第４回：１０月２８日（金）

3.6　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、

$$
\begin{aligned}
[\hat{x},\hat{p}]f &= \hat{x}\hat{p}f - \hat{p}\hat{x}f \\
&= -i\hbar\left(x\frac{d}{dx}f - \frac{d}{dx}(xf)\right) \\
&= -i\hbar(xf' - (xf' + f)) \\
&= i\hbar f
\end{aligned}
\tag{122}
$$

となるから、交換関係は次のように与えられる。

$$
[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar. \tag{123}
$$

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

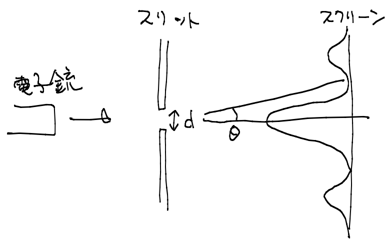

図 7: 単スリット実験

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。

$$
\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p_x} \tag{124}
$$

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を意味している。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

$$\Delta y = d \tag{125}$$

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渉縞が現れる。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渉縞の広がりの角度を θ とすれば、運動量 p_y のあいまいさは

$$\Delta p_y = \theta p_x \tag{126}$$

と与えることができる。（θ は小さいと仮定した。）干渉縞の幅 θ の定義は一意的ではないが、ここでは干渉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

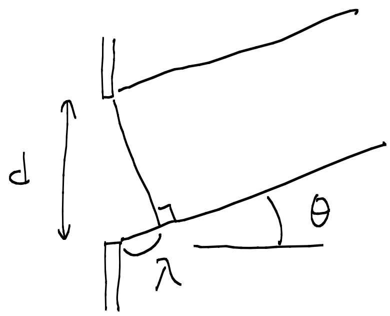

図 8: 単スリットにおける回折

さいと仮定すると、角度 θ は

$$\theta = \frac{\lambda}{d} \tag{127}$$

によって与えられる。以上の式を組み合わせれば、

$$\Delta p_y = \theta p_x = \frac{\lambda}{d} p_x = \frac{1}{d} p_x \frac{2\pi\hbar}{p_x} \sim \frac{\hbar}{d} \tag{128}$$

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。(125) と (128) を組み合わせれば

$$\Delta y \Delta p_y \sim \hbar. \tag{129}$$

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。

$$\Delta x \Delta p \gtrsim \hbar \tag{130}$$

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、

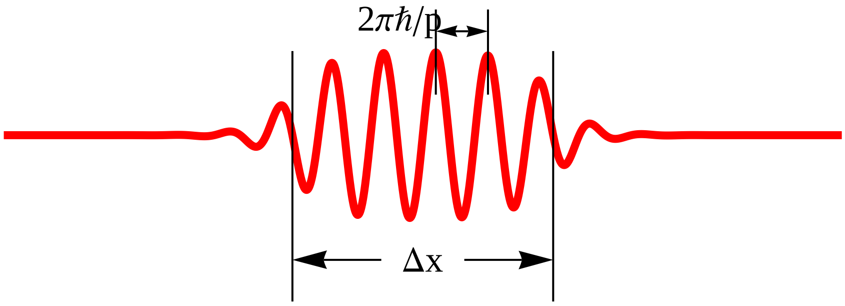

図 9: 波束

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。

$$\lambda = \frac{\Delta x}{n} \tag{131}$$

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 (131) の両辺を微分した式

$$d\lambda = -\frac{\Delta x}{n^2} dn \tag{132}$$

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

$$\Delta\lambda = \frac{\Delta x}{n^2}\Delta n \sim \frac{\Delta x}{n^2} = \frac{\lambda^2}{\Delta x} \tag{133}$$

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、

$$\Delta k = \frac{\Delta\lambda}{\lambda^2} = \frac{1}{\Delta x} \tag{134}$$

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 (130) 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。

$$\Delta x^2 = \langle \widehat{x}^2 \rangle - \langle \widehat{x} \rangle^2, \quad \Delta p^2 = \langle \widehat{p}^2 \rangle - \langle \widehat{p} \rangle^2. \tag{135}$$

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

$$\langle \widehat{A} \rangle = \int \psi^* \widehat{A} \psi dx \tag{136}$$

である。計算を簡単にするために、ここでは $\langle \widehat{x} \rangle = \langle \widehat{p} \rangle = 0$ 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。

$$\int \left| ax\psi + \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx \geq 0 \tag{137}$$

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。

$$\int |ax\psi|^2 dx = a^2 \Delta x^2, \tag{138}$$

$$\int \left| \frac{d\psi}{dx} \right|^2 dx = \int \psi^* \left(-\frac{d^2}{dx^2} \right) \psi dx = \frac{1}{\hbar^2} \Delta p^2, \tag{139}$$

$$\int \left(ax\psi^* \frac{d\psi}{dx} + \frac{d\psi^*}{dx} ax\psi \right) dx = \int \left(ax\psi^* \frac{d\psi}{dx} - a\psi^* \frac{d}{dx}(x\psi) \right) dx = -a \int \psi^* \psi dx = -a \tag{140}$$

これらをもとの不等式に代入すると、

$$a^2 \Delta x^2 - a + \frac{1}{\hbar^2} \Delta p^2 \geq 0 \tag{141}$$

が得られる。これは (137) 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。

(141) 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。

$$-\frac{1}{4\Delta x^2}+\frac{\Delta p^2}{\hbar^2}\geq 0 \tag{142}$$

この不等式を整理すれば、不確定性関係

$$\Delta x\Delta p\geq\frac{\hbar}{2} \tag{143}$$

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 (143) 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、(141) の左辺は放物線の頂点

$$a=\frac{1}{2\Delta x^2} \tag{144}$$

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 (137) の積分が 0 になることを意味する。(137) 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。

$$\frac{1}{2\Delta x^2}x\psi+\frac{d\psi}{dx}=0 \tag{145}$$

この微分方程式を解くと

$$\psi=\frac{1}{(2\pi)^{1/4}\Delta x^{1/2}}\exp\left(-\frac{x^2}{4\Delta x^2}\right) \tag{146}$$

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。

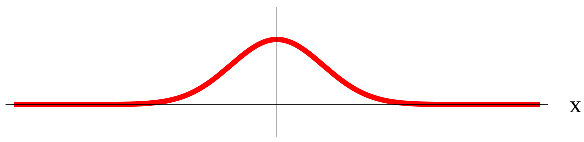

図 10: $\Delta x\Delta p$ が最小になる波動関数の例

ここまでは、位置と運動量の間の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 $\widehat{t}$（これは、$\widehat{x}=x$ と同様に、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 $\widehat{E}=i\hbar\partial/\partial t$ の間の交換関係は

$$[\widehat{t},\widehat{E}]=-i\hbar \tag{147}$$

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

$$\Delta t\Delta E\gtrsim\hbar \tag{148}$$

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 $\widehat{E} = i\hbar\partial/\partial t$ 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。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = E\psi(x,t). \tag{149}$$

この微分方程式は簡単に解くことができて、次の一般解を持つ。

$$\psi(x,t) = \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)\psi(x). \tag{150}$$

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 (150) を (38) に与えたシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)\right)\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) \tag{151}$$

に代入すると、$\psi(x)$ に対する次の微分方程式を得る。

$$\left(-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right)\psi(x) = E\psi(x) \tag{152}$$

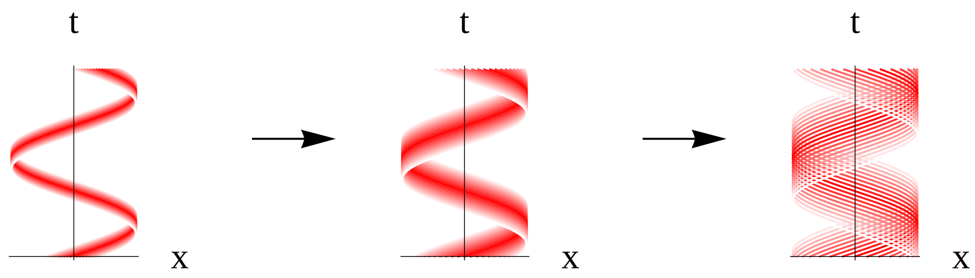

図 11: エネルギーを確定させると、時間的情報が失われる。

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 (151) 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 (152) に与えた時間に依存しないシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+U(x)\right)\psi(x)=E\psi(x) \tag{153}$$

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。

$$\lim_{x\to+\infty}U(x)=U_1,\quad \lim_{x\to-\infty}U(x)=U_2. \tag{154}$$

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

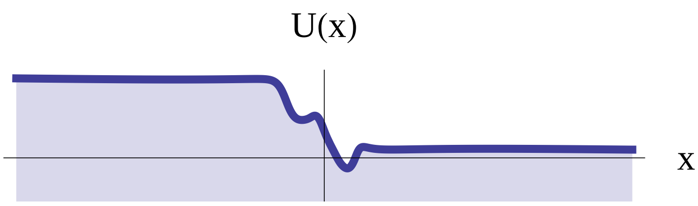

図 12: 遠方（$x\to\pm\infty$）において定数に漸近するポテンシャル

ガー方程式は

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)=-\frac{2m}{\hbar^2}(E-U_1)\psi(x) \tag{155}$$

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。

$$b^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_1 - E), \quad b > 0 \tag{156}$$

によって正の実数 b を定義しておくと、シュレーディンガー方程式は

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = b^2\psi(x) \tag{157}$$

となり、一般解が次のように与えられる。

$$\psi(x) = c_1 e^{bx} + c_2 e^{-bx}, \quad c_1, c_2 \in \mathbf{C}. \tag{158}$$

もし $c_1 \neq 0$ であれば、波動関数 $\psi(x)$ は $x \to \infty$ で指数関数的に発散する。このことは、粒子の存在確率は $x \to \infty$ 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 $x \to \infty$ の広い領域を運動できる。

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_1), \quad k > 0 \tag{159}$$

によって正の実数 k を定義しておくと、シュレーディンガー方程式は

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -k^2\psi(x) \tag{160}$$

となり一般解は

$$\psi(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}, \quad c_1, c_2 \in \mathbf{C} \tag{161}$$

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

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

$$b'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_2 - E), \quad b' > 0 \tag{162}$$

を定義しておくと、シュレーディンガー方程式の解は

$$\psi(x) = c_1' e^{b'x} + c_2' e^{-b'x}. \tag{163}$$

となり、$x \to -\infty$ で発散しないためには境界条件

$$c_2' = 0 \tag{164}$$

を課す必要がある。

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

$$k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_2), \quad k' > 0 \tag{165}$$

によって k' を定義しておくと、シュレーディンガー方程式の一般解は

$$\psi(x) = c_1' e^{ik'x} + c_2' e^{-ik'x} \tag{166}$$

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 $x \to \pm\infty$ 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。

$$\psi(x) = A\psi_1(x) + B\psi_2(x), \quad A, B \in \mathbf{C}. \tag{167}$$

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、$x \to +\infty$ 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。

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= c_{11} e^{bx} + c_{12} e^{-bx}, \\ \psi_2(x) &= c_{21} e^{bx} + c_{22} e^{-bx} \end{aligned} \tag{168}$$

ただし b は§4.2 と同様に定義した。このとき一般解は

$$\psi(x) = (Ac_{11} + Bc_{21})e^{bx} + (Ac_{12} + Bc_{22})e^{-bx} \tag{169}$$

となるが、この波動関数が $x \to +\infty$ 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。

$$Ac_{11} + Bc_{21} = 0. \tag{170}$$

$E > U_1$ の場合 この場合には ψ_1 も ψ_2 も $x \to +\infty$ 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 $x \to -\infty$ 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 $x \to -\infty$ において次のように振舞う。

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= c'_{11}e^{b'x} + c'_{12}e^{-b'x}, \\ \psi_2(x) &= c'_{21}e^{b'x} + c'_{22}e^{-b'x} \end{aligned} \tag{171}$$

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

$$Ac'_{12} + Bc'_{22} = 0 \tag{172}$$

を満足する必要がある。

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

つまり、$x \to \infty$ においても $x \to -\infty$ 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。$x \to \pm\infty$ における条件を組み合わせると、以下のようになる。

$E > U_1, U_2$ 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 $x \to \pm\infty$ においてそれぞれ条件が課される。

$$
\begin{aligned}
Ac_{11} + Bc_{21} &= 0 \\
Ac'_{12} + Bc'_{22} &= 0.
\end{aligned}
\tag{173}
$$

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。

$$
\begin{vmatrix} c_{11} & c_{21} \\ c'_{12} & c'_{22} \end{vmatrix} = 0 \tag{174}
$$

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 (174) 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 13 である。

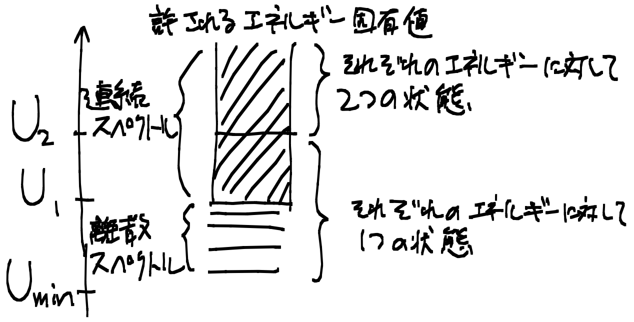

図 13: エネルギースペクトルの例