第１１回：１２月１６日（金）

反射係数から (409) によって定義される位相のずれ δ は一般に波数 k の関数である。δ の k 微分として定義した関数 $w(k)$ は (404) によって古典的に定義された関数と同じものであるということが前回示された。

古典的には、ポテンシャル内部でエネルギー E を持つ粒子がほとんど静止して存在できるような場所があると、そでは粒子がゆっくりと運動することになり、跳ね返ってくるまでに長い時間がかかる。これは、ポテンシャル内部に準安定状態が存在すると、そのエネルギーにおいて $w(k)$ が大きくなることを意味している。このことは、準安定状態と反射係数の関係からも以下のように導くことができる。

前回見たように、準安定状態のエネルギー、寿命は $R(k)$ の極を与える複素数 k によって決まる。準安定状態を表わす波数を $k = k_0 - ik'$ とする。すると、関数 $R(k)$ の一般的性質 (448) より $R(k)$ は $k = k_0 + ik'$ において 0 になる。このことから、$k = k_0$ の周りで $R(k)$ という関数は次のように与えることができる。

$$R(k) = (\cdots)\frac{k-(k_0+ik')}{k-(k_0-ik')} \tag{457}$$

$\cdots$ の部分は、k に依存する他の因子であるが、その部分は k_0 の近傍でそれほど大きく変化しないと仮定しよう。すると、位相のずれは次のように与えられる。

$$\delta = (\cdots) + \arctan\frac{k-k_0}{k'} \tag{458}$$

$\cdots$ の部分は再び $k = k_0$ の近傍ではそれほど変化しない項であり、以下では定数とみなす。すると、これを k で微分することによって次の関数を得る。

$$\frac{d\delta}{d\epsilon} = \frac{k'}{k'^2+(k-k_0)^2}. \tag{459}$$

この値は、準安定状態のエネルギーに相当する波数の値 k_0 において最大値 $1/k'$ をとる。このとき跳ね返りに要する時間を (404) から求めると、定数部分を除き

$$T = \frac{2}{v}w(k_0) = \frac{2}{vk'} = 4\tau. \tag{460}$$

となる。ただし、波数の虚部と寿命 τ の関係式 (444) を用いた。つまり、跳ね返りに要する時間は準安定状態の寿命と同程度である。これは、準安定状態のエネルギーに近いエネルギーの粒子が一旦ポテンシャル内に取り込まれ、それが寿命程度の時間を掛けて再びポテンシャル外部に現れるという現象が起こっていることを示唆している。

このように、準安定状態のエネルギーと粒子のエネルギーがほぼ一致したときに粒子が一時的に準安定状態になる現象を**共鳴**という。

10.4　束縛状態と反射係数

前節では反射係数から準安定状態についての情報を読み取る方法について述べたが、反射係数は真に安定な束縛状態についての情報も含んでいる。反射係数と束縛状態の関係を見るために、それらの定義をもう一度確認しておこう。

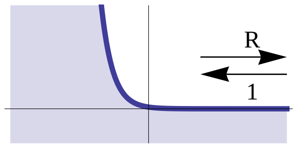

図 46: ポテンシャルによる反射

まず、反射係数であるが、$x \to -\infty$ において $U(x) \to \infty$ になるようなポテンシャルの壁による反射を考える場合、シュレーディンガー方程式の解が

- $x \to -\infty$ において $\psi \to 0$
- $x \to +\infty$ において

$$\psi(x) = Ae^{-ikx} + Be^{ikx}, \quad k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}. \tag{461}$$

という漸近形を持つとき、係数の比

$$R = \frac{B}{A} \tag{462}$$

を反射係数と呼ぶのであった。

一方、エネルギー $E < 0$ を持つ束縛状態の波動関数は次の漸近形を持つ。

- $x \to -\infty$ において $\psi \to 0$
- $x \to +\infty$ において

$$\psi(x) = Ce^{-bx} + 0e^{bx}, \quad b = \frac{1}{\hbar}\sqrt{-2mE}. \tag{463}$$

波動関数 (463) の第 2 項の係数は、波動関数が $x \to \infty$ で発散しないためには 0 でなければならない。

これら二つを比べてみると、反射定数を定義する波動関数 (461) において $k = -ib$ とおいて $R(k) = 0$ とするか、$k = ib$ とおいて $R(k) = \infty$ とすれば束縛状態の条件 (463) に一致することがわかる。従って、$R(k)$ を複素関数に拡張したときに、虚軸上の負の部分 $k = ib$ に極が存在するか、正の部分 $k = -ib$ に零点が存在すれば、それが束縛状態に対応している。($R(k)$ の極と零点は常に実軸の両側に対になって現れるため、$k = ib$ の極と $k = -ib$ の零点は常に同時に存在する。)

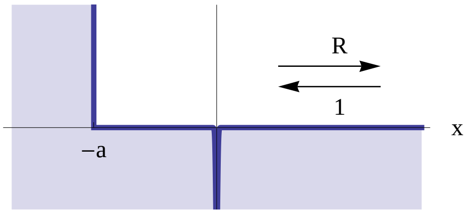

図 47: 束縛状態と準安定状態を持つポテンシャルの簡単な例

簡単な例として、ポテンシャルが

$$U(x) = +\infty \quad (x < -a), \quad U(x) = Z\delta(x) \quad (-a < x) \tag{464}$$

と与えられる場合を考えてみよう。Z が負で十分大きければ、δ 関数型ポテンシャルに付随した束縛状態が一つ存在するはずである。このとき、$R(k)$ は簡単に計算できて、次のように得られる。

$$R(k) = \frac{qe^{-iak} + (-ik - q)e^{iak}}{qe^{iak} + (ik - q)e^{-iak}}, \quad q = \frac{mZ}{\hbar^2} \tag{465}$$

これを $q < 0$ の場合について複素 k 平面上にプロットすると、図 48 のようになる。虚軸上を見てみると、正の部分に極が、負の部分に零点が対称にあることが

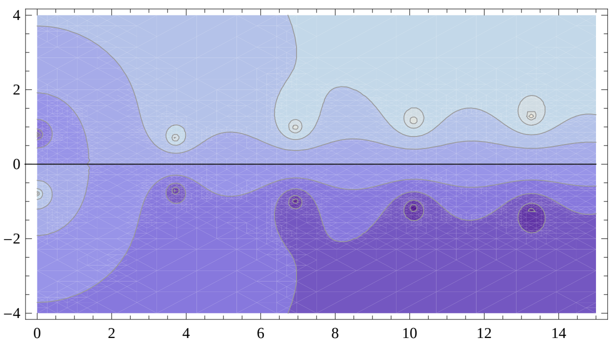

図 48: k 平面上の $R(k)$。色の濃いところは $|R(k)|$ の大きいところ、色の薄いところは $|R(k)|$ の小さいところである。

わかる。これが束縛状態を表わしている。それ以外にも、実軸の両側に極や零点が多数存在しているが、これらは準安定状態を与えている。（ポテンシャルが負であっても反射は起こるので、$-a < x < 0$ の領域に閉じ込められた粒子による準安定状態が生じる。）

11　表示

11.1　状態ベクトル

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、異なる表示の間の関係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 $n=1,2,3,\ldots$ によってラベルすることができるとする。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。

$$\int \psi_m^*(x)\psi_n(x)dx = \delta_{m,n}. \tag{466}$$

完全性より、任意の波動関数は

$$\psi(x) = \sum_n c_n\psi_n(x), \quad c_n \in \mathbf{C} \tag{467}$$

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

$$c_n = \int \psi_n^*(x)\psi(x)dx \tag{468}$$

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

$$c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{469}$$

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 $\widehat{A}$ 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**ブラケット表示**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。

$$c \to |\psi_c\rangle \text{ or } |c\rangle, \quad c^\dagger \to \langle\psi_c| \text{ or } \langle c|. \tag{470}$$

ここでは $|\cdots\rangle$ 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

$$\langle\psi_c|\psi_d\rangle = \int \psi_c(x)^*\psi_d(x)dx \tag{471}$$

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

$$\begin{aligned}\langle\psi_c|\psi_d\rangle &= \sum_{m,n}\int (c_m\psi_m(x))^*(d_n\psi_n(x))dx \\ &= \sum_{m,n} c_m^* d_n \int \psi_m(x)^*\psi_n(x)dx \\ &= \sum_{m,n} c_m^* d_n \delta_{m,n} \\ &= \sum_n c_n^* d_n \\ &= c^\dagger d.\end{aligned} \tag{472}$$

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 (466) をブラケット表示すると、

$$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n} \tag{473}$$

となる。また、ある状態ベクトル $|c\rangle$ の成分は

$$c_n = \langle n|c\rangle \tag{474}$$

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

$$|c\rangle = \sum_n c_n|n\rangle \tag{475}$$

と表される。(474) と (475) を組み合わせれば

$$|c\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|c\rangle \tag{476}$$

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、

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = \widehat{\mathbf{1}} \tag{477}$$

が結論される。ただし $\widehat{\mathbf{1}}$ は恒等演算子である。関係式 (477) は以下で何度も用いられる重要な式である。

11.2　演算子の行列表示

演算子 $\widehat{X}$ が状態 $|c\rangle$ を状態 $|d\rangle$ に変化させたとしよう。つまり

$$|d\rangle = \widehat{X}|c\rangle \tag{478}$$

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、(477) を用いて変形すると、

$$\langle n|d\rangle = \langle n|\widehat{X}|c\rangle = \langle n|\widehat{X}\widehat{\mathbf{1}}|c\rangle = \sum_m \langle n|\widehat{X}|m\rangle\langle m|c\rangle \tag{479}$$

が得られる。$c_n = \langle n|c\rangle$、$d_n = \langle n|d\rangle$ であるから、

$$d_n = \sum_m X_{nm}c_m \tag{480}$$

が得られる。ただし

$$X_{nm} = \langle n|\widehat{X}|m\rangle \tag{481}$$

を定義した。X_{nm} を成分とする行列を

$$X = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & \cdots \\ X_{21} & \cdots & \\ \vdots & & \end{pmatrix} \tag{482}$$

とすれば、(480) は行列の式として

$$d = Xc \tag{483}$$

と表すことができる。これは形式的に (478) 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 (481) 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 $\widehat{X}$ 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 $\widehat{A}$ の固有状態をとった場合には、行列 X は $\widehat{X}$ の A-表示における行列表示、あるいは単に $\widehat{X}$ の A-表示という。

演算子 $\widehat{X}$ 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 $\widehat{X}$ 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 $1, 2, \ldots$ 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 $\widehat{A}$ 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。

$$\widehat{A}|a\rangle = a|a\rangle \tag{484}$$

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。

$$\langle a|a'\rangle = \delta(a - a'). \tag{485}$$

これは離散スペクトルの場合の (473) に対応する。このとき次の関係式が成り立つ。

$$\int da|a\rangle\langle a| = \widehat{\mathbf{1}}. \tag{486}$$

これは離散スペクトルの場合の (477) に対応する。ある状態 $|\psi\rangle$ の $|a\rangle$ による展開は、(486) を $|\psi\rangle$ に作用させることで得られる。

$$|\psi\rangle = \int da|a\rangle\langle a|\psi\rangle. \tag{487}$$

$|a\rangle$ 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。

$$\psi(a) \equiv \langle a|\psi\rangle. \tag{488}$$

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 $\widehat{A}$ として位置演算子 $\widehat{x}$ 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 $\widehat{X}$ の行列表示を行えば、その成分は次のように与えられる。

$$X_{aa'} = \langle a|\widehat{X}|a'\rangle. \tag{489}$$

状態 $|\psi\rangle$ に演算子 $\widehat{X}$ を作用させて得られる状態を $|\phi\rangle$ とするとき、つまり $|\phi\rangle = \widehat{X}|\psi\rangle$ である場合、成分の間の関係式は次のように表される。

$$\phi(a) = \int da' X_{aa'}\psi(a'). \tag{490}$$

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。

11.3　ユニタリー変換

二つのエルミート演算子 $\widehat{A}$ と $\widehat{B}$ 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。$\widehat{A}$ の固有状態を $|a\rangle$、$\widehat{B}$ 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。

$$\psi^{(A)} = \begin{pmatrix} \langle a_1|\psi\rangle \\ \langle a_2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \psi^{(B)} = \begin{pmatrix} \langle b_1|\psi\rangle \\ \langle b_2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{491}$$

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間の関係は次のように与えることができる。

$$\langle b|\psi\rangle = \sum_a \langle b|a\rangle\langle a|\psi\rangle \tag{492}$$

$\sum_a$ は全ての固有値 $a_1, a_2, \ldots$ に対しての和を表わす。ここで、

$$U_{ba} = \langle b|a\rangle \tag{493}$$

を成分とする行列 U を定義しよう。

$$U = \begin{pmatrix} U_{b_1a_1} & U_{b_1a_2} & \cdots \\ U_{b_2a_1} & \cdots & \\ \vdots & & \end{pmatrix}. \tag{494}$$

この行列を用いれば、関係式 (492) は (491) 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。

$$\psi^{(B)} = U\psi^{(A)} \tag{495}$$

また、逆変換は、

$$V_{ab} = \langle a|b\rangle \tag{496}$$

を成分とする行列 V を用いて

$$\psi^{(A)} = V\psi^{(B)} \tag{497}$$

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

$$UV = VU = 1 \tag{498}$$

が成り立つ。また、二つの行列の成分 (493) と (496) 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。

$$U^\dagger = V. \tag{499}$$

(498) と (499) 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

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1 \tag{500}$$

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 $\widehat{X}$ の行列要素の関係は

$$X_{bb'} = \langle b|\widehat{X}|b'\rangle = \sum_{a,a'}\langle b|a\rangle\langle a|\widehat{X}|a'\rangle\langle a'|b'\rangle = \sum_{a,a'} U_{ba}X_{aa'}V_{a'b'} \tag{501}$$

と与えられる。従って、$\widehat{X}$ 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、$\widehat{X}$ 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。

$$X^{(B)} = UX^{(A)}U^{-1} \tag{502}$$

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 $UX^{(A)}\psi^{(A)}$ 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。