

量子力学IAの講義ノート

百武慶文

平成31年4月11日

目次

1	量子論のはじまり	4
1.1	Planck 放射 (輻射)	4
1.2	Bohr 模型	5
1.3	演習問題	6
2	光の波動性と粒子性	8
2.1	光の波動性	8
2.2	光の粒子性	9
2.3	演習問題	10
3	物質の粒子性と波動性	11
3.1	物質の粒子性	11
3.2	物質の波動性	11
3.3	演習問題	12
4	1次元空間における Schrodinger の波動方程式	13
4.1	自由粒子に対する Schrodinger の波動方程式と不確定性関係	13
4.2	1次元空間における Schrodinger の波動方程式	15
4.3	物理量の演算子による表示および不確定性関係	16
4.4	演習問題	18
5	井戸型ポテンシャルやポテンシャル障壁の下で運動する物質	19
5.1	定常状態の波動方程式	19
5.2	井戸型ポテンシャルの下で運動する物質 – 束縛状態と量子化	20
5.3	ポテンシャル障壁の下で運動する物質 – トンネル効果	23
5.4	結晶中を運動する物質のエネルギー準位 – バンド構造	25
5.5	演習問題	27
6	調和振動子のポテンシャル中を運動する物質	28
6.1	調和振動子のポテンシャル中を運動する物質	28
6.2	演習問題	30
7	古典力学と量子力学の対応について	31
7.1	解析力学による古典力学の定式化	31
7.2	量子力学の Schrodinger 表示と Heisenberg 表示	32
7.3	演習問題	33
8	ブラ・ケットベクトルと演算子による量子力学の定式化	34
8.1	ヒルベルト空間とブラ・ケットベクトル	34
8.2	演算子と物理量	36
8.3	Schrodinger 表示と Heisenberg 表示	37
8.4	調和振動子のブラ・ケットによる表示	38

8.5 演習問題	39
A 物理定数について	41
B Bloch の定理	41
C 一般相対論による ∇^2 の極座標表示	42
D Hermite 多項式	43
E 3次元調和振動子	44

1 量子論のはじまり

1.1 Planck 放射 (輻射)

物体の運動は Newton の運動の 3 法則によって体系的に理解できるようになり、19 世紀末までには電場と磁場に関する基本法則である Maxwell 方程式が導き出された。現代ではこれらの分野は「力学」および「電磁気学」として体系化されており、我々が日常生活で経験する物体の現象はこれらの 2 つの理論によって理解できるといっても過言ではない。

しかしながら、19 世紀になって産業が著しく発展し莫大なエネルギーを利用するようになると、人類は日常生活を超えたレベルの現象を取り扱う必要にせまられた。特に、製鉄業では炉内の温度を正確に見極める必要が生じ、炉から放射される光のエネルギースペクトル分布と温度がどのような関数に従うのかを明らかにすることは重要な研究であった。ところが、古典力学と電磁気学ではエネルギースペクトル分布を説明することができなかった。この問題は人々を大いに悩ませたが、1900 年になって Planck は単位体積当たりのエネルギースペクトル分布が、今日では Planck の放射公式と呼ばれる

$$\begin{aligned} U(\nu, T) &= \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \times \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-\frac{nh\nu}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{nh\nu}{kT}}} \\ &= \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}, \end{aligned} \quad (1)$$

のような関数で上手く説明できることを発見した¹。ここで ν は光の振動数、 c は光速、 k は Boltzmann 定数であり、 h は観測との比較により

$$h = 2\pi\hbar = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js}, \quad (2)$$

のような値をとる。 h はプランク定数と呼ばれる物理学の基本定数である。量子力学では h を 2π で割った \hbar (エッチバー) を使うことが多い。

Planck は放射公式 (1) を数理的に導出するにあたって「量子化」の概念を導入した。具体的には、光のエネルギーは振動数 ν に比例し、 $h\nu$ を単位とする離散的な値

$$E_n = nh\nu, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (3)$$

のみを取ると仮定したのである²。この式の物理的意味は、1905 年に Einstein による光電効果の説明で明らかになった。式 (3) は、振動数 ν の光 (=光子) は $E = h\nu$ のエネルギーをもつことを示しており、光の粒子性を表す式である。このようなエネルギーの量子化は、古典力学と電磁気学では説明することができない。それを説明する理論があるとすれば、それは古典力学と電磁気学とは体系的に異なる理論である。

なお、Planck の放射公式 (1) は初期宇宙を研究するうえでも重要になっている。現在の宇宙には宇宙初期に放出された電磁波が残存しており、それがまさに $T = 2.7 \text{ K}$ の Planck の放射公式とぴたりと一致するのである。

¹式 (1) の 1 行目は統計力学の考え方を適用している。

²角振動数を ω とすると、 $E = n\hbar\omega$ である。

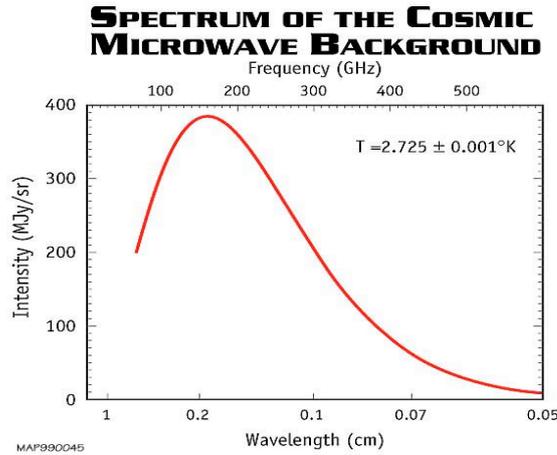


図 1: 宇宙背景放射のスペクトル (<http://wmap.gsfc.nasa.gov/media/ContentMedia/990015b.jpg> より転載)

1.2 Bohr 模型

エネルギーの量子化については、水素原子から放出されるスペクトルでも見つかっていた。実際、1885年に Balmer が Balmer 系列を発見したことを基に、1890年に Rydberg は放出される光の振動数は連続的ではなく以下のような離散的な値を取るであろうと提唱した。

$$\nu = Rc \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad m = 1, 2, 3, \dots, \quad n = m + 1, m + 2, \dots \quad (4)$$

c は光速で、 $R = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ は Rydberg 定数である。Balmer 系列は $m = 2$ の系列であり、他の系列も 20 世紀に入って実際に観測された。 $m = 1, 3, 4$ はそれぞれ Lyman 系列、Paschen 系列、Blackett 系列と呼ばれる。

1911 年になると、ラザフォード散乱により原子は原子核とその周りを運動する電子からなることが明らかになった。1913 年に Bohr は、光の振動数が離散的な値になる理由は水素原子内の電子のエネルギーが量子化されていることに起因すると推測した。Bohr による説明は以下の通りである。まず、水素原子の原子核の周りを電子が円軌道を描いているとすると、動径方向の運動方程式より

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \quad (5)$$



図 2: Balmer 系列は可視光のスペクトル線 (http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Emission_spectrum-H.png より転載)

を得る。ここで m_e は電子の質量で原子核に比べて十分軽いとし、 e は素電荷、 ϵ_0 は真空中での誘電率、 v は速度、 r は円軌道の半径とした。ここまでは古典力学であるが、Bohr はさらに電子の角運動量は

$$m_e v r = n \hbar, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (6)$$

のような量子化された値のみをとると仮定したのである。これによって r と v は離散的な値

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} n^2, \quad v = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar n}, \quad (7)$$

を取ることになる。従って電子のエネルギー準位も

$$E_n = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad (8)$$

のように量子化されることになる。電子が E_n のエネルギー準位から E_m のエネルギー準位に遷移することで、この分のエネルギーを電磁波として放出すると考えると、電磁波の振動数は

$$\nu = \frac{E_n - E_m}{h} = \frac{m_e e^4}{64\pi^3 \epsilon_0^2 \hbar^3} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (9)$$

のようになる。これは Rydberg の式 (4) を再現し、かつ Rydberg 定数は $R = m_e e^4 / 64\pi^3 \epsilon_0^2 \hbar^3 c$ のように表されることを示している。水素原子のエネルギー準位が量子化されることは、Frank と Hertz の実験によって 1914 年に確かめられた。

式 (3) および式 (8) は観測事実を見事に再現するが、その導出過程では古典力学や電磁気学の枠を超えた仮定を行った。このような仮定を正当化するために生み出されたのが量子力学である。そして、その本質は光や電子には粒子性と波動性が備わっているという点にある。エネルギー量子化の式 (8) は電子が波動方程式を満たすことから導くことができる。この波動方程式は 1926 年に Schrodinger によって提案されたもので、Bohr の仮定をより深いレベルで正当化するものになっている。この講義では Schrodinger の波動方程式とその解釈を解説し、それを解くことによってエネルギーの量子化や水素原子のスペクトルについて説明をする。また、後半ではブラケットや演算子を用いた量子力学の定式化を行う。

1.3 演習問題

1. Planck の放射公式において、振動数 ν が小さいとき ($\frac{h\nu}{kT} \ll 1$) の近似式を求めよ。(Rayleigh-Jeans の熱放射式) さらに、振動数 ν が大きいとき ($\frac{h\nu}{kT} \gg 1$) の近似式を求めよ。(Wien の熱放射式)
2. Boltzmann の分布則では、温度 T の熱平衡状態においてエネルギー E の状態が見出される確率は $e^{-\frac{E}{kT}}$ に比例する。光子のエネルギーが $E_n = n h \nu$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) のように量子化されているとき、エネルギーの平均値を求めよ。

3. 可視光線の波長は大別すると以下ようになる。紫:390 nm、藍:420 nm、青:450 nm、緑:500 nm、黄:590 nm、橙:600 nm、赤:700 nm。赤色の光子のエネルギー $h\nu$ を計算せよ。
4. 電子の静止エネルギーは $m_e c^2 = 0.5 \text{ MeV}$ である。これと同じエネルギーをもつ光子の振動数と波長を求めよ。
5. ボーア半径 (ボーア模型の最小の半径) の値、および水素原子の基底状態のエネルギーを計算せよ。
6. 2次元平面内で運動している質量 m の粒子を考える。極座標を (r, θ) とするとき、 θ に共役な運動量 p_θ を求めよ。そして、Bohr の量子化条件は

$$\oint p_\theta d\theta = nh, \quad n = 1, 2, \dots,$$

のように書き表されることを示せ。(Bohr-Sommerfeld の量子化条件)

2 光の波動性と粒子性

Newton は、白色光がプリズム分光器によって赤色から紫色まで連続的に分解されることから、白色光は屈折率の異なる様々な色の光線からできていると考えた。そして光線は粒子の飛跡であると考え、光の粒子説を唱えた。一方で、Huygens は「Huygens の原理」によって波動の性質から光の反射や屈折を説明し、さらに Young は 1804 年の 2 重スリットの実験により、2 つのスリットを通った光は干渉を起こすことを発見した。これにより、光の波動説も支持を集めるようになった。この節では光の波動性と粒子性について 19 世紀後半以降の発展を解説し、その 2 重性を見ていくことにする。

2.1 光の波動性

19 世紀後半に Maxwell らによって電磁気学が完成し、光は真空中を光速 c で伝搬する電磁波であることが確立した。真空中の Maxwell 方程式から、電場 $\mathbf{E}(t, \mathbf{x})$ は波動方程式

$$(\partial_t^2 - c^2 \nabla^2) \mathbf{E} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \quad (10)$$

を満たすことが導かれる³。磁場も同様な波動方程式を満たし、電場と磁場は直交する。

式 (10) の解を具体的に求めてみよう。解の形を

$$e^{2\pi i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} + \nu t)}, \quad (11)$$

のように仮定する。 ν は振動数である。 \mathbf{k} は波数ベクトルと呼ばれるもので、その大きさは波長 λ によって $|\mathbf{k}| = 1/\lambda$ のように表される。上記の仮定を式 (10) に代入すると、振動数は $\nu = \pm c|\mathbf{k}|$ となることが分かる。従って解は

$$e^{2\pi i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} \pm c|\mathbf{k}|t)}, \quad (12)$$

のように表される。これは $\pm \mathbf{k}$ 方向に光速 c で伝搬する波を表す。一般解は、解の重ね合わせにより

$$\mathbf{E}(t, \mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} d^3 k \left(\mathbf{A}(\mathbf{k}) e^{2\pi i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - c|\mathbf{k}|t)} + \mathbf{A}(\mathbf{k})^* e^{-2\pi i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - c|\mathbf{k}|t)} \right), \quad (13)$$

のように求まる。ただし、電場は実場であることを考慮しており、また、 $\mathbf{A}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{k} = 0$ である。

例えば、適当な初期条件のもとでは、波動方程式の解は

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos \left\{ 2\pi \left(\frac{1}{\lambda} \mathbf{n} \cdot \mathbf{x} - \nu t \right) \right\}, \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{E}_0 = 0, \quad (14)$$

のように求められる。ここで、 ν および $\lambda = c/\nu$ は電磁波の振動数および波長であり、 $\mathbf{n} = (n^1, n^2, n^3)$ は電磁波の伝搬方向を表す単位ベクトルである。 $\frac{\mathbf{n}}{\lambda}$ は波数ベクトルである。また \mathbf{E}_0 は定数のベクトルで、 \mathbf{n} と直交する。これにより電磁波は横波であり、光の干渉や回折といった性質は波動方程式に従うことから説明することができる。

³ただし、 $\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla = \partial_i \partial^i = \partial_1^2 + \partial_2^2 + \partial_3^2$ 、 $\mathbf{n} \cdot \mathbf{x} = n_i x^i = n^1 x^1 + n^2 x^2 + n^3 x^3$ である。 x^i と x_i はベクトル \mathbf{x} の i 番目の成分を表し、同じ添え字を上と下に書いた場合は添え字について和をとることを暗黙の了解とする。これは縮約の記法と呼ばれる。

2.2 光の粒子性

光が電磁波であることが明らかになると、粒子説は棄却されるかに思われたが、20世紀に入ってからは光子の存在が実験によって確かめられることになる。Planckの仮定(3)はまさに光子の存在を言い当てたもので、 $E = nh\nu$ のエネルギー状態は $h\nu$ のエネルギーをもつ光子が n 個集まった状態だと解釈できる。このことを、より物理的な考察から正当化したのがEinsteinによる光電効果の説明である。

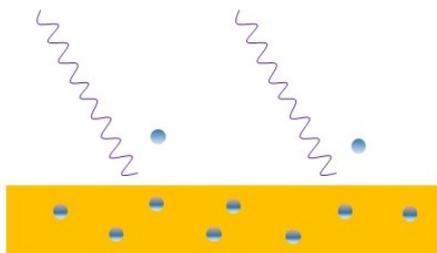


図 3: 光電効果

光電効果とは、金属の表面に電磁波を照射すると電子がたたき出される現象である。実験の結果、以下のことが分かっていた。

- 電磁波の振動数が ν_0 (値は金属の種類に依存する) より大きくなると電子がたたき出され、その運動エネルギーは電磁波の振動数 ν に比例する。
- たたき出される電子の個数は、電磁波の強さに比例する。

1905年にEinsteinは、電磁波は光子の集まりであり、光子1個のエネルギー E と運動量 \mathbf{p} は

$$E = h\nu, \quad \mathbf{p} = \frac{h}{\lambda} \mathbf{n}, \quad (15)$$

のように与えられると考えた⁴。ここで ν は振動数であり、 $\lambda = c/\nu$ は波長である。そして、 \mathbf{n} は単位ベクトルで光子の進行方向を表す。光子1個のエネルギーが電子1個の運動エネルギーに変換されたと解釈すると

$$\frac{1}{2}m_e v^2 = h\nu - h\nu_0, \quad (16)$$

のような式が成り立つ。 $h\nu_0$ は仕事関数と呼ばれる量で、電子と金属の結合を切るために必要なエネルギーである。比例定数 h は実験により測定可能であり、プランク定数と一致する。以上のようなEinsteinの考察によって、振動数 ν の電磁波はエネルギー $h\nu$ の光子

⁴特殊相対性理論により、質量 m の粒子のエネルギー E と運動量の大きさ p には $E = \sqrt{|\mathbf{p}|^2 c^2 + m^2 c^4}$ のような関係が常に成り立つ。光子は $m = 0$ なので、 $E = |\mathbf{p}|c$ である。

から構成されることが明らかになった。式 (15) を用いると真空中を \mathbf{n} 方向に伝搬する電磁波の電場 \mathbf{E} は

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos \left\{ 2\pi \left(\frac{1}{\lambda} \mathbf{n} \cdot \mathbf{x} - \nu t \right) \right\} = \mathbf{E}_0 \cos \left\{ \frac{1}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et) \right\}, \quad (17)$$

のように書き表せる。

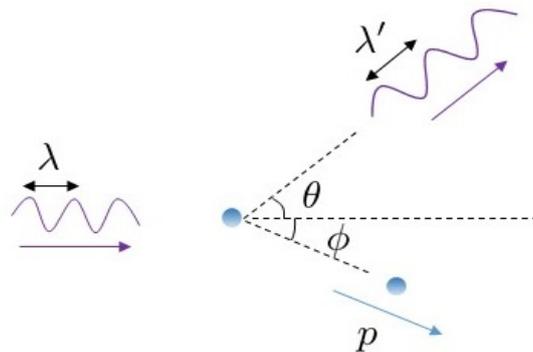


図 4: コンプトン効果

さらに、1923 年には Compton がコンプトン効果を光子の散乱により説明することに成功した。コンプトン効果とは、X 線を原子に照射するとより波長の長い X 線が散乱される現象であり、Compton はこれを光子と電子の 2 体散乱から説明した。入射 X 線の波長を λ とし、散乱される X 線の波長を λ' としよう。まずエネルギー保存則より

$$\frac{hc}{\lambda} + m_e c^2 = \frac{hc}{\lambda'} + \sqrt{p^2 c^2 + m_e^2 c^4}, \quad (18)$$

であり、また運動量保存により

$$\frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\lambda'} \cos \theta + p \cos \phi, \quad \frac{h}{\lambda} \sin \theta = p \sin \phi, \quad (19)$$

を得る。これらの式より ϕ と p を消去すると、波長の変化と θ の間の関係式

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta), \quad (20)$$

を導くことができる。この式は、散乱角に応じて波長の伸びが変化する実験結果とよく一致しており、これにより光子の存在は揺るぎないものとなった。

2.3 演習問題

1. 辺の長さが L の立方体に閉じ込められた電磁波を考える。このとき立方体の境界面では電場は 0 となる。一般解 (13) において、波数ベクトルはどのように表されるかを述べよ。
2. コンプトン効果を考える。反跳された電子の運動エネルギーを求めよ。また、その値が最大となるのはどのようなときか述べよ。

3 物質の粒子性と波動性

19世紀末から20世紀にかけては、物質を構成する素粒子が相次いで発見された。最初に発見された素粒子は電子で、まず1896年にZeemanはナトリウムから出る黄色のスペクトル線(D線)が磁場によって広がる現象(ゼーマン効果)を発見した。Lorentzは、この現象はナトリウム原子内部の荷電粒子の振動が原因だと考え、その比電荷を計算によって求めた。そして、1897年にJ. J. Thomsonは陰極線に電場や磁場をかけると陰極線が曲がることから、その正体は負電荷を帯びた粒子であると考えた。そしてその比電荷は、ZeemanとLorentzによって得られた値と一致したのである。これによって、原子内部には負電荷を帯びた電子が存在することが確立した⁵。さらに、1911年にはRutherfordによって正電荷を帯びた原子核の存在が明らかになった。原子核を構成する陽子(proton)は1918年にRutherfordにより発見され、中性子(neutron)は1935年にChadwickにより発見された。

さて、20世紀初頭までの研究によって、光は波動性と粒子性の両方を兼ね備えていることが明らかになった。そして、光子も素粒子であると考えられる。では素粒子は一般に波動性を備えているのではないか?そのような奇抜な考えは1924年にde Broglieによって提案された。そして、その考えは量子力学の構築には欠かせない発想だったのである。

3.1 物質の粒子性

物質とは物体を構成する粒子のことであり、例えば電子や陽子、中性子である⁶。電子が直接検証されたのは1897年のJ. J. Thomsonによる陰極線の実験による。陰極線に電場や磁場をかけることで、ローレンツ力を受けて運動する負電荷をもつ電子の存在が明らかになった。この実験で電子の比電荷が測定され、その後1909年にMilikanによって電気素量 $e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$ が測定されるなど、電子の粒子性は明白になった。陽子や中性子についても、原子内の原子核という $1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$ の長さの領域に存在することから、それらの粒子性は明らかであろう。

3.2 物質の波動性

光子が粒子性と波動性を備えた素粒子ならば、他の素粒子にも波動性があるのではないか?1924年にde Broglieは、波動性と粒子性は何も光に特有の性質ではなく、電子のような物質についても成り立つのではないかと仮説を立てた。具体的には、波動性と粒子性を関連付ける式(15)が全ての物質に当てはまるのではないかと考えた。

仮に電子を $V[\text{V}]$ の電圧で加速したとすると、電子の運動エネルギーは

$$\frac{p^2}{2m_e} = eV, \quad (21)$$

⁵ただし、Lorentzの理論はあくまでも古典力学であって、正しくは電子のスピンを考えないといけない。

⁶陽子や中性子は素粒子ではなく、クォーク3体からなる複合粒子である。電子は素粒子である。

となる。ただし、この式は電子の速度が光速に比べて十分小さいときに成り立つ式である。これを式 (15) の運動量に代入すると、電子の波長は

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV}} = \frac{12.3}{\sqrt{V}} \times 10^{-10} \text{ m}, \quad (22)$$

のようになる。従って、100 V 程度の電圧で加速した電子の波長は 10^{-10} m 程度になる。 10^{-10} m は結晶の格子間隔とだいたい同じなので、電子を結晶に入射させると回折現象が起こると期待できる。実際、1927年に Davisson と Germer は電子の回折を実験で検証することに成功した。翌年には G. P. Thomson や菊池正士も電子の回折を実験で確認している。

3.3 演習問題

1. J. J. Thomson は陰極線が電子の粒子線であるとして、その比電荷を求めた。図のように電場 E をかけたとして、電子の比電荷 e/m_e を求めよ。

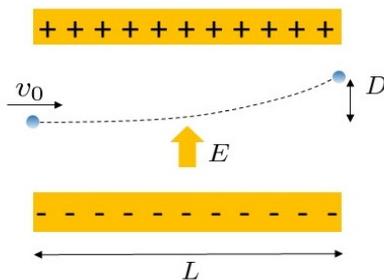


図 5: 比電荷の測定

2. 電子が 1 fm (原子核のサイズ程度) のドブロイ波長をもつとき、電子の運動エネルギー $E - m_e c^2$ を求めよ。

4 1次元空間における Schrodinger の波動方程式

4.1 自由粒子に対する Schrodinger の波動方程式と不確定性関係

簡単のために、1次元空間を運動する物質を考えよう。時間を t 、空間の座標を x とする。物質には粒子性と波動性があり、エネルギー E と振動数 ν 、運動量 p と波長 λ には、de Broglie の関係式

$$E = h\nu, \quad p = \frac{h}{\lambda}, \quad (23)$$

が成り立つ。そこで、波動の式を考えると

$$\psi(t, x) \sim \exp\left\{2\pi i\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right)\right\} \sim \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right\}, \quad (24)$$

のようになる。 $\psi(t, x)$ は波動関数と呼ばれる。この式より、粒子のエネルギーと運動量は

$$E\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi, \quad p\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi, \quad (25)$$

のように波動関数に作用する微分演算子として表されることになる。物理量が演算子であることを明示する際には

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad (26)$$

のようにハットで表記する。

さて、古典論ではエネルギーと運動量には $E = \frac{p^2}{2m}$ の関係があるが、これは保存則なので量子論でも成り立つと考えられる。そこで、この保存則と式 (25) を組み合わせると

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi, \quad (27)$$

のように波動関数に関する微分方程式が得られる。これが自由粒子に対する Schrodinger の波動方程式である。つまり、力を受けずに自由に運動する粒子の波動関数は、Schrodinger 方程式 (27) に従い、その解は

$$\psi(t, x) \sim \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(px - E(p)t)\right\}, \quad E(p) = \frac{p^2}{2m}, \quad (28)$$

で与えられる。これは平面波解と呼ばれる。

さて、波動方程式の解である波動関数 $\psi(t, x)$ は何を表すのだろうか？de Broglie や Schrodinger は波動関数は物質が雲状に分布している状態を表すと考えたが、これは物質が粒子として安定に振る舞うことは相容れないように思われる。Born は彼らとは異なる考え方として、「波動関数が

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(t, x)|^2 = 1, \quad (29)$$

のように規格化できるとき、物質が時刻 t において位置 x と $x + dx$ 間に存在する確率は $|\psi(t, x)|^2 dx$ で与えられる」とした。この Born の解釈と実験結果が矛盾しないことは確認されており、これが量子力学の波動関数 $\psi(t, x)$ に対する基本的な解釈である。

波動方程式 (27) の解についてもう少し考察をしよう。波の強さは $|\psi|^2$ に依存し、波が強いところに物質が存在すると考えられる。ここで平面波解 (28) は解ではあるが、空間の至る所で $|\psi|^2 \sim 1$ なので規格化できない。このような場合は、物質の数は無数であり、空間の至る所に存在すると考えられる。

そこで、物質が空間に局在した状況に対応する波動解を構成するために平面波解の重ね合わせを行ってみよう。

$$\psi(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \tilde{\psi}(p) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (px - E(p)t) \right\}, \quad E(p) = \frac{p^2}{2m}. \quad (30)$$

ここで $\tilde{\psi}(p)$ は任意の関数として波動方程式 (27) の解となるが、以下では $\tilde{\psi}(p)$ は $p = p_0$ でピークとなると考えてみよう。すると、 $\tilde{\psi}(p)$ は近似的に Gauss 分布 (正規分布) を用いて

$$\tilde{\psi}(p) = A \exp \left\{ -\frac{1}{4\sigma^2} (p - p_0)^2 \right\}, \quad A = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} \sigma^{1/2}}, \quad (31)$$

のように表される。これを式 (30) に代入して、 $p = p_0 + p'$ のように変数変換を行うと

$$\begin{aligned} \psi(t, x) &= \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \exp \left\{ -\frac{p'^2}{4\sigma^2} + \frac{i}{\hbar} (p_0 + p')x - \frac{i}{\hbar} \left(E(p_0) + \frac{p_0 p'}{m} + \frac{p'^2}{2m} \right) t \right\} \\ &= \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp' \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (p_0 x - E(p_0)t) + \frac{i}{\hbar} (x - v_g t) p' - \frac{a}{2} p'^2 \right\} \\ &= \frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (p_0 x - E(p_0)t) \right\} \exp \left\{ -\frac{(x - v_g t)^2}{2\hbar^2 a} \right\} \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dp' \exp \left\{ -\frac{a}{2} \left(p' - i \frac{x - v_g t}{\hbar a} \right)^2 \right\}, \\ &= \frac{A}{\sqrt{\hbar a}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (p_0 x - E(p_0)t) \right\} \exp \left\{ -\frac{(x - v_g t)^2}{2\hbar^2 a} \right\}, \end{aligned} \quad (32)$$

のような波動関数が得られる。ただし

$$v_g \equiv \frac{dE}{dp}(p_0) = \frac{p_0}{m}, \quad a \equiv \frac{1}{2\sigma^2} + \frac{it}{m\hbar}, \quad (33)$$

と定義した。波動関数の絶対値の 2 乗は

$$|\psi|^2 = \frac{|A|^2}{\hbar|a|} \exp \left\{ -\frac{(x - v_g t)^2}{2\hbar^2 \sigma^2 |a|^2} \right\}, \quad (34)$$

となるので、これより物質の速度は v_g であることが分かる。 v_g は群速度と呼ばれ、 $E(p_0)/p_0$ は位相速度と呼ばれる。

以上の考察により、局在化した物質の分布は $x = v_g t$ を中心とする正規分布 (34) で与えられる。これより $x = v_g t$ の周りの波動の広がりは $\Delta x = \hbar\sigma|a|$ となる。一方、運動量の分布は $|\tilde{\psi}|^2$ で与えられ、 $p = p_0$ を中心とする正規分布となる。これより運動量の広がりは $\Delta p = \sigma$ となることが分かる。すると、

$$\Delta x \Delta p = \hbar\sigma^2 |a| = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \left(\frac{2\sigma^2 t}{m\hbar} \right)^2} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (35)$$

となる。これは不確定性関係と呼ばれる量子論特有の関係である。その物理的な意味は、物質の位置と運動量の広がりとは同時にゼロにできなくて、プランク定数程度の不確定性があることを表す。例えば、既に述べた平面波では運動量を固定しているが、そうすると物質の広がりは無限になるのである。

4.2 1次元空間における Schrodinger の波動方程式

光速よりも十分に遅い速度で電子がポテンシャル $V(x)$ の中で運動しているとき、エネルギーの保存則により

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad (36)$$

のようになる。もし、ミクロの世界でこの式が成り立たなければ、マクロの世界では到底成り立たないはずである。従って、保存則はミクロの世界でも成立すると考えて構わないだろう。式 (25) と (36) を組み合わせることにより、波動関数についての微分方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, x) = \hat{H} \psi(t, x), \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \quad (37)$$

を得る。これはポテンシャル $V(x)$ の中で運動する物質についての Schrodinger 方程式である。波動関数 $\psi(t, x)$ については自由粒子のときと同じように、「波動関数 ψ が十分遠方ではゼロに収束して

$$\int dx |\psi(t, x)|^2 = 1, \quad (38)$$

のように規格化したとき、 $\rho = |\psi|^2$ は電子が位置 x に存在する確率密度を表す」という Born の解釈を行う。この解釈が正しいかどうかは実験によって確認する他ないが、実験的にも矛盾する結果は得られていない。量子力学では、物質が時刻 t で位置 x に存在する確率密度が波動関数の 2 乗 $\rho(t, x) = |\psi(t, x)|^2$ で与えられるとし、その波動関数 $\psi(t, x)$ に対する基礎方程式が Schrodinger 方程式なのである。

次に確率密度 ρ の時間変化を考えてみよう。計算すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \psi \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) \right\}, \end{aligned} \quad (39)$$

のようになる。そこで確率の流れ (カレント) を

$$j \equiv -\frac{i\hbar}{2m} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right), \quad (40)$$

のように定義すると、式 (39) はカレントの保存則

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0, \quad (41)$$

を意味する。 $|\psi|^2$ が電子の確率密度として解釈できるためには、 ψ とその微分は x について連続的である必要がある。

4.3 物理量の演算子による表示および不確定性関係

波動関数 $\psi(t, x)$ は Born による確率解釈がなされるので、時刻 t における粒子の位置の期待値は

$$\langle x(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(t, x) \hat{x} \psi(t, x), \quad \hat{x} = x, \quad (42)$$

のように表すことができる。では、運動量の期待値はどのようになるだろうか？運動量は波動関数 $\psi(t, x)$ に対して微分演算子として作用するので、以下のように与えられるだろう。

$$\langle p(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(t, x) \hat{p} \psi(t, x), \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}. \quad (43)$$

実際に右辺を Fourier 変換して計算すると

$$\begin{aligned} \langle p(t) \rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} dp' \tilde{\psi}^*(t, p') p \tilde{\psi}(t, p) e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \int_{-\infty}^{\infty} dp' \tilde{\psi}^*(t, p') p \tilde{\psi}(t, p) \delta(p - p') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \tilde{\psi}^*(t, p) p \tilde{\psi}(t, p), \end{aligned} \quad (44)$$

となるので、確かに運動量の期待値になる。

以上は波動関数が位置 x の関数として記述されている場合であるが、波動関数が運動量 p の関数として表されている場合には、

$$\hat{x} \tilde{\psi}(t, p) = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \tilde{\psi}(t, p), \quad \hat{p} \tilde{\psi}(t, p) = p \tilde{\psi}(t, p), \quad (45)$$

のように表される。このように波動関数の表示の仕方によって演算子の表記も変化する。しかし、演算子の間の交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar, \quad (46)$$

は表示によらず成り立つことが分かる。そして、この式から不確定性関係を示すことができる。まず、 Δx と Δp は

$$\begin{aligned} (\Delta x)^2 &\equiv \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2, \\ (\Delta p)^2 &\equiv \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2, \end{aligned} \quad (47)$$

のように定義される。そして、 $\hat{z} = t(\hat{x} - \langle x \rangle) + i(\hat{p} - \langle p \rangle)$ おいて、絶対値の 2 乗を計算すると

$$\langle z^\dagger z \rangle = t^2 (\Delta x)^2 - \hbar t + (\Delta p)^2 \geq 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\hbar}{2} \leq \Delta x \Delta p, \quad (48)$$

のように不確定性関係を導くことができる。

波動関数の Fourier 変換

波動関数 $\psi(t, x)$ の Fourier 変換は

$$\psi(t, x) = A \int_{-\infty}^{\infty} dp \tilde{\psi}(t, p) e^{\frac{i}{\hbar} p x}, \quad (49)$$

のようになる。ここで A は定数であり、 p は運動量である。Dirac のデルタ関数が

$$\delta(x - x') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p(x-x')}, \quad (50)$$

のように表されることに注意すると、式 (49) の逆変換は

$$\tilde{\psi}(t, p) = \frac{1}{2\pi\hbar A} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(t, x) e^{-\frac{i}{\hbar} p x}, \quad (51)$$

で与えられる。定数 A の値は何でもよいが、特に確率解釈のうえでは

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(t, x) \psi(t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \tilde{\psi}^*(t, p) \tilde{\psi}(t, p), \quad (52)$$

となるように選ぶのが便利であり、このとき $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ となる。

Gauss 分布と分散

Gauss 分布とは

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} \quad (53)$$

のように与えられる。係数は確率分布としての解釈ができるように選んでおり、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx P(x) = 1, \quad (54)$$

を満たす。上記の Gauss 分布における x の平均値 $\langle x \rangle$ は

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x P(x) = x_0, \quad (55)$$

である。また、分散 $\langle (x - x_0)^2 \rangle (= \langle x^2 \rangle - x_0^2)$ は

$$\langle (x - x_0)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - x_0)^2 P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} = \sigma^2, \quad (56)$$

となる。これより、 x の平均値は x_0 で、その値からの広がりは $\Delta x \equiv \sqrt{\langle (x - x_0)^2 \rangle} = \sigma$ で与えられる。

4.4 演習問題

1. 以下のガウス積分を示せ。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-ap^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}.$$

2. 以下の積分を示せ。

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp p^2 e^{-ap^2} = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}}.$$

3. 時刻 $t = 0$ における波動関数が

$$\psi(x) = A e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}},$$

で与えられている。規格化をして定数 A を求めよ。また、 $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle}$ を求めよ。

4. 上記の波動関数の Fourier 変換

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} px},$$

を求めよ。また、 $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle}$ を求めよ。

5. 不確定性関係について説明せよ。

6. 波動関数が

$$\psi(t, x) = A \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (px - E(p)t) \right\} + B \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (-px - E(p)t) \right\},$$

で与えられたとする。このとき確率の流れ(カレント)を求めよ。

7. 波動関数は一般に

$$\psi(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \tilde{\psi}(p) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (px - E(p)t) \right\},$$

のように表される。このとき確率の流れ(カレント)を全空間で積分した値を求めよ。また、物理的な意味を述べよ。

8. Schrodinger 方程式を用いて、 $\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p \rangle$ となることを説明せよ。

9. Schrodinger 方程式を用いて、 $\frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\langle \frac{dV}{dx} \rangle$ となることを説明せよ。(Ehrenfest の定理)

5 井戸型ポテンシャルやポテンシャル障壁の下で運動する物質

5.1 定常状態の波動方程式

この節では物質のエネルギー E が一定であるような定常状態について考える。定常状態では物質の波動関数 $\psi(t, x)$ は $\hat{H}\psi = E\psi$ を満たすので、

$$\psi(t, x) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \phi(x), \quad (57)$$

のように変数分離される。これを Schrodinger 方程式 (37) に代入すると、 $\phi(x)$ についての方程式

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\phi, \quad (58)$$

を得る。これは、物質のエネルギーが E であるような定常状態についての波動方程式である。また、カレント (40) は、

$$j(x) = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\phi^* \frac{d\phi}{dx} - \frac{d\phi^*}{dx} \phi \right), \quad (59)$$

のように x にのみ依存する。

最も簡単な場合として $V = V_0$ (定数) を考えよう。 $E - V_0 > 0$ の場合、定常状態の波動方程式 (58) の一般解は

$$\phi(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}px} + A'e^{-\frac{i}{\hbar}px}, \quad p = \sqrt{2m(E - V_0)}, \quad (60)$$

のようになる。 A と A' は複素数の定数である。カレント (59) を計算すると

$$j(x) = \frac{p}{m}|A|^2 - \frac{p}{m}|A'|^2, \quad p = \sqrt{2m(E - V_0)}, \quad (61)$$

となるので、 A を係数とする解は x 軸正の方向へ速さ p/m で伝搬する波動を、 A' を係数とする解は x 軸負の方向へ速さ p/m で伝搬する波動を表すことが分かる。これより、ポテンシャルの値 V_0 よりエネルギー E が大きい場合には、物質は波動方程式に従って伝搬することがわかる。

一方で、 $E - V_0 < 0$ の場合、一般解は

$$\phi(x) = Be^{\rho x} + B'e^{-\rho x}, \quad \rho = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, \quad (62)$$

のようになる。 B と B' は複素数の定数である。カレント (59) を計算すると

$$j(x) = -\frac{i\hbar\rho}{m}(B'^*B - B^*B'), \quad \rho = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, \quad (63)$$

となる。ポテンシャルの値よりエネルギーが小さい場合、古典論では物質の運動は不可能であるが、量子力学では解が存在することになる。ただし、 $x \rightarrow \pm\infty$ で $\phi \rightarrow 0$ を要求すると、 $B = B' = 0$ となる。量子力学においてこの解がどのような意味をもつかについては、以下で考察する。

5.2 井戸型ポテンシャルの下で運動する物質 – 束縛状態と量子化

$[-V_0 < E < 0$ の場合]

図6のような井戸型ポテンシャルの下で運動する物質の運動を考える。古典力学では、エネルギー E が負の場合には、物質が井戸型ポテンシャルの中を往復運動する。これらの描像は量子力学ではどうなるだろうか？

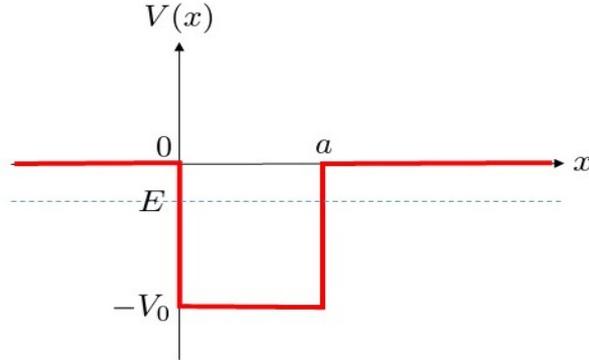


図 6: 井戸型ポテンシャル

まず、各領域で場合分けして Schrodinger 方程式 (58) を解くと、一般解は

$$\phi(x) = \begin{cases} Ae^{\rho x} + A'e^{-\rho x}, & x \leq 0, \\ Be^{ipx} + B'e^{-ipx}, & 0 \leq x \leq a, \\ Ce^{\rho x} + C'e^{-\rho x}, & a \leq x, \end{cases} \quad (64)$$

のように表される。ここで A, A', B, B', C, C' は複素数の積分定数であり、 ρ および p は

$$\rho = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}, \quad p = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}, \quad (65)$$

のように定義した。以下では、Born による確率解釈が満たされるように $|\psi|^2 (= |\phi|^2)$ の全空間での積分が有限になることを要求する。さらに、波動関数とカレントが x について連続的であることも課すことにする。そして、これらの条件より積分定数やエネルギーの関係を導出する。

まず、今考えているのは物質が井戸型ポテンシャル中に束縛されている状況なので、波動関数は $x = \pm\infty$ でゼロになる必要がある。従って、 $A' = C = 0$ である。そして、波動関数が $x = 0$ と $x = a$ で連続的になるための条件から

$$A = B + B', \quad (66)$$

$$Be^{ipa} + B'e^{-ipa} = C'e^{-\rho a}, \quad (67)$$

が得られ、さらに、カレントが $x = 0$ と $x = a$ で連続的になるための条件 (=波動関数の微分が連続的になる条件) から

$$\rho A = ip(B - B'), \quad (68)$$

$$ip(Be^{ipa} - B'e^{-ipa}) = -\rho C'e^{-\rho a}, \quad (69)$$

が得られる。式 (66) および (68) を A で割った式より

$$\frac{B}{A} = \frac{1}{2} \left(1 - i \frac{\rho}{p} \right), \quad \frac{B'}{A} = \frac{1}{2} \left(1 + i \frac{\rho}{p} \right), \quad (70)$$

となるので、これを式 (67) および (69) を A で割った式に代入すると

$$\cos pa + \frac{\rho}{p} \sin pa = \frac{C'}{A} e^{-\rho a}, \quad (71)$$

$$\sin pa - \frac{\rho}{p} \cos pa = \frac{C'}{A} \frac{\rho}{p} e^{-\rho a}, \quad (72)$$

のようになる。この式より $\frac{C'}{A}$ を消去すると、 ρ と p の関係式

$$\frac{\rho}{p} = \frac{\pm 1 - \cos pa}{\sin pa}, \quad (73)$$

が求まる。 $\rho = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - p^2}$ なので、上式より p の値が離散的に決まり、従って E の値も離散的に求まる。従って、井戸型ポテンシャルに束縛された物質は、ある決まったエネルギーしか取れないことになる。これは、原子内に束縛された電子のエネルギーが離散的な値になるという観測結果を本質的にとらえている。

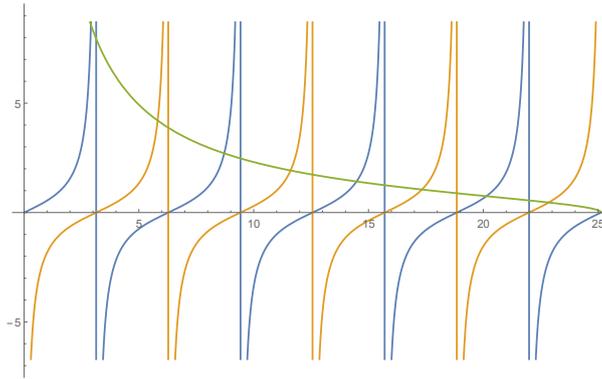


図 7: 式 (73) を満たす点の図。ただし、 $\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} = (8\pi)^2$ のように選んでいる。

[$0 < E$ の場合]

図 6 のような井戸型ポテンシャルの下で運動する物質の運動を考える。古典力学では、エネルギー E が正の場合には、 $x = -\infty$ から入射された物質はポテンシャル中では速度が変化するものの、必ず $x = \infty$ へと飛び去っていく。これらの描像は量子力学ではどうなるだろうか？

まず、各領域で場合分けして Schrodinger 方程式 (58) を解くと、一般解は

$$\phi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + A'e^{-ikx}, & x \leq 0, \\ Be^{ipx} + B'e^{-ipx}, & 0 \leq x \leq a, \\ Ce^{ikx} + C'e^{-ikx}, & a \leq x, \end{cases} \quad (74)$$

のように表される。ここで A, A', B, B', C, C' は複素数の積分定数であり、 k および p は

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad p = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}, \quad (75)$$

のように定義した。

物質は $x = -\infty$ からのみ入射されるとし、 $x = \infty$ からは入射しないとすると、 $C' = 0$ である。 $x = 0, a$ における波動関数の連続性より

$$A + A' = B + B', \quad (76)$$

$$Be^{ipa} + B'e^{-ipa} = Ce^{ika}, \quad (77)$$

が得られ、さらに $x = 0, a$ におけるカレントの連続性により

$$k(A - A') = p(B - B'), \quad (78)$$

$$p(Be^{ipa} - B'e^{-ipa}) = kCe^{ika}, \quad (79)$$

となる。式 (76) および (78) より

$$\begin{aligned} B &= \frac{A}{2} \left(1 + \frac{k}{p}\right) + \frac{A'}{2} \left(1 - \frac{k}{p}\right), \\ B' &= \frac{A}{2} \left(1 - \frac{k}{p}\right) + \frac{A'}{2} \left(1 + \frac{k}{p}\right), \end{aligned} \quad (80)$$

となり、これを式 (77) に代入すると

$$C = A \left(\cos pa + i \frac{k}{p} \sin pa \right) e^{-ika} + A' \left(\cos pa - i \frac{k}{p} \sin pa \right) e^{-ika}, \quad (81)$$

となる。最後に求めた B, B', C の値を式 (79) に代入すると

$$\begin{aligned} &A \left(i \sin pa + \frac{k}{p} \cos pa \right) + A' \left(i \sin pa - \frac{k}{p} \cos pa \right) \\ &= \frac{k}{p} A \left(\cos pa + i \frac{k}{p} \sin pa \right) + \frac{k}{p} A' \left(\cos pa - i \frac{k}{p} \sin pa \right), \end{aligned} \quad (82)$$

を得る。この式より

$$\frac{A'}{A} = \frac{i \left(1 - \frac{k^2}{p^2}\right) \sin pa}{\frac{2k}{p} \cos pa - i \left(1 + \frac{k^2}{p^2}\right) \sin pa}, \quad (83)$$

が求まり、さらに式 (81) に代入することで

$$\frac{C}{A} = \frac{\frac{2k}{p} e^{-ika}}{\frac{2k}{p} \cos pa - i \left(1 + \frac{k^2}{p^2}\right) \sin pa}, \quad (84)$$

が求まる。

よって、入射カレントに対する反射カレントと透過カレントの比はそれぞれ

$$\frac{j_r}{j_i} = \frac{\left(1 - \frac{k^2}{p^2}\right)^2 \sin^2 pa}{\frac{4k^2}{p^2} \cos^2 pa + \left(1 + \frac{k^2}{p^2}\right)^2 \sin^2 pa}, \quad (85)$$

$$\frac{j_t}{j_i} = \frac{\frac{4k^2}{p^2}}{\frac{4k^2}{p^2} \cos^2 pa + \left(1 + \frac{k^2}{p^2}\right)^2 \sin^2 pa}, \quad (86)$$

となる。これより、 $x = -\infty$ から入射された物質は、一般に一定の割合で井戸型ポテンシャルによって反射されることが分かる。反射が起こらないのは $pa = n\pi$ ($n = 1, 2, \dots$) のときであるが、 p は井戸型ポテンシャル中のドブロイ波長 λ を使って $p = 2\pi/\lambda$ のように表されることから、これは $a = n\lambda/2$ となる。つまり、井戸型ポテンシャルの幅が半波長の整数倍のときは、ポテンシャル中で波動の定常状態が生じて反射が起こらなくなる。

5.3 ポテンシャル障壁の下で運動する物質 – トンネル効果

[$0 < E < V_0$ の場合]

図8のようなポテンシャル障壁の下で運動する物質の運動を考える。特に、 $0 < E < V_0$ における物質の運動を考えよう。今回は物質を $x = -\infty$ から入射し続けている状況を考える。古典力学では物体は全てポテンシャル障壁に跳ね返されて透過することはないが、量子力学ではどうなるだろうか？

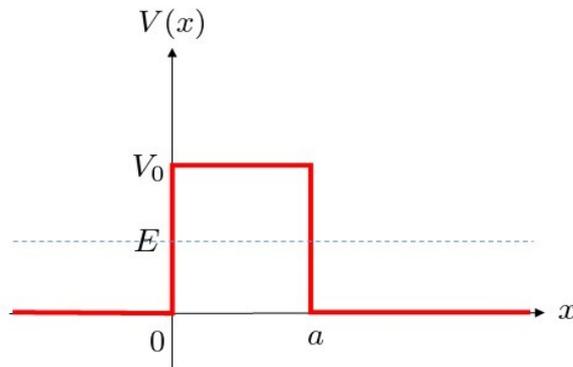


図 8: ポテンシャル障壁

まず、各領域で場合分けして Schrodinger 方程式 (58) を解くと、一般解は

$$\phi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + A'e^{-ikx}, & x \leq 0, \\ Be^{\rho x} + B'e^{-\rho x}, & 0 \leq x \leq a, \\ Ce^{ikx} + C'e^{-ikx}, & a \leq x, \end{cases} \quad (87)$$

のように表される。ここで A, A', B, B', C, C' は複素数の積分定数であり、 ρ および k は

$$\rho = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (88)$$

のように定義した。以下では積分定数を連続性の条件などを課して決めていこう。

まず、設定を繰り返すと、ビームを $x = -\infty$ から入射し、反射と透過が起こる状況を考えている。カレントを式 (40) で評価すると

$$j(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2E}{m}}(|A|^2 - |A'|^2), & x \leq 0, \\ -i\sqrt{\frac{2(V_0-E)}{m}}(B'^*B - B^*B'), & 0 \leq x \leq a, \\ \sqrt{\frac{2E}{m}}(|C|^2 - |C'|^2), & a \leq x, \end{cases} \quad (89)$$

のようになる。 $x \leq 0$ の領域を眺めると、 x 軸正の方向への入射カレントは $j_i = \sqrt{2E/m}|A|^2$ であり、 x 軸負の方向への反射カレントは $j_r = \sqrt{2E/m}|A'|^2$ であることがわかる。一方、 $a \leq x$ の領域を眺めると、 x 軸正の方向への透過カレントは $j_t = \sqrt{2E/m}|C|^2$ であり、 $x = \infty$ から負の方向に伝搬するカレントは存在しないので、 $C' = 0$ である。なお、古典的には不可能な $0 \leq x \leq a$ の領域でも一定のカレントが存在することが分かる。

次に、波動関数が $x = 0$ と $x = a$ で連続的になるための条件から

$$A + A' = B + B', \quad (90)$$

$$Be^{\rho a} + B'e^{-\rho a} = Ce^{ika}, \quad (91)$$

が得られ、さらに、カレントが $x = 0$ と $x = a$ で連続的になるための条件から

$$ik(A - A') = \rho(B - B'), \quad (92)$$

$$\rho(Be^{\rho a} - B'e^{-\rho a}) = ikCe^{ika}, \quad (93)$$

が得られる。式 (90) および (92) より

$$\begin{aligned} B &= \frac{A}{2} \left(1 + i\frac{k}{\rho}\right) + \frac{A'}{2} \left(1 - i\frac{k}{\rho}\right), \\ B' &= \frac{A}{2} \left(1 - i\frac{k}{\rho}\right) + \frac{A'}{2} \left(1 + i\frac{k}{\rho}\right), \end{aligned} \quad (94)$$

となり、これを式 (91) に代入すると

$$C = A \left(\cosh \rho a + i\frac{k}{\rho} \sinh \rho a \right) e^{-ika} + A' \left(\cosh \rho a - i\frac{k}{\rho} \sinh \rho a \right) e^{-ika}, \quad (95)$$

となる。最後に求めた B, B', C の値を式 (93) に代入すると

$$\begin{aligned} &A \left(\sinh \rho a + i\frac{k}{\rho} \cosh \rho a \right) + A' \left(\sinh \rho a - i\frac{k}{\rho} \cosh \rho a \right) \\ &= i\frac{k}{\rho} A \left(\cosh \rho a + i\frac{k}{\rho} \sinh \rho a \right) + i\frac{k}{\rho} A' \left(\cosh \rho a - i\frac{k}{\rho} \sinh \rho a \right), \end{aligned} \quad (96)$$

を得る。この式より

$$\frac{A'}{A} = \frac{\left(\frac{k^2}{\rho^2} + 1\right) \sinh \rho a}{\left(\frac{k^2}{\rho^2} - 1\right) \sinh \rho a + 2i\frac{k}{\rho} \cosh \rho a}, \quad (97)$$

が求まり、さらに式 (95) に代入することで

$$\frac{C}{A} = \frac{2i \frac{k}{\rho} e^{-ika}}{\left(\frac{k^2}{\rho^2} - 1\right) \sinh \rho a + 2i \frac{k}{\rho} \cosh \rho a}, \quad (98)$$

が求まる。

よって、入射カレントに対する反射カレントと透過カレントの比はそれぞれ

$$\frac{j_r}{j_i} = \frac{\left(\frac{k^2}{\rho^2} + 1\right)^2 \sinh^2 \rho a}{\left(\frac{k^2}{\rho^2} - 1\right)^2 \sinh^2 \rho a + \frac{4k^2}{\rho^2} \cosh^2 \rho a}, \quad (99)$$

$$\frac{j_t}{j_i} = \frac{\frac{4k^2}{\rho^2}}{\left(\frac{k^2}{\rho^2} - 1\right)^2 \sinh^2 \rho a + \frac{4k^2}{\rho^2} \cosh^2 \rho a}, \quad (100)$$

となる。この式により、物質の透過率は 0 ではないことが分かる。このように量子力学では、物質のエネルギーがポテンシャル障壁より小さい場合でも透過する現象が起こり得る。このような現象はトンネル効果と呼ばれ、これによって α 崩壊の現象 (不安定原子から α 線が放出される現象) を説明することができる。また、エサキダイオードや走査型トンネル顕微鏡などに幅広く応用されている。

最後に、図 8 において入射粒子のエネルギーが $V_0 < E$ を満たす場合を考えよう。この場合は 5.2 節の後半において、 $-V_0 \rightarrow V_0$ と置き換えればよい。従って、この場合も一定の割合で反射と透過が起きることが分かる。

5.4 結晶中を運動する物質のエネルギー準位 – バンド構造

結晶は原子が規則的に配列されることによって構成されている。ここでは 1 次元に等間隔 a で並んだ結晶中を運動する物質のエネルギー準位について考えよう。ポテンシャル $V(x)$ は結晶の構造をモデル化して

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sigma_0 \delta(x - na), \quad (101)$$

のように与えられるとする。(図 9 参照。)

それではまず、定常状態の波動方程式 (58) の一般解を考えよう。素朴には、ポテンシャルが $V(x) = V(x - a)$ のように周期的なので、波動関数も $\phi(x) = \phi(x - a)$ のように周期的になると思われる。しかしながら、波動関数の確率解釈では $|\phi|$ が周期的になっていればよいので、少し条件を緩めることができ

$$\phi(x) = e^{i\theta} \phi(x - a), \quad (102)$$

となる。ただし、 θ は位相のパラメータである。これは Bloch の定理と呼ばれる⁷。Bloch の定理により、定常状態の波動関数は $-a \leq x \leq a$ の領域では

$$\phi(x) = \begin{cases} Ae^{ipx} + A'e^{-ipx}, & -a \leq x \leq 0, \\ e^{i\theta} (Ae^{ip(x-a)} + A'e^{-ip(x-a)}), & 0 \leq x \leq a, \end{cases} \quad (103)$$

⁷ $\phi(x)$ と $\phi(x - a)$ は同じ波動方程式を満たす。1 次元では波動関数に縮退はないので、 $\phi(x)$ と $\phi(x - a)$ は定数倍で関係することになる。さらに $|\phi|$ が周期的であるという条件から Bloch の定理 (102) を導出できる。

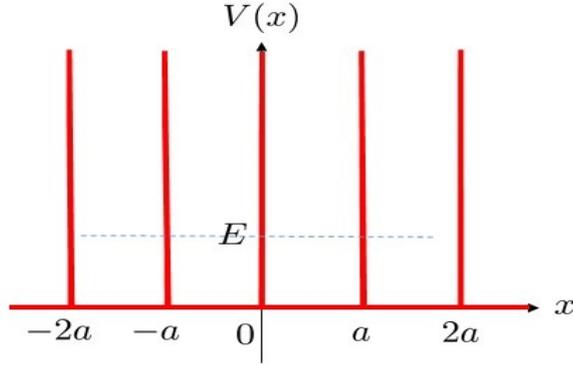


図 9: 1次元格子による周期ポテンシャル図

のように表される。

次に接続条件を考える。波動関数が $x = 0$ で連続であることを要請すると

$$A + A' = Ae^{i\theta}e^{-ipa} + A'e^{i\theta}e^{ipa}, \quad (104)$$

が得られる。一方で波動関数の微分は $x = 0$ では不連続になる。実際、波動方程式を $-\epsilon \leq x \leq \epsilon$ の区間で積分し、 $\epsilon \rightarrow 0$ の極限をとると

$$\frac{d\phi}{dx}(0_+) - \frac{d\phi}{dx}(0_-) = \frac{2m\sigma_0}{\hbar^2}\phi(0), \quad (105)$$

なる不連続性の式が得られる。この式に波動関数 (103) を代入すると

$$Ae^{i\theta}e^{-ipa} - A'e^{i\theta}e^{ipa} - A + A' = -i\frac{2m\sigma_0}{\hbar^2 p}(A + A'), \quad (106)$$

を得る。

接続条件の式 (104) と (106) をそれぞれ A' について解くと

$$A' = \frac{-1 + e^{i\theta}e^{-ipa}}{1 - e^{i\theta}e^{ipa}}A = \frac{1 - e^{i\theta}e^{-ipa} - i\frac{2m\sigma_0}{\hbar^2 p}}{1 - e^{i\theta}e^{ipa} + i\frac{2m\sigma_0}{\hbar^2 p}}A, \quad (107)$$

となるので、 A を消去すると

$$\begin{aligned} e^{2i\theta} + 1 &= 2e^{i\theta} \left(\cos pa + \frac{m\sigma_0}{\hbar^2 p} \sin pa \right), \\ \Leftrightarrow \cos \theta &= \cos pa + \frac{m\sigma_0 a}{\hbar^2} \frac{\sin pa}{pa}, \end{aligned} \quad (108)$$

のような関係式を得る。 $-1 \leq \cos \theta \leq 1$ なので、上式は pa の値についての制限

$$-1 \leq \cos pa + \frac{m\sigma_0 a}{\hbar^2} \frac{\sin pa}{pa} \leq 1, \quad (109)$$

を与える。この制限をグラフに表したものが図 10 である。この図により、 pa の値 (つまりエネルギー E の値) はある領域に限定されることが分かる。このように周期的なポテンシャル中では、物質のエネルギー準位はバンド構造を持つ。結晶が導体なのか絶縁体なのかは、このようなエネルギーバンド構造が大きく影響している。

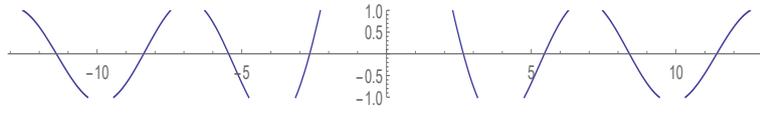


図 10: バンド構造。横軸は pa で、 $\frac{m\sigma_0 a}{\hbar^2} = 5$ とした。

5.5 演習問題

1. 1次元の量子力学では、定常状態の波動関数は縮退していないことを示せ。(つまり $\hat{H}\phi_1 = E\phi_1$ 、 $\hat{H}\phi_2 = E\phi_2$ ならば、 $\phi_1 = c\phi_2$ を示せ。ただし c は定数である。)
2. ポテンシャルが $V(x) = V(-x)$ のように対称であるとき、定常状態の波動関数は偶関数か奇関数となることを示せ。
3. 図 11(a) のような無限に深い井戸型ポテンシャルを考える。定常状態の波動関数とエネルギーを求めよ。ただし、接続条件は波動関数の連続性のみでよい。
4. 図 11(b) のようなデルタ関数型ポテンシャル $V(x) = \sigma_0 \delta(x)$ を考える。 $x = 0$ で波動関数の微分が不連続となることを説明せよ。
5. 図 11(c) のような階段型ポテンシャルを考える。 $0 < E < V_0$ の定常状態の波動関数を求めよ。
6. カレントを求め、反射率と透過率を求めよ。
7. 次に、 $V_0 < E$ の定常状態の波動関数を求めよ。
8. カレントを求め、反射率と透過率を求めよ。

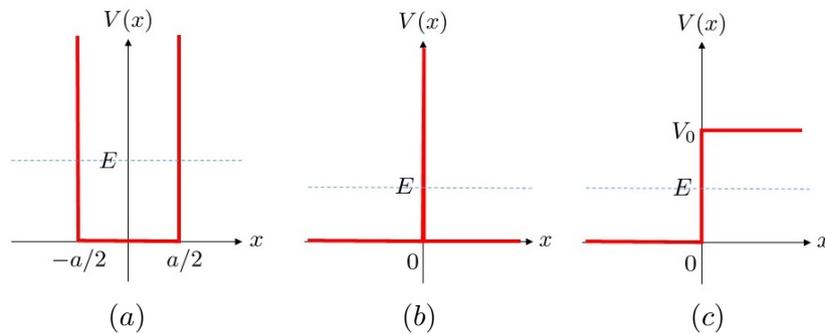


図 11: ポテンシャル図

6 調和振動子のポテンシャル中を運動する物質

6.1 調和振動子のポテンシャル中を運動する物質

調和振動子のポテンシャル中を運動する物質を考えよう。ポテンシャルは

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad (110)$$

で与えられる。古典力学では、このポテンシャルの下で質量 m の物質は角振動数 ω で単振動を行い、エネルギーは連続的な値をとる。量子力学では物質は波動性をもち、波動関数は Shrodinger の波動方程式 (37) に従う。特に定常状態の波動方程式 (58) は

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 \right)\phi = 0, \quad (111)$$

となる。以下では、この微分方程式の解を求めて物質が量子化されたエネルギーの値をとることをみよう。

まず、微分方程式 (111) をシンプルな形にするために変数変換

$$y = \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} x, \quad (112)$$

を行う。すると微分方程式 (111) は

$$\frac{d^2\phi}{dy^2} + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - y^2 \right)\phi = 0, \quad (113)$$

のようになる。今考えているのは物質が調和振動子型のポテンシャル中に束縛されている状態であり、 $y \rightarrow \pm\infty$ では波動関数は 0 になる必要がある。実際に $y \rightarrow \pm\infty$ のときは $\phi(y) \rightarrow e^{-\frac{1}{2}y^2}$ のような関数形に近づくと考えられるので、定常状態の波動関数 $\phi(y)$ を

$$\phi(y) = H(y)e^{-\frac{1}{2}y^2}, \quad (114)$$

の形に仮定して微分方程式 (113) に代入してみる。すると $H(y)$ についての微分方程式

$$\frac{d^2H}{dy^2} - 2y\frac{dH}{dy} + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \right)H = 0, \quad (115)$$

を得る。ただし、波動関数が無限遠で 0 に収束することが必要なので、 $H(y)$ は $e^{\frac{1}{2}y^2}$ 以上にはやく無限大に近づいてはいけない。実は、このような性質を満たす解 $H(y)$ は Hermite 多項式として知られている。概略は以下の囲み説明を参照のこと。Hermite 多項式の性質により、エネルギー準位は

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (116)$$

のように離散的になり、定常状態の波動関数は

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n \sqrt{\pi n!}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} H_n(y) e^{-\frac{1}{2}y^2}, \quad y = \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} x, \quad (117)$$

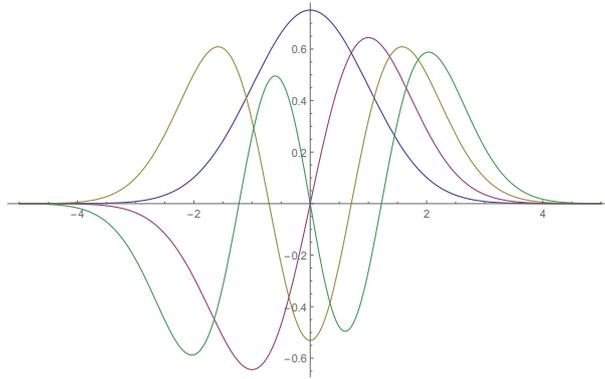


図 12: 調和振動子の波動関数。 $n = 0, 1, 2, 3$ は青、紫、黄土、緑に対応する。

となる。

— Hermite 多項式 —

係数に変数を含む 2 階微分方程式

$$\frac{d^2 H_n}{dy^2} - 2y \frac{dH_n}{dy} + 2nH_n = 0, \quad (118)$$

は Hermite の微分方程式と呼ばれ、 $n = 0, 1, 2, \dots$ のとき多項式で表される解 H_0, H_1, H_2, \dots が存在する。実際、 $H_n(y) = \sum_{i=0}^n c_i y^i$ として上式に代入すると、 $(i+2)(i+1)c_{i+2} = -2(n-i)c_i$ なので、 n が非負の整数の場合にのみ数列 c_i は c_n で止まる。このとき波動関数は無限遠で 0 に収束する。具体的な解の表式はロドリゲスの公式によって

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} (e^{-y^2}), \quad (119)$$

のように与えられる。いくつか具体的に書き下すと

$$H_0 = 1, \quad H_1 = 2y, \quad H_2 = 4y^2 - 2, \quad \dots \quad (120)$$

である。ただし、 H_n は規格直交関係

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy H_m(y) H_n(y) e^{-y^2} = \delta_{mn} 2^n \sqrt{\pi n!}, \quad (121)$$

を満たすように定数倍の因子を決めた。

6.2 演習問題

調和振動子のポテンシャル $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ の中を、エネルギー $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ で運動する物質の Shrodinger 方程式の解は $\phi(x) = C_n H_n(y) e^{-\frac{1}{2}y^2}$ となる。ただし、 C_n は波動関数の規格化によって決まる定数であり、 $y = (m\omega/\hbar)^{1/2}x$ である。また、Hermite 多項式 H_n は n 次の多項式であり、規格直交関係 $\int_{-\infty}^{\infty} dy H_m(y) H_n(y) e^{-y^2} = \delta_{mn} 2^n \sqrt{\pi} n!$ を満たす。

1. $H_n(y)$ が Hermite の微分方程式 $\frac{d^2 H_n}{dy^2} - 2y \frac{dH_n}{dy} + 2n H_n = 0$ を満たすことを説明せよ。(講義の復習)
2. $H_n(y) = \sum_{a=0}^{\infty} c_a y^a$ のように多項式で展開すると、 $c_{a+2} = \frac{2(a-n)}{(a+2)(a+1)} c_a$ となる。 $n = 0, 1, 2, \dots$ でないとすると、数列 c_a は無限数列になる。このとき、 $H(y) \sim e^{y^2}$ となることを説明せよ。
3. C_n の値を波動関数の規格化により求めよ。
4. Hermite の微分方程式を解いて、 $H_0(y)$ を具体的に求め、エネルギー準位が E_0 である物質の存在範囲の目安となる $(\Delta x)^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2$ を求めよ。
5. 同様に、 $H_1(y)$ を具体的に求め、 $(\Delta x)^2$ を求めよ。
6. 同様に、 $H_2(y)$ を具体的に求め、 $(\Delta x)^2$ を求めよ。
7. 同様に、 $H_3(y)$ を具体的に求め、 $(\Delta x)^2$ を求めよ。
8. 以下では、 $H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} (e^{-y^2})$ となることを示したい。(ロドリゲスの公式と呼ばれる。) まず、 $2yH_{n+1} = 2(n+1)H_n + H_{n+2}$ が成り立つことを示せ。
9. 上記の $H_n(y)$ が Hermite の微分方程式の解であることを説明せよ。
10. $m < n$ のとき、 $\int_{-\infty}^{\infty} dy y^m H_n(y) e^{-y^2} = 0$ であることを示せ。
11. $\int_{-\infty}^{\infty} dy y^n H_n(y) e^{-y^2} = \sqrt{\pi} n!$ であることを示せ。
12. Hermite 多項式の規格直交関係を示せ。

7 古典力学と量子力学の対応について

7.1 解析力学による古典力学の定式化

この節では、解析力学の基礎について簡単に復習をしておく。1次元空間 x を運動する質量 m の粒子を考えよう。ポテンシャルエネルギーが $V(x)$ で与えられるとき、粒子の運動方程式は

$$m\ddot{x} = -\frac{dV}{dx}, \quad (122)$$

のように表される。

解析力学では、運動方程式 (122) を変分原理により導出する。まず、Lagrangian $L(x, \dot{x})$ を

$$L(x, \dot{x}) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x), \quad (123)$$

のように定義し、action $S[x]$ を Lagrangian の時間積分として

$$S[x] = \int_{t_1}^{t_2} dt L(x, \dot{x}), \quad (124)$$

のように定義する。変分原理とは、action $S[x]$ が x について極値を取るという条件が運動方程式 (122) を与える、という原理である。ここで、 x についての変分は $x(t)$ を $x(t) + \delta x(t)$ のようにずらす操作を意味するが、 $\delta x(t_1) = \delta x(t_2) = 0$ としておく。(図 13 参照。) このことに注意して変分原理を実行すると

$$0 = \delta S[x] = \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\frac{\partial L}{\partial x} \delta x + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \delta \dot{x} \right) = \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) \right\} \delta x, \quad (125)$$

であり、これが任意の変分 δx について成り立つためには

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = 0, \quad (126)$$

となる必要がある。これは Euler-Lagrange 方程式と呼ばれる。この式に Lagrangian (123) を代入すると、確かに運動方程式 (122) が導かれる。

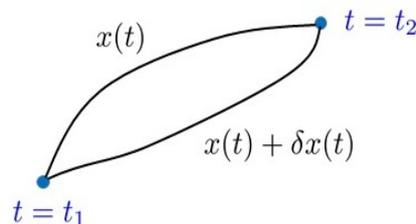


図 13: 変分原理の経路

上記は (x, \dot{x}) を独立変数とした Euler-Lagrange 形式であるが、次にこれと等価な (x, p) を独立変数とした Hamiltonian 形式について解説しよう。まず x の共役運動量 p を

$$p \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}, \quad (127)$$

のように定義する。そして、Hamiltonian $H(x, p)$ を

$$H(x, p) \equiv p\dot{x} - L(x, \dot{x}), \quad (128)$$

のように定義する。Hamiltonian の変分を考えると

$$\delta H = \delta p\dot{x} + p\delta\dot{x} - \frac{\partial L}{\partial x}\delta x - \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\delta\dot{x} = \delta p\dot{x} - \frac{\partial L}{\partial x}\delta x = \delta p\dot{x} - \dot{p}\delta x, \quad (129)$$

となるので、 H は x と p の関数であることが分かる。ただし、式 (126) および (127) を用いた。これより、運動方程式は

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \quad (130)$$

となる。一般に、 x と p に依存する物理量 $O(x, p)$ があつたとすると、その時間変化は

$$\dot{O} = \frac{\partial O}{\partial x}\dot{x} + \frac{\partial O}{\partial p}\dot{p} = \frac{\partial O}{\partial x}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial x}\frac{\partial O}{\partial p} \equiv \{O, H\}_{\text{P.B.}}, \quad (131)$$

のように表される。最後の表式は Poisson 括弧と呼ばれる。

7.2 量子力学の Schrodinger 表示と Heisenberg 表示

Schrodinger 表示による量子力学では、波動関数 $\psi(t, x)$ は時間に依存し、演算子 \hat{O} は時間に依存しない。Schrodinger の波動方程式 (37) を形式的に解くと、波動関数は

$$\psi(t, x) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\psi(0, x), \quad (132)$$

のように表される。これを演算子 \hat{O} の期待値の式に代入すると

$$\langle O \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(t, x)^* \hat{O} \psi(t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(0, x)^* e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{O} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \psi(0, x), \quad (133)$$

となる。

そこで、時間依存性を演算子に押し付けて

$$\hat{O}_H \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{O} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}, \quad (134)$$

のように定義してみよう。すると、 \hat{O}_H の時間微分は

$$\frac{d}{dt} \hat{O}_H = -\frac{i}{\hbar} [\hat{O}_H, \hat{H}], \quad (135)$$

のように表される。これは Heisenberg の運動方程式と呼ばれる。さらに、波動関数を

$$\psi_H(x) \equiv \psi(0, x), \quad (136)$$

のように定義すると、演算子 \hat{O}_H の期待値は

$$\langle O \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_H(x)^* \hat{O}_H(t) \psi_H(x), \quad (137)$$

のようになる。

以上のように、演算子に時間依存性を押し付けた表示を Heisenberg 表示と呼ぶ。この表示では演算子が時間依存しているので、古典力学との対応をつけることが明快になる。実際、式 (131) と式 (135) を見比べると、古典力学から Heisenberg 表示の量子力学へ移行するには

$$\{O_1, O_2\}_{\text{P.B.}} \rightarrow -\frac{i}{\hbar} [\hat{O}_1, \hat{O}_2], \quad (138)$$

のような置き換えをすればよいことが分かる。特に、座標と運動量については

$$\begin{aligned} \{x, x\}_{\text{P.B.}} = 0 &\rightarrow -\frac{i}{\hbar} [\hat{x}, \hat{x}] = 0, \\ \{x, p\}_{\text{P.B.}} = 1 &\rightarrow -\frac{i}{\hbar} [\hat{x}, \hat{p}] = 1, \\ \{p, p\}_{\text{P.B.}} = 0 &\rightarrow -\frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{p}] = 0, \end{aligned} \quad (139)$$

のようになることが分かる。これらの関係を満たす \hat{x} と \hat{p} は実数では表すことができない。そこで、Heisenberg と Born は \hat{x} と \hat{p} を行列を使って表した。ただし、行列のサイズは無限にとる必要がある。このような理由により、Heisenberg 表示による量子力学は行列力学とも呼ばれる。

7.3 演習問題

1. $\{x^n, p^2\}_{\text{P.B.}}$ および $[\hat{x}^n, \hat{p}^2]$ を計算せよ。
2. 調和振動子の場合における Heisenberg の運動方程式を導出せよ。
3. $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \mathbf{1}_\infty$ を満たすような、行列 \hat{x} と \hat{p} の組みを一つ見つけよ。

8 ブラ・ケットベクトルと演算子による量子力学の定式化

これまでは物質に対する波動方程式を解いて波動関数を求め、物理量の期待値を求めてきた。その際、主に波動関数は時間と空間の関数として求めたが、フーリエ変換をすると波動関数は時間と運動量の関数としても求まる。このように、波動関数の表示方法としては座標表示でも運動量表示でもよいのだが、より一般にそれら以外の表示をとることもできる。この節では量子力学の状態空間であるヒルベルト空間と、その状態に作用する演算子による量子力学の定式化を行う。簡単のため空間は1次元として説明するが、3次元空間への拡張は容易にできる。

8.1 ヒルベルト空間とブラ・ケットベクトル

Schrodinger 方程式は線形方程式なので、その解空間は線形空間として記述される。この線形空間はヒルベルト空間と呼ばれる空間で、内積が定義されているベクトル空間であると思ってよい⁸。ヒルベルト空間の各要素は状態ベクトルと呼ばれ、物理量は状態ベクトルに演算子として作用する。

ヒルベルト空間の基底としてまず思いつくのは、位置演算子の固有状態である。これを Dirac にならって $|x\rangle$ と書くことにすると、

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \quad (140)$$

のように表される。さらに、 $|x\rangle$ に双対な状態を $\langle x|$ で表し、内積を

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x'), \quad (141)$$

のように定義する。ヒルベルト空間の任意の状態ベクトルを $|\psi\rangle$ とすると、これは基底ベクトルによって展開できるので

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \psi(t, x), \quad (142)$$

のように表すことができる。このような状態ベクトルをケットベクトルと呼ぶ。ケットベクトルに双対な状態ベクトルはブラベクトルと呼ばれ、

$$\langle\psi| = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(t, x) \langle x|, \quad (143)$$

のように定義される。ケットベクトルと $\langle x|$ の内積をとると、

$$\langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle x|x'\rangle \psi(t, x') = \psi(t, x), \quad (144)$$

のようになり、前節まででなじみのある座標表示の波動関数が得られる。ブラベクトルと $|x\rangle$ との内積をとると

$$\langle\psi|x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi^*(t, x') \langle x'|x\rangle = \psi^*(t, x), \quad (145)$$

⁸正確には状態ベクトル任意の数列がヒルベルト空間の元になるという完備性も必要ではある。

となる。また、任意の状態について

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x| \psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \psi(t, x) = |\psi\rangle, \quad (146)$$

となるので、

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle \langle x| = 1 \quad (147)$$

となることが分かる。これは完全性の関係と呼ばれる。

以上の話は基底を運動量演算子 \hat{p} の固有状態 $|p\rangle$ にしても同様に成り立つ。まとめると

$$\begin{aligned} \hat{p}|p\rangle &= p|p\rangle, & \langle p|p'\rangle &= \delta(p-p'), & \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p| &= 1, \\ |\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \tilde{\psi}(t, p), & \langle \psi| &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \tilde{\psi}^*(t, p) \langle p|, \end{aligned} \quad (148)$$

である。そして、完全性関係を用いると

$$\psi(t, x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle x|p\rangle \tilde{\psi}(t, p), \quad (149)$$

となる。この式と式 (49) を比較すると

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}, \quad (150)$$

となることが分かる。

最後に内積についての性質をまとめておこう。ブラベクトル $\langle \phi|$ とケットベクトル $|\psi\rangle$ の内積は

$$\begin{aligned} \langle \phi|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^*(t, x') \langle x'|x\rangle \psi(t, x) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \phi^*(t, x) \psi(t, x) \\ &= \langle \psi|\phi\rangle^*, \end{aligned} \quad (151)$$

である。ケットベクトルやブラベクトルは和とスカラー倍で閉じており、内積については

$$\begin{aligned} \langle \phi|(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) &= \lambda_1\langle \phi|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle \phi|\psi_2\rangle, \\ (\lambda_1^*\langle \phi_1| + \lambda_2^*\langle \phi_2|)|\psi\rangle &= \lambda_1^*\langle \phi_1|\psi\rangle + \lambda_2^*\langle \phi_2|\psi\rangle, \end{aligned} \quad (152)$$

が成り立つ。特に同じ状態の内積は

$$\langle \psi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(t, x) \psi(t, x) \geq 0, \quad (153)$$

となり、等号が成り立つのは $|\psi\rangle = 0$ のときのみである。

8.2 演算子と物理量

演算子 $\hat{O}(\hat{x}, \hat{p})$ が \hat{x} と \hat{p} の関数として与えられているとすると、この演算子はケットベクトルに対して

$$\hat{O}(\hat{x}, \hat{p})|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx |x\rangle O(x, -i\hbar\partial_x)\psi(t, x) \quad (154)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle O(i\hbar\partial_p, p)\tilde{\psi}(t, p), \quad (155)$$

のように作用する。そして、このケットベクトルの共役であるブラベクトルは

$$\langle\psi|\hat{O}(\hat{x}, \hat{p})^\dagger = \int_{-\infty}^{\infty} dx O^*(x, -i\hbar\partial_x)\psi^*(t, x)\langle x| \quad (156)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp O^*(i\hbar\partial_p, p)\tilde{\psi}^*(t, p)\langle p|, \quad (157)$$

である。 \hat{O}^\dagger は \hat{O} のエルミート共役と呼ばれる。ブラケットを用いると、Schrodinger 方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle, \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}), \quad (158)$$

のように表される。波動関数による表示にするには、 $\langle x|$ と上式の内積をとればよい。

また、状態ベクトルが $|\psi\rangle$ であるときの演算子 \hat{O} の期待値は

$$\langle O \rangle_\psi = \langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(t, x)O(x, -i\hbar\partial_x)\psi(t, x), \quad (159)$$

で与えられる。また、その複素共役は

$$\langle O \rangle_\psi^* = \int_{-\infty}^{\infty} dx O^*(x, -i\hbar\partial_x)\psi^*(t, x)\psi(t, x) = \langle\psi|\hat{O}^\dagger|\psi\rangle, \quad (160)$$

となる。ここで、演算子 \hat{O} がある物理量の演算子であるとする、その期待値は実数である必要がある。従って、物理量の演算子 \hat{O} はエルミート性 $\hat{O}^\dagger = \hat{O}$ を満たすエルミート演算子である。 \hat{x} 、 \hat{p} や \hat{H} などはエルミート演算子である。一見、運動量は $\hat{p} = -i\hbar\partial_x$ のように表されるのでエルミート演算子でないように考えるかもしれない。しかしながら、運動量の期待値を計算すると

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx (i\hbar\partial_x\psi^*(t, x))\psi(t, x) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(t, x)(-i\hbar\partial_x\psi(t, x)) = \langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle, \end{aligned} \quad (161)$$

となるので、 \hat{p} はエルミート演算子である。また、演算子 \hat{O}_1 と \hat{O}_2 の積のエルミート共役は

$$(\hat{O}_1\hat{O}_2)^\dagger = \hat{O}_2^\dagger\hat{O}_1^\dagger, \quad (162)$$

のようになる。何故ならば

$$\begin{aligned}\langle\psi|(\hat{O}_1\hat{O}_2)^\dagger &= \int_{-\infty}^{\infty} dx (O_1O_2\psi)^*\langle x| \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx O_1^*(O_2\psi)^*\langle x| \\ &= (\langle\psi|\hat{O}_2^\dagger)\hat{O}_1^\dagger,\end{aligned}\tag{163}$$

のように表されるからである。

最後に、固有状態が同時対角化できる条件について考えよう。演算子 \hat{O}_1 と \hat{O}_2 は

$$[\hat{O}_1, \hat{O}_2] = 0,\tag{164}$$

を満たす可換なエルミート演算子とする。そして、固有値が m であるような \hat{O}_1 の固有状態が

$$\hat{O}_1|m\rangle_j = m|m\rangle_j, \quad j = 1, \dots, n\tag{165}$$

のように n 重に縮退しているとする。すると、

$$\hat{O}_1(\hat{O}_2|m\rangle_j) = \hat{O}_2\hat{O}_1|m\rangle_j = m(\hat{O}_2|m\rangle_j),\tag{166}$$

なので、 $\hat{O}_2|m\rangle_j$ も \hat{O}_1 の固有状態で固有値は m である。従って、 $\hat{O}_2|m\rangle_j$ は $|m\rangle_j$ の線形結合によって

$$\hat{O}_2|m\rangle_j = \sum_{i=1}^n |m\rangle_i C^i_j,\tag{167}$$

のようになる。 C は C^i_j を成分にもつ $n \times n$ のエルミート行列なので、 $P^{-1}CP = D$ のように対角行列 D によって対角化可能である。そこで、上式に右から P を作用させると

$$\hat{O}_2\left(\sum_j |m\rangle_j P^j_i\right) = \sum_{j,k} |m\rangle_k P^k_j (P^{-1}CP)^j_i = d_i \left(\sum_j |m\rangle_j P^j_i\right),\tag{168}$$

のようになり、 \hat{O}_2 の固有状態をつくることができる。従って、 \hat{O}_1 と \hat{O}_2 が可換であるとき同時対角化可能である。逆に、同時対角化が可能な場合には \hat{O}_1 と \hat{O}_2 は可換となる。

8.3 Schrodinger 表示と Heisenberg 表示

Schrodinger 方程式 (158) の解は形式的に

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi(0)\rangle,\tag{169}$$

のように書くことができる。そして、演算子 \hat{O} の期待値は

$$\langle O \rangle = \langle\psi(t)|\hat{O}|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{O}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi(0)\rangle,\tag{170}$$

のように与えられる。この表式より、演算子とケットベクトルを新たに

$$\hat{O}_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{O}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}, \quad |\psi\rangle_H = |\psi(0)\rangle, \quad (171)$$

のように定義すると、期待値は

$$\langle O \rangle = {}_H\langle \psi | \hat{O}_H(t) | \psi \rangle_H, \quad (172)$$

のようになる。状態ベクトルが時間依存する形式を Schrodinger 表示と呼び、演算子が時間依存する形式を Heisenberg 表示と呼ぶ。Heisenberg 表示における演算子の時間依存性は

$$\frac{d}{dt}\hat{O}_H = -\frac{i}{\hbar}[\hat{O}_H, \hat{H}], \quad (173)$$

で与えられる。ハミルトニアンはどちらの表示でも同じであることに注意しよう。上式は古典的な式

$$\frac{d}{dt}O = \{O, H\}_{\text{P.B.}} \equiv \frac{\partial O}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial O}{\partial p}, \quad (174)$$

に対応するものである。

8.4 調和振動子のブラ・ケットによる表示

調和振動子ではエネルギーの固有状態を座標表示で求めた。この節では特に座標表示や運動量表示をとらずに調和振動子のエネルギー固有状態を考えることにする。

調和振動子の \hat{x} と \hat{p} を用いて新しい演算子を

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}, \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\hat{p}, \quad (175)$$

のように定義すると、そのハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right), \quad (176)$$

のように書き直すことができる。 \hat{a} は消滅演算子、 \hat{a}^\dagger は生成演算子と呼ばれるもので、交換関係

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \quad (177)$$

を満たす。さらに、 $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ と生成消滅演算子の交換関係は

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}, \quad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger, \quad (178)$$

のようになる。

それでは \hat{N} の固有状態を $|n\rangle$ としよう。

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad (179)$$

とすると、 $|n\rangle$ は

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle, \quad (180)$$

なので、エネルギー $\hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ の固有状態である。さらに、式 (178) を用いると

$$\hat{N}\hat{a}|n\rangle = (n-1)\hat{a}|n\rangle, \quad \hat{N}\hat{a}^\dagger|n\rangle = (n+1)\hat{a}^\dagger|n\rangle, \quad (181)$$

なので、 \hat{a} を作用させると \hat{N} の固有値は 1 下がり、 \hat{a}^\dagger を作用させると \hat{N} の固有値は 1 上がる事が分かる。これが \hat{a} を消滅演算子、 \hat{a}^\dagger を生成演算子と呼ぶ理由である。 \hat{a} を作用させる度にエネルギーは $\hbar\omega$ だけ下がるので、エネルギーの基底状態に \hat{a} を作用させると 0 になる必要がある。式 (179) を見ると基底状態は $|0\rangle$ であり、

$$\hat{a}|0\rangle = 0, \quad |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (182)$$

を満たすことが分かる。ただし、基底状態は $\langle 0|0\rangle = 1$ のように規格化されている。

最後に、座標表示の波動関数 $\phi_n(x) = \langle x|n\rangle$ を具体的に求めてみよう。生成消滅演算子は座標表示では

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(y + \frac{d}{dy}\right), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(y - \frac{d}{dy}\right) = -\frac{1}{\sqrt{2}}e^{\frac{1}{2}y^2}\frac{d}{dy}e^{-\frac{1}{2}y^2}, \quad (183)$$

のように表される。ただし、 $y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ とした。従って $\langle x|\hat{a}|0\rangle = 0$ より、基底状態の波動関数 $\phi_0(x)$ は微分方程式

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(y + \frac{d}{dy}\right)\phi_0(x) = 0, \quad (184)$$

を満たす必要がある。これを解くと

$$\phi_0(x) = C_0 e^{-\frac{1}{2}y^2}, \quad C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}, \quad (185)$$

のように求まる。ただし、 C_0 は波動関数の規格化条件 $\int dx \phi_0(x)^2 = 1$ によって決めた。そして、 $\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x|(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$ より、 n 番目の励起状態の波動関数 $\phi_n(x)$ は

$$\begin{aligned} \phi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}e^{\frac{1}{2}y^2}\frac{d}{dy}e^{-\frac{1}{2}y^2}\right)^n \phi_0(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}C_0(-1)^n e^{\frac{1}{2}y^2}\frac{d^n}{dy^n}e^{-y^2}, \end{aligned} \quad (186)$$

のように求まる。これはロドリゲスの公式による表式 (117) と一致する。

8.5 演習問題

1. 運動量演算子はエルミート演算子であることを示せ。
2. ポテンシャルは定数であるとする。このとき、ハミルトニアンと運動量演算子は可換であることを示せ。

3. 調和振動子のエネルギー固有状態を $|n\rangle$ とする。生成消滅演算子は $\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(y - \frac{d}{dy})$ 、 $\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(y + \frac{d}{dy})$ のように表される。ただし $y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ とした。 $\langle x|\hat{a}|0\rangle = 0$ より、基底状態の波動関数 $\phi_0(x) = \langle x|0\rangle$ を求めよ。
4. さらに、 $|1\rangle = \hat{a}^\dagger|0\rangle$ より、第 1 励起状態の波動関数 $\phi_1(x) = \langle x|1\rangle$ を求めよ。
5. さらに、 $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$ より、第 n 励起状態の波動関数 $\phi_n(x) = \langle x|n\rangle$ を求めよ。
(ヒント : $\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(y - \frac{d}{dy}) = -\frac{1}{\sqrt{2}}e^{\frac{1}{2}y^2} \frac{d}{dy} e^{-\frac{1}{2}y^2}$ 。)

A 物理定数について

SI 単位系における物理定数の値を挙げる。

真空中の光速	$c = 299792458 \text{ m s}^{-1}$
プランク定数	$h = 6.62606957(29) \times 10^{-34} \text{ J s}$
電子の電荷の大きさ	$e = 1.602176565(35) \times 10^{-19} \text{ C}$
よく使う組合せ	$\hbar c = 197.3269718(44) \text{ MeV fm}$
電子の質量	$m_e = 0.510998928(11) \text{ MeV}/c^2 = 9.10938291(40) \times 10^{-31} \text{ kg}$
陽子の質量	$m_p = 938.272046(21) \text{ MeV}/c^2 = 1.672621777(74) \times 10^{-27} \text{ kg}$
ボーア半径	$a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(m_e e^2) = 0.52917721092(17) \times 10^{-10} \text{ m}$
ボルツマン定数	$k = 1.3806488(13) \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1} = 8.6173324(78) \times 10^{-5} \text{ eV K}^{-1}$
ボーア磁子	$\mu_B = e\hbar/(2m_e) = 5.7883818012(26) \times 10^{-11} \text{ MeV/T}$

値は 2015 年 4 月の <http://pdg.lbl.gov/> より抜粋した。

B Bloch の定理

1 次元空間において周期ポテンシャル中を運動する物質を考える。 $V(x) = V(x - a)$ とし、 $\phi(x)$ を定常状態の波動方程式の解とすると

$$\begin{aligned}\frac{1}{\phi(x)} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) &= -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x - a)) \\ &= \frac{1}{\phi(x - a)} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x - a),\end{aligned}\tag{187}$$

となる。この式より

$$0 = \frac{d}{dx} \left\{ \phi(x - a) \frac{d\phi(x)}{dx} - \phi(x) \frac{d\phi(x - a)}{dx} \right\},\tag{188}$$

が成り立つので、積分すると

$$\begin{aligned}C &= \phi(x - a) \frac{d\phi(x)}{dx} - \phi(x) \frac{d\phi(x - a)}{dx} \\ &= \phi(x) \frac{d\phi(x + a)}{dx} - \phi(x + a) \frac{d\phi(x)}{dx},\end{aligned}\tag{189}$$

を得る。さらに、この等式をまとめると

$$\frac{1}{\phi(x + a) + \phi(x - a)} \frac{d(\phi(x + a) + \phi(x - a))}{dx} = \frac{1}{\phi(x)} \frac{d\phi(x)}{dx},\tag{190}$$

となるので、積分すると

$$\begin{aligned}
& \phi(x+a) + \phi(x-a) = D\phi(x) \\
& \Leftrightarrow \phi(x+a) - \lambda_- \phi(x) = \lambda_+ (\phi(x) - \lambda_- \phi(x-a)), \quad \lambda_{\pm} \equiv \frac{D \pm \sqrt{D^2 - 4}}{2}, \\
& \Leftrightarrow \varphi(x) = \lambda_+ \varphi(x-a), \quad \varphi(x) \equiv \phi(x+a) - \lambda_- \phi(x),
\end{aligned} \tag{191}$$

を得る。 D は積分定数で、新たに定義した $\varphi(x)$ は波動方程式の解である。ここで、 $\varphi(x) = \lambda_+^n \varphi(x-na)$ なので、波動関数が発散しないためには $|\lambda_+| = 1$ である必要がある。従って、 $\lambda_+ = e^{i\theta}$ とおくことができ、Bloch の定理

$$\varphi(x) = e^{i\theta} \varphi(x-a), \tag{192}$$

が示されたことになる。

C 一般相対論による ∇^2 の極座標表示

3次元極座標における微小距離の2乗(計量)は

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\phi^2, \tag{193}$$

与えられるので、これより計量テンソル g_{ij} は 3×3 行列で

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \sin^2 \theta \end{pmatrix}, \quad g^{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \end{pmatrix}, \tag{194}$$

のようになる。ただし、 $i, j = r, \theta, \phi$ であり、 g^{ij} は g_{ij} の逆行列である。計量テンソルの行列式を g と表すと、 $\sqrt{g} = r^2 \sin \theta$ であり、これは体積要素と一致する。一般相対性理論によると一般の座標系で以下の表式

$$\nabla^2 = \frac{1}{\sqrt{g}} \partial_i (\sqrt{g} g^{ij} \partial_j), \tag{195}$$

が成り立つ。導出にはリーマン幾何の知識が必要なので、とりあえずこれは公式として覚えるとよい。極座標の場合は以下のように表される。

$$\begin{aligned}
\nabla^2 &= \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left\{ \partial_r (r^2 \sin \theta \partial_r) + \partial_\theta (\sin \theta \partial_\theta) + \partial_\phi \left(\frac{1}{\sin \theta} \partial_\phi \right) \right\} \\
&= \partial_r^2 + \frac{2}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \partial_\theta^2 + \frac{\cos \theta}{r^2 \sin \theta} \partial_\theta + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \partial_\phi^2.
\end{aligned} \tag{196}$$

D Hermite 多項式

Hermite の微分方程式は

$$\frac{d^2 H_n}{dy^2} - 2y \frac{dH_n}{dy} + 2nH_n = 0, \quad (197)$$

で与えられる。ここで、 $H_n(y) = \sum_{a=0}^{\infty} c_a y^a$ とおいて上式に代入すると、

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{a=2}^{\infty} a(a-1)c_a y^{a-2} - 2 \sum_{a=1}^{\infty} a c_a y^a + 2n \sum_{a=0}^{\infty} c_a y^a \\ &= \sum_{a=0}^{\infty} \{(a+1)(a+2)c_{a+2} + 2(n-a)c_a\} y^a, \end{aligned} \quad (198)$$

なので、一般に

$$c_{a+2} = -\frac{2(n-a)}{(a+1)(a+2)} c_a, \quad (199)$$

のようになる。もし $n \neq 0, 1, 2, \dots$ であれば、数列は無限に続き、 a が十分大きいときには $c_{a+2} \sim \frac{2}{a} c_a$ となる。これは、 $H_n \sim e^{y^2}$ のように振る舞うことを表すので、束縛状態の波動関数としては不適切である。

以下では、 $n = 0, 1, 2, \dots$ とする。このとき、Hermite の微分方程式の解は Hermite 多項式と呼ばれ、ロドリゲスの公式によって

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} (e^{-y^2}), \quad (200)$$

のように表される。解であることを証明するには、関係式

$$\begin{aligned} 2yH_{n+1} &= 2(n+1)H_n + H_{n+2}, \\ \frac{dH_n}{dy} &= 2yH_n - H_{n+1}, \end{aligned} \quad (201)$$

を示して使えばよい。

Hermite 多項式の直交関係は、

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} y^m H_n(y) &= 0, \quad (m < n), \\ \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} y^n H_n(y) &= \sqrt{\pi} n!, \end{aligned} \quad (202)$$

によって

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy H_m(y) H_n(y) e^{-y^2} = \delta_{mn} 2^n \sqrt{\pi} n!, \quad (203)$$

のようになる。

E 3次元調和振動子

3次元調和振動子のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}_i^2 \right), \quad (204)$$

で与えられる。定常状態の波動関数を $\Psi(x_i)$ とすると、波動方程式は

$$\sum_{i=1}^3 \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_i^2 + \frac{m\omega^2}{2} x_i^2 \right) \Psi = E\Psi, \quad (205)$$

となる。この式は $\Psi(x_i) = \phi_1(x_1)\phi_2(x_2)\phi_3(x_3)$ のようにおくと変数分離することができて、

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx_i^2} + \frac{m\omega^2}{2} x_i^2 \right) \phi_i(x_i) = E_i \phi_i(x_i), \quad i = 1, 2, 3, \quad (206)$$

となる。ただし、 $E = E_1 + E_2 + E_3$ である。各 $\phi_i(x_i)$ は1次元調和振動子と同じ波動方程式の解なので、

$$\phi_i(x_i) = \frac{B}{\sqrt{2^{n_i} n_i!}} H_{n_i}(Ax_i) e^{-\frac{A^2}{2} x_i^2}, \quad A \equiv \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad B \equiv \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}}, \quad (207)$$

のようになり、エネルギー準位は各方向のエネルギーの和

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{3}{2} \right), \quad n = n_1 + n_2 + n_3, \quad n_i = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (208)$$

で与えられる。

エネルギー準位は (n_1, n_2, n_3) によってラベルされる。基底状態のエネルギーは $E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$ であり、波動関数は $\Psi_{(0,0,0)}$ のようにラベルされる。第1励起状態のエネルギーは $E_1 = \frac{5}{2}\hbar\omega$ であり、波動関数は $\Psi_{(1,0,0)}, \Psi_{(0,1,0)}, \Psi_{(0,0,1)}$ のように3重に縮退している。一般にエネルギー E_n の状態は、 n 個のエネルギー量子を3つに分割する方法の数で与えられるので、

$${}_{n+2}C_2 = \frac{(n+1)(n+2)}{2}, \quad (209)$$

のように縮退している。