

第7回：11月18日（金）

(265) 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

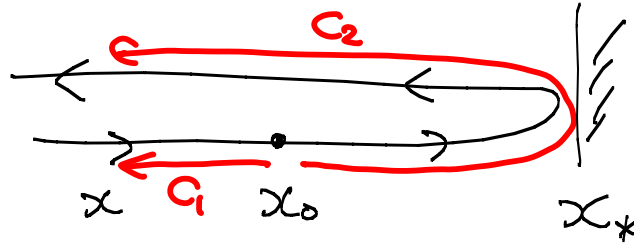


図 26: 基準点 x_0 と x をつなく経路が運動の向きと逆になる例

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ぬことに注意。

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く経路が 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、

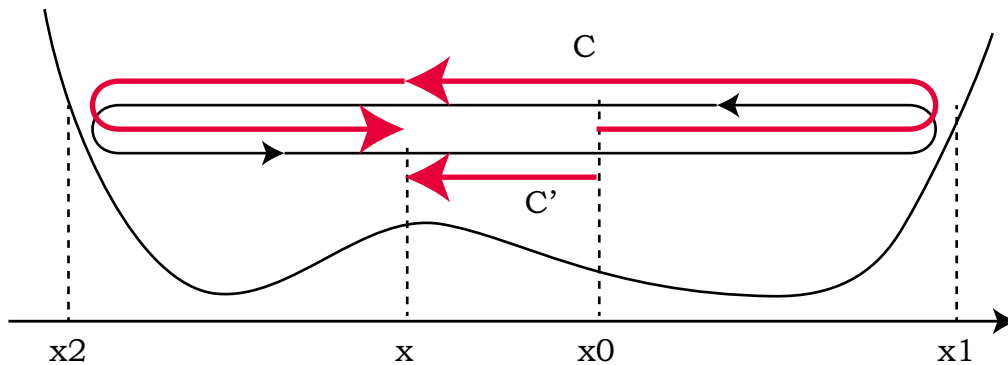


図 27: 井戸中を往復運動する粒子

$$\frac{1}{\hbar} S_C(x) - S_{C'}(x) = 2\pi n \quad (267)$$

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。

$$\frac{1}{\hbar} \oint p dx - (\Delta_1 + \Delta_2) = 2\pi n \quad (268)$$

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。この式はボーア・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 ボーア・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

$$U(x) = +\infty \quad (|x| > 0), U(x) = 0 \quad (|x| < 0). \quad (269)$$

(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

$$U(x) = \frac{k}{2} x^2. \quad (270)$$

(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。

$$\psi = e^{ikx - i\omega t} \quad (271)$$

この波動関数は、運動量とエネルギーが

$$p = \hbar k, \quad E = \hbar \omega \quad (272)$$

である粒子を表わしている。ただし、これらは分散関係

$$\frac{p^2}{2m} = E \quad (273)$$

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

$$v_{cl} = \frac{p}{m} \quad (274)$$

によって与えられる。

波動関数 (271) によって表される波が進む速度、すなわち位相

$$\phi = kx - \omega t \quad (275)$$

が一定である点が進む速度 v_{phase} (位相速度と呼ばれる) は

$$v_{\text{phase}} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} \quad (276)$$

である。(273) を用いると

$$v_{\text{phase}} = \frac{p}{2m} \quad (277)$$

であり、これは古典的な粒子の速度 (274) 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。

$$\psi = e^{ik_1x - i\omega_1t} + e^{ik_2x - i\omega_2t} \quad (278)$$

波数 k_i と振動数 ω_i は分散関係 (273) 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、

$$|\psi|^2 = |e^{ik_1x - i\omega_1t}(1 + e^{i\Delta kx - i\Delta\omega t})| = |1 + e^{i\Delta kx - i\Delta\omega t}| = 2 + 2\cos(\Delta kx - \Delta\omega t) \quad (279)$$

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

$$\Delta k = k_2 - k_1, \quad \Delta\omega = \omega_2 - \omega_1 \quad (280)$$

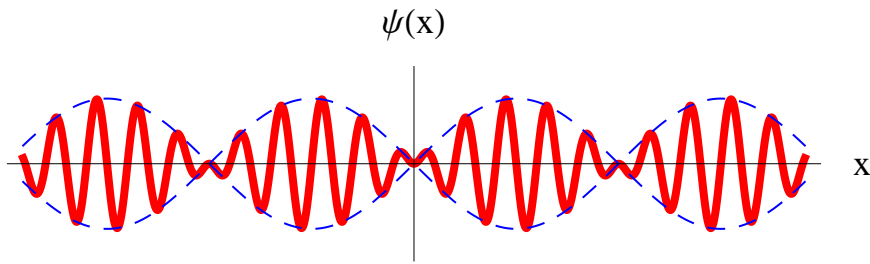


図 28: うなり

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

$$v_{\text{group}} = \frac{\Delta\omega}{\Delta k} \quad (281)$$

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、

$$v_{\text{group}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} \quad (282)$$

と与えられる。これは群速度と呼ばれる。(273) の分散関係を用いれば

$$v_{\text{group}} = \frac{p}{m} \quad (283)$$

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

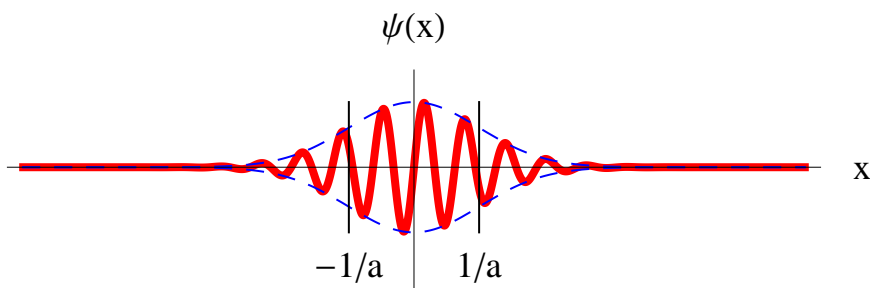


図 29: 波束の例

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。

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int f(k) e^{ik(x-x_0) - i\omega(k)t} dk \quad (284)$$

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

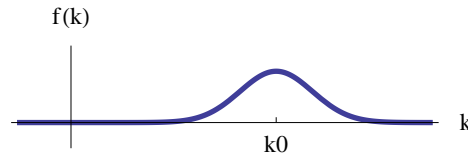


図 30: 入射波の k 表示

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。

$$\int |\psi(x)|^2 dx = \int |f(k)|^2 dk = 1. \quad (285)$$

x 空間での波動関数 (284) がどこで大きな値を持つかを調べよう。(284) 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。

$$\left. \frac{d}{dk} (kx - kx_0 - \omega(k)t) \right|_{k=k_0} = x - x_0 - \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k=k_0} t = 0. \quad (286)$$

群速度

$$v_{\text{group}} = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} \quad (287)$$

を用いると、

$$x = x_0 + v_{\text{group}} t. \quad (288)$$

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

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi dx \quad (289)$$

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。

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle &= \frac{d}{dt}\int\psi^*\hat{A}\psi dx \\
&= \int\psi^*\hat{A}\frac{\partial\psi}{\partial t}dx + \int\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\hat{A}\psi dx \\
&= \frac{1}{i\hbar}\int\psi^*\hat{A}\hat{H}\psi dx + \left[\int\psi\hat{A}\frac{\partial\psi^*}{\partial t}dx\right]^* \\
&= \frac{1}{i\hbar}\int\psi^*\hat{A}\hat{H}\psi dx + \left[\frac{1}{i\hbar}\int\psi\hat{A}\hat{H}\psi dx\right]^* \\
&= \frac{1}{i\hbar}\int\psi^*\hat{A}\hat{H}\psi dx - \frac{1}{i\hbar}\int\psi^*\hat{H}\hat{A}\psi dx \\
&= \frac{1}{i\hbar}\int\psi^*[\hat{A},\hat{H}]\psi dx \\
&= \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle
\end{aligned} \tag{290}$$

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

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} \tag{291}$$

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。

$$\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial x}\frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial x}. \tag{292}$$

\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、

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{x},\hat{H}]\rangle = \frac{1}{m}\langle\hat{p}\rangle, \\
\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{p},\hat{H}]\rangle = -\langle V'(\hat{x})\rangle.
\end{aligned} \tag{293}$$

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

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C} \quad (294)$$

を満足するとする。 \hat{A} , \hat{B} , \hat{C} において

$$\hat{x} \rightarrow x, \quad \hat{p} \rightarrow p, \quad \hbar \rightarrow 0 \quad (295)$$

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、

$$\{A, B\} = C \quad (296)$$

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 連続スペクトル

8.1 規格化条件

エネルギー固有状態のうち、離散スペクトルに属する状態については

$$\int \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn} \quad (297)$$

によって規格化を行うことが可能であるが、連続スペクトルに属する状態の波動関数は $x \rightarrow \pm\infty$ において 0 にならないので、同じ規格化条件を用いることはできない。そのような状態はこれまで「規格化不可能」としてきたが、以下ではしばしば連続スペクトルに属する状態を扱うので、何らかの規格化条件を課すことで定数因子の不定性をなくしておくのが便利である。

あるエルミート演算子 \hat{A} が連続的な固有値を持つ場合に波動関数を規格化するには次の正規直交条件を用いるのが便利である。

$$\int \psi_a^*(x) \psi_{a'}(x) dx = \delta(a - a'). \quad (298)$$

ただし $\psi_a(x)$ は固有値 a を持つ \hat{A} の波動関数である。つまり $\hat{A}\psi_a = a\psi_a$ である。このように規格化された波動関数に対して次のことが成り立つ。

- 任意の状態の波動関数 $\psi(x)$ は次のように展開できる。

$$\psi(x) = \int c_a \psi_a(x). \quad (299)$$

(ただしここでは離散的固有値がなく、縮退もないことを仮定している。)

- $\int |\psi|^2 dx = 1$ によって規格化された状態 ψ に対して \hat{A} の測定を行ったときに a と $a + \delta a$ の間の値が得られる確率を $\rho(a)\delta a$ とするとき、 $\rho(a)$ は次のように与えられる。

$$\rho(a) = \left| \int \psi_a^* \psi dx \right|^2. \quad (300)$$

ψ が (299) によって展開されている場合には $\rho(a) = |c_a|^2$ である。

例として、運動量演算子の固有関数を規格化してみよう。運動量演算子の固有関数を次のようにおく。

$$\psi_p(x) = N_p e^{ipx/\hbar} \quad (301)$$

これに正規直交条件

$$\int \psi_p^*(x) \psi_{p'}(x) dx = \delta(p - p') \quad (302)$$

を課して係数 N_p を決定しよう。左辺に (301) を代入して計算すると、

$$\begin{aligned} \text{左辺} &= \int (N_p e^{ipx/\hbar})^* (N_{p'} e^{ip'x/\hbar}) dx \\ &= N_p^* N_{p'} \int e^{-i(p-p')x/\hbar} dx \\ &= 2\pi N_p^* N_{p'} \delta\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right) \\ &= 2\pi\hbar N_p^* N_{p'} \delta(p-p') \end{aligned} \quad (303)$$

が得られる。従って規格化条件を満足するためには

$$2\pi\hbar N_p^* N_{p'} = 1 \quad (304)$$

であればよいから、

$$N_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (305)$$

とおけばよい。よって、規格化された運動量波動関数は

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \quad (306)$$

である。

問題 8.1 波数演算子 $\hat{k} = -id/dx$ の固有状態に対して正規直交条件を満足する波動関数 $\psi_k(x)$ を与えよ。

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

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0) \quad (307)$$

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。

$$\int \psi_{x_1}^*(x) \psi_{x_2}(x) dx = \delta(x_1 - x_2) \quad (308)$$

9 反射と透過

9.1 確率の保存

ハミルトニアン演算子は、その固有値として物理量（エネルギー）を与えるので、エルミートでなければならない。それだけでなく、ハミルトニアンのエルミート性は確率解釈を行う上でも重要である。

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、

$$\frac{d}{dt} \left(\int \psi^* \psi dx \right) = 0 \quad (309)$$

でなければならない。この式の左辺に時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi \quad (310)$$

を代入し、ハミルトニアンのエルミート性を用いずに変形すると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\int \psi^* \psi dx \right) &= \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dx + \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi dx \\ &= \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dx + \left[\int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dx \right]^* \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* \hat{H} \psi dx + \left[\frac{1}{i\hbar} \int \psi^* \hat{H} \psi dx \right]^* \\ &= \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* \hat{H} \psi dx - \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* \hat{H}^\dagger \psi dx \end{aligned} \quad (311)$$

となる。従って、(309) 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。