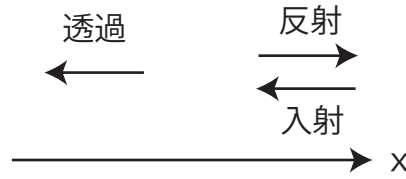


図 31: 入射、反射、透過

以下では、 $x = 0$ まわりにポテンシャルが変化する領域があり、そこへめがけて $x = +\infty$ から粒子を入射させ、その反射、透過について議論する。(図 31) 時間に依存するシュレーディンガー方程式を用いることで、有限の幅を持つ波束が左側から入射して壁によって跳ね返される様子を見ることができる。しかし、波束を用いた解析はやや複雑であるため後回しにし、ここでは確定したエネルギーを持つ、定常状態の波動関数を用いることでポテンシャルによる波の反射を調べよう。

$x = +\infty$ においてポテンシャルが 0 になるようにエネルギーの原点を取る。すると、 x が十分大きいところでの波動関数を次のように与えることができる。

$$\psi = Ae^{-ikx} + Be^{ikx}, \quad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}. \quad (373)$$

第 1 項は左へ進む入射波、第 2 項は右へ進む反射波である。例題 8.3 で見たように、この波動関数についての確率の流れは入射波、反射波に対する流れを単純に足し合わせたものである。

$$J = J_{\text{入射}} + J_{\text{反射}}, \quad J_{\text{入射}} = -v|A|^2, \quad J_{\text{反射}} = v|B|^2, \quad v = \frac{\hbar k}{m}. \quad (374)$$

さらに、 $x \rightarrow -\infty$ においても確率の流れを計算し、それを $J_{\text{透過}}$ としよう。ここでは粒子を右側から入射させる状況を考えているので

$$J_{\text{入射}} < 0, \quad J_{\text{反射}} \geq 0, \quad J_{\text{透過}} \leq 0 \quad (375)$$

である。これらの流れの比として反射率、透過率を以下のように定義する。

$$\text{反射率} = -\frac{J_{\text{反射}}}{J_{\text{入射}}}, \quad \text{透過率} = \frac{J_{\text{透過}}}{J_{\text{入射}}}. \quad (376)$$

(366) の下で述べたように、定常状態においては確率の流れは x 座標に依存しないから、 $x \rightarrow +\infty$ における流れ $J_{\text{入射}} + J_{\text{反射}}$ と $x \rightarrow -\infty$ における流れ $J_{\text{透過}}$ は一致するはずである。このことから、次の関係式が成り立つ。

$$\text{反射率} + \text{透過率} = 1. \quad (377)$$

$x \rightarrow +\infty$ における波動関数が (374) で与えられている場合、反射率は次のように与えられる。

$$\text{反射率} = \frac{|B|^2}{|A|^2}. \quad (378)$$

エネルギーの保存則より入射粒子と反射粒子の速さは同じであるから、流れに含まれる速さの因子は分子と分母で相殺する。透過波に対しては $U(+\infty) = U(-\infty)$ でない限りそうはならないので注意が必要である。

もっとも簡単な例として、図 32 のように $x \geq 0$ において $U(x) = 0$, $x \leq 0$ において $U(x) = +\infty$ であるようなポテンシャルの壁に対して左 (x 軸の正の側) から粒子を入射させることを考えよう。 $x \geq 0$ においては、シュレーディンガー方程

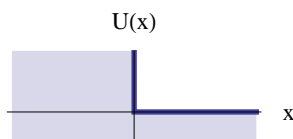


図 32: ポテンシャルの壁

式の解は

$$\psi = Ae^{-ikx} + Be^{ikx}, \quad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \quad (379)$$

である。固定端条件 $\psi(0) = 0$ より入射波と反射波の係数の間の関係

$$A + B = 0 \quad (380)$$

が得られる。これより、

$$\text{反射率} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1 \quad (381)$$

が得られる。つまり、ここで考えているようなポテンシャルの場合には、古典的運動と同様に、量子力学的にも粒子は完全に反射される。

次に、ポテンシャルの壁の高さが有限の場合を考えてみよう。(図 33)

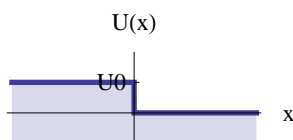


図 33: 階段型ポテンシャル

$$U(x) = U_0 \quad (x \leq 0), \quad U(x) = 0 \quad (x \geq 0). \quad (382)$$

まず、 $0 < E < U_0$ の場合を見てみよう。古典的には粒子は $x \geq 0$ の領域のみを運動することができ、入射した粒子は全て反射される。

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}, \quad b = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)} \quad (383)$$

によって k と b を定義すればシュレーディンガー方程式の解は

$$\begin{aligned} x \geq 0 & \quad \psi = Ae^{-ikx} + Be^{ikx}, \\ x \leq 0 & \quad \psi = Ce^{bx}. \end{aligned} \quad (384)$$

である。($x \leq 0$ における解には $x \rightarrow -\infty$ で発散しないという条件を課した。) ψ が $x = 0$ で連続であることから、

$$A + B = C \quad (385)$$

が得られる。また、 ψ' が $x = 0$ で連続であることから

$$ik(A - B) = -bC \quad (386)$$

が得られる。これら二つの式から C を消去することにより

$$\frac{B}{A} = \frac{k - ib}{k + ib} \quad (387)$$

が得られる。この両辺の絶対値を取り二乗すれば、

$$\text{反射率} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1 \quad (388)$$

が得られる。つまり、粒子は古典的な場合と同様に完全反射する。確率の保存より透過率はこのとき 0 になるはずであるが、これは $x < 0$ における波動関数が (係数の位相を適当に選べば) 実であり、流れが 0 であることからわかる。ただし $x < 0$ において流れが 0 であるとはいっても、粒子の存在確率は 0 にはなっていないことに注意しよう。(図 34) このような、波動関数の「染み出し」は量子力学の特徴的な現象であり、このあとに述べるトンネル効果が起こる原因となる。

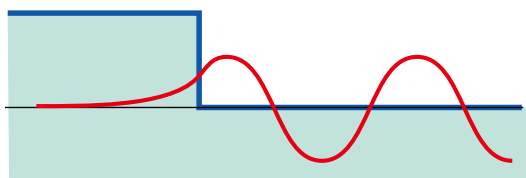


図 34: 有限の高さのポテンシャルの壁による反射を表す波動関数

今度は、粒子がポテンシャルの壁を越えるのに十分なエネルギーを持つ場合、すなわち $E > U_0$ である場合を考えてみよう。(E は正であることを仮定するが、 U_0 は正でも負でもよい。) この場合、古典的には、右側から粒子を入射させると、 $x = 0$ において速度が変化するものの、そのまま $x \rightarrow -\infty$ へと運動を続ける。

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad k' = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)} \quad (389)$$

によって k と k' を定義する。形式的には、先ほどの b を $-ik'$ で置き換えたと思ってもよい。シュレーディンガー方程式の解は

$$\begin{aligned} x \geq 0 & \quad \psi = Ae^{-ikx} + Be^{ikx}, \\ x \leq 0 & \quad \psi = Ce^{-ik'x}. \end{aligned} \quad (390)$$

である。右から粒子を入射させることを考えているので、 $x \leq 0$ においては左向きに進む波だけが存在することを仮定した。

ψ および ψ' が $x = 0$ で連続でなければならないことから次の二つの式を得る。

$$A + B = C, \quad k(A - B) = k'C. \quad (391)$$

これら二つの式から C を消去することにより、次の式が得られる。

$$\frac{B}{A} = \frac{k - k'}{k + k'}. \quad (392)$$

従って、反射率は

$$\text{反射率} = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 \quad (393)$$

となる。これは 0 と 1 の間の実数である。

エネルギー E を一定に保ちつつ U_0 を変化させたときの反射率のグラフを図 35 に与える。 $U_0 \geq E$ では完全反射であり、 $U_0 = 0$ では (何も無いのと同じである

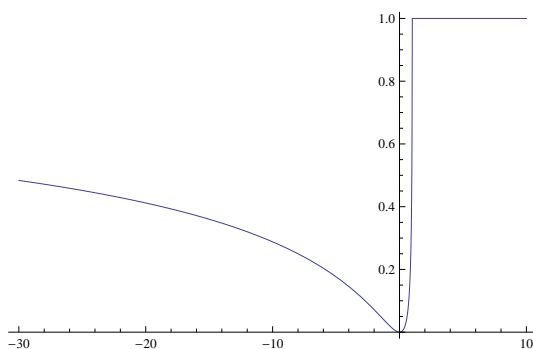


図 35: 反射率。横軸は U_0/E 、縦軸は反射率である。

から) 反射率は 0 となる。面白いのは $U_0 < 0$ であっても粒子はある確率で反射されるということである。 $U_0 \rightarrow -\infty$ の極限では反射率は限りなく 1 に近づく。

透過率は (377) を用いれば直ちに求まる。

$$\text{透過率} = 1 - \text{反射率} = \frac{4kk'}{(k + k')^2} \quad (394)$$

念のため、(376) の定義に従って計算しても同じ結果を得ることを確認しておこう。(385) と (386) より次の式が得られる。

$$\frac{C}{A} = \frac{2k}{k + k'}. \quad (395)$$

これより透過率は

$$\text{透過率} = \frac{k'|C|^2}{k|A|^2} = \frac{4kk'}{(k + k')^2} \quad (396)$$

となり (394) に一致する。入射粒子と透過粒子の速さが異なるので k'/k の因子を忘れてはならない。(つまり、透過率は $|C|^2/|A|^2$ とは異なる。)

8.3 トンネル効果

今度は図 36 のような箱形ポテンシャル

$$U(x) = 0 \quad (x \leq -a), \quad U(x) = U_0 \quad (-a \leq x \leq 0), \quad U(x) = 0 \quad (0 \leq x). \quad (397)$$

に対して粒子を右側から入射させよう。粒子のエネルギーはポテンシャル障壁よ

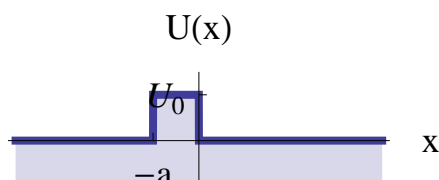


図 36: 箱形のポテンシャル障壁

りも低く $0 < E < U_0$ であるとする。このとき古典的には粒子はポテンシャルの壁を超えることはできないが、量子論的には以前に述べた波動関数の染み出しによって、粒子が壁を通り抜ける可能性が 0 ではない。

いつものように

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}, \quad b = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \quad (398)$$

によって k と b を定義しておく。それぞれの領域においてシュレーディンガー方程式の解は

$$\begin{aligned} (0 < x) \quad \psi &= Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \\ (-a < x < 0) \quad \psi &= Ce^{bx} + De^{-bx}, \\ (x < -a) \quad \psi &= Ee^{ikx}. \end{aligned} \quad (399)$$

となる。ただし、右側から粒子を入射させる状況を想定し、 $x < -a$ の領域では左側に進む粒子のみが存在するとした。

$x = 0$ で ψ および ψ' が連続であることより

$$A + B = C + D, \quad ik(A - B) = b(C - D) \quad (400)$$

が、 $x = -a$ で ψ および ψ' が連続であることより

$$Ce^{ba} + De^{-ba} = Ee^{ika}, \quad b(Ce^{ba} - De^{-ba}) = ikEe^{ika} \quad (401)$$

が得られる。5 つの係数 A, B, C, D, E に対して 4 つの関係式が得られたから、ある一つの係数を用いてそれ以外の係数を表すことができる。ここでは E を用い

て他の係数を与えておく。

$$\begin{aligned}
 A &= e^{ika} \left[\cosh(ba) + i \frac{b^2 - k^2}{2bk} \sinh(ba) \right] E, \\
 B &= -i \frac{b^2 + k^2}{2bk} e^{ika} \sinh(ba) E, \\
 C &= \frac{b + ik}{2b} e^{ika - ba} E, \\
 D &= \frac{b - ik}{2b} e^{ika + ba} E.
 \end{aligned} \tag{402}$$

ただし、 \sinh と \cosh は双曲線関数

$$\sinh z = \frac{e^z - e^{-z}}{2}, \quad \cosh z = \frac{e^z + e^{-z}}{2} \tag{403}$$

である。透過率は

$$\text{透過率} = \frac{|E|^2}{|A|^2} = \left[1 + \left(\frac{b^2 + k^2}{2bk} \right)^2 \sinh^2(ba) \right]^{-1}. \tag{404}$$

となる。これは 0 と 1 の間の実数である。

このように、エネルギーよりも高いポテンシャル障壁があったとしても、その厚さおよび高さが有限であれば、0 でない確率で粒子が通り抜けることができる。この現象はトンネル効果と呼ばれ、量子力学におけるもっとも重要な現象である。

上で計算した透過率の式 (404) は多少複雑である。ポテンシャルの厚さ a と、エネルギー E から測った高さ $E - U_0$ が大きいときには、透過率は非常に小さくなるが、そのような場合には $ba \gg 1$ であるから、近似的に次のように与えられる。

$$\text{透過率} \sim e^{-2ba}. \tag{405}$$

(指数関数の因子が非常に大きいので、それ以外の因子は無視した。) これより、粒子が壁をある程度の確率で通り抜けるためには、壁の厚さが $1/b$ 程度以下でなければならないことを示している。

このことは、不確定性原理を用いて以下のように説明することもできる。粒子がポテンシャル障壁を超えるためには、粒子のエネルギーは一時的に U_0 よりも大きくなる必要がある。ここでは粒子がポテンシャルを越える際にはもともとのエネルギー E から ΔE だけ高いエネルギーを持っており $E + \Delta E > U_0$ であるとする。このときの粒子の速さは

$$v = \sqrt{\frac{2}{m}(E + \Delta E - U_0)} \tag{406}$$

と与えられる。粒子のエネルギーが E から $E + \Delta E$ に変化したとすれば、これはエネルギー保存則を破っているように見える。しかしもしこの変化が短時間 Δt

の間だけ起こり、不確定性原理によって決まるエネルギーの不確定性 $\sim \hbar/\Delta t$ よりも小さければ ΔE は誤差の範囲であるから、エネルギー保存則を破っているとは言えない。このことから、エネルギーの変化 ΔE が許される時間は

$$\Delta t \sim \frac{\hbar}{\Delta E} \quad (407)$$

である。(406) と (407) の積を取れば、粒子が進むことのできる距離が

$$v\Delta t \sim \sqrt{\frac{2}{m}(\Delta E - (U_0 - E))} \frac{\hbar}{\Delta E} \quad (408)$$

これは ΔE に依存する関数であるが、 $\Delta E = 2(U_0 - E)$ の時に最大値をとり、その値は $1/b$ である。つまり、トンネル効果によって超えることのできる壁の厚さは $1/b$ 程度である。これはシュレーディンガー方程式を解くことによって得られた結果に一致している。(ここで述べたような不確定性原理を用いた説明は、あくまでも理解を助けるための補助的なものとみなすべきである。このような解釈に頼ることなくシュレーディンガー方程式を用いた導出ができるようになることが大切である。)

8.4 ガモフの透過因子

§8.3において、箱型ポテンシャルに対してトンネル効果が起こる確率(透過率)をシュレーディンガー方程式を解くことによって求めた。その結果、透過率は近似的に

$$\text{透過率} = e^{-2ba}, \quad b = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} \quad (409)$$

と与えられることを見た。ただし U_0 はポテンシャル障壁の高さ、 E は粒子のエネルギーであり、 a はポテンシャル障壁の厚さである。トンネル効果はさまざまな状況において現れ、一般にはポテンシャルの形は箱型ではない。そのような場合にも適用できる近似公式をWKB近似を用いて得ることができる。

WKB近似による波動関数の式(332)は、ある点 x における波動関数を、ある基準点 x_0 からその点 x に至る古典的運動からの寄与の和として波動関数を与えるものであり、それぞれの古典的運動からの寄与は次のように与えられた。

$$\psi_C = \exp \frac{i}{\hbar} \int_C p dx, \quad p(x) = \pm \sqrt{2m(E - U(x))}. \quad (410)$$

積分は古典的運動の経路 C に沿って行う。ここではおおまかな見積もりを行うだけなので、古典回帰点における位相のずれを無視した。この近似式の導出を振り返ってみると、 $p(x) = 0$ によって与えられる古典回帰点を除けば、 $p(x)$ が純虚数になる領域、すなわち $E < U(x)$ である領域においても近似が良いことがわかる。そこで、壁を通り抜けるような粒子の経路に対してこの近似式を適用し、透過率

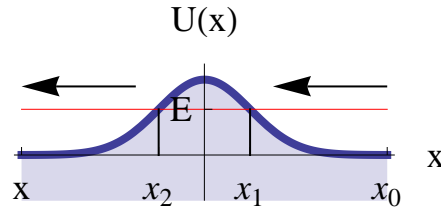


図 37: ポテンシャル障壁

を計算することを考えよう。ここでは図 37 のようなポテンシャル障壁に粒子が右側から入射し、左側に通り返ける過程を考えることにする。ポテンシャル障壁の右側に基準点 x_0 をとる。障壁の左側の点 x における波動関数は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \exp \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^x p_- dx \\ &= \left(\exp \frac{i}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} p_- dx \right) \left(\exp \frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p_- dx \right) \left(\exp \frac{i}{\hbar} \int_{x_2}^x p_- dx \right) \quad (411) \end{aligned}$$

ただし関数 $p_-(x)$ は、それが実数になる領域では運動が右から左であることに対応して負の平方根として定義されている。

$$p_-(x) = -\sqrt{2m(E - U(x))}. \quad (412)$$

二つの古典回帰点 x_1 と x_2 によって分けられる 3 つの領域に対応して積分を 3 つに分けた。透過率を計算するには波動関数の絶対値の大きさが問題であるが、3 つの因子のうち、最初と最後の因子、すなわち古典的運動が許される領域の寄与は、波動関数の位相にしか寄与しない。絶対値に影響を与えるのは、二番目の因子だけである。この因子中の $p_-(x)$ は純虚数になり、符号の取り方に不定性がある。この符号を決めるために、透過波の振幅が入射波の振幅よりも小さいという条件を用いよう。そうすると、(411) の二番目の因子は

$$\exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^{x_1} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right) \quad (413)$$

となる。(符号が見やすいように積分の両端を入れ替えた。) これが入射波と透過波の波動関数の絶対値の比を与えるから、透過率は次のようになる。

$$\text{透過率} = \exp \left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_2}^{x_1} \sqrt{2m(U(x) - E)} dx \right) \quad (414)$$

これはガモフの透過因子と呼ばれる。(ポテンシャル障壁の左右で粒子の速さが違う場合に透過率を計算する場合には粒子の存在確率の比と流れの比は異なるが、ここでは(414)の因子が指数関数的に小さいような場合を近似的に考えているので、そのようなオーダー 1 の因子は無視した。)ポテンシャル障壁の高さが一定値 $U(x) = U_0$ を取る場合には、透過因子(414)は(409)を再現する。

8.5 散乱行列

トンネル効果に関係する現象を調べるためには、ポテンシャル障壁による散乱、透過の情報をまとめた散乱行列を定義するのが便利である。散乱行列は透過率、反射率を含む、ポテンシャル障壁に対する完全な情報を与える。

$|x|$ が大きいところでは 0 になるようなポテンシャルによる散乱を考える。この

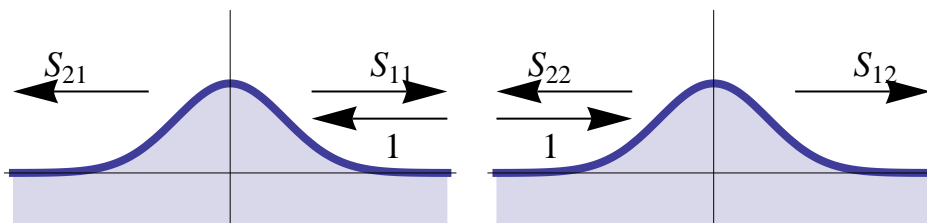


図 38: 1 次元の散乱

ポテンシャルに対して粒子を入射させよう。右からの入射と左からの入射の二つの場合が考えられる。 $x = +\infty$ から粒子を入射させたとき (図 38 左) の波動関数を次のように置こう。

$$\begin{aligned}\psi_1 &= e^{-ikx} + S_{11}e^{ikx} \quad (x < 0), \\ \psi_2 &= S_{21}e^{-ikx} \quad (x > 0)\end{aligned}\quad (415)$$

ただし、 $x > 0$ の側を領域 1、 $x < 0$ の側を領域 2 と名付け、それぞれの領域での波動関数を ψ_1 および ψ_2 と表した。入射波の係数が 1 になるような規格化を採用し、領域 1 から領域 2 への透過を表す項の係数を S_{21} 、領域 1 から領域 1 への反射を表す項の係数を S_{11} と表わした。以下では S_{fi} は領域 i から入射した粒子がポテンシャルによって散乱されて領域 f に出て行く過程に対応した係数を表すことにする、この場合の透過率は $|S_{21}|^2$ 、反射率は $|S_{11}|^2$ である。

同様に、領域 2、すなわち $x = -\infty$ から粒子を入射させたとき (図 38 右) の波動関数は

$$\begin{aligned}\psi_1 &= S_{12}e^{ikx} \quad (x > 0), \\ \psi_2 &= e^{ikx} + S_{22}e^{-ikx} \quad (x < 0)\end{aligned}\quad (416)$$

のように置くことができる。今度は透過率が $|S_{21}|^2$ 、反射率が $|S_{22}|^2$ である、それぞれの過程の確率の保存より

$$|S_{11}|^2 + |S_{21}|^2 = 1, \quad |S_{12}|^2 + |S_{22}|^2 = 1 \quad (417)$$

が成り立つはずである。

実は、シュレーディンガー方程式の線形性を用いると、係数 S_{fi} に対するより強い条件を得ることができる。(415) と (416) はどちらも同じシュレーディンガー方程式の解であるから、それらの任意の線形結合もやはり解になっているはずである。二つの解を係数 a と b で重ね合わせたものは

$$\begin{aligned}\psi_1 &= ae^{-ikx} + ce^{ikx} \quad (x > 0), \\ \psi_2 &= be^{ikx} + de^{-ikx} \quad (x < 0).\end{aligned}\tag{418}$$

ただし、 c と d は次のように与えられる。

$$c = aS_{11} + bS_{12}, \quad d = aS_{21} + bS_{22}.\tag{419}$$

これは図 39 のような状況を表している。入射波の係数が a と b 、散乱波の係数が

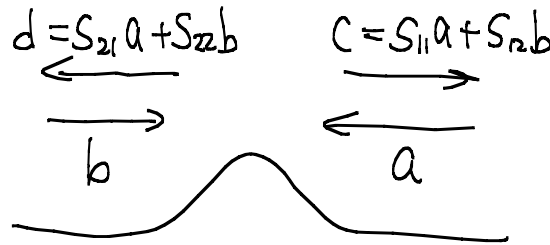


図 39: 一般の散乱

c と d であるから、確率の保存より次の関係が成り立っていないなければならない。

$$|a|^2 + |b|^2 = |c|^2 + |d|^2.\tag{420}$$

これが任意の a と b に対して成り立っていないといけないという条件より、係数 S_{fi} に対するいくつかの条件を得ることができる。

散乱行列 (scattering matrix) を次のように定義しておくのが便利である。

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}\tag{421}$$

係数 a と b も次のように行列表示しておく。

$$u = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},\tag{422}$$

これらを用いて (420) を書き換えると、次のようになる。

$$u^\dagger u = u^\dagger S^\dagger S u.\tag{423}$$

これが任意の u で成り立たなければならないので、行列 S が満足すべき条件は

$$S^\dagger S = \mathbf{1}_2\tag{424}$$

である。すなわち行列 S はユニタリーでなければならない。この条件を成分を用いて書くと、

$$S^\dagger S = \begin{pmatrix} |S_{11}|^2 + |S_{21}|^2 & S_{11}^* S_{12} + S_{21}^* S_{22} \\ S_{12}^* S_{11} + S_{22}^* S_{21} & |S_{21}|^2 + |S_{22}|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (425)$$

となる。1-1 成分と 2-2 成分は確率保存の式 (417) を与えるが、1-2 成分と 2-1 成分は新たな条件

$$S_{11}^* S_{12} + S_{21}^* S_{22} = 0 \quad (426)$$

を与えている。

さらに、散乱行列に対する別の条件が時間に依存しないシュレーディンガー方程式が実であることから得られる。シュレーディンガー方程式が実であるというのは、ある波動関数 ψ が解であればその複素共役 ψ^* も解であることを意味する。波動関数 (418) は係数の間に次の関係が成り立てばシュレーディンガー方程式の解の漸近形となっている。

$$\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (427)$$

複素共役演算を行ってみよう。すると、次の波動関数が得られる。

$$\begin{aligned} \psi_1 &= a^* e^{ikx} + c^* e^{-ikx} \quad (x > 0), \\ \psi_2 &= b^* e^{-ikx} + d^* e^{ikx} \quad (x < 0). \end{aligned} \quad (428)$$

これは、係数 (c^*, d^*) を持つ入射波が、係数 (a^*, b^*) を持つ散乱波になる様子を表している。これもやはりシュレーディンガー方程式の解であるから、次の式が成り立つはずである。

$$\begin{pmatrix} a^* \\ b^* \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} c^* \\ d^* \end{pmatrix} \quad (429)$$

(427) の複素共役をとり、(429) に代入すると、

$$\begin{pmatrix} a^* \\ b^* \end{pmatrix} = S S^* \begin{pmatrix} a^* \\ b^* \end{pmatrix} \quad (430)$$

となる。従って $S S^* = \mathbf{1}_2$ でなければならない。さらに S はユニタリーであり $S S^\dagger = \mathbf{1}_2$ であることも考慮すると、 S に対する次の条件が得られる。

$$S^T = S. \quad (431)$$

つまり、 S は対称行列であり、 $S_{12} = S_{21}$ が成り立つ。これは S 行列に対する相反定理と呼ばれるものである。相反定理より、左右から粒子を入射させた際の透過確率は等しい。

$$|S_{12}|^2 = |S_{21}|^2 \quad (432)$$

これと確率の保存（あるいはユニタリー条件）を用いれば、反射確率に対しても、同様の式が成り立つ。

$$|S_{11}|^2 = |S_{22}|^2 \quad (433)$$

従って、どちらかの向きの粒子だけを通過させるような一方通行のポテンシャル障壁は存在しない。

例題 8.4 次の δ 関数型ポテンシャルによる散乱行列を具体的に計算し、ユニタリー性、および相反定理の成立を確認せよ。

$$U(x) = Z\delta(x) \quad (434)$$

$E > 0$ と仮定し、 k を次のように定義する。

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}. \quad (435)$$

領域 1 と 2 での波動関数は次のように置くことができる。

$$\begin{aligned} \psi_1 &= ae^{-ikx} + ce^{ikx}, \\ \psi_2 &= be^{ikx} + de^{-ikx}. \end{aligned} \quad (436)$$

$x = 0$ における接続条件は、 $\psi_1(0) = \psi_2(0)$ であり、係数の間の次の関係式が得られる。

$$a + c = b + d. \quad (437)$$

波動関数の微分については、§5.3 で行ったように、シュレーディンガー方程式を原点を含む微小区間で積分することで次の関係式が得られる。

$$\psi_1'(0) - \psi_2'(0) = 2q\psi(0), \quad q = \frac{mZ}{\hbar^2}. \quad (438)$$

ここに (436) を代入することで

$$-ik(a - c) - ik(b - d) = 2q(a + c) \quad (439)$$

が得られる。(437) と (439) を c と d について解くと、

$$\begin{aligned} c &= \frac{q}{ik - q}a + \frac{ik}{ik - q}b, \\ d &= \frac{ik}{ik - q}a + \frac{q}{ik - q}b. \end{aligned} \quad (440)$$

散乱行列はこの関係式の右辺に現れる係数行列に他ならない。すなわち

$$S = \begin{pmatrix} \frac{q}{ik - q} & \frac{ik}{ik - q} \\ \frac{ik}{ik - q} & \frac{q}{ik - q} \end{pmatrix} \quad (441)$$

が得られる。これは対称行列であり、相反定理が確かに満足されている。この行列がユニタリーであることも、すぐに確かめることができる。

8.6 準安定状態

図 40 のようなポテンシャルを考えよう。粒子がはじめ $x < 0$ の部分にあり、エ

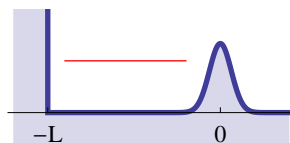


図 40: ポテンシャルの壁で閉じ込められた粒子

ネルギーが $x = 0$ 付近にあるポテンシャルの山の高さよりも小さいとすると、古典的には粒子は $L \leq x \leq 0$ の部分に閉じ込められる。しかし量子力学的にはトンネル効果のために粒子は時間が経つと $x > 0$ の部分に逃げていってしまう。このようなモデルは原子核のアルファ崩壊を説明する際にしばしば用いられる。その場合、 $-L \leq x \leq 0$ の部分が原子核の内部に、 $x > 0$ の部分が原子核の外部に相当し、 $x < 0$ の部分からトンネル効果によって粒子（アルファ粒子）が $x > 0$ の部分に逃げていくことがアルファ崩壊と解釈される。

このように、古典的には安定であるが、量子力学的にはトンネル効果によって不安定になっているような状況を準安定状態と呼ぶ。準安定状態において、粒子がポテンシャル内に存在している確率は時間とともに減少してゆき、次のように与えられる。

$$P = \exp\left(-\frac{t-t_0}{\tau}\right). \quad (442)$$

τ はポテンシャル中に粒子がどのくらいの時間留まっていられるかを表す量で準安定状態の寿命と呼ばれる。

準安定状態は厳密には定常状態ではなく、時間とともに変化するから、それを扱うには時間に依存するシュレーディンガー方程式を用いる必要があるように思われるが、実は時間に依存しないシュレーディンガー方程式を用いることで寿命などを計算することができる。以下でその方法を紹介しよう。

ここでは問題を解きやすくするために、 x が正の部分で x が大きいところではポテンシャルが 0 になっていると仮定しよう。さらに、 $L \leq x \leq 0$ の部分にもポテンシャルが 0 になっている領域があると仮定する。エネルギーを $E = (\hbar^2/2m)k^2$ とおくと、それらの部分での波動関数は次のように与えられる。

$$\psi_{\text{内}} = be^{ikx} + de^{-ikx}, \quad \psi_{\text{外}} = ce^{ikx} + ae^{-ikx}. \quad (443)$$

$x = 0$ 付近にあるポテンシャルの山について散乱行列がすでにわかっていると仮定しよう。すると、(443) の係数の関係が次のように表される。

$$\begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (444)$$

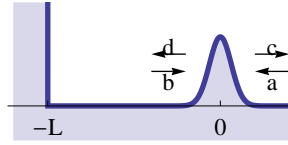


図 41: ポテンシャルの壁で閉じ込められた粒子

$x = -L$ における固定端条件 $\psi_{\text{内}}(-L) = 0$ より、次の関係が得られる。

$$d = -e^{-2ikL}b. \quad (445)$$

さらに、粒子が壁を越えて外へ逃げていくことはあっても、 $x > 0$ の側から粒子が入射してくることは無いと仮定すると、

$$a = 0. \quad (446)$$

である。(445) と (446) を (444) に代入することで

$$\begin{pmatrix} c \\ -e^{-2ikL}b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ b \end{pmatrix} \quad (447)$$

が得られる。二成分ベクトルの下成分から次の関係式が得られる。

$$-e^{-2ikL} = S_{22} \quad (448)$$

この式の右辺の絶対値の二乗は $x = 0$ 付近のポテンシャルの反射率であるから、ポテンシャルの高さが有限である限り 1 より小さい。従って左辺の k は実数ではありえない。このことが何を意味しているのかを考えてみよう。ここでは系を定常状態のように扱い、波動関数 $\psi(x)$ は x だけの関数であるとしているが、波動関数の時間依存性まできちんと書けば

$$\psi(x, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\psi(x) = e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}\psi(x) \quad (449)$$

となる。真の定常状態であれば、右辺の指数関数は位相因子であり粒子の存在確率密度には影響を与えないが、もし k が複素になるとこの複素数から次の時間依存性が現れる。

$$\rho = |\psi(x, t)|^2 \propto e^{\frac{\hbar \text{Im}(k^2)}{2m}t} \quad (450)$$

すなわち、 k が複素数になるのは、系が安定な状態ではなく、粒子の存在確率が時間とともに減少していくことの現れであると解釈することができる。(450) を (442) と比較すれば、寿命を次のように読み取ることができる。

$$\frac{1}{\tau} = -\frac{\hbar \text{Im}(k^2)}{2m}. \quad (451)$$

この関係式の意味をよりよく理解するために、ポテンシャルの山が高く、粒子が通過する確率がほんの少ししかない場合を考えよう。この場合、(448) の両辺の絶対値の二乗を取ると、

$$e^{2\text{Im}kL} = |S_{22}|^2 = 1 - |S_{21}|^2 \sim \exp(-|S_{21}|^2) \quad (452)$$

であるから

$$\text{Im}k = -\frac{|S_{21}|^2}{2L} \quad (453)$$

が得られる。右辺の $|S_{12}|^2$ はポテンシャルの山の透過率であり、ポテンシャルが高い場合には非常に小さい。従ってその場合には $\text{Im}k$ も小さい。 k の実部は、通常の波数とみなすことができるので、粒子の速さ v と次のように関係する。

$$\text{Re}k = \frac{mv}{\hbar} \quad (454)$$

(453) と (454) を (451) に代入すると次の式が得られる。

$$\frac{1}{\tau} = -\frac{\hbar}{m} \text{Re}k \text{Im}k = \frac{v}{2L} |S_{21}|^2 \quad (455)$$

この式の右辺の $v/2L$ は $L \leq x \leq 0$ に閉じ込められた粒子が単位時間あたりポテンシャルの山にぶつかる回数であり、 $|S_{21}|^2$ は一回の衝突あたりポテンシャルの山をトンネル効果によって通り抜ける確率であるから、この式は粒子が外に逃げ出すまでに掛かる時間の平均値を与えている。

9 状態ベクトル

9.1 ブラケット記法

ここまでは、状態を表すのに座標 x の関数である波動関数 $\psi(x)$ を用いてきた。この取り扱いは x と p に対して不平等である。しかし正準形式の解析力学においては x と p は対等であり、さまざまな方程式の中に対称な形で現れる。また、正準変換を用いることで、これらを互いに入れ替えることもできる。実は量子力学においても、状態を表すために必ずしも x の関数を用いる必要はなく、 p の関数として波動関数を与えることもできるし、それ以外の方法もある。 x の関数を用いるのは、状態を表すさまざまな表示のうちの一つに過ぎない。 x の関数を用いる以外の表示と、異なる表示の間について見ていくことにする。

正規直交系をなす状態の完全系を $\{\psi_n(x)\}$ とする。(ここでは離散スペクトルを仮定し、完全系をなす状態を $n = 1, 2, 3, \dots$ によってラベルすることができる。連続スペクトルの場合への一般化は簡単である。それについては後で触れる。) 次の正規直交条件が成り立つとする。

$$\int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{m,n}. \quad (456)$$

完全性より、任意の波動関数は

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x), \quad c_n \in \mathbb{C} \quad (457)$$

と与えられる。(波動関数はこれまでどおり x の関数として与えられているものとしておく。) 展開係数 c_n は

$$c_n = \int \psi_n^*(x) \psi(x) dx \quad (458)$$

によって与えられる。係数 c_n を与えれば、波動関数 $\psi(x)$ が決まるから、波動関数 $\psi(x)$ の代わりに縦ベクトル

$$c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (459)$$

を用いて状態を表わすことができる。通常定常状態 $\psi_n(x)$ は無限個存在するので、 c は無限次元のベクトルである。つまり、波動関数は無限次元空間におけるベクトルであるとみなすことができる。 c に対応する波動関数を $\psi_c(x)$ と表わそう。

ここで、「ベクトル」と「ベクトルの成分」の違いについて注意しておこう。「ベクトル」はある空間の中の矢印としてイメージすることができる。この矢印自体は、空間に座標が導入されていなくても存在することができるものである。それに対して、「ベクトルの成分」は、空間に座標(あるいは基底ベクトル)を導入して初めて定義されるものであり、同じベクトルであっても座標(基底ベクトル)の選び方が異なれば成分の値は異なる。

このような違いを意識した上で、状態を基底の取り方によらないベクトルだとみなしたとき、それを状態ベクトルと呼ぶ。そして基底となる状態の組 $\psi_n(x)$ を決め、その展開係数 c_n によって状態を表すとき、それを表示という。基底となる状態の組としてある物理量 A の演算子 \hat{A} の固有状態を用いるとき、その表示のことを A -表示という。特定の表示によらない概念としての状態ベクトルを表すときによく用いられるのがブラケット記法と呼ばれる表記法であり、ベクトル c およびそのエルミート共役 c^\dagger を次のように表記する。

$$c \rightarrow |\psi_c\rangle \text{ or } |c\rangle, \quad c^\dagger \rightarrow \langle \psi_c| \text{ or } \langle c|. \quad (460)$$

ここでは $|\dots\rangle$ の中に ψ_c や c を書いたが、その他にもそのときどきの都合によりいろいろな表し方をする。

$|\psi_c\rangle$ のことをケットベクトル、 $\langle \psi_c|$ のことをブラベクトルとよぶ。二つの状態の波動関数の内積はこれらを組み合わせたブラケット

$$\langle \psi_c | \psi_d \rangle = \int \psi_c(x)^* \psi_d(x) dx \quad (461)$$

によって表わされる。これを正規直交基底を用いて定義したベクトルの成分 c_m と b_m を用いて表すと

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_c | \psi_d \rangle &= \sum_{m,n} \int (c_m \psi_m(x))^* (d_n \psi_n(x)) dx \\
 &= \sum_{m,n} c_m^* d_n \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx \\
 &= \sum_{m,n} c_m^* d_n \delta_{m,n} \\
 &= \sum_n c_n^* d_n \\
 &= c^\dagger d. \tag{462}
 \end{aligned}$$

つまり、それぞれの状態の成分を用いて作ったベクトルのエルミート内積に一致する。

展開に用いた波動関数 $\psi_n(x)$ は基底ベクトルの役割を果たす。この状態ベクトルを $|n\rangle$ と表すことにしよう。正規直交条件 (456) をブラケット記法を用いて表すと、

$$\langle m | n \rangle = \delta_{m,n} \tag{463}$$

となる。また、ある状態ベクトル $|c\rangle$ の成分は

$$c_n = \langle n | c \rangle \tag{464}$$

と表される。この展開係数を用いれば、もとの状態ベクトル $|c\rangle$ は

$$|c\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \tag{465}$$

と表される。(464) と (465) を組み合わせれば

$$|c\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | c \rangle \tag{466}$$

が得られる。これが任意の $|c\rangle$ に対して成り立つことから、

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1} \tag{467}$$

が結論される。ただし $\hat{1}$ は恒等演算子である。関係式 (467) は以下で何度も用いられる重要な式である。

9.2 演算子の行列表示

演算子 \hat{X} が状態 $|c\rangle$ を状態 $|d\rangle$ に変化させたとしよう。つまり

$$|d\rangle = \hat{X}|c\rangle \quad (468)$$

であるとする。この関係式を成分 c_n と d_n の関係式として表そう。左から $\langle n|$ をかけ、(467) を用いて変形すると、

$$\langle n|d\rangle = \langle n|\hat{X}|c\rangle = \langle n|\hat{X}\hat{1}|c\rangle = \sum_m \langle n|\hat{X}|m\rangle \langle m|c\rangle \quad (469)$$

が得られる。 $c_n = \langle n|c\rangle$ 、 $d_n = \langle n|d\rangle$ であるから、

$$d_n = \sum_m X_{nm} c_m \quad (470)$$

が得られる。ただし

$$X_{nm} = \langle n|\hat{X}|m\rangle \quad (471)$$

を定義した。 X_{nm} を成分とする行列を

$$X = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & \cdots \\ X_{21} & \cdots & \\ \vdots & & \end{pmatrix} \quad (472)$$

とすれば、(470) は行列の式として

$$d = Xc \quad (473)$$

と表すことができる。これは形式的に(468)と同じ形をしている。つまり、状態ベクトルをその成分の縦ベクトルとみなし、演算子を(471)を成分とする行列とみなせば、状態に対する演算子の作用をそのままベクトルに対する行列の積として解釈することができる。演算子 \hat{X} を行列 X として表すことを、演算子の行列表示と呼ぶ。基底 $|n\rangle$ としてある演算子 \hat{A} の固有状態をとった場合には、行列 X は \hat{X} の A -表示における行列表示、あるいは単に \hat{X} の A -表示という。

演算子 \hat{X} がエルミート演算子であれば、対応する行列 X はエルミート行列である。また、演算子 \hat{X} がユニタリー演算子であれば、行列 X はユニタリー行列である。

連続スペクトルによる展開

ここまでは、基底として用いられる状態 $|n\rangle$ が離散的であり、整数 $1, 2, \dots$ でラベルされる場合を考えてきたが、連続固有値 a を持つ演算子 \hat{A} の固有状態を基底として用いることもできる。固有値 a を持つ状態を、その固有値を用いて $|a\rangle$ と表すことにしよう。

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \quad (474)$$

ここでは縮退はなく、次の正規直交条件によって規格化されているものとする。

$$\langle a|a'\rangle = \delta(a - a'). \quad (475)$$

これは離散スペクトルの場合の (463) に対応する。このとき次の関係式が成り立つ。

$$\int da|a\rangle\langle a| = \hat{1}. \quad (476)$$

これは離散スペクトルの場合の (467) に対応する。ある状態 $|\psi\rangle$ の $|a\rangle$ による展開は、(476) を $|\psi\rangle$ に作用させることで得られる。

$$|\psi\rangle = \int da|a\rangle\langle a|\psi\rangle. \quad (477)$$

$|a\rangle$ を基底として定義された状態ベクトル $|\psi\rangle$ の成分、すなわちこの展開式の展開係数を $\psi(a)$ と表す。

$$\psi(a) \equiv \langle a|\psi\rangle. \quad (478)$$

実は、これまで状態を表すために用いてきた、座標 x の関数としての波動関数 x は、ここで定義した状態ベクトルの成分 $\psi(a)$ の特殊な場合になっている。つまり、基底 $|a\rangle$ を定義するための演算子 \hat{A} として位置演算子 \hat{x} を用い、その固有状態である $|x\rangle$ を用いて定義された成分 $\psi(x) \equiv \langle x|\psi\rangle$ がこれまで用いてきた波動関数である。これまで状態 $|\psi\rangle$ とその波動関数 $\psi(x)$ はあまり区別せずに用いてきたが、正確には波動関数は \hat{x} 表示（座標表示）における状態ベクトルの成分であり、無数に存在する表示の一つに過ぎない。

基底 $|a\rangle$ を用いて演算子 \hat{X} の行列表示を行えば、その成分は次のように与えられる。

$$X_{aa'} = \langle a|\hat{X}|a'\rangle. \quad (479)$$

状態 $|\psi\rangle$ に演算子 \hat{X} を作用させて得られる状態を $|\phi\rangle$ とするとき、つまり $|\phi\rangle = \hat{X}|\psi\rangle$ である場合、成分の間の関係式は次のように表される。

$$\phi(a) = \int da' X_{aa'}\psi(a'). \quad (480)$$

座標表示をした場合、 $X_{xx'}$ は §3.3 において積分核と呼んでいたものに他ならない。

9.3 ユニタリー変換

二つのエルミート演算子 \hat{A} と \hat{B} の固有状態を用いて定義される二つの表示 (A -表示と B -表示) の間の関係について考えよう。 \hat{A} の固有状態を $|a\rangle$ 、 \hat{B} の固有状態を $|b\rangle$ とする。 a と b はそれぞれの演算子に対する固有値を表す。ここではどちらも離散的なスペクトルを持つと仮定し、状態についての和を \sum_a で表すが、連続的な場合への拡張はこれを $\int da$ で置き換えればよい。

ある状態 $|\psi\rangle$ の A 表示および B 表示での成分は次のように与えられる。

$$\psi^{(A)} = \begin{pmatrix} \langle a_1|\psi\rangle \\ \langle a_2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \psi^{(B)} = \begin{pmatrix} \langle b_1|\psi\rangle \\ \langle b_2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (481)$$

a_n および b_n はそれぞれの演算子の固有値を適当な順序で並べたときの n 番目の固有値である。これら二つの表示の関係は次のように与えることができる。

$$\langle b|\psi\rangle = \sum_a \langle b|a\rangle \langle a|\psi\rangle \quad (482)$$

\sum_a は全ての固有値 a_1, a_2, \dots に対しての和を表わす。ここで、

$$U_{ba} = \langle b|a\rangle \quad (483)$$

を成分とする行列 U を定義しよう。

$$U = \begin{pmatrix} U_{b_1 a_1} & U_{b_1 a_2} & \cdots \\ U_{b_2 a_1} & \cdots & \\ \vdots & & \end{pmatrix}. \quad (484)$$

この行列を用いれば、関係式 (482) は (481) に与えた二つの縦ベクトルの間の関係式として次のように表すことができる。

$$\psi^{(B)} = U\psi^{(A)} \quad (485)$$

また、逆変換は、

$$V_{ab} = \langle a|b\rangle \quad (486)$$

を成分とする行列 V を用いて

$$\psi^{(A)} = V\psi^{(B)} \quad (487)$$

と表すことができる。 U と V は逆変換を与える行列であるから、互いに逆行列の関係にある。すなわち

$$UV = VU = 1 \quad (488)$$

が成り立つ。また、二つの行列の成分 (483) と (486) を比較すれば、 U と V が互いのエルミート共役であることがわかる。

$$U^\dagger = V. \quad (489)$$

(488) と (489) より、行列 U 、 V はどちらもユニタリー行列であることがわかる。すなわち

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1 \quad (490)$$

が成り立つ。(V についても同様である。) ユニタリー行列による線形変換のことをユニタリー変換という。基底の取替えによる状態ベクトルの成分の変化はユニタリー変換によって与えられる。

状態ベクトルの成分と同様に、演算子の行列表示も用いる基底に依存する。 A 表示と B 表示における演算子 \hat{X} の行列要素の関係は

$$X_{bb'} = \langle b|\hat{X}|b'\rangle = \sum_{a,a'} \langle b|a\rangle \langle a|\hat{X}|a'\rangle \langle a'|b'\rangle = \sum_{a,a'} U_{ba} X_{aa'} V_{a'b'} \quad (491)$$

と与えられる。従って、 \hat{X} の A 表示、すなわち $X_{aa'}$ を成分とする行列を $X^{(A)}$ とし、従って、 \hat{X} の B 表示、すなわち $X_{bb'}$ を成分とする行列を $X^{(B)}$ とすれば、それらの関係は次のように与えられる。

$$X^{(B)} = U X^{(A)} U^{-1} \quad (492)$$

A 表示において $\psi^{(A)}$ に行列 $X^{(A)}$ を作用させてからユニタリー変換によって B 表示に移ったもの $U X^{(A)} \psi^{(A)}$ と、 $\psi^{(A)}$ をユニタリー変換によって B 表示に移してから $X^{(B)}$ を作用させたもの $X^{(B)} U \psi^{(A)}$ は同じになる。つまり、演算子の作用はどの表示で計算するかに依存しない。

9.4 座標表示と運動量表示

表示を指定するエルミート演算子として座標演算子 \hat{x} を用い、展開の基底としてその固有状態 $|x\rangle$ を用いよう。 x の関数である波動関数を用いれば、固有状態 $|x_0\rangle$ の波動関数はディラックのデルタ関数を用いて次のように与えられる。

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0) \quad (493)$$

ここで、 x_0 は状態の固有値を表し、座標変数 x とは区別するために添え字 0 をつけたが、以下では固有値を表すためにも文字 x を用いることにする。上記の波動関数は、次の正規直交条件を満足する。

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x'). \quad (494)$$

以前も述べたように、座標 x の関数としての波動関数は、 \hat{x} -表示における状態ベクトルの成分であり、次のように定義される。

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle. \quad (495)$$

波動関数 $\psi(x)$ は、状態 $|\psi\rangle$ を \hat{x} の固有状態 $|x\rangle$ で展開したときの展開係数である。

これまで運動量演算子 \hat{p} は

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (496)$$

のように微分演算子として与えてきたが、これは波動関数が x の関数としてかけられることを前提としている。つまり、運動量演算子の座標表示における表現が (496) なのである。

座標表示以外の例として、基底として \hat{p} の固有状態を用いる運動量表示について調べてみよう。運動量の固有値 p を持つ固有状態を $|p\rangle$ と表す。その座標表示での波動関数 $\psi_p(x)$ は (168) に与えられている。ここにもう一度与えておこう。

$$\psi_p(x) = \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \quad (497)$$

これは次の正規直交条件を満足する。

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p'). \quad (498)$$

p 表示の波動関数 $\psi(p)$ は x 表示の波動関数 $\psi(x)$ と次の関係にある。

$$\psi(p) = \langle p|\psi\rangle = \int dx \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} \psi(x). \quad (499)$$

逆変換は

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \int dp \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \psi(p). \quad (500)$$

これらの変換はフーリエ変換に他ならない。すなわち、フーリエ変換は、二つの表示をつなぐユニタリー変換の一種である。

運動量表示における位置演算子 \hat{x} と運動量演算子 \hat{p} の具体的表示を求めよう。そのためには、波動関数 $\psi(p)$ で表される状態 $|p\rangle$ にこれらの演算子を作用させて得られる状態が、どのような成分を持つかを調べればよい。まず、運動量演算子 \hat{p} について見てみよう。 $\hat{p}|p\rangle$ の成分は次のようになる。

$$\langle p|\hat{p}|\psi\rangle = p\langle p|\psi\rangle = p\psi(p). \quad (501)$$

従って、運動量表示においては \hat{p} は単に p を掛ける演算によって表される。 $|p\rangle$ に位置演算子を作用させた状態 $\hat{x}|p\rangle$ の成分は

$$\langle p|\hat{x}|\psi\rangle = \int dx \langle p|x\rangle \langle x|\hat{x}|\psi\rangle. \quad (502)$$

と書き換えた上で $\langle x|\hat{x} = x\langle x|$ を用いると

$$\langle p|\hat{x}|\psi\rangle = \int dx x \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle \quad (503)$$

さらに、

$$\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} \quad (504)$$

であり、これを p で微分すると、 $-ix/\hbar$ という因子が現れることを用いれば

$$\langle p|\hat{x}|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \int dx \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \langle p|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \psi(p). \quad (505)$$

が得られる。従って、演算子 \hat{x} は p 表示においては次のような微分演算子として与えられる。

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}. \quad (506)$$

まとめておこう。

$$\hat{x}^{(x)} = x, \quad \hat{p}^{(x)} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{x}^{(p)} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}, \quad \hat{p}^{(p)} = p. \quad (507)$$

(x) と (p) はそれぞれ座標表示と運動量表示を表わす。このように、 p 表示においては、運動量と座標の役割が入れ替わる。交換関係はどちらで計算しても同じであることは、すぐに確認できる。

$$[\hat{x}^{(x)}, \hat{p}^{(x)}] = [x, -i\hbar \frac{d}{dx}] = i\hbar \quad (508)$$

$$[\hat{x}^{(p)}, \hat{p}^{(p)}] = [i\hbar \frac{d}{dp}, p] = i\hbar \quad (509)$$

10 時間発展

10.1 トンネル効果による準位の分裂

図 42 のような、左右対称なポテンシャルを考えよう。 $x = \pm L$ のところに無限

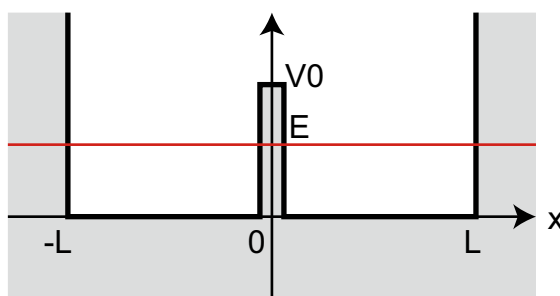


図 42: 二重井戸

に高い壁があり、粒子はその外へ出ることはできない。壁に挟まれた領域は中央にある高さ V_0 のポテンシャル障壁によって二つの部分に分けられている。ポテン

ポテンシャル障壁の幅 d は L に比べて十分小さく、以下の計算では無視する。このポテンシャル中にあるエネルギー $E < V_0$ を持つ粒子を考える。古典的にはこの粒子はポテンシャル障壁を超えることはできないから、左側または右側の領域にあり続ける。しかし量子力学ではトンネル効果が存在するので、 V_0 が無限に大きくなると限りなく粒子は左側の領域と右側の領域を行ったり来たりする。この行き来の時間スケールを計算することを考えよう。

トンネル効果の影響を考慮する準備として、 $V_0 = +\infty$ であり、トンネル効果が存在しない状況について考えてみるのが有益である。この場合、図 43 にあるように、ポテンシャル障壁で隔てられた二つの領域は完全に独立な井戸型ポテンシャルとなり、それぞれ独立にエネルギー固有状態を計算することができる。たとえ

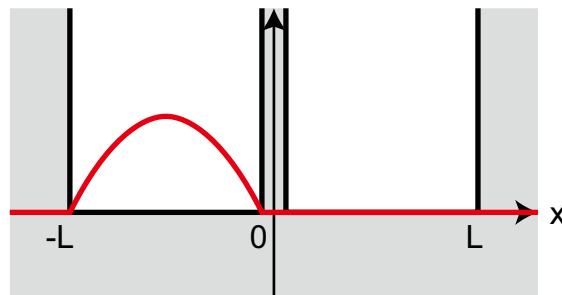


図 43: V_0 が無限に大きいとき、二つの独立な井戸型ポテンシャルとして扱うことができる。赤線は波動関数 $\psi_{\text{左}}(x)$ である。

ば、左側のポテンシャル井戸中に粒子が存在するとき、その波動関数は

$$\psi_{\text{左}} = -\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \quad (-L < x < 0), \quad \psi_{\text{左}} = 0 \quad (\text{その他}) \quad (510)$$

であり、エネルギーは

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \quad (511)$$

である。右側の井戸中に存在する粒子の波動関数は

$$\psi_{\text{右}} = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L}x\right) \quad (0 < x < L), \quad \psi_{\text{右}} = 0 \quad (\text{その他}) \quad (512)$$

であり、同じエネルギー固有値を持つ。さらに、これらの二つの状態の重ね合わせ

$$\psi(x) = c_1\psi_{\text{左}}(x) + c_2\psi_{\text{右}}(x) \quad (513)$$

もやはり同じエネルギーを持つ固有状態になっている。

ここで、定常束縛状態の波動関数の次の性質を思い起こそう。

- ポテンシャルが偶関数であるとき定常状態の波動関数は偶関数または奇関数である。

- 縮退は存在しない。
- 波動関数の節の数（両端は含まない）はそれより低いエネルギーの定常状態の数を表わす。

$\psi_{左}$ と $\psi_{右}$ は定常状態であるにも関わらず、一つ目および二つ目の性質を満足しない。これは、中央のポテンシャル障壁が無限に高く、二つの領域が完全に分離しているという特殊な状況であるためである。（上記の性質に対する以前に与えた証明がこのような状況では成り立たないことを確認すること。）

次に、 V_0 が有限であるような状況を考えよう。この場合 (513) によって与えられる波動関数は一般にはエネルギー固有状態ではなくなる。しかし V_0 が有限ではあるが非常に大きいままであるとすると、真の固有状態は近似的に (513) のような形に表わされると期待される。 V_0 が有限であれば上で述べた波動関数の性質が成り立つ。つまり、真の固有状態は偶関数または奇関数になるはずである。(513) のように与えられる波動関数のうちこの条件を満足するのは次の二つである。

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{左}(x) + \psi_{右}(x)), \quad \psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{左}(x) - \psi_{右}(x)). \quad (514)$$

これらのエネルギーをそれぞれ E_1 および E_2 としよう。 E_1 と E_2 は近似的に $V_0 = +\infty$ の場合のエネルギー固有値 E_0 に等しいが、波動関数の一般的性質より縮退は存在しないはずであるから、厳密には僅かに異なるはずである。 $\psi_1(x)$ は節の数は 0 であるから基底状態、 $\psi_2(x)$ は節の数は 1 であるから第一励起状態である。（ $\psi_1(x)$ は $x = 0$ において 0 になるように見えるが、その両側では正であるから節には数えない。ここでは V_0 が非常に大きいとして波動関数を近似的に扱っているが、厳密に波動関数を求めれば $x = 0$ においても波動関数は 0 にならないことがわかる。）すなわち僅かに E_1 より E_2 の方が大きい。これは、もともと縮退していたエネルギーが、トンネル効果の影響で分裂したものであると考えることができる。（図 44）二つのエネルギーの差を ΔE と置こう。

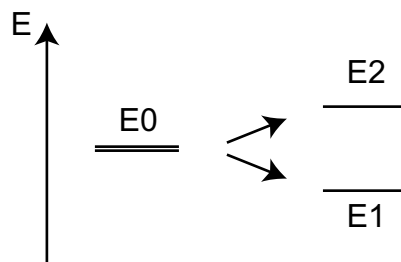


図 44: エネルギーの分裂

$$\Delta E = E_2 - E_1. \quad (515)$$

例題 10.1 ポテンシャル障壁の透過率 $P_{透過}$ が分かっているものとしてエネルギーの差 $E_2 - E_1$ を計算せよ。必要であれば適当な近似を用いよ。

解答

$x = \pm L$ における固定端条件を用いることで、ポテンシャル障壁の右側の波動関数 $\psi_1(x)$ と左側の波動関数 $\psi_2(x)$ を次のように置くことができる。

$$\psi_1(x) = Ae^{-ik(x-L)} - Ae^{ik(x-L)}, \quad \psi_2(x) = Be^{ik(x+L)} - Be^{-ik(x+L)}. \quad (516)$$

ポテンシャルの高さ V_0 が大きければ、二つの領域を独立な井戸型ポテンシャルと見なす近似がよいので、 k は近似的に

$$k_0 = \frac{\pi}{L} \quad (517)$$

によって与えられる。しかし実際にはトンネル効果のためにエネルギーの分裂がおこり、波数についても k_0 から少しずれた二つの値 k_{\pm} が解になるはずである。

k_{\pm} を求めるために、ポテンシャル障壁近傍における波動関数を調べよう。ポテンシャル障壁の散乱行列を S_{fi} とすると、次の関係式が成り立つ。

$$\begin{pmatrix} -Ae^{-ikL} \\ -Be^{-ikL} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Ae^{ikL} \\ Be^{ikL} \end{pmatrix} \quad (518)$$

この式によって許される k の値が定まり、エネルギーも決まる。一般に散乱行列の成分の値はエネルギーに依存するが、ここでは $k = k_0$ の近傍のみに注目し、エネルギー依存性が無視できると仮定する。

(518) は $(A \ B)^T$ というベクトルが散乱行列の固有ベクトルであり、その固有値が $-e^{-2ikL}$ であることを意味している。散乱行列の一般的性質より、 $S_{12} = S_{21}$ であり、さらにここでは左右対称なポテンシャルを考えているので $S_{11} = S_{22}$ も成り立つ。従って散乱行列を次のように置くことができる。

$$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R & T \\ T & R \end{pmatrix} \quad (519)$$

この行列の期待値は

$$\lambda_{\pm} = R \pm T \quad (520)$$

であるから、次の式が成り立つ。

$$-e^{-2ik_{\pm}L} = R \pm T \quad (521)$$

k_{\pm} の差を求めたいので、二つの解に対してこの式の比を取ると、

$$e^{-2i\Delta kL} = \frac{R+T}{R-T} \quad (522)$$

が得られる。ただし $\Delta k = k_+ - k_-$ である。ここではポテンシャル障壁は高く、透過率がほとんど 0 であることを仮定しているから、 $|R| \sim 1$ および $|T| \ll 1$ が成り立つ。このことを用いれば

$$L\Delta k = |T| = \sqrt{P_{\text{透過}}} \quad (523)$$

が得られる。エネルギーの差については

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{m} k_0 \Delta k = \frac{\pi \hbar^2}{m L^2} \sqrt{P_{\text{透過}}} \quad (524)$$

である。

解答終わり

始めに考えた問題に戻ろう。 $t = 0$ において粒子が左側の領域にあり、波動関数 $\psi_{\text{左}}(x)$ によって表されたとする。その後粒子はトンネル効果によって右側の領域に移るが、それにかかる時間 T を求めよう。この問題を解くためには、初期状態において

$$\psi(x, t = 0) = \psi_{\text{左}}(x) \quad (525)$$

を満足する時間に依存するシュレーディンガー方程式の解 $\psi(x, t)$ を知る必要がある。そのためにも、初期状態の波動関数を、定常状態の波動関数を用いて次のように表そう。

$$\psi_{\text{左}}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x) + \psi_2(x)). \quad (526)$$

この波動関数の時間発展を見るには、右辺に現れる定常状態の波動関数を時間に依存する波動関数に置き換えればよい。

$$\psi_i(x) \rightarrow \psi_i(x, t) = e^{-\frac{iE_i t}{\hbar}} \psi_i(x). \quad (527)$$

その結果

$$\begin{aligned} \psi_{\text{左}}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} \psi_1(x) + e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}} \psi_2(x) \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} \left[\psi_1(x) + e^{-\frac{i\Delta E t}{\hbar}} \psi_2(x) \right] \end{aligned} \quad (528)$$

を得る。これが時間に依存するシュレーディンガー方程式の解である。時間 $t = \pi \hbar / \Delta E$ が経過すると、

$$\psi_{\text{左}}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\text{phase}) [\psi_1(x) - \psi_2(x)] \quad (529)$$

が得られる。これは、粒子が右側に存在することを意味する。すなわち、粒子が右側へ移動するのに掛かる時間は

$$T = \frac{\pi \hbar}{\Delta E} \quad (530)$$

によって与えられる。さらに同じ時間 T が経過すると粒子は左側にもどり、あとは周期 $2T$ で行ったりきたりを繰り返す。

対応する角振動数は

$$\omega = \frac{\Delta E}{\hbar} = \frac{E_2}{\hbar} - \frac{E_1}{\hbar} = \omega_2 - \omega_1 \quad (531)$$

となり、それぞれのエネルギーに対応する角振動数 $\omega_1 = E_1/\hbar$ と $\omega_2 = E_2/\hbar$ の差である。これは、二つの僅かに異なる振動数の波が干渉して発生するうなりの振動数と同じである。

この結果を、粒子ポテンシャル障壁に衝突する頻度と透過率を用いて表わしてみよう。(531) に (524) を代入してみると、

$$\omega = 2f\sqrt{P_{\text{透過}}} \quad (532)$$

となる。ただし f は粒子がポテンシャル障壁に衝突する頻度

$$f = \frac{\pi\hbar}{mL} \frac{1}{2L} \quad (533)$$

である。この結果は、透過率のルートに比例しており、古典的に解釈するのは難しい。

10.2 時間発展演算子

前の例でもやったように、時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$\hat{H}\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) \quad (534)$$

の解は次のように与えることができる。

1. $t = 0$ における波動関数を定常状態の重ね合わせとして表わす。

$$\psi(x,0) = \sum_n c_n \psi_n(x). \quad (535)$$

2. $\psi_n(x)$ を時間依存性も含めた波動関数 $\psi_n(x,t) = e^{-iE_n t/\hbar}\psi_n(x)$ で置き換える。

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar}\psi_n(x) \quad (536)$$

ブラケット記法を用い、 $\psi_n(x)$ を $|n\rangle$ によって表わすことにしよう。 $c_n = \langle n|\psi\rangle$ であるから、時刻 t での状態 $|\psi_t\rangle$ の時間発展 $|\psi_t\rangle$ は次のように与えられる。

$$|\psi_t\rangle = \sum_n c_n |n\rangle e^{-iE_n t/\hbar} = \sum_n |n\rangle e^{-iE_n t/\hbar} \langle n|\psi\rangle = \hat{U}(t)|\psi\rangle \quad (537)$$

ここで、時間発展演算子

$$\hat{U}(t) = \sum_n |n\rangle e^{-iE_n t/\hbar} \langle n| \quad (538)$$

を定義した。これはユニタリー演算子であり、次の性質を満足する。

$$\hat{U}(t)^\dagger \hat{U}(t) = \hat{\mathbf{1}}. \quad (539)$$

また、ハミルトニアン演算子を用いて次のように表わすこともできる。

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{it}{\hbar} \hat{H}} \quad (540)$$

ただし演算子の指数関数は次のようにテーラー展開によって定義される。

$$\exp \hat{A} = \hat{\mathbf{1}} + \hat{A} + \frac{1}{2} \hat{A}^2 + \frac{1}{3!} \hat{A}^3 + \dots \quad (541)$$

(537) が時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \quad (542)$$

を満足することは、演算子の指数関数の微分が、通常の指数関数と同じ式

$$\frac{d}{dz} e^{z\hat{A}} = \hat{A} e^{z\hat{A}} \quad (543)$$

によって得られることを用いれば簡単に確かめられる。

$\hat{U}(t)$ はユニタリー演算子であるから、これを用いて別の表示へ移ることができる。

$$|\psi\rangle_H \equiv U^\dagger(t)|\psi(t)\rangle = |\psi_0\rangle \quad (544)$$

$$\mathcal{O}_H(t) \equiv U^\dagger(t)\mathcal{O}U(t) \quad (545)$$

このユニタリー変換で定義される表示をハイゼンベルグ表示と呼ぶ。これに対し、元の表示のことをシュレーディンガー表示と呼ぶ。二つの表示は期待値については同じ結果を与える。

$${}_H\langle\psi|\mathcal{O}_H|\psi\rangle_H = \langle\psi|\mathcal{O}|\psi\rangle \quad (546)$$

これまで用いてきたシュレーディンガー表示においては、系の時間発展は状態ベクトルの変化として表される。その変化を決定するのは時間に依存するシュレーディンガー方程式 (542) である。それに対してハイゼンベルグ表示では、状態ベクトルは変化せず、物理量の時間変化は演算子の変化として表わされる。(545) の両辺を時間微分することで、演算子の時間変化を与える式 (ハイゼンベルグ方程式)

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H(t), \hat{H}] \quad (547)$$

を得ることができる。以前にシュレーディンガー表示を用いて得られた期待値の時間発展の式 (エーレンフェストの定理)

$$\frac{d}{dt} \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle\psi|[\hat{A}, \hat{H}]|\psi\rangle \quad (548)$$

はシュレーディンガー表示でもハイゼンベルグ表示でも同じ形になるが、ハイゼンベルグ表示では演算子に対する式 (547) を時間変化しない状態ではさんだものとして解釈できる。

シュレーディンガー表示とハイゼンベルグ表示は互いに等価であり、どちらを用いても同じ物理を記述することができるが、それぞれに利点がある。シュレーディンガー表示では状態ベクトルが時間変化するので、系の状態が変化の様子をイメージしやすい。それに対してハイゼンベルグ表示では古典論との対応が見やすいという利点がある。たとえば、ハイゼンベルグ方程式は古典解析力学におけるハミルトン方程式

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\}. \quad (549)$$

と類似した形をしている。

10.3 対称性と保存量

無限小変換

正準形式の古典力学において、時間発展はハミルトン方程式

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} \quad (550)$$

によって与えられた。(ここでは A や H はあらわに時間に依存しないものと仮定する。つまり、これらは運動量変数 p_i と座標変数 q_i の関数であり、 p_i や q_i の時間変化を通してのみ時間に依存するものとする。) ただし $\{\dots\}$ はポアソン括弧

$$\{A, B\} = \sum_i \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \quad (551)$$

である。

ある物理量 G に対して右边が 0 である場合、つまり、

$$\{G, H\} = 0 \quad (552)$$

が恒等的に成り立つとき、 G は時間的に変化しない保存量である。

G が生成する (G を母関数とする) 無限小変換を

$$\begin{aligned} q_i &\rightarrow q'_i = q_i + \delta q_i, & \delta q_i &= -\epsilon \{G, q_i\} = \epsilon \frac{\partial G}{\partial p_i}, \\ p_i &\rightarrow p'_i = p_i + \delta p_i, & \delta p_i &= -\epsilon \{G, p_i\} = -\epsilon \frac{\partial G}{\partial q_i} \end{aligned} \quad (553)$$

によって定義する。このとき、 q_i と p_i の関数として与えられる任意の物理量 $A(q_i, p_i)$ の δ による変換は

$$\delta A = \frac{\partial A}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial A}{\partial p_i} \delta p_i = \epsilon \{A, G\} \quad (554)$$

のようにポアソン括弧を用いて与えることができる。

ハミルトニアン H がこの変換のもとで不変であるとき、すなわち $\{H, G\} = 0$ であるとき、 G が生成する変換は系の対称性であるという。 G が生成する変換が系の対称性であることと、 G が保存量であることは等価である。

$$G \text{ が生成する変換が系の対称性} = G \text{ が保存量} \quad (555)$$

例題 10.2 ハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2m} p^2 \quad (556)$$

によって与えられる 1 次元の系において、運動量 p は保存する。対応する無限小変換を求めよ。

$$\begin{aligned} \delta x &= -\epsilon \{p, x\} = \epsilon, \\ \delta p &= -\epsilon \{p, p\} = 0. \end{aligned} \quad (557)$$

つまりこれは並進対称性である。

ポアソン括弧と交換関係の対応

$$\{A, B\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}] \quad (558)$$

を通して、全く同様なことが量子力学においても成り立つ。

\hat{G} が生成する変換は古典的な変換の式 (554) に対して (558) の置き換えを行うことで、期待値を次のように変化させる変換として定義する。

$$\delta \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \frac{\epsilon}{i\hbar} \langle \psi | [\hat{A}, \hat{G}] | \psi \rangle \quad (559)$$

これは二通りに解釈できる。一つの解釈は δ が演算子に対して作用し、状態ベクトルに対しては作用しないとみなすものである。その場合の変換則は

$$\delta \hat{A} = \frac{\epsilon}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{G}], \quad \delta |\psi\rangle = 0. \quad (560)$$

である。これが期待値に対する変換則 (559) を与えることは明らかであろう。

もう一つの解釈は、 δ が状態ベクトルに作用し、演算子には作用しないとみなすものである。その場合の変換則は次のように与えられる。

$$\delta |\psi\rangle = \frac{\epsilon}{i\hbar} \hat{G} |\psi\rangle, \quad \delta \hat{A} = 0. \quad (561)$$

これが期待値に対する変換 (559) を再現することはすぐに確かめることができる。どちらの見方においても、演算子 \hat{G} は変換の生成子と呼ばれる。

特に \hat{G} がハミルトニアン自身である場合には、 δ は時間並進

$$\delta = \epsilon \frac{d}{dt} \quad (562)$$

となり、(560) はハイゼンベルグ表示におけるハイゼンベルグ方程式、(561) はシュレーディンガー表示における時間に依存するシュレーディンガー方程式を与える。
ある物理量 \hat{G} がハミルトニアンと可換

$$[\hat{G}, \hat{H}] = 0 \quad (563)$$

であるとき、 \hat{G} が生成する変換は系の対称性である（あるいは単に \hat{G} は系の対称性である）という。

\hat{G} が生成する変換が系の対称性であるとき、以下のことが成り立つ。

- \hat{G} の期待値は時間変化しない。（ハイゼンベルグ方程式より明らか）
- ψ が定常状態であれば、 $\psi' = \hat{G}\psi$ も（0 でなければ）同じエネルギー固有値を持つ定常状態である。
- G とエネルギーは同時測定可能。（これは、定常状態の完全系として \hat{H} と \hat{G} の同時固有状態を取れることを意味する。）

シュレーディンガー表示とハイゼンベルグ表示がそうであったように、これら二つの見方は互いにユニタリー変換で結びついており、期待値はどちらで計算しても同じになる。簡単な例として \hat{G} が運動量演算子

$$\hat{G} = \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (564)$$

である場合に、この二つの違いを見てみよう。

まず、一つ目の見方、すなわち、変換が演算子にのみ作用する場合を考えてみよう。この場合、運動量演算子 \hat{p} は変化しないが、位置演算子が次のように変換される。

$$\hat{x}' = \hat{x} + \frac{i\epsilon}{\hbar} [\hat{p}, \hat{x}] = \hat{x} + \epsilon \quad (565)$$

波動関数 $\psi(x)$ は不変である。これは、図 45 の (a) に与えたように、波動関数自体は変化しないが、座標の原点を ϵ だけずらしたと解釈することができる。

これに対して二番目の見方、すなわち波動関数に変換される見方では、演算子 \hat{x} は不変であるのに対して波動関数は

$$\psi'(x) = \psi(x) + \frac{\epsilon}{i\hbar} \hat{p}\psi(x) = \psi(x) - \epsilon \frac{d}{dx}\psi(x) = \psi(x - \epsilon) \quad (566)$$

のように変換される。今度は、座標のとり方は変化しないが、波動関数自体が図 45 の (b) のように変化したとみなすことができる。

つまり、これら二つの違いは座標を動かしたと見るか、関数を動かしたとみるかという違いである。物理量の計算には、座標軸と波動関数の相対的な関係だけが問題であるから、これら二つの見方は本質的には同じである。

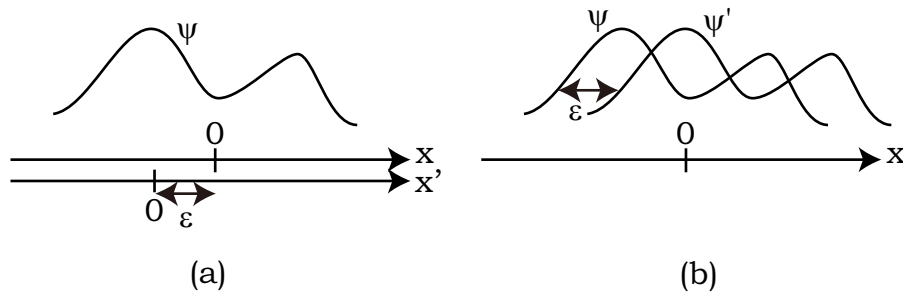


図 45: 座標の変換

有限変換

無限小変換を繰り返し行うことで、有限変換を実現することができる。

\hat{G} によって生成される、微小パラメータ ϵ の変換は

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = |\psi\rangle + \frac{\epsilon}{i\hbar} \hat{G} |\psi\rangle = \left(1 + \frac{\epsilon}{i\hbar} \hat{G}\right) |\psi\rangle \quad (567)$$

である。ただしここでは変換が演算子ではなく状態に作用する立場を採用した。有限なパラメータ a による変換は、この微小変換を a/ϵ 回繰り返すことで実現される。

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \left(1 + \frac{\epsilon}{i\hbar} \hat{G}\right)^{a/\epsilon} |\psi\rangle \quad (568)$$

ここで、 ϵ が微小量であることを用いれば

$$\left(1 + \frac{\epsilon}{i\hbar} \hat{G}\right)^{\frac{a}{\epsilon}} = \exp\left(\frac{a}{i\hbar} \hat{G}\right) \quad (569)$$

と変形することができる。つまり、有限パラメータ a による変換を

$$|\psi'\rangle = \hat{U} |\psi\rangle, \quad \hat{U} = \exp\left(\frac{a}{i\hbar} \hat{G}\right) \quad (570)$$

と与えることができる。演算子 \hat{G} がエルミート演算子であれば、演算子 \hat{U} はユニタリ演算子である。

例題 10.3 演算子

$$\hat{G} = \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (571)$$

を生成子とする有限変換を行ったとき波動関数がどのように変化するかを求めよ。

$$\begin{aligned} \psi'(x) &= \exp\left(-a \frac{d}{dx}\right) \psi(x) \\ &= \left[1 + (-a) \frac{d}{dx} + \frac{(-a)^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \dots\right] \psi(x) \\ &= \psi(x) + (-a) \psi'(x) + \frac{(-a)^2}{2} \psi''(x) + \dots \end{aligned} \quad (572)$$

これはテイラー展開の式にほかならない。すなわち

$$\psi'(x) = \psi(x - a) \quad (573)$$

であり、 $\psi'(x)$ は $\psi(x)$ を x の正の方向に a だけ平行移動したものである。

変換が演算子に作用するという立場の場合には、任意の演算子 \hat{A} が次のように変換される。

$$\hat{A} \rightarrow \hat{A}' = \hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U} \quad (574)$$

特にハミルトニアンと \hat{G} が可換であれば

$$\hat{H} = \hat{U}^{-1} \hat{H} \hat{U} \quad (575)$$

が成り立つ。あるいは生成子 \hat{G} と同様に、 \hat{U} も \hat{H} と可換、すなわち

$$[\hat{U}, \hat{H}] = 0 \quad (576)$$

である。

離散的変換

無限小変換の繰り返しによって実現できない対称性も存在する。そのような対称性は離散的対称性といい、その代表的なものが鏡映対称性である。波動関数に対して次のように作用する演算子 \hat{P} を導入する。

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = \hat{P}\psi(x) = \psi(-x) \quad (577)$$

この演算子は鏡映演算子、またはパリティ演算子という。定義より明らかに

$$\hat{P}^2 = \hat{1}, \quad \hat{P} = \hat{P}^{-1} \quad (578)$$

である。 $\hat{P}^2 = \hat{1}$ より、 \hat{P} の固有値は ± 1 である。この値のことをパリティと呼ぶ。波動関数 $\psi(x)$ が偶関数である状態はパリティが $+1$ であり、奇関数である状態はパリティが -1 である。それぞれパリティが偶および奇であると表現する場合もある。 \hat{P} が系の対称性であるためにはハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + U(\hat{x}) \quad (579)$$

が \hat{P} による変換のもとで不変であれば良い。実際にやってみると、

$$\hat{P}^{-1} \hat{H} \hat{P} = \frac{1}{2m} \hat{p} + U(-\hat{x}) \quad (580)$$

となり、これが \hat{H} に等しくなければならない。すなわち、ポテンシャル $U(x)$ が偶関数の場合に \hat{P} は系の対称性となる。(\hat{P} は x 軸の左右を入れ替えることから、当然である。)

もしパリティ変換が系の対称性である場合には、 \hat{H} と \hat{P} が同時測定可能であり、定常状態の完全系として \hat{P} の固有状態でもあるような波動関数を用いることができる。このことは、§4.4 において述べた波動関数の性質 [5]、すなわちポテンシャル $U(x)$ が偶関数であるときには波動関数を偶関数または奇関数に取ることができるということに他ならない。

離散的対称性に対応する保存量は、古典論には存在しない量子力学に特有のものである。

内部対称性

座標や運動量を変化させない対称性は内部対称性と呼ばれる。古典的な粒子の場合、その運動は座標と運動量で完全に決まるから、内部対称性は存在しないが、量子力学においてはしばしば重要な役割を果たす。

量子力学において最も単純な内部対称性は頂等演算子

$$\hat{G} = \hat{1} \quad (581)$$

を生成子とする対称性であり、これは 1 次元空間上を運動する 1 粒子系における唯一の内部対称性である。これが対称性であることは、恒等演算子が任意の演算子と交換し、当然ハミルトニアンとも可換であることから明らかである。

この変換が波動関数に作用するものとみなすと、無限小変換の変換則は

$$\psi \rightarrow \psi' = \psi + \delta\psi = \left(1 + \frac{\epsilon}{i\hbar}\right) \psi \quad (582)$$

と与えられ、有限変換は波動関数の位相回転となる。

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{\frac{\alpha}{i\hbar}} \psi. \quad (583)$$

$\hat{G} = \hat{1}$ の期待値は

$$\langle \psi | \hat{1} | \psi \rangle = \int |\psi|^2 dx \quad (584)$$

である。つまり、 $\hat{G} = \hat{1}$ に対応する保存則は確率の保存に他ならない。

波動関数の位相は物理的に意味を持たず、任意に変化させても物理的には何も変化しないが、位相を変化させる対称性があるという事実は、確率の保存という非常に重要な物理的性質と関係しているのである。

11 調和振動子

11.1 定常状態

点 $x = x_0$ において最低値 U_0 を取るポテンシャル $U(x)$ の中で運動する質点を考える。古典的にはポテンシャルの最低点 $x = x_0$ で止まっている場合がエネルギー最低である。この系に小さなエネルギーを与えると、 $x = x_0$ の周りで微小振動する。 $U(x)$ を $x = x_0$ の周りでテーラー展開すると、

$$U(x) = U_0 + \frac{1}{2}U''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots \quad (585)$$

となる。振動の振幅が小さければ、高次の項を無視することができて

$$U(x) = U_0 + \frac{1}{2}U''(x_0)(x - x_0)^2 \quad (586)$$

と近似することができる。このポテンシャルによって表わされる系は調和振動子と呼ばれる。現実に現れる多くの系で、微小振動は近似的に調和振動子の組み合わせとして表わされる。

エネルギーと座標の原点を取り直して

$$U_0 = 0, \quad x_0 = 0 \quad (587)$$

とするのが便利である。このとき $k = U''(x_0)$ と置けばポテンシャルは

$$U(x) = \frac{k}{2}x^2 \quad (588)$$

となる。(図 46) このポテンシャル上で古典的粒子は単振動をする。その角振動

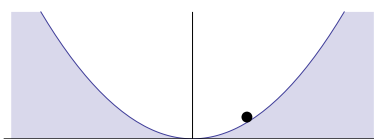


図 46: 調和振動子ポテンシャル

数は

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (589)$$

である。

この系を量子力学的に扱おう。シュレーディンガー方程式は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (590)$$

座標 x 、エネルギー E 、運動量 p の代わりに、次の変数変換によって無次元化された量 y , \mathcal{E} , k_y を用いると、計算が楽になる。

無次元化

$$y = x / \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad \mathcal{E} = E/(\hbar\omega), \quad k_y = p/\sqrt{m\hbar\omega} \quad (591)$$

この無次元化の操作は、 $\hbar = \omega = m = 1$ の単位系を用いることと同じである。新しい変数を用いるとシュレーディンガー方程式 (590) は

$$\left(-\frac{d^2}{dy^2} + y^2\right)\psi = 2\mathcal{E}\psi \quad (592)$$

となる。

この微分方程式の解を求めたい。ポテンシャルが $y \rightarrow \pm\infty$ で発散するから全ての状態は束縛状態である。 $|y|$ が大きいところでの漸近形がどのようになるかを考えてみよう。 $y^2 \gg \mathcal{E}$ を用いればシュレーディンガー方程式は近似的に次のようになる。

$$\psi'' \sim y^2\psi \quad (593)$$

$|y|$ が大きいところでこれを近似的に満足する解として

$$\psi \sim e^{\pm\frac{y^2}{2}} \quad (594)$$

がある。実際、これを二回微分してみると

$$\psi'' = (y^2 \pm 1)e^{\pm\frac{y^2}{2}} \sim y^2\psi \quad (595)$$

となる。 $|y| \rightarrow \infty$ で発散しないためには、 $\psi \sim e^{-\frac{y^2}{2}}$ でなければならない。これは $|y|$ が大きいところでの近似的な解である。厳密な解を求めるために、波動関数を次のように置いてみよう。

$$\psi(y) = f(y)e^{-\frac{y^2}{2}}. \quad (596)$$

ψ に対して二通りの解 $e^{\pm y^2/2}$ があることに対応して、 $f(y)$ に対しても y の大きいところで e^{y^2} のように振舞う解と y が大きいところで指数関数的な発散を持たない解 (多項式的な発散はある) が存在する。物理的に許される波動関数は後者の解に対応する。

$f(y)$ を決めるために、これをシュレーディンガー方程式に代入しよう。

$$\begin{aligned} \psi' &= (f' - yf)e^{-\frac{y^2}{2}} \\ \psi'' &= (f'' - 2yf' + (y^2 - 1)f)e^{-\frac{y^2}{2}} \end{aligned} \quad (597)$$

を用いると、

$$f'' - 2yf' + (2\mathcal{E} - 1)f = 0 \quad (598)$$

が得られる。微分方程式 (598) の解を求めるために、 f を次のように展開する。

$$f(y) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k y^k \quad (599)$$

これを (598) に代入すると、

$$\sum_{k=0}^{\infty} c_k [k(k-1)y^{k-2} - 2ky^k + (2\mathcal{E} - 1)y^k] = 0. \quad (600)$$

となる。第 1 項で $k \rightarrow k+2$ の置き換えを行って、 y のべきをそろえると

$$\sum_{k=0}^{\infty} [c_{k+2}(k+2)(k+1) + c_k(2\mathcal{E} - 1 - 2k)] y^k = 0. \quad (601)$$

これが y によらず 0 になるようにするためには、全ての係数が 0 でなければならない。

$$c_{k+2}(k+2)(k+1) + c_k(2\mathcal{E} - 1 - 2k) = 0, \quad \forall k \quad (602)$$

これより、次の漸化式を得る。

$$c_{k+2} = \frac{2k+1-2\mathcal{E}}{(k+2)(k+1)} c_k. \quad (603)$$

(603) は c_k の添え字 k が偶数のもとの奇数のもので分離している。添え字が偶数の c_{2l} は c_0 を与えれば一意的に定まり、添え字が奇数の c_{2l+1} は c_1 を与えれば一意的に定まる。 $c_0 \neq 0$ で $c_1 = 0$ の場合には波動関数は偶関数、 $c_0 = 0$ で $c_1 \neq 0$ の場合には波動関数は奇関数である。これはポテンシャルは偶関数であり、波動関数は偶関数または奇関数としてよいことと対応している。

偶関数の場合を考えてみよう。漸化式において、 $k = 2l$ と置くと、

$$c_{2l+2} = \frac{4l+1-2\mathcal{E}}{(2l+2)(2l+1)} c_{2l} \quad (604)$$

l が非常に大きいところでは近似的に

$$c_{2(l+1)} = \frac{1}{l+1} c_{2l} \quad (605)$$

が成り立つ。よって、大きい l に対しては近似的に

$$c_{2l} = \frac{A}{l!} \quad (606)$$

とおける。 A は定数である。このとき $f(y)$ は

$$f(y) \sim \sum_{l=0}^{\infty} \frac{A}{l!} y^{2l} = A e^{y^2} \quad (607)$$

となるが、前にも述べたように指数関数的に発散する $f(y)$ は物理的な波動関数を与えない。従って、定数 A は 0 でなければならない。

これは波動関数が奇数である場合も同様である。よって、規格化可能な束縛状態の波動関数を得るためには、漸化式 (603) の分子 $2k+1-2\mathcal{E}$ がある k において 0 になり、そこから先の係数 c_k が全て 0 になる必要がある。 $k=n$ ($n=0, 1, 2, \dots$) のときに分子が 0 になるとすると、エネルギー固有値は

調和振動子のエネルギー固有値

$$\mathcal{E}_n = n + \frac{1}{2} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (608)$$

でなければならない。(591) によって無次元化される前のエネルギーは

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (609)$$

となる。

エネルギー固有値 \mathcal{E}_n に対応する波動関数を

$$\psi_n(y) = f_n(y)e^{-\frac{y^2}{2}} \quad (610)$$

とおく。 f_n は次の微分方程式を満足する。

$$f_n'' - 2yf_n' + 2nf_n = 0 \quad (611)$$

これはエルミート微分方程式と呼ばれる。漸化式より $f_n(y)$ は n 次の多項式であり、 n が偶数であれば f_n 、 ψ_n は偶関数、 n が奇数の場合、 f_n 、 ψ_n は奇関数である。これらの多項式で、 c_0 を c_1 を適当に選んだものはエルミート多項式と呼ばれ、 $H_n(y)$ と表わされる。

小さい n の値について、エルミート多項式的具体形は次のとおりである。

$$\begin{aligned} H_0(y) &= 1, \\ H_1(y) &= 2y, \\ H_2(y) &= 4y^2 - 2, \\ H_3(y) &= 8y^3 - 12, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (612)$$

エルミート多項式は次の直交関係を満足する。

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} H_m(y) H_n(y) dy = \delta_{m,n} 2^m m! \sqrt{\pi}. \quad (613)$$

従って、正規直交条件を満足する波動関数は次のように与えられる。

調和振動子の定常状態の波動関数

$$\psi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}} \quad (614)$$

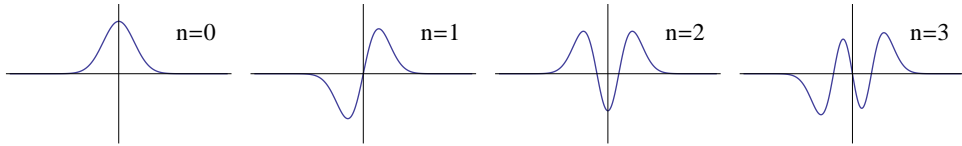


図 47: 調和振動子の定常状態の波動関数

(614) に与えた波動関数は y 座標において規格化されたもの、すなわち

$$\int \psi_m(y) \psi_n(y) dy = \delta_{m,n} \quad (615)$$

を満たす波動関数である。 x 座標に直すと

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \int \psi_m(y) \psi_n(y) dx = \delta_{m,n} \quad (616)$$

よって、 x 座標において規格化された波動関数は次のように与えればよい。

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \psi_n(y) = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}. \quad (617)$$

11.2 古典極限

粒子の存在確率密度 $|\psi|^2$ をグラフにしたものを図 48 に与える。山の数 $n + 1$

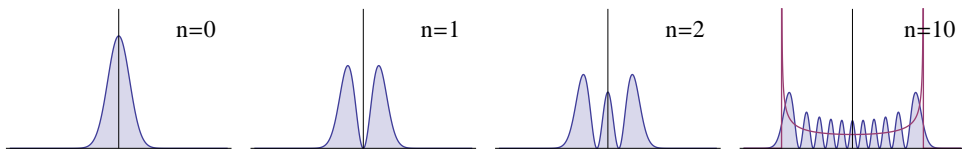


図 48: 調和振動子の定常状態における粒子の存在確率密度

に一致する。 n を大きくしていくと、波動関数は激しく振動する関数になるが、その振動を均すと滑らかな曲線が現れる。これは、古典的な粒子の存在確率密度を与えると期待される。

調和振動子の古典的存在確率密度を求めてみよう。古典的には、ある微小区間を粒子が通過するのに掛かる時間はその区間の幅を粒子の速さで割ったものであ

る。従って、周期運動する粒子がその区間内に存在する確率は、この時間を運動の周期で割ったものになる。往復運動の場合には一周期の間に二回その区間を通過するのでさらに 2 を掛けなければならない。よって存在確率密度 ρ は

$$\rho = \frac{2}{vT} \quad (618)$$

である。無次元化された変数を用いている場合、周期は $T = 2\pi$ であり、速さはエネルギー保存則

$$\frac{1}{2}v^2 + \frac{1}{2}y^2 = n + \frac{1}{2} \quad (619)$$

から求めることができる。

$$v = \sqrt{2n + 1 - y^2}. \quad (620)$$

その結果、古典的存在確率密度 ρ は次のように与えられる。

$$\rho = \frac{1}{\pi\sqrt{2n + 1 - y^2}} \quad (621)$$

平方根の中身が負になる領域には古典的粒子は侵入することができないから、そこでは古典的存在確率密度は 0 である。図 48 の $n = 10$ のグラフには古典的存在確率密度のグラフも重ねて描いてある。確かに $|\psi|$ の振動を均したものに一致しそうなことが確認できる。

波の振幅だけでなく、波の位相についても見てみよう。WKB 近似を用いると、ある二つの点 y_1 と y_2 での位相差は次のように得ることができる。

$$\Delta\phi(y_1, y_2) = \int_{y_1}^{y_2} k_y dy \quad (622)$$

古典回帰点

$$y_* = \sqrt{2n + 1} \quad (623)$$

における跳ね返りで位相のずれ δ が生じると仮定すると、波動関数は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} \psi(y) &\sim e^{2i\delta} \exp[i\Delta(y, y_*)] + \exp[-i\Delta(y, y_*)] \\ &\sim \cos(\Delta(y, y_*) + \delta) \end{aligned} \quad (624)$$

($\Delta(y, y_*)$ は y の減少関数であり、一行目右辺第 1 項が反射波、第 2 項が入射波を表している。) $y = 0$ における波動関数は

$$\Delta\phi(0, y_*) = \int_0^{y_*} \sqrt{y_*^2 - y^2} dy = \frac{\pi}{4} y_*^2 = \frac{n\pi}{2} + \frac{\pi}{4} \quad (625)$$

を用いれば

$$\psi(0) \sim \cos\left(\frac{n\pi}{2} + \frac{\pi}{4} + \delta\right) \quad (626)$$

となる。これを厳密な波動関数の $y = 0$ での振る舞い

$$\psi(0) \sim \cos \frac{n\pi}{2} \quad (627)$$

と比較してみよう。波動関数の符号は自由に取ることができるから、位相については π の整数倍の不定性があることに注意すると、次の関係が得られる。

$$\frac{n\pi}{2} = \frac{n\pi}{2} + \frac{\pi}{4} + \delta \pmod{\pi} \quad (628)$$

ここから位相のずれが次のように得られる。³

$$\delta = -\frac{\pi}{4} \pmod{\pi} \quad (629)$$

11.3 古典回帰点近傍での波動関数

$E - U(x)$ の値が連続的に 0 を横切るような古典回帰点での位相のずれを調べるには、その古典回帰点の周りに注目してシュレーディンガー方程式を解き、その波動関数の形状を調べればよい。粒子のエネルギーが $E = 0$ になるようにエネルギーの原点を選び、そのときの古典回帰点を座標の原点にとる。適当な変数変換を行えば、古典回帰点 $x = 0$ 近傍のポテンシャルを次のように取ることができる。

$$U(x) = \frac{x}{2} \quad (630)$$

このときシュレーディンガー方程式は次のように与えられる。

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} - x \right) \psi(x) = 0 \quad (631)$$

この微分方程式の解はエアリー関数と呼ばれる。独立な二つの解は $\text{Ai}(x)$ および $\text{Bi}(x)$ と表される。ポテンシャルによって跳ね返される粒子を表す波動関数として

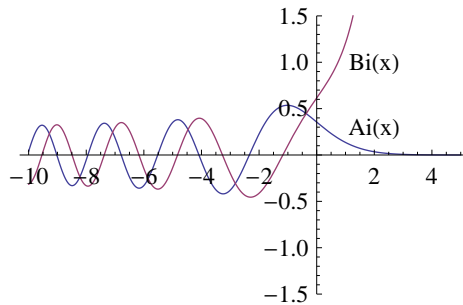


図 49: エアリー関数

は $x \rightarrow \infty$ において 0 に漸近する $\text{Ai}(x)$ を採用すればよい。

³これとは $\pi/2$ だけ異なる位相のずれの定義の仕方もある。その場合には $\delta = \pi/4$ である。

この関数の漸近形を詳しく調べることで、古典回帰点における位相のずれを計算することができるが、位相のずれはすでに前節で調和振動子の波動関数を用いて計算したので、ここでは調和振動子の波動関数とエアリー関数の関係を簡単に述べるにとどめる。次のポテンシャルを考えよう。

$$U(x) = \frac{x}{2} + \frac{x^2}{2a^4} = \frac{1}{2a^4} \left(x + \frac{a^4}{2} \right)^2 - \frac{a^4}{8} \quad (632)$$

このポテンシャルは $x = -a^4/2$ を頂点とする下に凸な放物線であり、調和振動子を表している。角振動数は

$$\omega = \frac{1}{a^2} \quad (633)$$

である。 $a \rightarrow \infty$ の極限において (631) に一致する。このポテンシャル上の粒子の

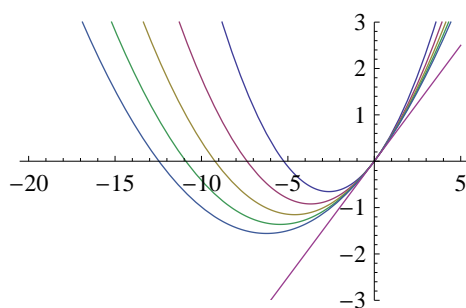


図 50: $a \rightarrow \infty$ で $U(x) = x/2$ に漸近するポテンシャル

シュレーディンガー方程式は

$$\left(\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{2a^4} \left(x + \frac{a^4}{2} \right)^2 + \frac{a^4}{8} \right) \psi = 0. \quad (634)$$

である。§11.1 で扱ったものと同じ形に持っていくには次の変数変換を行えばよい。

$$x = ay - \frac{a^4}{2}, \quad a^6 = 4(2n + 1). \quad (635)$$

この結果、次の微分方程式を得る。

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2 + 2n + 1 \right) \psi_n(y) = 0. \quad (636)$$

このシュレーディンガー方程式の解で

$$\int |\psi_n(y)|^2 dy = 1. \quad (637)$$

によって規格化したものはすでに (614) に与えられている。 $\psi_n(x)$ を $\psi_n(y)$ に対して代入 $y = x/a + a^3/2$ をしたものと定義すれば、その規格化は次のようになる。

$$\int |\psi_n(x)|^2 dx = a. \quad (638)$$

これは、 x 座標では全体の粒子数が a であるような規格化になっている。古典回帰点近傍のみに注目している場合、全体の粒子数よりも粒子が古典回帰点を通る頻度に注目するほうが良い。(638) によって規格化された波動関数に対する衝突頻度を角振動数で表したものは、(633) を用いれば $1/a$ となる。従って、衝突頻度が角振動数 1 になるように規格化した波動関数は

$$\varphi_n(x) = \sqrt{a} \psi_n \left(\frac{x}{a} + \frac{a^3}{2} \right) \quad (639)$$

と与えられる。いくつかの n に対する波動関数の概形を図 51 に与える。波動関数

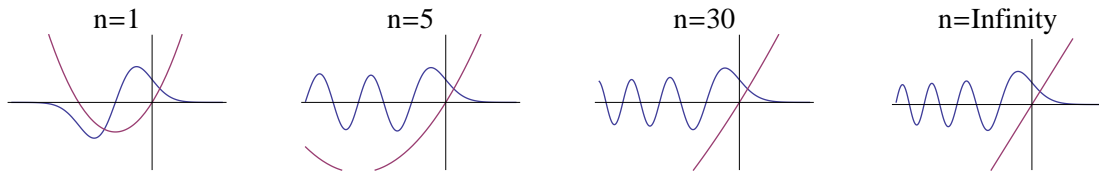


図 51: 古典回帰点近傍での波動関数

$\varphi_n(x)$ の $n \rightarrow \infty$ の極限としてエアリ関数が得られる。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \varphi_n(x) = \sqrt{2} \text{Ai}(x) \quad (640)$$

11.4 エルミート多項式

$H_n(y)$ は次の母関数を用いて定義するのが便利である。

$$G(y, s) \equiv e^{-s^2+2sy} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(y) \quad (641)$$

ここから $H_n(y)$ が満足する微分方程式を求めよう。 $G(y, s)$ が次の式を満たすことはすぐにわかる。

$$\frac{\partial^2 G}{\partial y^2} - 2y \frac{\partial G}{\partial y} = (4s^2 - 4sy)G = -2s \frac{\partial G}{\partial s} \quad (642)$$

この左辺に (641) の展開式を代入すると、

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \left(\frac{d^2}{dy^2} - 2y \frac{d}{dy} \right) H_n(y) \quad (643)$$

となる。一方右辺は

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} (-2n) H_n(y) \quad (644)$$

である。この二つが s によらず等しいから、 s^n の係数ごとに等しいはずである。よって

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - 2y \frac{d}{dy} \right) H_n = -2n H_n \quad (645)$$

が成り立つ。これは $f_n(y)$ が満足する微分方程式 (598) に一致する。

エルミート多項式の幾つかの性質について、その導出を与えておく。一般にテーラー展開

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a_n}{n!} x^n \quad (646)$$

の係数が

$$a_n = \frac{d^n}{dx^n} f(x) \Big|_{x=0} \quad (647)$$

によって得られることを用いると、

$$\begin{aligned} H_n(y) &= \frac{\partial^n}{\partial s^n} G(y, s) \Big|_{s=0} \\ &= e^{y^2} \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-(s-y)^2} \Big|_{s=0} \\ &= e^{y^2} \left(-\frac{\partial}{\partial y} \right)^n e^{-(s-y)^2} \Big|_{s=0} \\ &= e^{y^2} \left(-\frac{\partial}{\partial y} \right)^n e^{-y^2} \end{aligned} \quad (648)$$

が得られる。これは (エルミート多項式に対する) ロドリゲスの公式 (Rodrigues' formula) と呼ばれる。

波動関数の規格化に用いられた関係式 (613) を求めよう。つまり、次の $A_{m,n}$ を計算したい。

$$A_{m,n} = \int e^{-y^2} H_m(y) H_n(y) dy \quad (649)$$

そのために母関数を用いて

$$\int e^{-y^2} G(y, s) G(y, t) dy = \sum_{m,n} \frac{s^m t^n}{m! n!} A_{m,n} \quad (650)$$

を計算すればよい。 $G(y, s) = e^{-s^2+2sy}$ を代入すると

$$\begin{aligned}
 &= \int e^{-y^2} e^{-s^2+2sy} e^{-t+2ty} dy \\
 &= \int e^{-(y-s-t)^2} e^{2st} dy \\
 &= e^{2st} \int e^{-x^2} dx \\
 &= \sqrt{\pi} e^{2st} \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{n!} \sqrt{\pi} s^n t^n \tag{651}
 \end{aligned}$$

が得られる。途中で公式

$$\int e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \tag{652}$$

を用いた。(651) を (650) の右辺と比較し、 s と t の各次数の係数が等しいと置くことで

$$A_{m,n} = \delta_{m,n} 2^m m! \sqrt{\pi} \tag{653}$$

が得られる。これを (649) に代入すれば関係式 (613) が得られる。

11.5 昇降演算子

前節では固有状態を求めるために微分方程式を解き、具体的に波動関数 $\psi(x)$ を求めた。今度はそれとは異なる代数的な方法で固有状態を求める。

今回も無次元化された変数を用いる。

$$y = x / \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad \mathcal{E} = E / (\hbar\omega). \tag{654}$$

シュレーディンガー方程式は

$$\hat{H}|\psi\rangle = \mathcal{E}|\psi\rangle, \quad \hat{H} = \frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dy^2} + y^2 \right) \tag{655}$$

これは二乗の差なので、和と差の積に因数分解できそうであるが、 y と d/dy が可換ではないために余分な項が現れる。次の演算子を定義する。

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{dy} + y \right), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{d}{dy} + y \right). \tag{656}$$

この二つの演算子が互いにエルミート共役であることは簡単に確かめられる。これを用いて上記のハミルトニアンは次のように幾つかの形に書き換えることができる。

$$\hat{H} = \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} = \hat{a} \hat{a}^\dagger - \frac{1}{2} = \frac{1}{2} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) \tag{657}$$

これらが互いに等しいことは、 \hat{a} と \hat{a}^\dagger が満たす交換関係

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (658)$$

を用いれば示すことができる。

\hat{a} と \hat{a}^\dagger とハミルトニアン \hat{H} の交換関係は

$$[\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hat{a}^\dagger [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \quad (659)$$

これより、もし $|\psi\rangle$ が \hat{H} の固有状態であり、

$$\hat{H}|\psi\rangle = \mathcal{E}|\psi\rangle \quad (660)$$

であれば、 $|\psi'\rangle = \hat{a}^\dagger|\psi\rangle$ に対して

$$\hat{H}|\psi'\rangle = \hat{H}\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{H}\psi + [\hat{H}, \hat{a}^\dagger]|\psi\rangle = \hat{a}^\dagger\mathcal{E}|\psi\rangle + \hat{a}^\dagger|\psi\rangle = (\mathcal{E}+1)\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = (\mathcal{E}+1)|\psi'\rangle \quad (661)$$

が成り立つことがわかる。つまり、 \hat{a}^\dagger を作用させると、状態のエネルギーが 1 だけ上昇する。そのため、 \hat{a}^\dagger は上昇演算子と呼ばれる。 \hat{a} に対しては、

$$[\hat{H}, \hat{a}] = -\hat{a} \quad (662)$$

が成り立ち、これを用いて $|\psi'\rangle = \hat{a}|\psi\rangle$ に対して

$$\hat{H}|\psi'\rangle = (\mathcal{E}-1)|\psi'\rangle \quad (663)$$

を示すことができる。これは \hat{a} がエネルギーを 1 だけ下降させる演算子であることを意味する。このため \hat{a} は下降演算子と呼ばれる。上昇演算子と下降演算子をまとめて昇降演算子という。

基底状態を $|0\rangle$ と表わそう。基底状態はそれ以上エネルギーを下げるできないので、

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \quad (664)$$

が成り立つはずである。基底状態のエネルギーは、ハミルトニアンを作用させ、基底状態の性質 (664) を用いることで

$$\hat{H}|0\rangle = \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) |0\rangle = \frac{1}{2}|0\rangle \quad (665)$$

と得られる。

励起状態は基底状態に上昇演算子 \hat{a}^\dagger を作用させることによって構成できる、第 n 励起状態を $|n\rangle$ と表わせば、次のように与えることができる。

$$|n\rangle = c_n(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle. \quad (666)$$

c_n は規格化因子である。この状態のエネルギーは

$$\hat{H}|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right) |n\rangle \quad (667)$$

が成り立つ。

固有状態の規格化を $n = 0$ の基底状態も含め次のように決めておこう。

$$\langle n|n\rangle = 1. \quad (668)$$

この規格化条件を満足するように (666) の規格化因子 c_n を求めよう。

$$\frac{1}{c_n} |n\rangle = \frac{1}{c_{n-1}} \hat{a}^\dagger |n-1\rangle. \quad (669)$$

この両辺のノルムをとると、

$$\frac{1}{|c_n|^2} \langle n|n\rangle = \frac{1}{|c_{n-1}|^2} \langle n-1|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n-1\rangle = \frac{n}{|c_{n-1}|^2} \langle n-1|n-1\rangle \quad (670)$$

規格化条件 (668) を用いれば、 c_n に対する漸化式が得られる。

$$\frac{1}{|c_n|^2} = \frac{n}{|c_{n-1}|^2} \quad (671)$$

位相は決まらないので、正の実数に取ることにすれば、 c_0 は定義より 1 であることを用いて

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} \quad (672)$$

が得られる。つまり、

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \quad (673)$$

である。

もし波動関数の具体形を知りたいければ、座標表示における昇降演算子の具体形 (656) を用いればよい。たとえば基底状態 $|0\rangle$ の波動関数を $\psi_0(y)$ を決めるには、(664) に対応する微分方程式

$$\left(\frac{d}{dy} + y\right) \psi_0 = 0 \quad (674)$$

を解けば良い。すると、前回求めた基底状態の波動関数

$$\psi_0 = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{y^2}{2}} \quad (675)$$

が得られる。

励起状態については、上昇演算子 \hat{a}^\dagger が

$$\hat{a}^\dagger = e^{y^2/2} \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{d}{dy} \right) e^{-y^2/2} \quad (676)$$

と表せることを用いれば

$$\begin{aligned} \psi_n(y) &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n \psi_0 \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[e^{y^2/2} \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{d}{dy} \right) e^{-y^2/2} \right]^n \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-y^2/2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^n n!}} e^{y^2/2} \left(-\frac{d}{dy} \right)^n e^{-y^2} \end{aligned} \quad (677)$$

これは波動関数 (614) に一致している。

例題 11.1 状態 $|n\rangle$ における y^2 の期待値を求めよ。

y を昇降演算子を用いて表わすと $y = (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)/\sqrt{2}$ であるから、

$$y^2 = \frac{1}{2} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 = \frac{1}{2} (\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) \quad (678)$$

この演算子を $|n\rangle$ で挟んで期待値を求めよう。右辺の括弧の中の第1項は $\langle n|\hat{a}^2|n\rangle \sim \langle n|n-2\rangle$ であるが、異なる固有状態の内積は0であるから考える必要はない。第2項も同様である。従って、残りの二つの項のみ考慮すればよい。

$$\langle n|y^2|n\rangle = \langle n|\frac{\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}}{2}|n\rangle = n + \frac{1}{2}. \quad (679)$$

11.6 調和振動子とエネルギー量子

調和振動子のエネルギースペクトル

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (680)$$

はエネルギー準位が等間隔であり、その間隔は

$$\Delta E = \hbar\omega \quad (681)$$

である。このため、系のエネルギーが ΔE を最小単位とする粒のようなものとみなすことができる。たとえば、系が第 n 励起状態 $|n\rangle$ にあれば、それは系が n 個のエネルギー量子を含んでいるとみなすことができる。このような立場では昇降演算子はエネルギー量子を生成、消滅させるものと解釈される。このため \hat{a} と \hat{a}^\dagger はそれぞれ消滅演算子および生成演算子とも呼ばれる。系が含むエネルギー量子の数を固有値として与える次の演算子は個数演算子と呼ばれる。

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}. \quad (682)$$

は状態 $|n\rangle$ に作用させると固有値 n を与える。すなわち、励起の個数を数える。 \hat{N} は個数演算子と呼ばれる。

11.7 コヒーレント状態

古典的な調和振動子の運動は

$$x = A \cos(\omega t + \theta) \quad (683)$$

によって与えられる。この運動は、はっきりとした位相 $\omega t + \theta$ と振幅 A を持っている。このような状態はコヒーレントであるといわれる。

量子力学における調和振動子の定常状態は、粒子がどこにあるのかあいまいであり、位相（波動関数の位相ではなく、振動子の位相）が定まらない。従ってコヒーレントではない。そもそも量子力学では位置と運動量を同時に確定することができないため、完全にコヒーレントな状態は存在しないが、それぞれがある程度のあいまいさを持ちつつ、ほぼ定まった状態が存在する。量子力学においてはこのような状態のことをコヒーレント状態と呼ぶ。

最も簡単な例として、下降演算子 \hat{a} の固有状態がそのような例になっている。 α を任意の複素数として

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (684)$$

を満足する状態 $|\alpha\rangle$ について調べてみよう。 \hat{a} はエルミート演算子ではないので、固有値 α は実数とは限らない。実際、任意の複素数値を固有値とする状態を構成することができる。 $|\alpha\rangle$ を定常状態 $|n\rangle$ で展開し、次のように置こう。

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n \frac{c_n}{n!} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \quad (685)$$

これを固有値方程式 (684) に代入してみると、

$$\sum_n c_n \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = \alpha \sum_n \frac{c_n}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \quad (686)$$

となる。 $\hat{a} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle = n (\hat{a}^\dagger)^{n-1} |0\rangle$ を用いると、この左辺は

$$\sum_n c_n \frac{\sqrt{n}}{\sqrt{(n-1)!}} (\hat{a}^\dagger)^{n-1} |0\rangle = \sum_n c_{n+1} \frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \quad (687)$$

なので、両辺の係数の比較より、係数に対する漸化式

$$c_{n+1} \sqrt{n+1} = \alpha c_n \quad (688)$$

が得られる。この漸化式を解くことにより全ての係数 c_n ($n \geq 1$) を c_0 を用いて与えることができる。

$$c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0 \quad (689)$$

c_0 は状態 $|\alpha\rangle$ の規格化を決める。規格化条件 $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ を要求しよう。この規格化条件に展開式 (685) を代入すると、

$$1 = \langle\alpha|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = |c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |c_0|^2 e^{|\alpha|^2}. \quad (690)$$

従って

$$c_0 = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \quad (691)$$

であり、コヒーレント状態が次のように求まった。

コヒーレント状態

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (692)$$

コヒーレント状態の波動関数 $\psi_\alpha(y) = \langle y|\alpha\rangle$ を求めておこう。

$$\begin{aligned} \langle y|\alpha\rangle &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{n!} \langle y|n\rangle \\ &= \frac{e^{-|\alpha|^2/2}}{\pi^{1/4}} e^{-y^2/2} \sum_n \frac{1}{n!} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{2}}\right)^n H_n(y) \\ &= \frac{e^{-|\alpha|^2/2}}{\pi^{1/4}} e^{-y^2/2} G\left(y, \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\right) \end{aligned} \quad (693)$$

ただし、 $G(y, s)$ は (641) に与えたエルミート多項式の母関数である。さらに母関数の具体形を代入すれば

$$\psi_\alpha(y) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}(y - \sqrt{2} \operatorname{Re} \alpha)^2} e^{i(\sqrt{2} \operatorname{Im} \alpha y - \frac{\operatorname{Im} \alpha^2}{2})} \quad (694)$$

が得られる。二つの指数関数因子のうち、一つ目は振幅に関するものであり、位置 y の期待値が $\sqrt{2} \operatorname{Re} \alpha$ であることがここから読み取れる。また二つ目は位相因子に関するものであり、 $-i\partial_y$ の期待値が $\sqrt{2} \operatorname{Im} \alpha$ であることが読み取れる。

無次元化された座標 y と運動量 $-i\partial_y$ の期待値は、波動関数を用いなくても、以下のように代数的に導出することもできる。まず、これらを昇降演算子を用いて表わすと

$$\langle\alpha|y|\alpha\rangle = \langle\alpha|\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)|\alpha\rangle, \quad \langle\alpha|-i\partial_y|\alpha\rangle = \langle\alpha|\frac{1}{\sqrt{2}i}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)|\alpha\rangle \quad (695)$$

が得られる。ここで、

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad \langle\alpha|\hat{a}^\dagger = \langle\alpha|\alpha^* \quad (696)$$

を用いると、期待値が次のように得られる。

$$\langle\alpha|y|\alpha\rangle = \sqrt{2} \operatorname{Re} \alpha, \quad \langle\alpha|-i\partial_y|\alpha\rangle = \sqrt{2} \operatorname{Im} \alpha \quad (697)$$

無次元化する前の座標と運動量の期待値は次のように与えられる。

$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \langle y \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \operatorname{Re} \alpha, \quad \langle \hat{p} \rangle = \sqrt{m\omega\hbar} \langle -i\partial_y \rangle = \sqrt{2m\omega\hbar} \operatorname{Im} \alpha. \quad (698)$$

コヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ は定常状態ではないので、時間的に変化していく。一般に、 $t = 0$ における状態がエネルギー固有状態によって

$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle \quad (699)$$

と展開される時、一般の時刻 t における状態は次のように与えられる。

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} c_n |\psi_n\rangle \quad (700)$$

であることを用いれば調和振動子の場合には $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ であるから $t = 0$ における状態ベクトルが (692) のコヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ であったときに、時刻 t における状態ベクトルは

$$e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{i(n+\frac{1}{2})\omega t} |n\rangle = e^{\frac{i}{2}\omega t} e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_n \frac{(e^{i\omega t}\alpha)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{\frac{i}{2}\omega t} |\alpha(t)\rangle \quad (701)$$

となる。ただし $\alpha(t)$ は次の関数である。

$$\alpha(t) = e^{i\omega t} \alpha \quad (702)$$

つまり、 $\alpha(t)$ は複素平面上で原点を中心とする円の上を角速度 ω で移動する。 α の実部と虚部は (698) によって座標と運動量の期待値を与える。座標と運動量の変化を相空間上に描くと、これは丁度古典的運動のそれと一致する。

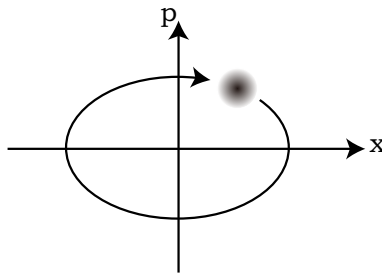


図 52: コヒーレント状態の時間発展

問題 11.1 コヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ に対して y^2 および $-\partial_y^2$ の期待値を求めよ。

コヒーレント状態は、座標と運動量に対して 0 でない不確定性を持つが、その不確定性を無視できるような極限においては、古典的な粒子の運動とみなすことができる。

電磁波のエネルギー量子を調和振動子を用いて扱う場合には、エネルギー固有状態はエネルギー量子の数が確定値を取るような状態である。その場合には電場、磁場の値は不確定であり、期待値は 0 となる。それに対してコヒーレント状態では電場、磁場が時間ごとにほぼ決まった値を持ち古典的な電磁波に対応させることができる。