

Introductory Quantum Mechanics(2006)

山田 満

平成 19 年 4 月 26 日

目 次

3	自由粒子の波動関数	1
3.1	平面波と位相速度	1
3.2	波束と群速度	1
3.3	自由粒子の Schroedinger 方程式	3
3.4	波動関数のノルムと規格化	3
3.5	波動関数の確率解釈	5
3.6	1 次元の例題	6
3.7	波束中心の運動	8
3.8	波束のひろがり	9
4	Potential 力による運動	10
4.1	波動関数と Schroedinger 方程式	10
4.2	運動量表示の波動関数	12
4.3	波動関数の内積とノルム	13
4.4	確率の保存と Hamiltonian の Hermite 性	14
4.5	期待値と波束中心の運動	15
4.6	自由度 f の力学系：多粒子の系への拡張	16
5	定常状態	16
5.1	定常状態	16
5.2	1 次元のポテンシャル問題における定常状態	17
5.3	ポテンシャルの不連続点における波動関数のふるまい	18
5.4	箱の中の自由粒子	19
5.4.1	2 次元の例題	20
5.4.2	3 次元の例題	20
5.5	周期的境界条件	21
5.5.1	1 次元の例題	21

5.5.2	3次元の例題	21
6	定常状態 (つづき)	21
6.1	有限の深さの井戸型ポテンシャルの中の束縛状態	21
6.1.1	負のエネルギー固有値	21
6.1.2	偶関数の $u(x)$	22
6.1.3	奇関数の $u(x)$	23
6.1.4	固有状態の数	24
6.1.5	波動関数のようす	25
6.2	ポテンシャルの段差による反射と透過	27
6.3	potential 障壁による反射と透過、トンネル効果	30
6.3.1	反射係数と透過係数	30
6.4	振動定理	32
7	調和振動子	32
7.1	エネルギー固有値	32
7.2	昇降演算子および固有関数	34
7.3	Hermite の多項式	35
7.4	【調和振動子の問題】	36
8	波動関数の作る集合	37
8.1	ノルムと内積：Hilbert 空間	37
8.1.1	3次元ベクトル空間の復習	37
8.1.2	規格化可能な (波動) 関数の全体	38
8.1.3	内積と Schwartz の不等式	38
8.1.4	Hilbert 空間の例	40
8.1.5	線型部分空間	41
8.2	完全直交系 (C.O.N.S)	43
8.2.1	Schmidt の直交化法	43
8.2.2	規格直交系と完全規格直交系	43
8.2.3	完全規格直交系の例	44
8.3	Dirac の記法	46
9	力学量と Observable	47
9.1	量子力学における力学量	47
9.2	線形作用素	47
9.3	直交系による力学量の表示	49
9.4	線形作用素の Hermite 共役	50
9.5	Hermite 作用素の固有値と固有関数	51
9.6	観測可能量 (observable)	53

9.7	observable の観測	54
9.8	observable の期待値	55
9.9	行列表示の例：調和振動子	56
10	observable のスペクトル	57
10.1	連続固有値	57
10.1.1	関数の極限としてのデルタ関数	57
10.1.2	位置演算子の固有値問題：波動関数の意味	60
10.1.3	例：デルタ関数の微分と積分	62
10.1.4	運動量演算子の固有値問題	64
10.2	混合的スペクトルをもつ observable の観測	66
10.2.1	有限の深さの井戸型ポテンシャル： $E > 0$ の場合	67
10.2.2	量子力学の一般形式	67
10.3	可換な observable	67
10.3.1	周期的境界条件を課したときの運動量の固有値問題	67
10.3.2	可換な observable の同時観測	69
10.4	不確定性関係：非可換な Observable の観測	71
10.4.1	observable の関数	73
10.5	運動量表示の量子力学	74
10.5.1	一様な力を受ける粒子	74
10.5.2	調和振動子	75

3 自由粒子の波動関数

この節では力が働かない 1 つの質点の量子力学的記述をのべる。古典力学ではこの系の Hamilton 関数は

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

であった。

3.1 平面波と位相速度

決まった運動量 $\boldsymbol{p}$ をもつ 1 つの質点の状態が次のような**波動関数**によって記述されるものとしよう。

$$\psi(\boldsymbol{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{x} - E(\boldsymbol{p})t)} \quad (2)$$

$$E(\boldsymbol{p}) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \quad (3)$$

ここで、

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad (4)$$

$$= 1.05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \quad (5)$$

は、有理化された Planck 定数である。上の関数に $\boldsymbol{x}, t$ に依存しない複素定数のかけた波動関数もまったく同じ状態をあらわすものとする。

例題：この平面波の位相速度を求めよ。(答え： $v_p = \frac{p}{2m}$)

3.2 波束と群速度

数学的準備：Fourier 変換

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |f(x)|^2 < \infty \quad (6)$$

となる複素数値関数 $f(x)$ について、

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (7)$$

を f の Fourier 変換と呼ぶ。このとき Fourier 逆変換の公式

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk \quad (8)$$

がなりたつ。また内積の不変性

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)^* g(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k)^* \tilde{g}(k) dk \quad (9)$$

がなりたつ。

量子力学では自由粒子がきまった運動量をもっているとは限らない。最も一般的な自由粒子の状態を表す波動関数は前述の決まった運動量をもった波動関数（平面波）を重ねあわせたものになる。

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \quad A(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\mathbf{x} - E(\mathbf{p})t)} \quad (10)$$

Fourier 変換の理論によれば、 $\psi(\mathbf{x}, t)$ の Fourier 変換は

$$A(\mathbf{p}) e^{-\frac{i}{\hbar} E(\mathbf{p})t} = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \quad \psi(\mathbf{x}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \quad (11)$$

となる。

波動論によればこの形の波動関数のなかには $|\psi(\mathbf{x}, t)|$ が $\mathbf{x}$ のある値の付近に局在し $|A(\mathbf{p})|$ が $\mathbf{p}$ のある値の付近に局在するようなものが存在する。

このような性質を持つ波動関数は古典力学での自由粒子に最も近い状態を表すもので、**波束 (wave packet)** と呼ばれる。

例題：波束の群速度を求めよ。（答え： $\mathbf{v}_g = \mathbf{p}/m$ ）

3.3 自由粒子の Schrodinger 方程式

容易に確かめられるように自由粒子の波動関数は次の 1 階偏微分方程式を満たす。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{x}, t) \quad (12)$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (13)$$

これは自由粒子の Schrodinger 方程式と呼ばれる。この右辺に現れる演算子

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \quad (14)$$

は Hamiltonian から

$$\mathbf{p} \longrightarrow -i\hbar \nabla \quad (15)$$

の置き換えによってえられるので自由粒子にたいする Hamilton 演算子と呼ばれる。すなわち自由粒子の Schrodinger 方程式は次のように書かれる。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = H(\mathbf{x}, -i\hbar \nabla) \psi(\mathbf{x}, t). \quad (16)$$

3.4 波動関数のノルムと規格化

波動関数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ の絶対値の 2 乗を全空間で積分したものの平方根をその波動関数の **ノルム**と呼んで $\|\psi\|$ と書く。即ち

$$\|\psi\| = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz |\psi(\mathbf{x}, t)|^2}. \quad (17)$$

いま

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}, t)^* \psi(\mathbf{x}, t) \quad (18)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \Im \{ \psi(\mathbf{x}, t)^* \nabla \psi(\mathbf{x}, t) \} \quad (19)$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m} \{ \psi(\mathbf{x}, t)^* \nabla \psi(\mathbf{x}, t) - \nabla \psi(\mathbf{x}, t)^* \cdot \psi(\mathbf{x}, t) \} \quad (20)$$

とかこう。このとき Schrodinger 方程式のおかげで、次の連続の式がなりたつ。

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0 \quad (21)$$

さて波動関数が Schrodinger 方程式に従うために、ある時刻でノルムが有限ならば、そのノルムは時間によらなくなることが次のようにしてわかる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \|\psi\|^2 = - \int dV \operatorname{div} \mathbf{j} \quad (22)$$

$$= - \int dS \mathbf{j} \quad (23)$$

$$= 0 \quad (24)$$

ここで波動関数が無限遠で十分早く減衰することを使った。

$\|\psi\| < \infty$ ならば、そのノルムは $A(\mathbf{p})$ によっても表すことができる。

$$\|\psi\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dp_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} dp_z |A(\mathbf{p})|^2. \quad (25)$$

この表現を用いればノルムが時間に依存しないことが明白である。

c を複素数とすると、 $\psi(\mathbf{x}, t)$ と $c\psi(\mathbf{x}, t)$ とは同一の状態を表す。従って $\|\psi\| < \infty$ のときもし $\|\psi\| \neq 1$ ならば

$$\psi'(\mathbf{x}, t) = \frac{e^{i\theta}}{\|\psi\|} \psi(\mathbf{x}, t) \quad (26)$$

とすれば、 $\|\psi'\| = 1$ とできる。このように、 $\psi(\mathbf{x}, t)$ からノルムが1でそれと同じ状態を表す波動関数 $\psi'(\mathbf{x}, t)$ をもとめてつづきを**規格化**という。このとき位相因子 $e^{i\theta}$ までは決まらない。 $\|\psi\| = 1$ を満たす波動関数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ は規格化されているという。

$\|\psi\| < \infty$ を満たす波動関数は規格化できるのにたいし、 $\|\psi\| = \infty$ となるような波動関数は規格化できない。平面波で表される波動関数は後者の例である。

3.5 波動関数の確率解釈

$\|\psi\| < \infty$ のとき波動関数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ に次のような物理的意味をもたせることができる。時刻 t において系の状態が波動関数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ で表されるとき、粒子の位置座標を観測して得られる値が $\mathbf{x}$ のまわりの微少体積 dV に入る確率は

$$\frac{\psi(\mathbf{x}, t)^* \psi(\mathbf{x}, t)}{\|\psi\|^2} dV \quad (27)$$

に等しい。すなわち座標の測定値の確率分布関数は

$$W(\mathbf{x}, t) = \frac{\psi(\mathbf{x}, t)^* \psi(\mathbf{x}, t)}{\|\psi\|^2} \quad (28)$$

で与えられる。

$W(\mathbf{x}, t)$ が確率分布関数の意味を持つための条件 {(1) 非負であること。(2) 積分すると1になること。} も満たされている：

$$W(\mathbf{x}, t) \geq 0 \quad (29)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz W(\mathbf{x}, t) = 1 \quad (30)$$

$A(\mathbf{p})$ にも次のような確率解釈を与えることにする。波動関数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ で表される状態 ψ において、運動量を測定して得られる値が、 $\mathbf{p}$ のまわりの微少区間 $d\mathbf{p}$ 内にある確率は

$$\frac{A(\mathbf{p})^* A(\mathbf{p})}{\|\psi\|^2} d\mathbf{p} \quad (31)$$

である。

すなわち運動量の測定値の確率分布関数は

$$W_{\mathbf{p}} = \frac{A(\mathbf{p})^* A(\mathbf{p})}{\|\psi\|^2} \quad (32)$$

で与えられる。

$W_{\mathbf{p}}$ が確率分布関数の意味を持つための条件 {(1) 非負であること。(2) 積分すると1になること。} も満たされている：

$$W_{\mathbf{p}} \geq 0 \quad (33)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} dp_z W_{\mathbf{p}} = 1 \quad (34)$$

さらに $W_{\mathbf{p}}$ は時間によらない。

3.6 1次元の例題

1. 1次元の自由粒子を表す波動関数は

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp A(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - E(p)t)} \quad (35)$$

$$E(p) = \frac{p^2}{2m} \quad (36)$$

となる。このとき $A(p)$ が $\psi(x, 0)$ の Fourier 変換である。

ノルムはつぎのいずれの積分からも求まる。

$$\|\psi\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, t)|^2 \quad (37)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x, 0)|^2 \quad (38)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp |A(p)|^2. \quad (39)$$

2. 自由粒子の系の $t = 0$ における状態が、次のような階段関数からなる規格化された波動関数で表されるとする。

$$\psi(x, 0) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\sigma}} & \text{for } -\sigma < x < \sigma \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (40)$$

このとき

$$A(p) = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi\sigma}} \cdot \frac{1}{p} \sin \frac{\sigma p}{\hbar} \quad (41)$$

となることを示せ。

3. 積分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} dx = \sqrt{2\pi} \sigma \quad (42)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x+iy)^2} dx = \sqrt{2\pi} \sigma \quad (\text{ここで } y \text{ は実数}) \quad (43)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cos bx e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} dx = \sqrt{2\pi} \sigma e^{-\frac{1}{2}b^2\sigma^2} \quad (44)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\sin x}{x}\right)^2 dx \quad (45)$$

$$= \pi \quad (46)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}} dx = \sigma^{2n+1} \Gamma(n + \frac{1}{2}) \quad (\text{ここで } n = 0, 1, 2, \dots) \quad (47)$$

4. Gauss 型の規格化された波動関数

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{1}{\sqrt{\sigma}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \quad (48)$$

について、

$$A(p) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \sqrt{\frac{\sigma}{\hbar}} e^{-\frac{\sigma^2 p^2}{2\hbar^2}} \quad (49)$$

となることを示せ。

5. $\psi(x, 0)$ の Fourier 変換が $A(p)$ であるとき、

$$\psi(x, 0) e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}}$$

の Fourier 変換は $A(p - p_0)$ であることを示せ。

6. $\psi(x, 0)$ の Fourier 変換が $A(p)$ であるとき、 $\psi(x - x_0, 0)$ の Fourier 変換が

$$A(p) e^{-\frac{ipx_0}{\hbar}}$$

となることを示せ。

7. 位置と運動量がそれぞれ x_0, p_0 で与えられる波束の波動関数の例を作れ。

例 1)

$$\psi(x, 0) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\sigma}} e^{\frac{ip_0 x}{\hbar}} & \text{for } x_0 - \sigma < x < x_0 + \sigma \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (50)$$

このとき

$$A(p) = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi\sigma}} \cdot \frac{1}{p - p_0} \cdot \sin\left\{\frac{\sigma}{\hbar}(p - p_0)\right\} \quad (51)$$

例 2) Gauss 型の規格化された波動関数

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{1}{\sqrt{\sigma}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-x_0)^2 + \frac{ip_0 x}{\hbar}} \quad (52)$$

については、

$$A(p) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \sqrt{\frac{\sigma}{\hbar}} e^{-\frac{\sigma^2}{2\hbar^2}(p-p_0)^2} \quad (53)$$

となる。

8. $||\psi|| = 1$ のとき、座標の平均値 (期待値) を

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x, t)|^2 dx \quad (54)$$

平均値からの偏差を

$$\Delta x = \sqrt{\langle x - \langle x \rangle \rangle^2} \quad (55)$$

$$= \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad (56)$$

で計算することができる。

同様に運動量表示の波動関数 $A(p)$ から運動量の平均値

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p |A(p)|^2 dp \quad (57)$$

および偏差を

$$\Delta p = \sqrt{\langle p - \langle p \rangle \rangle^2} \quad (58)$$

$$= \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \quad (59)$$

として計算することができる。

先にあげたガウス型の波動関数について、

$$\Delta x = \frac{\sigma}{\sqrt{2}} \quad (60)$$

$$\Delta p = \frac{\hbar}{\sqrt{2} \sigma} \quad (61)$$

となることを確かめよ。

また先の階段関数状の例では

$$\Delta x = \frac{\sigma}{\sqrt{3}} \quad (62)$$

$$\Delta p = \infty \quad (63)$$

となることを確かめよ。

3.7 波束中心の運動

3.8 波束のひろがり

このように自由粒子の波束は古典力学から期待されるように運動することがわかったが、波束の形は一般に時間とともに変形する。このことを1次元のガウス型の波動関数について見てみよう。この場合

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \frac{1}{\sqrt{\sigma}} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \quad (64)$$

および

$$A(p) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \sqrt{\frac{\sigma}{\hbar}} e^{-\frac{\sigma^2 p^2}{2\hbar^2}} \quad (65)$$

であったから、その後の時刻 t においては

$$\psi(x, t) = \frac{\sqrt{\sigma}}{\hbar \sqrt{2\pi} \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\sigma^2 p^2}{2\hbar^2} - \frac{ip^2 t}{2m\hbar} + \frac{ipx}{\hbar}} dp \quad (66)$$

となる。途中の計算はユークリッド時間 $t \rightarrow -i\tau$ で行おう。

$$\psi(x, -i\tau) = \frac{\sqrt{\sigma}}{\hbar \sqrt{2\pi} \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\frac{\sigma^2}{2\hbar^2} + \frac{\tau}{2m\hbar})p^2 + \frac{ipx}{\hbar}} dp \quad (67)$$

$$= \frac{\sqrt{\sigma}}{\hbar \sqrt{2\pi} \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{p^2}{2\xi^2} + \frac{ipx}{\hbar}} dp \quad (68)$$

ここで

$$\xi^2 = \frac{m\hbar^2}{m\sigma^2 + \hbar\tau} \quad (69)$$

積分を実行して

$$\psi(x, -i\tau) = \frac{\sqrt{\sigma}}{\hbar \sqrt[4]{\pi}} \xi e^{-\frac{\xi^2}{2\hbar^2} x^2} \quad (70)$$

ここでミンコフスキー時間に戻そう。 $(\tau \rightarrow it)$ このとき ξ の表式が変わる。

$$\xi = \frac{\hbar}{\sigma_t} \sqrt{1 - \frac{i\hbar t}{m\sigma^2}} \quad (71)$$

$$\sigma_t = \sigma \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{m\sigma^2}\right)^2} \quad (72)$$

したがって、

$$\psi(x, t) = \frac{\sqrt{\sigma}}{\sqrt[4]{\pi}\sigma_t} \sqrt{1 - \frac{i\hbar t}{m\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma_t^2}(1 - \frac{i\hbar t}{m\sigma^2})x^2} \quad (73)$$

とくにこの絶対値の2乗をとると最初 ($t = 0$) のものと比べやすい。

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}\sigma_t} e^{-(\frac{x}{\sigma_t})^2} \quad (74)$$

これは最初のもの σ を σ_t で置き換えたものであり、波束が時間とともに広がっている事を示している。

これらは全て厳密な結果である。

例題 1次元の自由粒子について

$$A(p) = F(p) \exp \left[-\frac{p^2}{2\xi^2} \right] \quad (75)$$

とするとき $\psi(x, t)$ を計算せよ。 $F(p)$ は解析関数とする。

4 Potential 力による運動

この節では1つの質点が potential 力

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = -\text{grad}V(\mathbf{x}) \quad (76)$$

を受けて運動する系の量子力学的記述をのべる。古典力学ではこの系の Hamiltonian は

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \quad (77)$$

であった。

4.1 波動関数と Schroedinger 方程式

波動関数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ の時間発展は次の Schroedinger 方程式によって決定される。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{x}, t). \quad (78)$$

ここで $\hat{H}$ は波動関数に作用する線型演算子で、

$$\hat{H} = H(\mathbf{x}, -i\hbar \nabla) \quad (79)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \quad (80)$$

である。すなわち $\hat{H}$ は古典力学の Hamilton 関数 $H(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ から次の置き換えによって得られるものとする。

$$\mathbf{p} \longrightarrow -i\hbar\nabla \quad (81)$$

$$\mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{x} \quad (82)$$

前節で波動関数のノルム $\|\psi\|$ を定義した。即ち

$$\|\psi\| = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz |\psi(\mathbf{x}, t)|^2}. \quad (83)$$

$\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ も前節と同様としよう。

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}, t)^* \psi(\mathbf{x}, t) \quad (84)$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \Im\{\psi(\mathbf{x}, t)^* \nabla\} \quad (85)$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m} \{\psi(\mathbf{x}, t)^* \nabla \psi(\mathbf{x}, t) - \nabla \psi(\mathbf{x}, t)^* \cdot \psi(\mathbf{x}, t)\} \quad (86)$$

このとき波動関数が Schroedinger 方程式に従うことをつかって連続の式

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0 \quad (87)$$

が前節と同様に証明できる。

従ってある時刻で $\|\psi\| < \infty$ ならば、そのノルムが時間によらなくなることが次のようにしてわかる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \|\psi\|^2 = - \int dV \operatorname{div} \mathbf{j} \quad (88)$$

$$= - \int dS \mathbf{j} \quad (89)$$

$$= 0 \quad (90)$$

ここで $\|\psi\| < \infty$ であるために波動関数が遠方で十分早く減衰することを使った。

こうして $\|\psi\| < \infty$ のとき波動関数を次のように解釈することが可能となる。時刻 t において系の状態が波動関数 ψ で表されるとき、粒子の位置座標を観測して得られる値が $\mathbf{x}$ のまわりの微少体積 dV に入る確率は

$$\frac{\psi(\mathbf{x}, t)^* \psi(\mathbf{x}, t)}{\|\psi\|^2} dV \quad (91)$$

に等しい。すなわち座標の測定値の確率分布関数は

$$W(\mathbf{x}, t) = \frac{\psi(\mathbf{x}, t)^* \psi(\mathbf{x}, t)}{\|\psi\|^2} \quad (92)$$

で与えられる。

4.2 運動量表示の波動関数

Fourier 変換の理論によれば、 $\psi(\mathbf{x}, t)$ の Fourier 変換は

$$\phi(\mathbf{p}, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \quad \psi(\mathbf{x}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \quad (93)$$

となる。

このとき $\phi(\mathbf{p}, t)$ の Fourier 逆変換は $\psi(\mathbf{x}, t)$ になる。すなわち

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int_{-\infty}^{\infty} dp_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \quad \phi(\mathbf{p}, t) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \quad (94)$$

$\|\psi\| < \infty$ ならば、そのノルムは $\phi(\mathbf{p}, t)$ によっても表すことができる。

$$\|\psi\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \quad (95)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} dp_z |\phi(\mathbf{p}, t)|^2. \quad (96)$$

(デルタ関数を使用せずに上式を証明するには Fourier 変換を 2 回繰り返すことが必要である.)

$\phi(\mathbf{p}, t)$ については次のような確率解釈をおこなう。

規格化された波動関数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ で表される状態 ψ において、運動量を測定して得られる値が、 $\mathbf{p}$ のまわりの微少区間 $d\mathbf{p}$ 内にある確率は

$$\frac{\phi(\mathbf{x}, t)^* \phi(\mathbf{x}, t)}{\|\psi\|^2} d\mathbf{p} \quad (97)$$

である。したがって運動量の測定値の確率分布関数は

$$W_{\mathbf{p}}(t) = \frac{\phi(\mathbf{x}, t)^* \phi(\mathbf{x}, t)}{\|\psi\|^2} \quad (98)$$

となる。この関数が確率分布関数として必要な条件を満たしていることは明らかである。前節の自由粒子のときと異なり、 $W_{\mathbf{p}}(t)$ が時間的に変化することに注意しよう。

4.3 波動関数の内積とノルム

$\psi_1, \psi_2 \in L_2(R^3)$ のとき ψ_1 と ψ_2 の内積を

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int \psi_1(\mathbf{x})^* \psi_2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (99)$$

で定義しよう。これは複素数になる。このとき ψ のノルムは

$$\|\psi\| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (100)$$

と書ける。

内積は次のような性質をもつ。

$$\langle \psi | \psi \rangle \geq 0 \quad (101)$$

$$\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle^* \quad (102)$$

$$\langle c_1 \psi_1 | c_2 \psi_2 \rangle = c_1^* c_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \quad (103)$$

$$\langle \psi_1 + \psi_2 | \psi \rangle = \langle \psi_1 | \psi \rangle + \langle \psi_2 | \psi \rangle \quad (104)$$

$$\langle \psi | \psi_1 + \psi_2 \rangle = \langle \psi | \psi_1 \rangle + \langle \psi | \psi_2 \rangle \quad (105)$$

$$(106)$$

4.4 確率の保存と Hamiltonian の Hermite 性

波動関数が Schroedinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\boldsymbol{x}, t) = \hat{H} \psi(\boldsymbol{x}, t). \quad (107)$$

にしたがって時間発展するときノルムが不変になり確率解釈が可能となった。

この節では $\hat{H}$ のどの性質が確率保存を可能にしたかをしらべ、線形演算子の基本的性質とそのエルミート性について説明する。

4.5 期待値と波束中心の運動

波束中心の座標が古典力学の Hamilton 方程式を満たすことをここで、3 次元で行うためには、2 時間ほど時間を使う必要がある。1 次元でおこなうこと。

4.6 自由度 f の力学系：多粒子の系への拡張

これまでのべてきたことを異種粒子の N 粒子系にも当てはまるように拡張しておこう。

5 定常状態

5.1 定常状態

Hamiltonian が時間を含まないとき Schroedinger 方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt}\psi = \hat{H}\psi \quad (108)$$

を変数分離形

$$\psi(\mathbf{x}, t) = a(t)u(\mathbf{x}) \quad (109)$$

で求めることができる。
このとき

$$i\hbar \frac{\dot{a}(t)}{a(t)} = \frac{\hat{H}u(\mathbf{x})}{u(\mathbf{x})} \quad (110)$$

が成り立つがこの式の両辺は $\mathbf{x}$ にも t にも依らない定数だからこれを E とおくと、

$$a(t) = \exp(-i\frac{Et}{\hbar}) \quad (111)$$

および

$$\hat{H}u(\mathbf{x}) = Eu(\mathbf{x}) \quad (112)$$

が得られる。後者は Hamilton 演算子の固有値方程式である。この方程式のことを**時間を含まない Schroedinger 方程式**という。Hamilton 演算の固有値と固有状態がわかればもとの時間を含む Schroedinger 方程式がつぎのように 解けたことになる。

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}}u(\mathbf{x}) \quad (113)$$

この解で表される状態は時間がたっても同じ状態に留まっているので**定常状態**という。

実際質点の座標 $\mathbf{x}$ における存在確率は

$$|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = |u(\mathbf{x})|^2 \quad (114)$$

で表され、時間に依らない。

Hamiltonian の固有値方程式を

$$\hat{H}u_n(\mathbf{x}) = E_n u_n(\mathbf{x}) \quad (115)$$

$$n = 0, 1, 2, \dots \quad (116)$$

$$E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots \quad (117)$$

とすれば時間を含む schroedinger 方程式の一般の解は

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \exp(-i \frac{E_n t}{\hbar}) u_n(\mathbf{x}) \quad (118)$$

となり、各項の位相因子だけが時間変化を担っている。無限個の定数 c_n を正しく選ぶことにより、どのような波束も表される。¹

5.2 1次元のポテンシャル問題における定常状態

$x = \pm\infty$ でポテンシャル $V(x) = \infty$ となるときのエネルギー固有値が離散になる様子は次のようにして理解することができる。Schroedinger 方程式を

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \{V(x) - E\} u(x) \quad (119)$$

$$\frac{u''(x)}{u(x)} = \frac{2m}{\hbar^2} \{V(x) - E\} \quad (120)$$

のように書きかえてみよう。²波動関数 $u(x)$ は実数にとることができる。その曲がり方を次の三つの場合に分けて考えてみよう。

1. $E > V(x)$

この範囲では $u(x)$ と $u^*p(x)$ とが異符号なので、波動関数 $u(x)$ は振動し、一般にいくつかの零点をもつ。

2. $E < V(x)$

この範囲では $u(x)$ と $u^*p(x)$ とが同符号なので、波動関数 $u(x)$ は指数関数状に減衰または増大する。零点の数は多くても1つである。

¹任意の波動関数はハミルトニアン固有関数で展開できる。この事は後の節で厳密に議論される。

²このかたちの微分方程式すなわち

$$u'' = v(x)u$$

を一般的にとくことができるか？

$$3. E = V(x)$$

この点では波動関数 $u(x)$ のグラフは変曲点をもつ。

$u(x) = 0$ となる点を波動関数の**節** (node) という。そこでは $V(x) \neq E$ でも $u'' = 0$ となり、 u は変曲点をもつ。

定常状態の波動関数の曲がりかた
一般に波動関数の節の数 n が

$$n = 0, 1, 2, \dots \quad (121)$$

とふえるにしがって対応するエネルギー固有値 E_n の値も増えてゆく。

$$E_0 < E_1 < E_2 < \dots \quad (122)$$

エネルギー固有値 E_n に属する固有関数の節の数がちょうど n であると考えればよい。³

エネルギーの一番低い状態を**基底状態**、それ以外の状態を**励起状態**と呼ぶ。

5.3 ポテンシャルの不連続点における波動関数のふるまい

ポテンシャルがある点で特異性（不連続性）をもつとき、Schroedinger 方程式は $\frac{d^2 u(x)}{dx^2}$ の特異性と $V(x)u(x)$ の特異性が同程度であることを教えている。さらに u'' の特異性の方が u の特異性よりも強いので、 $V(x)$ の特異性が u'' にそのまま反映されることになる。

いまある点たとえば $x = 0$ において関数 $f(x)$ の n 階導関数が存在して連続であるときその関数は $x = 0$ において C_n 級であると呼ぼう。

C_1 級とは関数とその点で**滑らか**につながっていることをいい、 C_0 級とは関数とその点で**連続**であることをいう。 C_0 級のときは関数を表す曲線はそこで折れ曲がってもよい。

C_0 級の関数の例として

$$f(x) = |x| \quad (123)$$

をとってみると、一度積分をして得られる関数は

$$F(x) = \int_0^x |x| dx \quad (124)$$

$$= \frac{1}{2} \epsilon(x) x^2 \quad (125)$$

³振動定理

だから積分を一度するたびに関数の滑らかさが1段階ずつ増してゆく。微分をするときには、

$$f'(x) = \epsilon(x) \quad (126)$$

$$f''(x) = 2\delta(x) \quad (127)$$

となって、滑らかさが1段階ずつへって行く。

こうして関数の $x = 0$ におけるふるまいをその滑らかさが増す順番に整理してみると、

1. 無限の飛び (段差) をもつ。
2. 有限の飛びをもつ。
3. 連続だが折れ曲がる。
4. 滑らかにつながっている。

となる。

そこで最初に述べたことを用いると、波動関数の各点におけるふるまいはポテンシャル $V(x)$ のそれよりも、2段階滑らかであることがわかる。すなわちある点においてポテンシャルが C_n 級ならば波動関数は C_{n+2} 級になることがわかる。

こうして、ポテンシャル $V(x)$ が無限の飛びをもつ点でも波動関数は連続であり、ポテンシャル $V(x)$ が有限の飛びしかもたない点では波動関数は滑らかになる。

ポテンシャルと波動関数の連続性

5.4 箱の中の自由粒子

直線上を運動する質量 m の粒子が無限に高いポテンシャルの壁によって、 $0 < x < L$ の範囲に閉じ込められているとする。

このポテンシャルは

$$V(x, S) = \begin{cases} -Sx & \infty < x < 0 \\ 0 & 0 < x < L \\ S(x - L) & L < x < \infty \end{cases} \quad (128)$$

の $S \rightarrow \infty$ の極限と考えればよい。

この系のエネルギー固有値と固有状態は

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2 \quad (129)$$

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (130)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots \quad (131)$$

で与えられる。

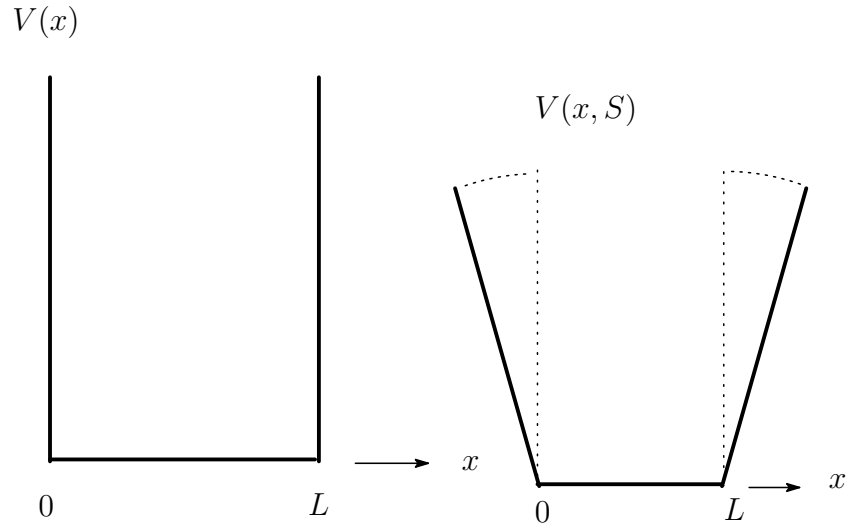


図 1: 無限に高い井戸型ポテンシャル

5.4.1 2次元の例題

無限に高いポテンシャルによって、 $0 < x < L$ 、 $0 < y < L$ の範囲に閉じ込められた質量 m の粒子の場合には、先の 1 次元の波動関数をつかって、

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (n_1^2 + n_2^2) \quad (132)$$

$$u_{n_1 n_2} = \frac{2}{L} \sin \frac{n_1 \pi x}{L} \sin \frac{n_2 \pi y}{L} \quad (133)$$

$$n_1 = 1, 2, 3, \dots \quad (134)$$

$$n_2 = 1, 2, 3, \dots \quad (135)$$

がエネルギー固有値とエネルギー固有状態の完全系をあらわす。

5.4.2 3次元の例題

無限に高いポテンシャルによって、 $0 < x < L$ 、 $0 < y < L$ 、 $0 < z < L$ の範囲に閉じ込められた質量 m の粒子の場合には、

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

$$u_{n_1 n_2 n_3} = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{3}{2}} \sin \frac{n_1 \pi x}{L} \sin \frac{n_2 \pi y}{L} \sin \frac{n_3 \pi z}{L}$$

$$n_1 = 1, 2, 3, \dots$$

$$n_2 = 1, 2, 3, \dots$$

$$n_3 = 1, 2, 3, \dots \quad (136)$$

がエネルギー固有値とエネルギー固有状態の完全系をあらわす。

5.5 周期的境界条件

5.5.1 1次元の例題

例題：滑らかなリング上の質点

5.5.2 3次元の例題

6 定常状態（つづき）

6.1 有限の深さの井戸型ポテンシャルの中の束縛状態

1次元の深さ V_0 幅 L の井戸型ポテンシャルによる負エネルギー解（束縛状態）を求めよう。

$$V(x) = -V_0 \theta\left(\left(\frac{L}{2}\right)^2 - x^2\right) \quad (137)$$

6.1.1 負のエネルギー固有値

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \{V(x) - E\} u(x) \quad (138)$$

$$(139)$$

井戸のなかでは

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E) u(x) \quad (140)$$

$$(141)$$

井戸の外では

$$\frac{d^2 u(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E u(x) \quad (142)$$

$$(143)$$

井戸型 potential 中の負エネルギー状態

そこで k, ℓ を

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E) \quad (144)$$

$$\ell^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(-E) \quad (145)$$

を満たすような正の数とすると

$$k^2 + \ell^2 = \frac{2m}{\hbar^2}V_0 \quad (146)$$

が成り立たなければならない。

いま座標を次のような三つの領域に分け、それぞれの領域で解を求めよう。

1. 領域 I : $-\infty < x < -\frac{L}{2}$

$x \rightarrow -\infty$ で減衰する解は

$$u(x) = Ce^{\ell x} \quad (147)$$

2. 領域 II : $-\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2}$

一般解は

$$u(x) = A \cos kx + B \sin kx \quad (148)$$

3. 領域 III : $\frac{L}{2} < x < \infty$

$x \rightarrow \infty$ で減衰する解は

$$u(x) = De^{-\ell x} \quad (149)$$

potential が $x \rightarrow -x$ の反転にたいして対称だから、固有関数を偶関数と奇関数の場合にわけて求めることができる。

6.1.2 偶関数の $u(x)$

$u(x)$ が偶関数のときは $B = 0, D = C$ とすると、それぞれの領域で波動関数とその導関数は

$$\begin{array}{lll} I; & II; & III; \\ u(x) = & Ce^{\ell x}; & A \cos kx; & Ce^{-\ell x}; \\ u'(x) = & \ell Ce^{\ell x}; & -kA \sin kx; & -\ell Ce^{\ell x}; \end{array} \quad (150)$$

$x = \pm \frac{L}{2}$ でこれらが連続であるという条件を課して

$$A \cos \frac{kL}{2} = C e^{-\frac{\ell L}{2}} \quad (151)$$

$$-kA \sin \frac{kL}{2} = -\ell C e^{-\frac{\ell L}{2}} \quad (152)$$

これより

$$\ell = k \tan \frac{kL}{2} \quad (153)$$

を得る。

6.1.3 奇関数の $u(x)$

$u(x)$ が奇関数のときは $A = 0, D = -C$ とすると、それぞれの領域で波動関数とその導関数は

$$\begin{aligned} & \begin{array}{lll} I; & II; & III; \\ u(x) = & C e^{\ell x}; & B \sin kx; & -C e^{-\ell x}; \\ u'(x) = & \ell C e^{\ell x}; & kB \cos kx; & \ell C e^{\ell x}; \end{array} \end{aligned} \quad (154)$$

$x = \pm \frac{L}{2}$ でこれらが連続であるという条件を課して

$$B \sin \frac{kL}{2} = -C e^{-\frac{\ell L}{2}} \quad (155)$$

$$kB \cos \frac{kL}{2} = \ell C e^{-\frac{\ell L}{2}} \quad (156)$$

これより

$$\ell = -k \cot \frac{kL}{2} \quad (157)$$

を得る。

(k, ℓ) 面のグラフによる解

6.1.4 固有状態の数

(k, ℓ) 面のグラフによって固有値を求めよう。明らかに

$$\sqrt{k^2 + \ell^2} = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \quad (158)$$

がおおきくなるにつれて解 (k, ℓ) の個数が増えてゆく。 n を

$$n \frac{\pi}{L} < \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar} \leq (n+1) \frac{\pi}{L} \quad (159)$$

を満たすような整数とすると、 $n+1$ 個の解の組があり、これらを

$$(k_0, \ell_0), (k_1, \ell_1), \dots, (k_n, \ell_n) \quad (160)$$

とかくと、 $k_j (j = 0, 1, \dots, n)$ は

$$j \frac{\pi}{L} < k_j \leq (j+1) \frac{\pi}{L} \quad (161)$$

をみたす。これから次の結論が得られる。

$n+1$ 個の固有値 $E_0, E_1, E_2, \dots, E_n$ があるとき、

$$n < \frac{L}{\pi \hbar} \sqrt{2mV_0} \leq n+1 \quad (162)$$

が成り立ち、各エネルギー準位を potential の底から測った値 $E_j + V_0$ は次の範囲にある。

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} j^2 < E_j + V_0 < \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (j+1)^2 \quad (163)$$

$$j = 0, 1, 2, \dots \quad (164)$$

エネルギー準位の個数 $n+1$ は $\frac{L}{\pi \hbar} \sqrt{2mV_0}$ 以上の最小の整数である。したがって、 $V_0 L^2$ がいかに小さくとも一つの束縛状態がある。

例題

potential が深くて V_0 が大きいとき下の方のエネルギー準位を potential の底から測った値は箱の中の自由粒子のエネルギー固有値と近似的に一致することを示せ。

解)

$$E_j + V_0 \approx \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (j+1)^2 \quad (165)$$

$$j = 0, 1, 2, \dots \quad (166)$$

6.1.5 波動関数のようす

波動関数のようす

$E = 0$ の固有関数は存在しないことに注意しよう。

例題

1次元のポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{for } x < 0 \\ -V_0 & \text{for } 0 < x < a \\ 0 & \text{for } a < x \end{cases} \quad (167)$$

の場合の負のエネルギー固有値とそれに属する固有状態をもとめよ。

またこのとき負エネルギー固有状態が少なくともひとつ存在する条件を求めよ。

(解)

井戸型ポテンシャルの問題において $L = 2a$ として、 $u(x)$ が奇関数の場合だけ取り上げれば

$$\ell = -k \cot ka \quad (168)$$

$$\ell^2 + k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \quad (169)$$

の解を求めることに帰着するがこれが、少なくとも一つの解を持つためには

$$\ell^2 + k^2 > \left(\frac{\pi}{2a} \right)^2 \quad (170)$$

が必要であることが (k, ℓ) 平面のグラフからわかる。したがって答えは $V_0 a^2 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m}$ 。

例題：片側が無限に高い井戸型ポテンシャルの図

6.2 ポテンシャルの段差による反射と透過

準備

$E = \frac{p^2}{2m}$, $|r| < 1$ として, x 軸の正方向と負方向の平面波の重ねあわせの状態

$$\psi(x, t) = (e^{\frac{ipx}{\hbar}} + re^{-\frac{ipx}{\hbar}})e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (171)$$

が, 1次元の自由粒子の Hamiltonian $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ の固有値 $E = \frac{p^2}{2m}$ に属する固有関数になっているのは明らかである。この状態において確率密度とその流れの密度を計算してみよう。

$$\begin{aligned} \rho &= \psi^* \psi \\ &= (e^{-\frac{ipx}{\hbar}} + r^* e^{\frac{ipx}{\hbar}})(e^{\frac{ipx}{\hbar}} + re^{-\frac{ipx}{\hbar}}) \\ &= (1 + r^* e^{\frac{2ipx}{\hbar}})(1 + re^{-\frac{2ipx}{\hbar}}) \\ &= 1 + |r|^2 + 2\Re(re^{-\frac{2ipx}{\hbar}}) \end{aligned} \quad (172)$$

これは $(1 \pm |r|^2)$ の間でなみうつ定在波を表している。

$$\begin{aligned} j &= \frac{\hbar}{m} \Im(\psi^* \text{grad} \psi) \\ &= \frac{p}{m} (1 - |r|^2) \end{aligned} \quad (173)$$

$\frac{p}{m}$ は波束の群速度を表すから, この関数は密度 1 の正方向への進行波と密度 $|r|^2$ の負方向への進行波の重ねあわせと考えてもよい。 ($|r|^2$ は反射係数と呼ぶべき量である。) $\psi(x, t)$ 自身は規格化できない波動関数であるが確率の保存

$$\frac{d}{dt} \rho + \nabla \cdot j = 0 \quad (174)$$

は成り立っている。

平面波の重ねあわせ

段差のあるポテンシャル

$$V(x) = -V_0 \theta(-x) \quad (175)$$

のなかの正エネルギーの定常状態を考えよう。

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 > 0 \quad (176)$$

$$E + V_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \ell^2 > 0 \quad (177)$$

で定義される正の数 k, ℓ を導入すると

$$\ell^2 - k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \quad (178)$$

が成り立つ。いま座標区間をを次のような二つの領域に分け、それぞれの領域で一般解を求めよう。

1. 領域 I: $-\infty < x < 0$: ここでの一般解は

$$u_I(x) = Ae^{i\ell x} + Be^{-i\ell x} \quad (179)$$

$$(180)$$

2. 領域 II: $0 < x < \infty$: ここでの一般解は

$$u(x)_{II} = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \quad (181)$$

$x = 0$ における境界条件は $u_I(0) = u_{II}(0)$ および $u'_I(0) = u'_{II}(0)$ の二つしかないので、1 次独立な解が二つあることを示している。

$D = 0$ とする解を求めよう。これは x 軸の負の方向より平面波が入射して $x=0$ において反射と透過が起こることに対応している。入射波、反射波、透過波の確率の流れの密度はそれぞれ $\frac{\hbar\ell}{m}|A|^2$, $\frac{\hbar\ell}{m}|B|^2$, $\frac{\hbar k}{m}|C|^2$, である。

入射波、反射波、透過波 上述の境界条件より

$$A + B = C \quad (182)$$

$$i\ell(A - B) = ikC \quad (183)$$

B, C を A で表すと、

$$\frac{B}{A} = \frac{\ell - k}{\ell + k} \quad (184)$$

$$\frac{C}{A} = \frac{2\ell}{\ell + k} \quad (185)$$

が得られる。⁴

反射係数 R , 透過係数 T をそれぞれ

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 \quad (186)$$

$$T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 \frac{k}{\ell} \quad (187)$$

で定義すると、

$$R = \frac{(\ell - k)^2}{(\ell + k)^2} = \left(\frac{\sqrt{E + V_0} - \sqrt{E}}{\sqrt{E + V_0} + \sqrt{E}} \right)^2 \quad (188)$$

$$T = \frac{4\ell k}{(\ell + k)^2} = \dots \quad (189)$$

⁴この結果を $k \leq \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mV_0}$ に解析接続したらどのような結果がえられるだろうか？

となり、確率の保存則

$$R + T = 1 \quad (190)$$

が成り立っている。

反射係数 R と透過係数 T のグラフ。小さい E にたいして $R \approx 1 - 4\sqrt{E/V_0}$ 、大きい E にたいして $R \approx (\frac{V_0}{4E})^2$ となる。

例題：自由粒子がポテンシャルの低い領域に入射するときも反射がおこることを示し、そのときの反射係数を計算せよ。

(例題)：負のエネルギーをもつ定常状態には縮退がない。固有関数を求めそのことを示せ (浸透の位相をもとめよ)。

6.3 potential 障壁による反射と透過、トンネル効果

高さ V_0 幅 a の障壁をあらわすポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ V_0 > 0 & \text{for } 0 < x < a \\ 0 & \text{for } a < x \end{cases} \quad (191)$$

がある場合について考えてみよう。今正の数 k, ℓ を

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad (192)$$

$$V_0 - E = \frac{\hbar^2}{2m} \ell^2 \quad (193)$$

によって定義すると、

$$\ell^2 + k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \quad (194)$$

が成り立つ。このとき $0 < E < V_0$ ならば

$$\ell = \frac{2m}{\hbar} \sqrt{V_0 - E} \quad (195)$$

$E > V_0$ ならば

$$\ell = \pm i \frac{2m}{\hbar} \sqrt{E - V_0} = \pm i \lambda \quad (196)$$

とするものとしてすべての E の値をいっしょにあつかおう。

potential 障壁による反射と透過

6.3.1 反射係数と透過係数

いま座標を次のような三つの領域に分け、それぞれの領域で一般解を求めよう。

1. 領域 I : $-\infty < x < 0$: ここでの一般解は

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (197)$$

2. 領域 II : $0 < x < a$: ここでの一般解は

$$u(x) = Fe^{\ell x} + Ge^{-\ell x} \quad (198)$$

3. 領域 III : $a < x < \infty$: ここでの一般解は

$$u(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx} \quad (199)$$

波動関数が $x = 0, a$ で滑らかにつながる条件を課すと A, B, C, D, F, G 6つの係数の間に4つの関係式しか得られない。これは1次独立な解が2つある事を示している。 $D = 0$ とおいて左から入射した平面波が障壁によって反射と透過をする解を求めて見よう。

計算の結果は

$$\frac{B}{A} = \frac{(k^2 + \ell^2) \sinh \ell a}{(k^2 - \ell^2) \sinh \ell a + 2ik\ell \cosh \ell a} \quad (200)$$

$$\frac{C}{A} = \frac{e^{-ika}}{\cosh \ell a + \frac{i}{2}(\frac{\ell}{k} - \frac{k}{\ell}) \sinh \ell a} \quad (201)$$

反射係数 R , 透過係数 T はそれぞれ

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{\frac{1}{4}(\frac{k}{\ell} + \frac{\ell}{k})^2 \sinh^2 \ell a}{1 + \frac{1}{4}(\frac{k}{\ell} + \frac{\ell}{k})^2 \sinh^2 \ell a} \quad (202)$$

$$= \frac{\frac{1}{4}V_0^2 \sinh^2 \ell a}{E(V_0 - E) + \frac{1}{4}V_0^2 \sinh^2 \ell a} \quad (203)$$

および

$$T = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}(\frac{k}{\ell} + \frac{\ell}{k})^2 \sinh^2 \ell a} \quad (204)$$

$$= \frac{E(V_0 - E)}{E(V_0 - E) + \frac{1}{4}V_0^2 \sinh^2 \ell a} \quad (205)$$

であたえられる。このとき確率の保存則

$$R + T = 1 \quad (206)$$

が成り立っている。

反射係数 R と透過係数 T のグラフなし。Mathematica で描かせること

$al \gg 1$ にたいして

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2al} \quad (207)$$

また $E = V_0$ のとき

$$T = \frac{1}{1 + \frac{mV_0a^2}{2\hbar^2}} \quad (208)$$

となる。

エネルギーよりも高い potential を越えて物質が透過するこのような現象は量子力学特有なもので**トンネル効果**と呼ばれている。

例題

$E > V_0$ の場合にも反射がおこることを同上の計算をすることによって示せ。いくつかのエネルギーの値に対して反射が起こらなくなる現象 (共鳴) に注意しよう。

反射と透過 $E > V_0$ の場合

例題

有限の深さの井戸型 potential の正エネルギーの定常状態を考え、反射係数 R と透過係数 T を計算せよ。

6.4 振動定理**7 調和振動子**

ポテンシャル $V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$ のなかで 1 次元的に運動する質量 m の粒子の Hamilton 関数は

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \quad (209)$$

したがって時間を含まない Schroedinger 方程式は

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \right\} u(x) = Eu(x) \quad (210)$$

この節ではこの力学系すなわち 1 次元調和振動子の量子力学を述べる。

7.1 エネルギー固有値

$y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ という無次元の変数を導入して $v(y) = u(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}y)$ とおくと Hamiltonian が

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2}y^2 \right) \quad (211)$$

となり固有値方程式が

$$v''(y) + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - y^2 \right) v(y) = 0 \quad (212)$$

となる。この式から、 $y \rightarrow \pm\infty$ のときの関数のふるまいについて

$$v'' \approx y^2 v, \quad v' \approx -yv, \quad v \approx e^{-\frac{1}{2}y^2} \quad (213)$$

と見当をつけることができるので、

$$v(y) = Q(y)e^{-\frac{y^2}{2}} \quad (214)$$

と置き、先の方程式に代入してみると

$$Q'' - 2yQ' + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1\right)Q = 0 \quad (215)$$

ポテンシャルが偶関数だったから Hamiltonian と Parity との同時固有状態を求めればよい。したがって偶関数か奇関数のどちらかである。これをべき展開の方法で解くことにしよう。 $Q(y)$ をべき展開して

$$Q(y) = \sum_{k=0,2,4,\dots} a_k y^k \quad (216)$$

または

$$Q(y) = \sum_{k=1,3,5,\dots} a_k y^k \quad (217)$$

として代入すると展開係数の間の関係

$$a_{k+2} = \frac{2k+1 - \frac{2E}{\hbar\omega}}{(k+1)(k+2)} a_k \quad (218)$$

$$\approx \frac{2}{k} a_k \quad (k \rightarrow \infty) \quad (219)$$

がえられる。このべき級数が有限項で終わらずに無限に続くと $Q(y)$ は大きな y にたいして $Q(y) \rightarrow e^{y^2} \times \text{多項式}$ のふるまいをし、その結果波動関数が規格化できなくなる。したがって $Q(y)$ は多項式でなければならない。⁵

いま $a_{n+2} = 0$ であり、 $Q(y)$ が n 次の多項式であるとしよう。このときエネルギースペクトルが次のように求まる。

$$E = E_n, \quad (220)$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (221)$$

$$n = 0, 1, 2, \dots \quad (222)$$

特に基底状態のエネルギー固有値と波動関数は

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (223)$$

$$u_0(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \quad (224)$$

となる。これらは**零点エネルギー**、**零点振動**の呼び名で知られている。

エネルギー固有値の分布は等間隔である。したがってレベル密度は一定値

$$\rho(E) = \frac{1}{\hbar\omega} \quad (225)$$

をとる。

⁵この議論はもっと正確に述べること。

7.2 昇降演算子および固有関数

前節で $y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ という無次元の変数を導入した。 x のかわりにこれを使って

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y + \frac{d}{dy} \right) \quad (226)$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \frac{ip}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \quad (227)$$

および

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right) \quad (228)$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x - \frac{ip}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \quad (229)$$

なる作用素を導入しよう。Hamiltonian は

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (230)$$

とかかれる。さらに次の交換関係がなりたつ。

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (231)$$

$$[\hat{H}, a] = -\hbar\omega a \quad (232)$$

$$[\hat{H}, a^\dagger] = \hbar\omega a^\dagger \quad (233)$$

これから Hamiltonian の固有値と固有状態があつて

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (234)$$

を満たしているとき,

$$\hat{H}a^\dagger\psi = (E + \hbar\omega)a^\dagger\psi \quad (235)$$

$$\hat{H}a\psi = (E - \hbar\omega)a\psi \quad (236)$$

がなりたつ。このことは、作用素 $a, a^\dagger$ をかけることによって、あらたな $\hat{H}$ の固有状態ができ、その固有値がもとのものより、 $\hbar\omega$ だけ小さいか、または大きいことを示している。このことから、作用素 $a, a^\dagger$ は固有値を上げ下げする演算子であるといってもよい。このような演算子のことを**昇降演算子**という。

例題

$f(x)$ を x の多項式として次式が成り立つことを示せ。

$$[a, (a^\dagger)^n] = n(a^\dagger)^{n-1} \quad (237)$$

$$[a^n, a^\dagger] = na^{n-1} \quad (238)$$

$$[a, f(a^\dagger)] = f'(a^\dagger) \quad (239)$$

$$[f(a), a^\dagger] = f'(a) \quad (240)$$

例題

二つの波動関数 ψ_1, ψ_2 にたいして次式が成り立つことを示せ。

$$(a\psi_1, \psi_2) = (\psi_1, a^\dagger\psi_2) \quad (241)$$

$$(a^\dagger\psi_1, \psi_2) = (\psi_1, a\psi_2) \quad (242)$$

$a\psi = 0$ をみたす波動関数 ψ は $\hat{H}\psi = \frac{1}{2}\hbar\omega\psi$ も満たすので、基底状態の波動関数であることがわかる。これを規格化したものを u_0 とかくと、規格化されたエネルギー固有関数が次のようにもとまる。

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n u_0 \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (243)$$

例題

これらが次の規格直交関係を満たすことを示せ。

$$(u_n, u_m) = \delta_{nm} \quad (244)$$

7.3 Hermite の多項式

エネルギーの固有関数 $u_n(x)$ を変数 y であらわしてみよう。 $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ として、

$$u_0 = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 y^2} \quad (245)$$

とすると、

$$u_n = \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \cdot \left(y - \frac{d}{dy}\right)^n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 y^2}$$

であるから、 n 次の Hermite の多項式

$$H_n(y) = e^{\frac{1}{2}\alpha^2 y^2} \left(y - \frac{d}{dy}\right)^n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 y^2} \quad (246)$$

$$= e^{\alpha^2 y^2} \left(-\frac{d}{dy}\right)^n e^{-\alpha^2 y^2} \quad (247)$$

$$= \sum_{m=0, 2m \leq n} (-1)^m \frac{n!}{m!(n-2m)!} (2\alpha y)^{n-2m} \quad (248)$$

を導入して

$$u_n = \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \cdot H_n(y) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 y^2} \quad (249)$$

と置くことができる。

Hermite の多項式 $H_n(y)$ については次のような性質が証明できる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_i(y) H_j(y) e^{-y^2} dy = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{ij} \quad (250)$$

はじめのいくつかは次の通りである。

$$H_0(y) = 1 \quad (251)$$

$$H_1(y) = 2y \quad (252)$$

$$H_2(y) = 4y^2 - 2 \quad (253)$$

$$H_3(y) = 8y^3 - 12y \quad (254)$$

$$H_4(y) = 16y^4 - 48y^2 + 12 \quad (255)$$

こうして 1 次元調和振動子の規格化されたエネルギー固有関数をはじめの変数 x によってあらわしたものは

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad (256)$$

で与えられる。

7.4 【調和振動子の問題】

【調和振動子の問題】

1. 調和振動子の Hamiltonian

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \quad (257)$$

の基底状態のエネルギー固有値 E_0 に属する固有関数 $u_0(x)$ が

$$u_0(x) = \beta e^{-\alpha x^2} \quad (258)$$

の形をしているとして、エネルギー固有値 E_0 と α を求めよ。

さらに $u_0(x)$ を $\|u_0\| = 1$ と規格化するための β の値を求めよ。

(答)

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega, \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}, \beta = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}$$

2. 前問と同様に調和振動子のひとつのエネルギー固有値 E に属する固有関数 $u(x)$ が

$$u(x) = \beta x e^{-\alpha x^2} \quad (259)$$

の形をしているとして、エネルギー固有値 E と α を求めよ。さらに $u(x)$ を $\|u\| = 1$ と規格化するための β の値を求めよ。

(答)

$$E = \frac{3}{2}\hbar\omega, \alpha = \frac{m\omega}{2\hbar}, \beta = \sqrt{\frac{4m^3\omega^3}{\pi\hbar^3}}$$

3. 期待値について次の結果を確かめよ。ここで、 $|n\rangle$ は n 番目のエネルギー固有状態を表す Dirac の ket ベクトルとする。ここで $n = 0, 1, 2, \dots$ また、 $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$

(a)

$$\langle n | x^{2k+1} | n \rangle = 0, k = 0, 1, 2, \dots$$

(b)

$$\langle n | x^2 | n \rangle = \frac{n + \frac{1}{2}}{\alpha^2}$$

(c)

$$\langle n | x^4 | n \rangle = \frac{3}{4\alpha^4}(2n^2 + 2n + 1)$$

8 波動関数の作る集合

8.1 ノルムと内積：Hilbert 空間

8.1.1 3次元ベクトル空間の復習

3次元のベクトル空間について次のことを思い出しておこう。

ベクトル空間または線形空間

実数体上の一次独立性およびベクトル空間の次元

ノルムとスカラー積 (内積)

Schwartz の不等式と三角不等式

ベクトルの直交性

部分空間

直交補空間

C.O.N.S.

8.1.2 規格化可能な (波動) 関数の全体

波動関数 $\psi(\mathbf{x})$ の確率解釈が可能であるためには

$$\int |\psi(\mathbf{x})|^2 dV < \infty \quad (260)$$

が必要であった。⁶これを満たす関数全体の集合は $L_2(R^3)$ と呼ばれる。

波動関数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ の絶対値の 2 乗を全空間で積分したものの平方根をその波動関数の **ノルム** (または**長さ**) と呼んで $\|\psi\|$ と書こう。即ち

$$\|\psi\| = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz |\psi(\mathbf{x})|^2}. \quad (261)$$

ところで $\|\psi\| = 0$ なら至る所 $\psi(\mathbf{x}) = 0$ だからこのような関数を

$$\psi = 0 \quad (262)$$

とかこう。

8.1.3 内積と Schwartz の不等式

$\psi_1, \psi_2 \in L_2(R^3)$ のとき ψ_1 と ψ_2 の**内積**を

$$(\psi_1, \psi_2) = \int \psi_1(\mathbf{x})^* \psi_2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (263)$$

で定義しよう。

内積の存在は次の **Schwartz の不等式**によって保証される。

$$|(\psi_1, \psi_2)| \leq \|\psi_1\| \cdot \|\psi_2\| \quad (264)$$

ここで等号が成り立つのは ψ_1 と ψ_2 が一次従属のときに限る。

内積は次のような性質をもつ。

$$(\psi_2, \psi_1) = (\psi_1, \psi_2)^* \quad (265)$$

$$(c_1 \psi_1, c_2 \psi_2) = c_1^* c_2 (\psi_1, \psi_2) \quad (266)$$

$$(\psi_1 + \psi_2, \psi) = (\psi_1, \psi) + (\psi_2, \psi) \quad (267)$$

$$(\psi, \psi_1 + \psi_2) = (\psi, \psi_1) + (\psi, \psi_2) \quad (268)$$

⁶ここの積分の意味は $\int dV = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz$ である。以後 $\int d\mathbf{x}$ とも書くことにする。

さらに

$$(\psi, \psi) \geq 0 \quad (269)$$

ここで等号が成り立つのは $\psi = 0$ のときのみ。

このとき ψ のノルムは内積をつかって

$$\|\psi\| = \sqrt{(\psi, \psi)} \quad (270)$$

と書ける。

例題

任意の2つの波動関数 $\psi_1(\mathbf{x}), \psi_2(\mathbf{x})$ にたいして **Schwartz の不等式**を証明せよ。

証明

$$|(\psi_1, \psi_2)|^2 \quad (271)$$

$$= (\psi_1, \psi_2)(\psi_2, \psi_1) \quad (272)$$

$$= \int \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} \psi_1(\mathbf{x})^* \psi_2(\mathbf{x}) \psi_2(\mathbf{y})^* \psi_1(\mathbf{y}) \quad (273)$$

$$= \frac{1}{2} \int \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} \{ \psi_1(\mathbf{x})^* \psi_2(\mathbf{x}) \psi_2(\mathbf{y})^* \psi_1(\mathbf{y}) + \psi_1(\mathbf{y})^* \psi_2(\mathbf{y}) \psi_2(\mathbf{x})^* \psi_1(\mathbf{x}) \} \quad (274)$$

一方

$$\|\psi_1\|^2 \cdot \|\psi_2\|^2 \quad (275)$$

$$= (\psi_1, \psi_1)(\psi_2, \psi_2) \quad (276)$$

$$= \frac{1}{2} \int \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} \{ \psi_1(\mathbf{x})^* \psi_1(\mathbf{x}) \psi_2(\mathbf{y})^* \psi_2(\mathbf{y}) + \psi_1(\mathbf{y})^* \psi_1(\mathbf{y}) \psi_2(\mathbf{x})^* \psi_2(\mathbf{x}) \} \quad (277)$$

となる。両者の差を取ると

$$\|\psi_1\|^2 \cdot \|\psi_2\|^2 - |(\psi_1, \psi_2)|^2 \quad (278)$$

$$= \frac{1}{2} \int \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} \{ (\psi_1(\mathbf{x}) \psi_2(\mathbf{y}) - \psi_1(\mathbf{y}) \psi_2(\mathbf{x}))^* (\psi_1(\mathbf{x}) \psi_2(\mathbf{y}) - \psi_1(\mathbf{y}) \psi_2(\mathbf{x})) \} \quad (279)$$

$$= \frac{1}{2} \int \int d\mathbf{x} d\mathbf{y} |\psi_1(\mathbf{x}) \psi_2(\mathbf{y}) - \psi_1(\mathbf{y}) \psi_2(\mathbf{x})|^2 \quad (280)$$

$$\geq 0 \quad (281)$$

となる。

例題

Schwartz の不等式をつかって次の**三角不等式**を証明せよ。

$$\|\psi_1 + \psi_2\| \leq \|\psi_1\| + \|\psi_2\| \quad (282)$$

証明)

$$\|\psi_1 + \psi_2\|^2 = (\psi_1 + \psi_2, \psi_1 + \psi_2) \quad (283)$$

$$= \|\psi_1\|^2 + 2\Re(\psi_1, \psi_2) + \|\psi_2\|^2 \quad (284)$$

$$\leq \|\psi_1\|^2 + 2|(\psi_1, \psi_2)| + \|\psi_2\|^2 \quad (285)$$

$$\leq \|\psi_1\|^2 + 2\|\psi_1\| \cdot \|\psi_2\| + \|\psi_2\|^2 \quad (286)$$

$$= (\|\psi_1\| + \|\psi_2\|)^2 \quad (287)$$

4 番目の関係式で Schwartz の不等式を使った。両辺の平方根をとって

$$\|\psi_1 + \psi_2\| \leq \|\psi_1\| + \|\psi_2\| \quad (288)$$

がえられる。

例題

三角不等式から Schwartz の不等式を証明せよ。

こうして $L_2(R^3)$ の中でベクトル和をとっても $L_2(R^3)$ のそとに出ないので、波動関数の集合 $L_2(R^3)$ はベクトル空間をなす。ベクトル空間にこのような性質を持つ内積が定義されているとき **Hilbert 空間** という。こうして規格化可能な波動関数の集合 $L_2(R^3)$ は Hilbert 空間をなすことが分かった。波動関数はそこでのベクトルとみなしてもよい。

関数解析学の教える所によれば、内積の定義に使われる積分を Riemann 積分の意味にとると、空間 $L_2(R^3)$ は完備ではない。二つの波動関数が高々上の測度 0 の部分集合上においてのみ異なった値をとるときこの二つの関数は「ほとんどいたるところ等しい」という。ほとんど至る所等しい関数を同一視することにしよう。この時上の積分は Lebesgue 積分としなければならない。関数と積分の意味をこのようにとると $L_2(R^3)$ は完備な距離空間になる。

8.1.4 Hilbert 空間の例

1. ℓ_2 空間

無限次元の複素数ベクトル $v = (v_1, v_2, \dots)$ で

$$\|u\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{\infty} |u_i|^2} \quad (289)$$

で定義されるノルムが有限のものの集合を ℓ_2 空間 という。内積を

$$(u, v) = \sum_{i=1}^{\infty} u_i^* v_i \quad (290)$$

で定義すれば Hilbert 空間となり、その次元は ∞ である。

例題

無限次元複素ベクトル空間のベクトルを

$$v = (v_1, v_2, \dots) \quad (291)$$

と書くとき、次のように定義されるベクトルは ℓ_2 空間に含まれるか。もし含まれるならそのノルムを求めよ。

$$(a) \ v_k = \frac{1}{\sqrt{k}}$$

$$(b) \ v_k = \frac{1}{k} \quad (\text{答え } \|v\| = \frac{\pi}{\sqrt{6}})$$

2. $L_2(a, b)$ 一般に $a < x < b$ の区間で定義される関数に

$$(\psi_1, \psi_2) = \int_a^b \psi_1(x)^* \psi_2(x) dx \quad (292)$$

で内積を定義するとその集合は Hilbert 空間をなす。

3. もっと一般的に $a < x < b$ の区間で定義される関数の内積を、ある正の関数 $\rho(x)$ (重み) をつかって

$$(\psi_1, \psi_2) = \int_a^b \psi_1(x)^* \psi_2(x) \rho(x) dx \quad (293)$$

と定義しても Hilbert 空間になる。

4. $L_2(R^3), L_2(R^{3N})$ これらが 1 粒子系、 N 粒子系の波動関数の集合になる。

8.1.5 線型部分空間

1. ベクトルの 1 次独立性

Hilbert 空間の有限個または無限個のベクトル $\psi_1, \psi_2, \dots$ について

$$\sum_{i=1}^{\infty} c_i \psi_i = 0 \text{ のとき } c_1 = c_2 = \dots = 0 \quad (294)$$

ならばこれらのベクトルは**一次独立**であるという。

1 次独立なベクトルの最大個数を Hilbert 空間の**次元**という。Hilbert 空間の次元は自然数のときも無限のときもある⁷。量子力学で用いられる波動関数の全体は無限次元の Hilbert 空間をなす。

⁷ここで無限とは加算無限をさし、非加算無限次元の Hilbert 空間 (非可分) は考えない。

2. ベクトルの平行性

c をある複素数として Hilbert 空間の 0 でない二つのベクトル ψ_1, ψ_2 が $\psi_1 = c\psi_2$ の関係を満たすときこれらのベクトルは**平行**であるという。ベクトル ψ の**規格化**とは ψ に平行で長さが 1 のベクトル

$$\frac{e^{i\theta}}{\|\psi\|}\psi \quad (295)$$

を求めることである。このとき θ は任意にとれる。

3. いくつかのベクトルで張られる空間

Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ の有限個または無限個のベクトルの集合

$$S = \{\psi_1, \psi_2, \dots\} \quad (296)$$

があるとき、複素数の係数 $c_1, c_2, \dots$ によって

$$\psi = \sum_{i=1} c_i \psi_i \quad (297)$$

とあらわされるベクトルの全体を S で張られる**部分空間**といい、 $\bar{S}$ と書く。
($\bar{S}$ は S に一次従属なベクトルの全体になる。)

部分空間 $\bar{S}$ の一次独立なベクトルの最大の個数を $\bar{S}$ の次元という。

4. ベクトルの直交性

Hilbert 空間の 0 でない二つのベクトル ψ_1, ψ_2 が $(\psi_1, \psi_2) = 0$ を満たすときこれらのベクトルは**直交**するという。

5. 直交補空間

部分空間 $\bar{S}$ のベクトルの全てと直交するベクトルの全体を $\bar{S}$ の**直交補空間**とよび、 $S^\perp$ であらわす。このとき

$$\mathcal{H} = \bar{S} \oplus S^\perp \quad (298)$$

がなりたつ (直和)。また

$$\dim \mathcal{H} = \dim \bar{S} + \dim S^\perp \quad (299)$$

である。

8.2 完全直交系 (C.O.N.S)

8.2.1 Schmidt の直交化法

Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ の無限個の一次独立なベクトルの列

$$S = \{\psi_1, \psi_2, \dots\} \quad (300)$$

から、つぎのようにして直交系 $\{f_1, f_2, \dots\}$ および規格直交系

$$K = \{e_1, e_2, \dots\} \quad (301)$$

を作ることができる。

$$f_1 = \psi_1 \quad (302)$$

$$e_1 = \frac{1}{\|f_1\|} f_1 \quad (303)$$

$$f_2 = \psi_2 - e_1(e_1, \psi_2) \quad (304)$$

$$e_2 = \frac{1}{\|f_2\|} f_2 \quad (305)$$

$$f_3 = \psi_3 - e_1(e_1, \psi_3) - e_2(e_2, \psi_3) \quad (306)$$

$$e_3 = \frac{1}{\|f_3\|} f_3 \quad (307)$$

$$\dots = \dots \quad (308)$$

$$f_n = \psi_n - \sum_{i=1}^{n-1} e_i(e_i, \psi_n) \quad (309)$$

$$e_n = \frac{1}{\|f_n\|} f_n \quad (310)$$

$$\dots \quad (311)$$

このようにして順次構成したベクトルの集合 $K = \{e_1, e_2, \dots\}$ の元の間には直交関係

$$(e_i, e_j) = \delta_{i,j} \quad (312)$$

が成り立っているので、規格直交系をなす。

8.2.2 規格直交系と完全規格直交系

規格直交系 $K = \{e_1, e_2, \dots\}$ が

$$\bar{K} = \mathcal{H} \quad (313)$$

をみたすとき、完全規格直交系 (C.O.N.S.) という。 $K = \{e_1, e_2, \dots\}$ が完全規格直交系 (C.O.N.S.) ならば $\mathcal{H}$ の任意の元 ψ は K に一次従属であり、それを

$$\psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i e_i \quad (314)$$

と書くとき展開係数は

$$c_i = (e_i, \psi) \quad (315)$$

となる。 c_i は ψ の Fourier 係数と呼ばれることもある。こうして $\mathcal{H}$ の元に無限次元の複素数ベクトルが対応している。さらに

$$\psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i e_i \quad (316)$$

$$\phi = \sum_{i=1}^{\infty} d_i e_i \quad (317)$$

のとき、

$$(\psi, \phi) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i^* d_i \quad (318)$$

がなりたつ。

例題

次の Parseval の等式を証明せよ。

$$\|\psi\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 \quad (319)$$

この関係式はピタゴラスの定理の一般化と考えることができる。

こうして完全規格直交系を導入することによって Hilbert 空間としての演算を保ったまま $\mathcal{H}$ の元を ℓ_2 の元に 1 対 1 に対応させることができる。

8.2.3 完全規格直交系の例

1. Fourier 級数

$L_2(0, L)$ において $K = \{\phi_0, \phi_1, \phi_2, \dots\}$ を

$$\phi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \quad (320)$$

$$\phi_{2n-1} = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{2\pi n x}{L} \quad (321)$$

$$\phi_{2n} = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{2\pi n x}{L} \quad (322)$$

$$n = 1, 2, \dots \quad (323)$$

とすると直交関係

$$(\phi_i, \phi_j) = \delta_{i,j} \quad (324)$$

をみたす。さらにそれが、C.O.N.S. になることが証明できる。

2. 複素 Fourier 級数

$L_2(0, L)$ において $K = \{\varphi_n; n \in \mathbf{Z}\}$ を

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{2\pi i x}{L}} \quad (325)$$

としても

$$(\varphi_i, \varphi_j) = \delta_{i,j} \quad (326)$$

をみたし、C.O.N.S. をなす。

例題

1 の ϕ_n と 2 の φ_n の間の関係を求めよ。

3. Legendre の多項式

$L_2(-1, 1)$ において単項式の列 $S = \{1, x, x^2, x^3, \dots\}$ に Schmidt の直交化を施してえられる多項式を

$$P_n(1) = 1 \quad (327)$$

$$P_n(-1) = (-1)^n \quad (328)$$

が成り立つように規格化して得られるのが、Legendre の多項式 $\{P_n(x); n = 0, 1, 2, \dots\}$ である。

例題

Legendre の多項式の最初のいくつかをもとめよ。

(解) 最初のいくつかは

$$P_0(x) = 1 \quad (329)$$

$$P_1(x) = x \quad (330)$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \quad (331)$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) \quad (332)$$

$$P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3) \quad (333)$$

これらのノルムは1に規格化されていない。すなわち

$$(P_n, P_m) = \frac{2}{2n+1} \delta_{n,m} \quad (334)$$

がなりたつ。

一般には

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{d}{dx} \right)^n (x^2 - 1)^n \quad (335)$$

となる。

4. Hermite の多項式

$L_2(-\infty, \infty)$ における関数列 $S = \{y^n e^{-\frac{1}{2}y^2}; n = 0, 1, 2, \dots\}$ に Schmidt の直交化を施して得られる直交系を $S = \{H_n(y) e^{-\frac{1}{2}y^2}; n = 0, 1, 2, \dots\}$ とするとき $H_n(y)$ は n 次の多項式になり、Hermite の多項式と呼ばれる。それらは通常最高次の項が $(2y)^n$ となるように規格化される。Hermite の多項式 $H_n(y)$ については次のような性質が証明できる。

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \left(\frac{d}{dy} \right)^n e^{-y^2} \quad (336)$$

$$= \sum_{m=0, 2m \leq n} (-1)^m \frac{n!}{m!(n-2m)!} (2y)^{n-2m} \quad (337)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_i(y) H_j(y) e^{-y^2} dy = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{ij} \quad (338)$$

はじめのいくつかは次の通りである。

$$H_0(y) = 1 \quad (339)$$

$$H_1(y) = 2y \quad (340)$$

$$H_2(y) = 4y^2 - 2 \quad (341)$$

$$H_3(y) = 8y^3 - 12y \quad (342)$$

$$H_4(y) = 16y^4 - 48y^2 + 12 \quad (343)$$

8.3 Dirac の記法

ブラとケット

$\mathcal{H}$ のベクトル ψ を $|>$ で囲んで $|\psi>$ と表すことがある。この表記法では $\psi = \sum c_i \psi_i$ は

$$|\psi> = \sum_i c_i |\psi_i> \quad (344)$$

とかかれる。内積 (ψ_1, ψ_2) は $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$ と書かれるので、 $K = \{|e_1 \rangle, |e_2 \rangle, \dots\}$ が規格直交系であれば直交関係

$$\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{i,j} \quad (345)$$

がなりたつ。さらにこれが完全であれば任意のベクトル $|\psi \rangle$ が

$$|\psi \rangle = \sum_i |\psi_i \rangle \langle \psi_i | \psi \rangle \quad (346)$$

とかけるのだから、 $K = \{|e_i \rangle; i = 1, 2, \dots\}$ が C.O.N.S. であることと

$$\sum_{i=1}^{\infty} |\psi_i \rangle \langle \psi_i| = I \quad (347)$$

が成り立つこととは同等である。この関係式は右辺の I (恒等演算子) を完全規格直交系によって表しているの、完全規格直交系による 1 の分解と呼ばれる。

9 力学量と Observable

9.1 量子力学における力学量

古典力学では、力、エネルギー、角運動量など座標と運動量 $\mathbf{x}, \mathbf{p}$ の実関数として表されるもの $F(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ すべては力学量である。ある時刻での系の状態とは正準変数 $\mathbf{x}, \mathbf{p}$ のその時刻での値のことであり、それひとたびを初期条件として与えればそれ以後の状態は運動方程式から一意的に決定された。したがって状態と力学量との間には本質的な区別はない。

量子力学では状態と力学量をはっきり区別する。ある時刻の系の状態は波動関数 $\psi(t, \mathbf{x})$ で表され、その時間的な変化は Schrodinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi \quad (348)$$

によって一意的に決定される。この方程式の右辺の $\hat{H}$ はハミルトニアンまたはエネルギー作用素と呼ばれ、波動関数に作用して別の波動関数を与える作用素である。このように量子力学での力学量は波動関数に作用する線形作用素で表される。この節ではその線形作用素の性質を詳しく調べよう。

9.2 線形作用素

先に見たように運動量は次のような微分作用素で表される。

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (349)$$

$$\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \quad (350)$$

$$\hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (351)$$

また Descartes 座標 $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ は

$$\hat{x}\psi(\mathbf{x}) = x\psi(\mathbf{x}) \quad (352)$$

$$\hat{y}\psi(\mathbf{x}) = y\psi(\mathbf{x}) \quad (353)$$

$$\hat{z}\psi(\mathbf{x}) = z\psi(\mathbf{x}) \quad (354)$$

と定義される**掛け算作用素**である。⁸

一般に波動関数を別な波動関数にうつす作用素 $\hat{F}$ が線形性

$$\hat{F}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{F}(\psi_1) + c_2\hat{F}(\psi_2) \quad (358)$$

をもつとき**線形作用素**という。したがって座標と運動量は量子力学では線形作用素になる。⁹

作用素の間には定数倍、積、和の演算が定義され、それらによって新たな作用素を構成することができる。たとえばポテンシャルエネルギー $\hat{V}$ は次のような掛け算作用素である。

$$\hat{V}\psi(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) \quad (359)$$

作用素 $\hat{V}$ は $V(\hat{\mathbf{x}})$ と記してもよい。

運動エネルギーは2階の微分作用素

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial z} \right)^2 \right\} \quad (360)$$

である。さらにエネルギーすなわちハミルトニアンは前述の作用素から次のように組み立てられる作用素である。

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + \hat{V} \quad (361)$$

一定の条件を課すと線形作用素は環をつくる。これは**作用素環**と呼ばれる。

⁸ここで波動関数の変数を変えると

$$\hat{x}\psi(\xi, \eta, \zeta) = \xi\psi(\xi, \eta, \zeta) \quad (355)$$

$$\hat{y}\psi(\xi, \eta, \zeta) = \eta\psi(\xi, \eta, \zeta) \quad (356)$$

$$\hat{z}\psi(\xi, \eta, \zeta) = \zeta\psi(\xi, \eta, \zeta) \quad (357)$$

となることに注意すること。

⁹このとき規格化可能な波動関数にそれを作用させてえられる波動関数がふたたび規格化可能であればはじめの波動関数は線形作用素の定義域に含まれるという。

力学量が量子力学においても最も著しく古典力学と異なった性質は力学量の**非可換性**である。作用素の積は順番に依存する。一般に $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$ である。例えば 1 次元の場合に作用素として次の等式が成り立つ。ここで I は**恒等作用素**である。

$$\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar I \quad (362)$$

3 次元の場合には次のようになる。

$$\hat{x}_i\hat{p}_j - \hat{p}_j\hat{x}_i = i\hbar\delta_{i,j}I \quad (363)$$

9.3 直交系による力学量の表示

いま作用素 $\hat{A}, \hat{B}, \dots$ と完全規格直交系 $K = \{|i\rangle; i = 1, 2, \dots\}$ があるとしよう。ここでは Dirac の記法に従う。作用素 $\hat{A}, \hat{B}, \dots$ のそれぞれに対応して無限行無限列の行列 $\mathcal{A}, \mathcal{B}, \dots$ をつぎのように定義する。

$$\mathcal{A}_{ij} = \langle i|\hat{A}|j\rangle \quad (364)$$

$$\mathcal{B}_{ij} = \langle i|\hat{B}|j\rangle \quad (365)$$

$$\dots = \dots \quad (366)$$

この事を

$$\hat{A} \longrightarrow \mathcal{A} \quad (367)$$

$$\hat{B} \longrightarrow \mathcal{B} \quad (368)$$

$$\dots \longrightarrow \dots \quad (369)$$

と略記するとあきらかにつぎの対応が成り立つ。

$$\hat{A}\hat{B} \longrightarrow \mathcal{A}\mathcal{B} \quad (370)$$

$$\hat{A}^\dagger \longrightarrow \mathcal{A}^\dagger \quad (371)$$

さらに波動関数をその CONS による展開係数からなる数ベクトルに対応させることにしよう。すなわち

$$\phi_i = \langle i|\phi\rangle \quad (372)$$

$$\psi_i = \langle i|\psi\rangle \quad (373)$$

として波動関数を無限次元列ベクトルに対応させる。

$$|\psi\rangle \longrightarrow \psi \quad (374)$$

$$|\phi\rangle \longrightarrow \phi \quad (375)$$

このとき

$$\hat{A}|\psi\rangle \longrightarrow A\psi \quad (376)$$

また

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \phi_i^* \psi_i \quad (377)$$

$$= \phi^\dagger \psi \quad (378)$$

このようにこれまでに導入された波動関数と線型作用素を含むすべての演算を無限次元の線型代数の演算に帰着させることができる。

9.4 線形作用素の Hermite 共役

$(\phi, \hat{A}\psi)$ という量は ψ について線形だからあるベクトル ξ が存在して (ξ, ψ) とかける。この時ベクトル ξ は ϕ に線形に依存するので、 ϕ にある線型作用素をかけたものになる。これを $\xi = \hat{A}^\dagger \phi$ と書こう。すなわち

$$(\phi, \hat{A}\psi) = (A^\dagger \phi, \psi) \quad (379)$$

線形作用素 $\hat{A}^\dagger$ は $\hat{A}$ に反線形に依存する。 $\hat{A}^\dagger$ のことを $\hat{A}$ の **Hermite 共役** と呼ぶ。

なお Dirac の記法では $(\hat{A}\psi, \phi)$ 、 $(\psi, \hat{B}\phi)$ 、 $(\hat{A}\psi, \hat{B}\phi)$ のことをそれぞれ $\langle \psi | \hat{A}^\dagger | \phi \rangle$ 、 $\langle \psi | \hat{B} | \phi \rangle$ 、 $\langle \psi | \hat{A}^\dagger \hat{B} | \phi \rangle$ と書く。

前式の複素共役をとることによって

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A} \quad (380)$$

が示される。Hermite 共役についてはさらにつぎの性質をもつことが容易に示せる。

$$(c_1 \hat{A}_1 + c_2 \hat{A}_2)^\dagger = c_1^* \hat{A}_1^\dagger + c_2^* \hat{A}_2^\dagger \quad (381)$$

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \quad (382)$$

例題

1. 複素数値をとる関数 $F(\mathbf{x})$ があるとき、掛け算作用素 $\hat{F}$ は

$$(\hat{F}\psi)(\mathbf{x}) = F(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) \quad (383)$$

と定義される。 $\hat{F}$ の Hermite 共役作用素を求めよ。

2. 単なる微分作用素 $\frac{\partial}{\partial x}$ は Hermite 作用素か？
3. 運動量演算子 $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ は $L_2(-\infty, \infty)$ において Hermite であることをしめせ。

4. 単体問題のエネルギー作用素

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + \hat{V} \quad (384)$$

が Hermite であることを示せ。

5. 内積が重み $\rho(x)$ によって

$$(\psi_1, \psi_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x)^* \psi_2(x) \rho(x) dx \quad (385)$$

と定義されているとき、 $-i\nabla$ は Hermite でなくなり、 $-\frac{i}{\sqrt{\rho}}\nabla\sqrt{\rho}$ が Hermite となることを示せ。

9.5 Hermite 作用素の固有値と固有関数

波動関数に作用する Hermite 作用素について、その固有値問題を考えよう。Hermite 作用素 $\hat{F}$ にたいして数 λ および 0 でない波動関数 ψ が存在して

$$\hat{F}\psi = \lambda\psi \quad (386)$$

を満たすとき、 λ は $\hat{F}$ の一つの**固有値**であり、 ψ は固有値 λ に属する $\hat{F}$ の**固有関数**であるという。

¹⁰

¹⁰線型数学よりの準備

次の行列について、

1. それが Hermite 行列であることを確かめよ。
2. 固有値を求めよ。
3. 各々の固有値に属する固有ベクトルを求めよ。
4. 異なった固有値に属する固有ベクトルが直交することを確かめよ。

(a)

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (387)$$

(b)

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (388)$$

(c)

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 3 \\ 3 & 3 & 8 \end{pmatrix}. \quad (389)$$

λ を $\hat{F}$ の固有値として

$$\hat{F}\psi = \lambda\psi \quad (390)$$

を満たす ψ で 1 次独立なものが 1 つしか取れないとき固有値は**縮退**していないといい、一次独立なものが n 個あるときは固有値が n **重に縮退している**という。この節では固有値はすべて縮退していないと仮定する。

[定理] Hermite 作用素の固有値はすべて実数である。

(証明)

$$\hat{F}\psi = \lambda\psi \quad (391)$$

とする。これに左から ψ をかけると、

$$(\psi, \hat{F}\psi) = \lambda(\psi, \psi) \quad (392)$$

従って

$$\lambda = \frac{(\psi, \hat{F}\psi)}{(\psi, \psi)} \quad (393)$$

となる。これから λ が実数であることが導ける。

[定理] Hermite 作用素の異なった固有値に属する固有関数は直交する。

(証明) $\lambda \neq \lambda'$ として

$$\hat{F}\psi = \lambda\psi \quad (394)$$

$$\hat{F}\psi' = \lambda'\psi' \quad (395)$$

が成り立つとする。これらの各々に左から ψ', ψ をかけると、

$$(\psi', \hat{F}\psi) = \lambda(\psi', \psi) \quad (396)$$

$$(\psi, \hat{F}\psi') = \lambda'(\psi, \psi') \quad (397)$$

がえられる。この複素共役をとると

$$(\hat{F}\psi', \psi) = \lambda'(\psi', \psi) \quad (398)$$

$\hat{F}$ の Hermite 性により

$$(\psi', \hat{F}\psi) = \lambda'(\psi', \psi) \quad (399)$$

(396) からこの式を辺々引くことによって

$$(\lambda - \lambda')(\psi', \psi) = 0 \quad (400)$$

これより

$$(\psi', \psi) = 0 \quad (401)$$

を得る。

9.6 観測可能量 (observable)

Hermite 作用素について、

1. その固有値が実数であること、
2. 固有関数が直交すること

が上で示された。以下では固有値はすべて離散であり、多重度が 1 であることを仮定する。

この時の固有関数系からえられる規格直交系は完全であろうか。作用素論によれば一般にはそうではない。Hermite でその固有関数が完全系をなすものを**自己共役作用素**とよぶ。

量子力学で測定あるいは観測の対象となる物理量をこれから、**observable** ということにする。それは数学的には自己共役演算子のことである。

observable $\hat{F}$ について、その固有値方程式を

$$\hat{F}\psi_i = \lambda_i\psi_i, \quad (402)$$

$$i = 1, 2, \dots \quad (403)$$

とすると、

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (404)$$

とでき、任意の波動関数 ψ が

$$\psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \psi_i, \quad (405)$$

$$c_i = \langle \psi_i | \psi \rangle \quad (406)$$

と展開できる。

上式に observable $\hat{F}$ をかけると

$$\hat{F}\psi = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \psi_i \langle \psi_i | \psi \rangle \quad (407)$$

となり、Dirac の記法では

$$\hat{F}|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i | \psi \rangle \quad (408)$$

とかける。これがすべてのケット $|\psi\rangle$ について成り立つのだから、

$$\hat{F} = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (409)$$

と書いてもよいことになる。これを固有値がすべて離散で縮退がない場合の observable $\hat{F}$ の **スペクトル分解** と呼ぶ。

[例題] $\hat{F}$ の固有関数からなる C.O.N.S. により $\hat{F}$ を行列表示するとどのような行列になるか。この表示は $\hat{F}$ を **対角化する表示** と呼ばれる。

9.7 observable の観測

ここで観測に関する基本的な仮定をもうけよう。

ある状態において observable を観測してえられる値はその固有値にかぎられる。

説明と例示

状態が規格化された波動関数 ψ で表されるとき、波動関数 ψ の固有関数による展

開を

$$\psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \psi_i, \quad (410)$$

$$c_i = \langle \psi_i | \psi \rangle \quad (411)$$

としよう。この時 observable $\hat{F}$ を観測して固有値 λ_i がえられる確率は、

$$P_i = |c_i|^2 = |\langle \psi_i | \psi \rangle|^2 \quad (412)$$

である。

従ってもし波動関数 ψ が規格化されていなければ、

$$P_i = \frac{\langle \psi | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (413)$$

が成り立つ。

どちらの場合にも

$$\sum_{i=1}^{\infty} P_i = 1 \quad (414)$$

が成り立ち確率の意味に矛盾しないことになる。

observable $\hat{F}$ を観測して固有値 λ_i がえられた直後には、再び $\hat{F}$ を観測すると確実に同じ固有値 λ_i が得られるはずである。したがって次の仮定を設けることが自然である。

observable $\hat{F}$ を観測して固有値 λ_i がえられたとき系の状態はそれに属する固有状態 ψ_i に不連続的に飛び移る。

このように observable の観測は力学系の状態を不可避免的に乱し、そのいずれかの固有状態に系の状態を移す。この変化は非因果的であり、どの固有状態にとびうつるかは、確率的にしか言えない。

こうして量子系の時間変化には本質的に性格を異にする次の2種類があることになる。

- Schrodinger 方程式に従う連続的、因果的变化
- 観測に伴って起こる不連続的、非因果的遷移

9.8 observable の期待値

一般にある状態において observable $\hat{F}$ を測定するとき、各々の固有値がえられる確率しかわからない。しかし同じ状態 ψ を何度も準備して $\hat{F}$ の測定をくりかえすとき、得られる値の平均値ははっきり決っている。この値は状態 ψ における observable $\hat{F}$ の**期待値**と呼ばれる。いまそれを $\bar{F}$ と書くと

$$\bar{F} = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i P_i \quad (415)$$

$$= \sum_{i=1}^{\infty} \langle \psi | \psi_i \rangle \lambda_i \langle \psi_i | \psi \rangle \quad (416)$$

$$= \langle \psi | \hat{F} \psi \rangle \quad (417)$$

例題

1次元の箱の中に閉じ込められた自由粒子が次のような状態にあるとき、エネルギーの期待値をもとめよ。

9.9 行列表示の例：調和振動子

調和振動子を扱った節で、力学変数が昇降演算子 $a, a^\dagger$ によって表された。ここではハミルトニアン固有状態を CONS にとり、諸量の行列とベクトルによる表示を求めよう。ハミルトニアンと固有ベクトルは

$$\hat{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (418)$$

$$u_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, u_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, u_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \end{pmatrix}, \dots \quad (419)$$

昇降演算子 $a, a^\dagger$ は、

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (420)$$

$$a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (421)$$

これからよみとれるとおり

$$a_{mn} = \sqrt{n} \delta_{m, n-1} \quad (422)$$

$$a_{mn}^\dagger = \sqrt{m} \delta_{m, n+1} \quad (423)$$

$$H_{mn} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) \delta_{mn} \quad (424)$$

また波数の次元をもつ数 $c = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ をつかうと、

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}c}(a + a^\dagger) \quad (425)$$

$$p = -\frac{i\hbar c}{\sqrt{2}}(a - a^\dagger) \quad (426)$$

だからそれらの行列要素は

$$x_{mn} = \frac{1}{\sqrt{2}c}(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{m}\delta_{m,n+1}) \quad (427)$$

$$p_{mn} = -\frac{i\hbar c}{\sqrt{2}}(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} - \sqrt{m}\delta_{m,n+1}) \quad (428)$$

例題

期待値について次の結果を確かめよ。ここで、 $m = 0, 1, 2, \dots$ 。

$$\langle m | x^{2n+1} | m \rangle = 0, n = 0, 1, 2, \dots \quad (429)$$

$$\langle m | x^2 | m \rangle = \frac{m + \frac{1}{2}}{c^2} \quad (430)$$

$$\langle m | x^4 | m \rangle = \frac{3}{4c^4}(2m^2 + 2m + 1) \quad (431)$$

例題

$n = 0, 1, 2, \dots$ について

$$\langle m | x^{2n} | m \rangle \quad (432)$$

を求めよ。

10 observable のスペクトル

この節では、Observable の集まりをかんがえる。一般に Observable は可換ではない。そのときに不確定性関係が生じる。前節では固有値に縮退がないときにひとつの observable の固有関数からなる完全規格直交系が決定し、observable の観測の理論ができあがった。この理論を一般化して、固有値に縮退があるときに可換な observable の組が一つの observable の役割をすることを述べる。さらに固有値が連続スペクトルを持つときをかんがえる。

10.1 連続固有値

10.1.1 関数の極限としてのデルタ関数

この節以降では連続固有値を取り扱うために Dirac のデルタ関数を使う。

$$d_\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi\sigma^2}} e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}} \quad (433)$$

という関数を考えてみよう。積分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}} dx = \sqrt{\pi\sigma^2} \quad (434)$$

を使うと

$$\int_{-\infty}^{\infty} d_{\sigma}(x) dx = 1 \quad (435)$$

であり、 σ が小さくなると $x = 0$ にあるピークがますます高く鋭くなる。この関数の $\sigma \rightarrow 0$ の極限を考えて

$$\delta(x) = \lim_{\sigma \rightarrow 0} d_{\sigma}(x) \quad (436)$$

とおくと

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & x \neq 0 \\ +\infty & x = 0 \end{cases} \quad (437)$$

となるので、本来の関数ではない。いま $f(x)$ を $x = 0$ において連続な関数とすると

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d_{\sigma}(x) f(x) dx = f(0) \quad (438)$$

が必ず成り立つので $\lim_{\sigma \rightarrow 0}$ と $\int_{-\infty}^{\infty} dx$ の順序をとりかえて、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0) \quad (439)$$

と書くことにする。これが Dirac のデルタ関数の基本的性質である。

Dirac のデルタ関数は他にもいろいろな表示法がある。

次の関数を考えよう。

$$\delta_{\epsilon}(x) = \begin{cases} 0 & x^2 > \epsilon^2 \\ \frac{1}{2|\epsilon|} & x^2 < \epsilon^2 \end{cases} \quad (440)$$

Dirac のデルタ関数はこの関数の極限とも考えられる。

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta_{\epsilon}(x) \quad (441)$$

例題

波動関数としての $d_{\sigma}(x)$ のノルム $\|d_{\sigma}\|$ を求めよ。またそのでの極限 $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \|d_{\sigma}\|$ はいくつか？

(解)

$$\|d_{\sigma}\| = \frac{1}{\pi\sigma^2} \int e^{-\frac{2x^2}{\sigma^2}} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \longrightarrow \infty \quad (442)$$

例題

波動関数としての $\delta_\epsilon(x)$ のノルム $\|\delta_\epsilon\|$ を求めよ。またその極限 $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \|\delta_\epsilon\|$ はいくつか？

(解)

$$\|\delta_\epsilon\| = \frac{1}{2\epsilon} \longrightarrow \infty \quad (443)$$

また積分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\sin x}{x}\right)^2 dx = \pi \quad (444)$$

を使うと Dirac のデルタ関数は次のような表現をもつことがわかる。

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{1}{a\pi} \frac{\sin^2 ax}{x^2} \quad (445)$$

Dirac のデルタ関数の性質を詳しくしらべてみよう。Dirac のデルタ関数は偶関数である。

$$\delta(-x) = \delta(x) \quad (446)$$

$x = a$ にピークをもつデルタ関数は $\delta(x - a)$ である。これについて

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - a) dx = f(a) \quad \text{なので、} \quad (447)$$

$$f(x) \delta(x - a) = f(a) \delta(x - a) \quad (448)$$

例題

本来の関数にたいする置換積分の公式が適用できると仮定して、つぎの式が証明せよ。

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x) \quad (449)$$

$$\delta(ax - b) = \frac{1}{|a|} \delta\left(x - \frac{b}{a}\right) \quad (450)$$

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2|a|} \{\delta(x + a) + \delta(x - a)\} \quad (451)$$

例題

$f(x) = a$ の解が $x_1, x_2, \dots, x_n$ の n 個だけだとし、 $0 < |f'(x_i)| < \infty$ とすると

$$\delta(f(x) - a) = \sum_{i=1}^n |f'(x_i)|^{-1} \delta(x - x_i) \quad (452)$$

が成り立つことをしめせ。

10.1.2 位置演算子の固有値問題：波動関数の意味

位置演算子 $\hat{x}$

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x) \quad (453)$$

の固有値問題は x' を固有値をしめす実数として、次のように書かれる。

$$\hat{x}\psi_{x'}(x) = x'\psi_{x'}(x) \quad (454)$$

左辺は位置演算子の定義により、 $x\psi_{x'}(x)$ であるから、

$$(x - x')\psi_{x'}(x) = 0 \quad (455)$$

x' はすべての実数をとると考えて、これから、 $x \neq x'$ では $\psi_{x'}(x) = 0$ 、さらに $\psi_{x'}(x') = \infty$ と考えれば、

$$\psi_{x'}(x) = c\delta(x - x') \quad (456)$$

でなくてはならない。

Dirac の記法をもちいた書き方では、いまの固有値問題は

$$\hat{x}|x' \rangle = x'|x' \rangle \quad (457)$$

とかかれる。以下で、ケットベクトルと波動関数との正確な関係を打ちたてよう。

固有ベクトル $|x' \rangle$ をうえで $c = 1$ とした波動関数

$$\psi_{x'}(x) = \delta(x - x') \quad (458)$$

に対応するものとすれば、内積の定義から

$$\langle x' | x'' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') \delta(x - x'') dx = \delta(x'' - x') \quad (459)$$

となるので固有関数 $|x' \rangle$ または $\psi_{x'}(x)$ が拡張された意味での規格直交系をなすことがわかる。

波動関数 $\psi(x)$ に対応する状態を $|\psi \rangle$ とすると、

$$\langle x' | \psi \rangle = \psi(x') \quad (460)$$

が示される。これをつかって、 $|\psi \rangle, |\psi' \rangle$ の内積の計算をすれば、

$$\langle \psi | \psi' \rangle = \int \psi^*(x) \psi'(x) dx = \int \langle \psi | x \rangle \langle x | \psi' \rangle dx \quad (461)$$

これから 1 の分解の式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx' |x' \rangle \langle x'| = I \quad (462)$$

がえられるが、これは固有関数 $|x' \rangle$ の完全性を証明するものと考えることができる。

したがって任意の波動関数 $|\psi \rangle$ が $\hat{x}$ の固有関数で展開できる。

$$|\psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' c(x') |x' \rangle \quad (463)$$

さらに $\langle x' |$ との内積をとると

$$\langle x' | \psi \rangle = \int dx'' c(x'') \langle x' | x'' \rangle = \int dx'' c(x'') \delta(x' - x'') \quad (464)$$

したがって

$$c(x') = \langle x' | \psi \rangle \quad (465)$$

と書けるということである。

そして重要な関係式

$$\langle x' | \psi \rangle = \psi(x') \quad (466)$$

が導かれる。3次元のばあいには、 $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ の同時固有関数 $|x' y' z' \rangle$ をつかって

$$\langle x' y' z' | \psi \rangle = \psi(x', y', z') \quad (467)$$

あるいは

$$\langle x' | \psi \rangle = \psi(x') \quad (468)$$

とあらわされる。

これは Dirac のケット記号で書かれた波動関数が具体的にどんな関数であるかを簡潔に示している。波動関数というのは状態を observable $\hat{x}$ の固有関数で展開したときの展開係数であることがこれではっきりしたことになる。このように考えると**波動力学は量子力学の一つの形式にすぎない**ことになる。

observable $\hat{x}$ のスペクトル分解は

$$\hat{x} = \int_{-\infty}^{\infty} dx' x' |x' \rangle \langle x'| \quad (469)$$

となる。

波動関数が規格化されていれば

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x' \rangle \langle x'| \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |\langle x' | \psi \rangle|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |\psi(x')|^2 \quad (470)$$

このことから observable $\hat{x}$ の観測について次のような一般化をしても良いことがわかる。

規格化された状態で observable $\hat{x}$ を観測すると実数がえられる。そして x' と $x' + dx'$ の間の値が得られる確率は

$$dW = |\langle x' | \psi \rangle|^2 dx' = |\psi(x')|^2 dx' \quad (471)$$

である。このとき確率の総和は 1 である。

$$\int dW = 1 \quad (472)$$

これは波動力学の導入に際し、基本仮定としたものである。

10.1.3 例：デルタ関数の微分と積分

デルタ関数自身の微分と積分も定義できる。

$$\int_{-\infty}^x \delta(y) dy = \theta(x) \quad (473)$$

だからデルタ関数を step function の導関数と考えてもよい。このようにデルタ関数を n 回積分すると C_{n-2} 級の連続性をもつようになる。

部分積分の公式を適用して、

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta'(x) dx &= -f'(0) \\ \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta^{(n)}(x) dx &= (-)^n f^{(n)}(0)\end{aligned}\quad (474)$$

ここで $f(x)$ は $x=0$ において必要な回数だけ連続微分可能とする。¹¹
デルタ関数のもう一つの表示を与えておこう。

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dx = f(k) \quad (475)$$

とすると明らかに

$$f(0) = +\infty \quad (476)$$

である。 $k \neq 0$ のときは

$$f(k) = \frac{1}{2\pi} \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^L e^{ikx} dx \quad (477)$$

$$= \frac{1}{\pi} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sin kL}{k} \quad (478)$$

$L \rightarrow \infty$ で $\frac{\sin kL}{k}$ は $-\frac{1}{k}$ と $\frac{1}{k}$ の間を振動するのでこの極限は存在しない。Cesàro の総和法ではこの極限を平均値の 0 とする。ここではそれを採用することにとすると

$$f(k) = \begin{cases} 0 & k \neq 0 \\ +\infty & k = 0 \end{cases} \quad (479)$$

また

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(k) dk = \frac{1}{\pi} \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin kL}{k} dk \quad (480)$$

$$= 1 \quad (481)$$

となる。ここで極限と積分の操作の順序を交換できるとし、また積分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin x}{x} dx = \pi \quad (482)$$

を使った。これらの性質をみたす関数はまさしくデルタ関数 $\delta(k)$ であるから次の表示がえられる。

$$\delta(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dx \quad (483)$$

¹¹ $f(x)\delta'(x)dx = -f'(x)\delta(x)$ とすることはできないことに注意しよう。なお公式

$$\{f(x) - f(y)\}\delta'(x-y) = -f'(x)\delta(x-y)$$

の真偽について検証すること

10.1.4 運動量演算子の固有値問題

運動量演算子 $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ の固有値問題

$$\hat{p}\psi(x) = p'\psi(x) \quad (484)$$

を考えよう。 $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ は hermite 演算子であるから、固有値 p' を実数として

$$\psi_{p'}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip'x}{\hbar}} \quad (485)$$

が固有関数の候補である。これを Dirac の記法で $|p' \rangle$ とすると

$$(\psi_{p'}, \psi_{p''}) = \langle p' | p'' \rangle = \delta(p' - p'') \quad (486)$$

となるのでこれが運動量作用素の規格化された固有関数である。

さらに次の形の完全性が証明できる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp' |p' \rangle \langle p'| = I \quad (487)$$

このことの意味は任意の波動関数 $|\psi \rangle$ が $\hat{p}$ の固有関数で展開できて、

$$\begin{aligned} |\psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dp' c(p') |p' \rangle \\ c(p') &= \langle p' | \psi \rangle \end{aligned} \quad (488)$$

と書けるということである。運動量演算子のスペクトル分解は

$$\hat{p} = \int_{-\infty}^{\infty} dp' p' |p' \rangle \langle p'| \quad (489)$$

とかける。

このように運動量演算子の固有値スペクトルは連続であり、その固有関数は規格化できないので、Hilbert 空間に属さないが、それらは上述の意味で完全規格直交系をなし、任意の波動関数がそれで展開できる。連続スペクトルをもつ Hermite

演算子については、この条件を満たすときそれを observable (数学では自己共役演算子) であるということにする。

例題

位置作用素 $\hat{x}$ を対角化する表示で、位置作用素の行列要素 $\langle x'|\hat{x}|x'' \rangle$ と運動量作用素の行列要素 $\langle x'|\hat{p}|x'' \rangle$ を求めよ。

(答え)

$$\langle x'|\hat{x}|x'' \rangle = x' \delta(x' - x'') \quad (490)$$

$$\langle x'|\hat{p}|x'' \rangle = -i\hbar \delta'(x' - x'') \quad (491)$$

例題

運動量作用素 $\hat{p}$ を対角化する表示で、運動量作用素の行列要素 $\langle p'|\hat{p}|p'' \rangle$ と位置作用素の行列要素 $\langle p'|\hat{x}|p'' \rangle$ を求めよ。

(答え)

$$\langle p'|\hat{p}|p'' \rangle = p' \delta(p' - p'') \quad (492)$$

$$\langle p'|\hat{x}|p'' \rangle = i\hbar \delta'(p' - p'') \quad (493)$$

例題

3次元において位置作用素の固有ベクトルの完全性はいかに表されるか？

(答え)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |x'y'z' \rangle \langle x'y'z'| dx' dy' dz' = I \quad (494)$$

例題

3次元において次の関係式を証明せよ。

$$\langle \mathbf{x}'|\psi \rangle = \psi(\mathbf{x}) \quad (495)$$

$$\langle \mathbf{x}'|\mathbf{x}'' \rangle = \delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') \quad (496)$$

$$\langle \mathbf{p}'|\mathbf{p}'' \rangle = \delta^3(\mathbf{p}' - \mathbf{p}'') \quad (497)$$

$$\langle \mathbf{x}'|\mathbf{p}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'} \quad (498)$$

$$\langle \mathbf{p}'|\mathbf{x}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'} \quad (499)$$

例題

運動量の固有関数

$$\psi_{p'}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip'x}{\hbar}} \quad (500)$$

は無限のノルムをもつが、これを p' の有限の範囲にわたって均して (smooth-out) できるベクトル

$$\Psi_{P,q}(x) = \int_{P-\frac{q}{2}}^{P+\frac{q}{2}} \psi_{p'}(x) dp' \quad (501)$$

は規格化が可能である。そのノルムを求めよ。

(答え)

$$\Psi_{P,q}(x) = -i\sqrt{\frac{2\hbar}{\pi}} \frac{1}{x} \sin \frac{qx}{2\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}Px} \quad (502)$$

これより

$$\|\Psi_{P,q}\| = \sqrt{q} \quad (503)$$

が得られる。

10.2 混合的スペクトルをもつ observable の観測

Hermite 演算子 $\hat{F}$ が離散スペクトルと連続スペクトルの両方をもつとしよう。

$$\begin{aligned} \hat{F}|\lambda_i\rangle &= \lambda_i|\lambda_i\rangle \quad \text{for } i=1,2,\dots \\ \hat{F}|\lambda\rangle &= \lambda|\lambda\rangle \quad \text{for } L_1 < \lambda < \infty \\ &= \lambda_1 < \lambda_2 < \dots < L_1 \end{aligned} \quad (504)$$

このとき簡単のため固有値の縮退はないとすれば、固有関数の直交関係

$$\begin{aligned} \langle \lambda_i | \lambda_j \rangle &= \delta_{ij} \\ \langle \lambda | \lambda' \rangle &= \delta(\lambda - \lambda') \\ \langle \lambda_i | \lambda' \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (505)$$

がなりたつ。さらに

$$\sum_{i=1}^{\infty} |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i| + \int_{L_1}^{\infty} |\lambda\rangle \langle \lambda| d\lambda = I \quad (506)$$

という形の完全性が成り立つとき $\hat{F}$ を observable であるとよぼう。
 このとき規格化できる任意の波動関数 $|\psi\rangle$ が $\hat{F}$ の固有関数で展開できて、

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{i=1}^{\infty} c_i |\lambda_i\rangle + \int_{L_1}^{\infty} c(\lambda) |\lambda\rangle d\lambda \\ c_i &= \langle \lambda_i | \psi \rangle \\ c(\lambda) &= \langle \lambda | \psi \rangle \end{aligned} \quad (507)$$

と表される。 $\hat{F}$ 自身のスペクトル表示は

$$\hat{F} = \sum_{i=1}^{\infty} |\lambda_i\rangle \lambda_i \langle \lambda_i| + \int_{L_1}^{\infty} |\lambda\rangle \lambda \langle \lambda| d\lambda \quad (508)$$

となる。

$\langle \psi | \psi \rangle = 1$ と規格化した状態 $|\psi\rangle$ において observable $\hat{F}$ を観測して離散スペクトルのうちの λ_i が得られる確率が

$$|\langle \lambda_i | \psi \rangle|^2 \quad (509)$$

で与えられる。また連続スペクトルに属する固有値の λ から $\lambda + d\lambda$ までの範囲の値が得られる確率が

$$|\langle \lambda | \psi \rangle|^2 d\lambda \quad (510)$$

で与えられると解釈しよう。このとき全確率の総和が1になる。すなわち

$$\sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 + \int_{L_1}^{\infty} |c(\lambda)|^2 d\lambda = \langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (511)$$

10.2.1 有限の深さの井戸型ポテンシャル： $E > 0$ の場合

10.2.2 量子力学の一般形式

10.3 可換な observable

10.3.1 周期的境界条件を課したときの運動量の固有値問題

1次元の系について、周期的境界条件

$$\psi(x + L) = \psi(x) \quad (512)$$

をおき、これを満たすもののなかから運動量

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (513)$$

の固有値問題を解こう。固有値は離散な値

$$p_n = \frac{2\pi\hbar}{L}n \quad (514)$$

をとり、固有関数は一意的に決まって

$$\psi_{p_n}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{\frac{i}{\hbar}p_n x} \quad (515)$$

であることがわかる。

3次元の場合には、周期的境界条件

$$\psi(x+L, y, z) = \psi(x, y+L, z) = \psi(x, y, z+L) = \psi(x, y, z) \quad (516)$$

および、内積の定義

$$(\psi_1, \psi_2) = \int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^L dz \psi_1^*(x, y, z) \psi_2(x, y, z) \quad (517)$$

を課する。このとき $\hat{p}_x$ の固有関数は一意的に決まらなかつ、 $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ の同時固有値方程式

$$\hat{p}_x \psi = p_x \psi \quad (518)$$

$$\hat{p}_y \psi = p_y \psi \quad (519)$$

$$\hat{p}_z \psi = p_z \psi \quad (520)$$

をとくと固有値は、 (n_x, n_y, n_z) を独立な正数の組として

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L}n_x \quad (521)$$

$$p_y = \frac{2\pi\hbar}{L}n_y \quad (522)$$

$$p_z = \frac{2\pi\hbar}{L}n_z \quad (523)$$

であることがわかる。そしてこれらの固有値に属する同時固有関数が一意的に決定する：

$$\psi_{p_x, p_y, p_z}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)\right] \quad (524)$$

これが3次元 Fourier 級数の底であることから、完全規格直交系をなすことは明らかである。

また自由粒子のエネルギーは p_x, p_y, p_z の関数として

$$H(p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \quad (525)$$

として与えられているので、量子力学的 Hamiltonian

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) \quad (526)$$

の固有値は

$$H(p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \quad (527)$$

$$= \frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (528)$$

この例では前節で縮退のない一つの observable が果たした役割を可換な observable の組 $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ が果たしていることがわかる。以下ではこの事を一般的に論ずる。

10.3.2 可換な observable の同時観測

量子力学において Hermite 演算子の固有値に縮退がおきるときにも、その固有関数で任意の波動関数を展開できるときこれを自己共役演算子と呼び、observable であるとしよう。その時の問題は、ひとつの observable の固有値を指定しても固有ベクトルが一意的に決まらないので、この observable だけでは完全規格直交系を一意的に決定できないことである。

定理：可換な 2 つの observable があるとき、任意の波動関数がそれらの同時固有関数で展開できる。

証明。可換な 2 つの observable を $\hat{A}, \hat{B}$ とする。任意の波動関数 ψ を $\hat{A}$ の固有ベクトルで展開して、

$$\psi = \sum_a \psi_a \quad (529)$$

とかく。このとき和 $\sum_a$ は $\hat{A}$ のすべての固有値 a にわたってとられる。また固有状態 ψ_a は規格化されていない。この ψ_a は $\hat{B}$ の固有ベクトルで展開できるから、その形を

$$\psi_a = \sum_b \phi_{a,b} \quad (530)$$

とかこう。このとき和 $\sum_b$ は $\hat{B}$ のすべての固有値にわたってとられ、固有状態 $\phi_{a,b}$ は規格化されていない。このとき $\hat{B}$ の固有関数 $\phi_{a,b}$ が依然として $\hat{A}$ の固有関数でもあることを示せば ψ が $\hat{A}, \hat{B}$ の同時固有関数で展開されたことになる。そこでベクトル

$$\xi_{a,b} = (\hat{A} - a)\phi_{a,b} \quad (531)$$

がゼロになるか調べてみる。左から $\hat{B}$ を作用させると

$$\hat{B}\xi_{a,b} = \hat{B}(\hat{A} - a)\phi_{a,b} \quad (532)$$

$$= (\hat{A} - a)\hat{B}\phi_{a,b} \quad (533)$$

$$= b(\hat{A} - a)\phi_{a,b} \quad (534)$$

$$= b\xi_{a,b} \quad (535)$$

だからベクトル $\xi_{a,b}$ は固有値 b に属する $\hat{B}$ の固有ベクトルである。ここで $\hat{A}, \hat{B}$ の可換性を使った。これを b について加えあわせると、

$$\sum_b \xi_{a,b} = \sum_b (\hat{A} - a)\phi_{a,b} = (\hat{A} - a) \sum_b \phi_{a,b} = (\hat{A} - a)\psi_a = 0 \quad (536)$$

となるが、これは $\hat{B}$ の直交するの固有ベクトル $\xi_{a,b}$ ばかりをくわえて 0 になることをしめしているのので、 $\xi_{a,b} = 0$ が結論される。したがって $\phi_{a,b}$ は $\hat{A}$ の固有ベクトルでもある。よって ψ は $\hat{A}, \hat{B}$ の同時固有ベクトルによって展開されている：

$$\psi = \sum_a \sum_b \phi_{a,b} \quad (537)$$

$\hat{B}$ の固有関数による展開を先に行っても同じ表式がえられ、その時の $\phi_{a,b}$ は同一であることに注意しよう。すなわち波動関数を可換な observable の同時固有関数で展開する方法は一意的である。

いま二つの可換な observable A, B があって、それらの同時固有状態が複素定数を除いて一意的に決定するとき、 **A, B を可換な observable の完全な組**と呼ぶ。

このときには A, B の固有値の組 a, b でラベルされる完全規格直交系 $|a, b\rangle$ が存在してこれらによって任意の波動関数を一意的に展開できる。これらの規格直交関係, 完全関係, observable A, B のスペクトル分解はそれぞれ

$$\langle a, b | c, d \rangle = \delta_{ac} \delta_{bd} \quad (538)$$

$$\sum_a \sum_b |a, b\rangle \langle a, b| = I \quad (539)$$

$$A = \sum_a \sum_b a |a, b\rangle \langle a, b| \quad (540)$$

$$B = \sum_a \sum_b b |a, b\rangle \langle a, b| \quad (541)$$

と表現できる。

二つの可換な observable A, B をもってしてもまだその固有値の縮退が除けないときには、さらに A, B のどちらとも交換する observable C を持ってきて、三つの可換な observable A, B, C の同時固有状態 $|a, b, c\rangle$ を求める。このように最後には可

換な observable の完全な組 $A, B, \dots, F$ を求めることができ、それらの同時固有状態 $|a, b, \dots, f\rangle$ から成る完全規格直交系を作ることができる。

前の章で扱った固有値に縮退がない observable はそれ自身で可換な observable の完全な組をなしているとみなせる。従って**可換な observable の完全な組は縮退のない一つの observable と同じ役目をしている。**

10.4 不確定性関係：非可換な Observable の観測

いま二つの observable $\hat{P}, \hat{Q}$ が非可換で

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = i\hat{R} \quad (542)$$

としよう。 $\hat{R}$ も hermite 作用素になる。ここでは規格化された状態 ψ における期待値を $\langle \rangle$ で表すことにする。 $\hat{P}, \hat{Q}$ をその期待値から目盛り直したものをそれぞれ

$$\hat{A} = \hat{P} - \langle \hat{P} \rangle \quad (543)$$

$$\hat{B} = \hat{Q} - \langle \hat{Q} \rangle \quad (544)$$

とおくと、これらも observable であり、

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{R} \quad (545)$$

をみたす。 $\hat{P}, \hat{Q}$ の平均値からのずれ（偏差）は

$$\Delta P = \sqrt{\hat{A}^2} \quad (546)$$

$$\Delta Q = \sqrt{\hat{B}^2} \quad (547)$$

とかくことができる。

いま λ を実数としてベクトル $(\hat{A} + i\lambda\hat{B})\psi$ のノルムの2乗を考えると、これは負にはならないから、

$$\|(\hat{A} + i\lambda\hat{B})\psi\|^2 = ((\hat{A} + i\lambda\hat{B})\psi, (\hat{A} + i\lambda\hat{B})\psi) \quad (548)$$

$$= (\psi, (\hat{A} - i\lambda\hat{B})(\hat{A} + i\lambda\hat{B})\psi) \quad (549)$$

$$= (\psi, (\hat{A}^2 - \lambda\hat{R} + \lambda^2\hat{B}^2)\psi) \quad (550)$$

$$= (\Delta P)^2 - \lambda \langle \hat{R} \rangle + \lambda^2 (\Delta Q)^2 \quad (551)$$

$$\geq 0 \quad (552)$$

がなりたつ。ゆえに λ の2次関数としての判別式が負

$$\langle \hat{R} \rangle^2 - 4(\Delta P)^2(\Delta Q)^2 \leq 0 \quad (553)$$

という結論がえられる。これより一般の**不確定性関係**

$$\Delta P \cdot \Delta Q \geq \frac{1}{2} | \langle [\hat{P}, \hat{Q}] \rangle | \quad (554)$$

が得られる。とくに $\hat{P}, \hat{Q}$ を 3 次元の座標と運動量のデカルト成分とおいてみると、

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (555)$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \quad (556)$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2} \quad (557)$$

となる。この関係式は **Heisenberg の不確定性原理** と呼ばれる。

例題

不確定性関係において等号が成り立つばあいは、非可換な Observable の不確定性が原理上最小になるときである。このような状態を見つけるためには、

$$\Delta P \cdot \Delta Q = \frac{1}{2} | \langle R \rangle | \quad (558)$$

として、さきの λ の 2 次式が最小値の 0 をとらなければならない。このとき、

$$\lambda = \pm \frac{\Delta P}{\Delta Q} \quad (559)$$

ここで複合 $\pm$ は $\langle R \rangle$ の符号である。(すなわち $| \langle R \rangle | = \pm \langle R \rangle$)

$$\left(\hat{A} \pm i \left(\frac{\Delta P}{\Delta Q} \right) \hat{B} \right) \psi = 0 \quad (560)$$

の解を求めればよい。

例題

1 次元の系で Heisenberg の不確定性関係の等号が成り立つような状態をもとめよ。

とくに $\langle \hat{x} \rangle = x_0, \langle \hat{p} \rangle = p_0, \Delta x = \sigma$ として求める波動関数を計算せよ。

(解) もとめる波動関数を ψ とし、規格化してあるとする。

$$p_0 = (\psi, \hat{p}\psi) \quad (561)$$

$$x_0 = (\psi, \hat{x}\psi) \quad (562)$$

$$\hat{A} = \hat{p} - p_0 \quad (563)$$

$$\hat{B} = \hat{x} - x_0 \quad (564)$$

λ をある実数として

$$\xi = (\hat{A} + i\lambda\hat{B})\psi \quad (565)$$

なるベクトルのノルムの2乗を計算すると

$$\|\xi\|^2 = \left(\frac{\hbar}{2\sigma} + \lambda\sigma\right)^2 \quad (566)$$

となるので $\lambda = -\frac{\hbar}{2\sigma^2}$ のとき $\xi = 0$ となる。すなわち微分方程式

$$\left(-i\hbar\frac{d}{dx} - p_0 - i\frac{\hbar}{2\sigma^2}(\hat{x} - x_0)\right)\psi(x) = 0 \quad (567)$$

がえられ、その解は

$$\psi(x) = \text{const.} \times \exp\left[-\frac{1}{4\sigma^2}(x - x_0)^2 + \frac{i}{\hbar}p_0x\right] \quad (568)$$

さらに解を規格化すると

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}}\frac{1}{\sigma}\exp\left[-\frac{1}{4\sigma^2}(x - x_0)^2 + \frac{i}{\hbar}p_0x\right] \quad (569)$$

となる。

10.4.1 observable の関数

定理：2つの observable の同時固有関数が完全系をなすならそれらの observable は可換である。

証明。任意の波動関数をの同時固有関数で展開して、

$$\psi = \sum_a \sum_b \phi_{a,b} \quad (570)$$

とする。このとき、

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \sum_a \sum_b \hat{A}\hat{B}\phi_{a,b} = \sum_a \sum_b b a b \phi_{a,b} = \hat{B}\hat{A}\psi \quad (571)$$

したがって

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad (572)$$

10.5 運動量表示の量子力学

運動量表示の波動関数 $\phi(p) = \langle p | \psi \rangle$ にたいして作用素 $\hat{x}, \hat{p}$ のはたらきは

$$\hat{x}\phi(p) = i\hbar \frac{d}{dp}\phi(p) \quad (573)$$

$$\hat{p}\phi(p) = p\phi(p) \quad (574)$$

したがって Hamiltonian $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ は次のような微分作用素になる：

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(i\hbar \frac{d}{dp}) \quad (575)$$

10.5.1 一様な力を受ける粒子

1次元の系で一様な力 $-k$ を受ける粒子の運動を調べよう。 $k > 0$ としてハミルトン関数は

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + kx \quad (576)$$

だからハミルトン作用素

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + i\hbar k \frac{d}{dp} \quad (577)$$

の固有値方程式

$$\hat{H}\phi(p) = E\phi(p) \quad (578)$$

をとけばよい。この時任意の実数 E が固有値になる。固有関数に対する微分方程式

$$\frac{d}{dp}\phi(p) = \frac{i}{k\hbar} \left(\frac{p^2}{2m} - E \right) \phi(p) \quad (579)$$

はすぐにとけて、

$$\phi(p) = \exp\left[\frac{i}{k\hbar} \int^p \left(\frac{p^2}{2m} - E \right) dp\right] \quad (580)$$

$$= \exp\left[\frac{i}{k\hbar} \left(\frac{p^3}{6m} - Ep \right)\right] \quad (581)$$

が得られる。

$$(\phi_E, \phi_{E'}) = \delta(E - E') \quad (582)$$

と規格化した固有関数 ϕ_E は

$$\phi_E(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi k\hbar}} \exp\left[\frac{i}{k\hbar} \left(\frac{p^3}{6m} - Ep \right)\right] \quad (583)$$

である。

10.5.2 調和振動子

ハミルトン作用素

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2 \frac{d^2}{dp^2} \quad (584)$$

の固有値方程式

$$\hat{H}\phi(p) = E\phi(p) \quad (585)$$

をとけばよい。

$$q = \frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}; \frac{d}{dq} = \sqrt{m\omega\hbar} \frac{d}{dp} \quad (586)$$

とすると、

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(q^2 - \frac{d^2}{dq^2} \right) \quad (587)$$

q 表示のエネルギー固有関数は

$$\langle q|n \rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(q) e^{-\frac{1}{2}q^2} \quad (588)$$

p 表示のエネルギー固有関数は

$$\langle p|n \rangle = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n\left(\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right) e^{-\frac{p^2}{2m\omega\hbar}} \quad (589)$$

Hermite 多項式は次のように定義される。

$$H_n(y) = e^y \left(-\frac{d}{dy} \right)^n e^{-y^2} \quad (590)$$

これらは x 表示の波動関数から Fourier 変換によって計算してもよい。そのための公式は

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dy H_n(y) e^{-\frac{1}{2}y^2 + i q y} = i^n H_n(q) e^{-\frac{1}{2}q^2} \quad (591)$$

例題

q 表示による生成消滅演算子をもとめよ。

$$(\text{解}) \quad a = \frac{i}{\sqrt{2}} \left(q + \frac{d}{dq} \right), a^\dagger = -\frac{i}{\sqrt{2}} \left(q - \frac{d}{dq} \right)$$

例題

p 表示の Coherent States をもとめよ。