令和２年度版

量子力学セミナーI

目 次

1 古典波動

1.1 1次元波動

1次元波動の方程式は,

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(x,t) = v^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x,t) \tag{1.1}$$

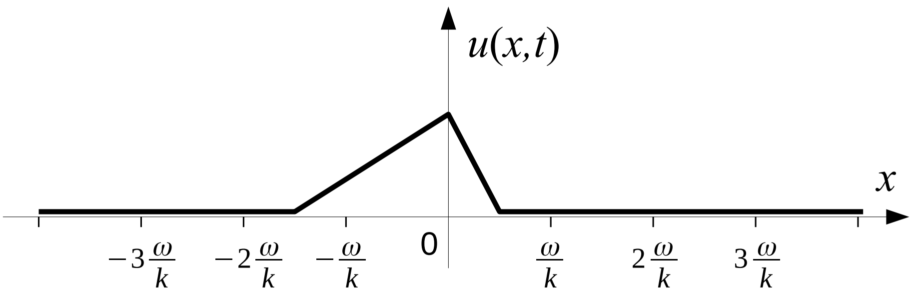
で与えられる．ここで，v は波の速さを表す．

[問題 1.1] k と ω を定数とし $\omega/k = v$ とすると，

(1) $u(x,t) = f(kx - \omega t)$ が式 (1.1) の解になることを示せ．

(2) 同様にして，$u(x,t) = g(kx + \omega t)$ が式 (1.1) の解になることを示せ．

[問題 1.2] 時刻 $t = 0$ で $u(x,t) = f(kx - \omega t)$ のグラフが下図のようにかける時，$t = 1$，$t = 2$ でのグラフの概形をかけ．



$u(x,t) = f(kx - \omega t)$ は速さ $v = \omega/k$ で x 軸の正の方向に進む波の式と見ることができる。また，$u(x,t) = g(kx + \omega t)$ は速さ $v = \omega/k$ で x 軸の負の方向に進む波の式と見ることができる。

[問題 1.3] $v = \omega/k$ とすると，$u(x,t) = A\sin(kx - \omega t)$ が式 (1.1) を満たすことを示せ．

上記の波は kx が 2π の時もとに戻る．見方を変えると k は 2π の間にいくつ波が入るかを表すので**波数**と呼ばれる．

1.2 2次元波動

2次元波動の方程式は,

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(\boldsymbol{r},t) = v^2 \Delta u(\boldsymbol{r},t) = v^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) u(\boldsymbol{r},t), \quad \boldsymbol{r} = (x,y) \tag{1.2}$$

で与えられる．ここで，v は波の速さを表す．

[問題 1.4] $\boldsymbol{k} = (k_x, k_y)$，$\boldsymbol{r} = (x,y)$ とすると，$u(\boldsymbol{r},t) = f(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t) = f(k_x x + k_y y - \omega t)$ が式 (1.2) を満たすことを示せ．

[問題 1.5] [問題 1.4] の特殊な場合として，$\boldsymbol{k} = (\pi,\pi)$，$\omega = \pi/2$ として $u(\boldsymbol{r},t) = \sin(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t) = \sin(\pi x + \pi y - \frac{\pi}{2}t)$ を考える．

(1) ベクトル $\boldsymbol{k}$ と x 軸のなす角を求めよ.

(2) 時刻 $t=0$ で $u(\boldsymbol{r},t)=0$ となる点を全て求め図示せよ.

(3) 時刻 $t=1$ で $u(\boldsymbol{r},t)=0$ となる点を全て求め図示せよ.

関数 $u(\boldsymbol{r},t)=f(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)$ はベクトル $\boldsymbol{k}$ の方向に速さ $\frac{\omega}{k}$ (但し，$k=|\boldsymbol{k}|=\sqrt{k_x^2+k_y^2}$) で進む波を表す. 特に，$u(\boldsymbol{r},t)$ が $A\sin(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)$ や $A\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)$ の時，位相がそろっている面が進行方向 $\boldsymbol{k}$ に垂直な直線 (3 次元だと平面) なので平面波と呼ぶ．$\sin(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)$ と $\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)$ の代わりに，これらの線形結合で表される，

$$u(\boldsymbol{r},t)=Ae^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)} \tag{1.3}$$

を平面波の式として用いることが多い.
これまで見てきた大きさが,

$$v_{\mathrm{ph}}=\frac{\omega}{k} \tag{1.4}$$

で計算される速度は位相がそろった面が進む速度を表しているので**位相速度**と呼ぶ.

1.3 3 次元波動

3 次元波動の方程式は,

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}u(\boldsymbol{r},t)=v^2\Delta u(\boldsymbol{r},t)=v^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)u(\boldsymbol{r},t),\quad \boldsymbol{r}=(x,y,z) \tag{1.5}$$

で与えられる．ここで，v は波の速さを表す.

[問題 1.6] $\boldsymbol{k}=(k_x,k_y,k_z)$，$\boldsymbol{r}=(x,y,z)$ とすると，$u(\boldsymbol{r},t)=f(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)=f(k_xx+k_yy+k_zz-\omega t)$ が式 (1.5) を満たすことを示せ.

[問題 1.7] $u(\boldsymbol{r},t)=Ae^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}=e^{i(k_xx+k_yy+k_zz-\omega t)}$ が式 (1.5) を満たすことを示せ.

[問題 1.8] $k=\sqrt{k_x^2+k_y^2+k_z^2}$，$r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ とすると，

(1) $u(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{r}\sin(kr-\omega t)$ が式 (1.5) を満たすことを示せ.

(2) $k=2\pi$ とする時，$z=0$ の平面で $t=0$ の時，この関数が 0 となる点を全て図示せよ.

上記の関数は，位相がそろった面が球面状に広がるので**球面波**と呼ばれる.
3 次元の波の 1 つの典型例は電磁波 (光) である．真空中の電磁波の方程式は電場 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$ または磁場 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)$ の波の方程式として,

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{\epsilon_0\mu_0}\Delta\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) \tag{1.6}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{\epsilon_0\mu_0}\Delta\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) \tag{1.7}$$

で与えられる．電磁気学 II の最後に習うので，その時に思い出してほしい．式 (1.5) と比較すると光速 c は,

$$c=\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0\mu_0}} \tag{1.8}$$

で与えられる．上式を満たす解の 1 つとして，

$$E_x(z,t) = E_0 \sin(kz - \omega t), \quad E_y = E_z = 0 \tag{1.9}$$

$$B_y(z,t) = B_0 \sin(kz - \omega t), \quad B_Z = B_y = 0 \tag{1.10}$$

がある．これも電磁気学 II で習うので，その時に思い出してほしい．

2　前期量子論

2.1　光の粒子性

光電効果

Planck は光電効果の実験から,「振動数 ν の光を放射または吸収する場合，そのエネルギーは $h\nu$ の整数倍ずつ不連続に変化する」という**量子仮説**を 1900 年に発表する．Einstein はこれをさらに発展させて,「光量子 (光子) のエネルギーは $h\nu$ となる」という**光量子説**を 1905 年に発表する．h は Planck に因んで Planck 定数と呼ぶ．便利なので h を 2π で割った $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ もよく用いられる．これを換算 Planck 定数または単に Planck 定数と呼ぶこともある．Planck 定数と言った場合，h なのか $\hbar$ なのか注意する必要がある．$\hbar$ は「エイチバー」と読む．

h: Planck 定数，$\hbar$: 換算 Planck 定数，ν: 振動数，$\omega = 2\pi\nu$: 角振動数

$$E = h\nu = \hbar\omega \tag{2.1}$$

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \mathrm{J \cdot S} \tag{2.2}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05 \times 10^{-34} \mathrm{J \cdot S} \tag{2.3}$$

Compton 効果

1923 年，Compton は Compton 効果の実験から,「波長 $\lambda(= \frac{c}{\nu})$ の光は $h\nu = (h\frac{c}{\lambda})$ のエネルギーと $p = \frac{h}{\lambda}(= (\frac{h\nu}{c})$ の運動量と持つとすると実験結果を説明できる」と発表．ここで c は光速である．

p: 運動量，λ: 波長，ν: 振動数，c: 光速

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h\nu}{c} \tag{2.4}$$

2.2　粒子の波動性

1924 年，de Brogli (ド・ブロイ) は,「エネルギー E，運動量 $p = mv$ を持つ粒子は振動数 $\nu = \frac{E}{h}$，波長 $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$ の波動性を持つ」ことを示した．この波を物質波 (de Brogli 波)，λ を de Brogli 波長と呼ぶ．

ν: 振動数，λ: 波長，p: 運動量，m: 質量，v: 速度

$$\nu = \frac{E}{h} \tag{2.5}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \tag{2.6}$$

2.3　Bohr-Sommerfeld の量子化条件

Liouville の定理のよれば，1 自由度の正準変換 $(q,p) \to (Q,P)$ に対して位相空間の微小体積は不変である．即ち，

$$dQdP = \frac{\partial(Q,P)}{\partial(q,p)} dqdp = dqdp \tag{2.7}$$

従って，周期運動をする 1 自由度系に対して 1 周期にわたる積分，$\oint pdq = \iint dpdq(=$ 位相空間内の軌道が囲む面積) は正準変換で不変である．そこで Sommerfeld は Bohr の量子条件を一般化して，

$$\oint pdq = \iint dpdq = nh, \quad (n: \text{自然数}) \tag{2.8}$$

という量子化条件を提案した.

[問題 2.1] 水素原子で 1 個の電子が原子核の周りを古典的に円運動しているとする．この運動を極座標 (r, θ) で表すと r は円運動で定数なので θ の 1 自由度系と見ることができる．極座標系での正準運動量は，$p_r = m\dot{r}$，$p_\theta = mr^2\dot{\theta}$ である．等速円運動なので角速度を ω とすると $\dot{\theta} = \omega$ である．

(1) Bohr-Sommerfeld の量子化条件 (2.8)，$\oint pdq = \oint p_\theta d\theta = \int_0^{2\pi} p_\theta d\theta = nh$ より，この系の量子化条件が $2\pi mrv = nh$ で与えられることを示せ.

(2) 水素原子のエネルギーが,

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2} \tag{2.9}$$

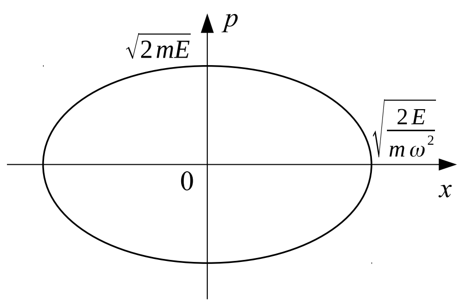
と量子化されることを示せ．$n = 1$ の時，上記は水素の $1s$ 軌道のエネルギーで，$-\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2} = -2.17 \times 10^{-18}\mathrm{J} = -13.6\mathrm{eV}$ となる．これの絶対値をとったエネルギーを 1Ry ということがある．Ry はスウェーデンの物理学者 Rydberg に因む単位でリドベルグまたはリュードベリと読む.

(3) 水素の $1s$ 軌道が円運動だとした時の半径 a_B が、

$$a_\mathrm{B} = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m e^2} = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-10}\mathrm{m} = 0.529\text{Å} \tag{2.10}$$

となることを示せ．a_B を Bohr 半径と呼ぶ.

[問題 2.2] 単振動 (調和振動子) のエネルギーは，$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ でとなる．これは位相空間で下図のような閉じた軌道を描く．これに対して，Bohr-Sommerfeld の量子化条件，$\iint dpdx = nh$ を適用し，エネルギーが $E = n\hbar\omega$ と量子化されることを示せ.



3 Schrödinger 方程式への移行

量子力学では古典力学での Newton 方程式に代わって，

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = H\psi(\boldsymbol{r},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r},t), \quad \nabla^2 = \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{3.1}$$

で表される Schrödinger 方程式を解くことで運動を調べる．ここで，H は解析力学で習った Hamiltonian,

$$H = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + V(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x,y,z) \tag{3.2}$$

において，

$$p_x \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \tag{3.3}$$

という置き換えを行い演算子に変えたものであることがわかる．また，古典的な波動方程式 (1.5) に良く似ていることも解る．ここでは，解析力学からどのようにしてこの Schrödinger 方程式を思いつくに至ったかを見ていくことにする．

しかし解析力学から量子力学が導けるわけではないことに注意して欲しい．また，Schrödinger 方程式は相対論効果を含んでいない．相対論効果を含んだ方程式として Dirac 方程式がある．Schrödinger 方程式は Dirac 方程式の非常に良い近似式にすぎない．そういった意味では，Newton 方程式も Schrödinger 方程式の非常に良い近似式である．

3.1 Hamilton 形式の復習

一般化座標を $\{q_i\}$，対応する運動量を $\{p_i\}$ とし，Hamiltonian を $H(\{q_i\},\{p_i\})$ とすると正準方程式，

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{3.4}$$

が成り立つ．これはニュートン方程式と同等である．

[問題 3.1] 単振動の Hamiltonian は $H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ で与えられる．正準方程式を用いて $\dot{x}$，$\dot{p}_x$ の満たす方程式を求めよ．

3.2 Poisson の括弧式

Poisson の括弧式は，

$$\{A,B\} = \sum_i\left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i}\right) \tag{3.5}$$

で定義される．Poisson の括弧式は以下の関係を満たす．

$$
\begin{aligned}
&\text{反対称性} \quad \{A,B\} = -\{B,A\}, \quad \text{特に},\{A,A\} = 0 &(3.6)\\
&\text{線形性} \quad \{A,B+C\} = \{A,B\} + \{A,C\} &(3.7)\\
&\text{分配則} \quad \{A,BC\} = \{A,B\}C + B\{A,C\} &(3.8)\\
&\text{結合即} \quad \{A,\{B,C\}\} + \{B,\{C,A\}\} + \{C,\{A,B\}\} = 0 &(3.9)
\end{aligned}
$$

また,

$$\{q_i,p_j\} = \delta_{ij}, \quad \{q_i,q_j\} = 0, \quad \{p_i,p_j\} = 0 \tag{3.10}$$

さらに,

$$\frac{d}{dt}A = \{A,H\} \tag{3.11}$$

従って，$\{A,H\} = 0$ の時，A は時間的に不変である．

3.3 Hamilton-Jacobi の方程式

以下では $\{q_i\}$，$\{p_i\}$ をまとめて q，p と書くことにする．正準変換,

$$p = \frac{\partial W(q,P,t)}{\partial q}, \quad Q = \frac{\partial W(q,P,t)}{\partial P}, \quad \bar{H} = H + \frac{\partial}{\partial t}W(q,P,t) \tag{3.12}$$

で $\bar{H} = 0$ となる場合を考える．この時，正準方程式,

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial Q} = 0, \quad \frac{dQ}{dt} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial P} = 0 \tag{3.13}$$

より，$P(t) = P(0) = P_0$，$Q(t) = Q(0) = Q_0$ と定数になる．このような母関数 W を求める偏微分方程式は、

$$H\left(q, \frac{\partial W(q,P_0,t)}{\partial q}, t\right) + \frac{\partial W(q,P_0,t)}{\partial t} = 0 \tag{3.14}$$

となる．これを Hamilton-Jacobi 方程式と呼ぶ.

3.4 Schrödinger 方程式への移行

簡単のため，以下では q を x と表記し，P_0 は定数なので，$W(q,P_0,t)$ は $W(x,t)$ と書くことにする．すると，式 (3.14) は,

$$-\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = H\left(q, \frac{\partial W(x,t)}{\partial x}, t\right) = H(q,p,t) \tag{3.15}$$

となる．ここで正準方程式 $p = \frac{\partial W(x,t)}{\partial x}$ を用いた．今，$\psi(x,t) = e^{W(x,t)/\kappa}$ (但し，κ は微小な定数) とすると,

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi = \frac{1}{\kappa}\frac{\partial W}{\partial t}\psi \tag{3.16}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi = \frac{1}{\kappa}\frac{\partial W}{\partial x}\psi \tag{3.17}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\psi = \frac{1}{\kappa}\frac{\partial^2 W}{\partial x^2}\psi + \left(\frac{1}{\kappa}\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2\psi \simeq \left(\frac{1}{\kappa}\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2\psi \tag{3.18}$$

となるので，$\psi(x,t)$ に $\kappa\frac{\partial}{\partial t}$ および $\kappa\frac{\partial}{\partial x}$ を作用させることは，$\frac{\partial W}{\partial t}$ および $\frac{\partial W}{\partial x}$ をかけることとほぼ同等である．即ち，

$$\frac{\partial W}{\partial t}\psi(x,t)=\kappa\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t),\quad \frac{\partial W}{\partial x}\psi(x,t)=p\phi(x,t)\simeq\kappa\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) \tag{3.19}$$

そこで，式 (3.15) に右から $\psi(x,t)$ をかけた式，

$$-\frac{\partial W}{\partial t}\psi(x,t)=H\left(q,\frac{\partial W}{\partial x},t\right)\psi(x,t) \tag{3.20}$$

に上記の関係を用いると，

$$-\kappa\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=H\left(x,\kappa\frac{\partial}{\partial x},t\right)\psi(x,t) \tag{3.21}$$

$$p\psi(x,t)=\kappa\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) \tag{3.22}$$

という偏微分方程式が得られる．あとは κ を決めれば良い．

κ の決定

Hamiltonian が時間 t を陽に含まないとき，母関数は，

$$W(x,t)=\Theta(t)+S(x) \tag{3.23}$$

となり，Hamilton-Jacobi の方程式 (3.14) は，

$$H\left(x,\frac{\partial S}{\partial x}\right)+\frac{d\Theta(t)}{dt}=0 \tag{3.24}$$

となる．ここで，第 1 項は x だけの関数，第 2 項は t だけの関数なので，足したものが定数であるためには，いずれも定数でなければならない．従って，$\frac{d\Theta(t)}{dt}=-C$(定数) より，$\Theta(t)=-Ct$，$H=C$ となるが，Hamiltonian はエネルギーに対応するので，$\Theta(t)=-Et$，$H=E$ となる．また母関数は，

$$W(x,t)=S(x)-Et \tag{3.25}$$

と変数分離できることになる．一方，$p=\frac{\partial W}{\partial x}=\frac{\partial S}{\partial x}$ より，$S(x)=\int_0^x p(x')dx'$ となる．従って，

$$\psi(x,t)=e^{W/\kappa}=\mathrm{Exp}\left[\frac{1}{\kappa}\left(\int_0^x p(x')dx'-Et\right)\right] \tag{3.26}$$

ここで，$\psi(x,t)$ が周期運動する時に関数の 1 価性を要求すると，

$$\frac{1}{\kappa}\oint pdx=i2\pi n \tag{3.27}$$

でないといけない．これと経験的に導かれた Bohr-Sommerfeld の量子化条件 (2.8) を比較すると $\kappa=-i\hbar$ となり，式 (3.21)，(3.22) は，

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=H\psi(x,t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\psi(x,t) \tag{3.28}$$

$$p\psi(x,t)=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) \tag{3.29}$$

となり，Schrödinger 方程式に移行する．

3.5 古典力学との対応関係

前節で古典力学と量子力学の間に，

$$p_x \iff -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y \iff -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z \iff -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \tag{3.30}$$

という対応関係 (3.3)，(3.29) があることを見た．

$$[A,B] = AB - BA \tag{3.31}$$

により交換子 [,] を定義すると，すでに物理数学基礎 I で習ったように，

$$[x,p_x] = \left[x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right] = i\hbar, \quad [y,p_y] = \left[y, -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right] = i\hbar, \quad [z,p_z] = \left[z, -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right] = i\hbar \tag{3.32}$$

$$[x,p_y] = [x,p_z] = [y,p_z] = [y,p_x] = [z,p_x] = [z,p_y] = 0 \tag{3.33}$$

が成り立つ．これは，古典力学における Poisson の括弧式が満たす関係 (3.10)，$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$ に対応する．ちなみに，この関係は後で習うが不確定性原理，

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \sim h \tag{3.34}$$

と同じことを意味する．
また，これもあとで習うが量子力学では，

$$\frac{d}{dt}A = \frac{1}{i\hbar}[A,H] = \frac{1}{i\hbar}(AH - HA) \tag{3.35}$$

という関係が成り立つ．これを Heisenberg の方程式と呼ぶ．特に Hamiltonian と交換する演算子 (物理量) は保存する (時間的に一定である) ことを示す．これに対応する古典力学の Poisson の括弧式の関係式として，$\frac{d}{dt}A = \{A,H\}$ がある．これらを比較すると Poisson の括弧式と量子力学の交換関係の間に，

$$\{A,B\} \iff \frac{1}{i\hbar}[A,B] \tag{3.36}$$

という対応関係があることがわかる．

3.6 時間とエネルギー

正準方程式 (3.4) は自由度を f とすると，

$$\delta\int_{t_1}^{t_2}\left(\sum_{i=1}^{f} p_i\dot{q}_i - H(p,q,t)\right)dt = 0 \tag{3.37}$$

という変分問題から導かれる．これは，

$$\delta\int_{t_1}^{t_2}\left(\sum_{i=1}^{f} p_i\dot{q}_i - E\right)dt = 0, \quad E = H(q,p,t) \tag{3.38}$$

という連立方程式と見ることができる．ここで，t も q や p と同じように扱い，もう一つのパラメータ τ の関数であるとすると上式は，

$$\delta \int_{\tau_1}^{\tau_2} \left(\sum_{i=1}^{f} p_i \frac{dq_i}{d\tau} - E \frac{dt}{d\tau} \right) d\tau = 0, \quad E = H(q,p,t) \tag{3.39}$$

と書き直せる．ここで t を $f+1$ 番目の自由度として標準変数 q の仲間に加え q_{f+1} とし，$-E$ を p_{f+1} とすると上式はさらに，

$$\delta \int_{\tau_1}^{\tau_2} \left(\sum_{i=1}^{f+1} p_i \frac{dq_i}{d\tau} \right) d\tau = 0, \quad H + p_{f+1} = 0 \tag{3.40}$$

と書き直せる．これに対して正準方程式を求めたときと同じ手続きを行うと $f+1$ 番目の自由度から，

$$\boxed{\frac{dE}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t}} \tag{3.41}$$

という正準方程式が得られる．つまり，時間 t とエネルギーの符号を変えた $-E$ は正準共役な変数と見ることができる．また，この式から Hamiltonian が陽に t を含まなければ E は一定であることがわかる．
古典力学から量子力学に移行する時に，$p_\alpha \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ という置き換えを行った．従って，$p_{f+1} \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_{f+1}}$ 即ち，

$$\boxed{-E \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial t}} \tag{3.42}$$

という置き換えを行っても良さそうである．実際に，$H = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + V(\boldsymbol{r}) = E$ に対して式 (3.3) と式 (3.42) の置き換えを行って演算子に変え $\psi(\boldsymbol{r},t)$ に作用させると Schrödinger 方程式を得る．
式 (3.34) から正準共役な変数の間には不確定性関係があると予想できる．実際に時間とエネルギーの間にも，

$$\boxed{\Delta E \cdot \Delta t \sim h} \tag{3.43}$$

という不確定性関係がある．

4　量子力学の考え方

4.1　Schrödinger 方程式の導入

以下に Schrödinger 方程式導入の手順を示す.
(1) Hamiltonian,

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(\boldsymbol{r}, t) = E \tag{4.1}$$

において,

$$p_\alpha \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_\alpha}, \quad (\alpha = x, y, z), \quad E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{4.2}$$

という置き換えを行う.

(2) その結果，Hamiltonian は演算子 (他の関数に作用して初めて意味のあるもの) に変わる．量子力学では物理量 (観測できるものという意味で **observable** と呼ぶ) は全て演算子になる．古典力学で計算してきたエネルギーや力は，こうした observable に対応した演算子の期待値である．期待値の計算方法は後ほど勉強する.

(3) 上記の Hamiltonian を関数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ に作用させることで Schrödinger 方程式,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(\boldsymbol{r}, t)\right]\psi(\boldsymbol{r}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{4.3}$$

を作る．∇ や Δ を使って書き直すと,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r}, t)\right]\psi(\boldsymbol{r}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{4.4}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{r}, t)\right]\psi(\boldsymbol{r}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{4.5}$$

(4) $V(\boldsymbol{r}, t)$ が時間に依存しないとき，即ち $V(\boldsymbol{r})$ と書ける時，波動関数は,

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \phi(\boldsymbol{r})e^{-iEt/\hbar} \tag{4.6}$$

と変数分離できて，**時間に依存しない Schrödinger 方程式**,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{r}, t)\right]\phi(\boldsymbol{r}) = \left[-\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(\boldsymbol{r}, t)\right]\phi(\boldsymbol{r}) = E\phi(\boldsymbol{r}) \tag{4.7}$$

が得られる．この時の E と $\phi(\boldsymbol{r})$ をそれぞれ**固有値**，**固有関数**と呼ぶ．後でわかるが $\phi(\boldsymbol{r})$ はベクトルで表現することも可能なので**固有ベクトル**と呼ぶこともある.

(5) (4) の時，式 (4.6) からわかるように，$|\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 = \psi^*(\boldsymbol{r}, t)\psi(\boldsymbol{r}, t) = |\phi(\boldsymbol{r})|^2$ となる．これは**時間 t に依らない定常状態**を表す.

4.2　波動関数の意味

$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\Delta\boldsymbol{r}$ は時刻 t における $\boldsymbol{r}$ 近傍の $\Delta\boldsymbol{r}$ の領域に粒子が存在する確率を与える．即ち，

$$\rho(\boldsymbol{r},t)=|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2=\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{4.8}$$

は時刻 t で位置 $\boldsymbol{r}$ に粒子が存在する確率密度を与える．確率密度なので全空間で積分すると 1 でなければならない．即ち，

$$\int\rho(\boldsymbol{r},t)d\boldsymbol{r}=\int|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2d\boldsymbol{r}=\int\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)d\boldsymbol{r}=1 \tag{4.9}$$

$\psi(\boldsymbol{r},t)$ がこの関係を満たしている時，$\psi(\boldsymbol{r},t)$ は規格化されているという．規格化されていない場合は $\psi(\boldsymbol{r},t)$ のノルム $\sqrt{\int|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2d\boldsymbol{r}}$ で割れば規格化される．

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)=-\frac{i\hbar}{2m}\{\psi^*\mathrm{grad}\psi-\psi\mathrm{grad}\psi^*\} \tag{4.10}$$

を**確率の流れ密度**と呼び粒子の速度分布を表す.

4.3　期待値

物理量 (observable)A の期待値 $\langle A\rangle$ は A に確率密度 $\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$ をかけて全空間で積分すれば求まる．即ち，

$$\langle A\rangle=\int\psi^*(\boldsymbol{r},t)A\psi(\boldsymbol{r},t)d\boldsymbol{r} \tag{4.11}$$

ここで A は左側の $\psi(\boldsymbol{r},t)$ にのみ作用することに注意．何故 A を中央に挟むのかという厳密な証明は「量子力学 I」の講義で勉強してほしい．
(例 1) x 座標の期待値

$$\langle x\rangle=\int\psi^*(\boldsymbol{r},t)x\psi(\boldsymbol{r},t)d\boldsymbol{r} \tag{4.12}$$

(例 1) x 方向の運動量の期待値

$$\langle p_x\rangle=\int\psi^*(\boldsymbol{r},t)p_x\psi(\boldsymbol{r},t)d\boldsymbol{r}=\int\psi^*(\boldsymbol{r},t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(\boldsymbol{r},t)d\boldsymbol{r} \tag{4.13}$$

[問題 4.1]　$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{Re}\left[-\frac{i\hbar}{m}\psi^*\mathrm{grad}\psi\right]$ であることを示し，$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)$ が確率の流れ密度として合理的であることを説明せよ．

[問題 4.2]　時間に依存しない Schrödinger 方程式の Hamiltonian の期待値が E となることを示せ.

4.4　連続の方程式

確率密度 $\rho(\boldsymbol{r},t)=\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$ と確率の流れ密度 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)$ の間には,

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\boldsymbol{r},t)+\mathrm{div}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)=0 \tag{4.14}$$

が成り立つ．これを**連続の方程式**と呼ぶ．第 1 項は確率密度の単位時間単位体積あたりの変化量で第 2 項はその領域への確率密度の流入量と流出量の差を表している．
(参考) 古典電磁気学でも電荷密度を $\rho(\boldsymbol{r},t)$，電流密度を $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)$ とすると (4.14) 式と同じ式が成り立ち**電荷の保存則**と呼ばれる．

[問題 4.3] 連続の式 (4.14) を Schrödinger 方程式から導け.

[問題 4.4] 1 次元の場合に連続の方程式 (4.14) を Schrödinger 方程式から導け.

4.5 Ehrenfest の定理

Newton 力学ではポテンシャルを $V(\boldsymbol{r},t)$ とすると力 $\boldsymbol{f}$ は,

$$\boldsymbol{f} = -\mathrm{grad}V = -\nabla V \tag{4.15}$$

で与えられる．そこで力の期待値 $\langle \boldsymbol{f} \rangle$ を,

$$\langle \boldsymbol{f} \rangle = \int \psi^*(-\nabla V)\psi d\boldsymbol{r} \tag{4.16}$$

で表すと，波動関数が限られた空間でしか有限の値を持たなければ (これを波束と呼ぶ)，即ち $|\boldsymbol{r}| \to \infty$ で $|\psi(\boldsymbol{r})| \to 0$ ならば,

$$\frac{d}{dt}\langle \boldsymbol{r} \rangle = \frac{1}{m}\langle \boldsymbol{p} \rangle \tag{4.17}$$

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle \boldsymbol{r} \rangle = \langle \boldsymbol{f} \rangle \tag{4.18}$$

が成り立つ．ここで $\langle \boldsymbol{r} \rangle = (\langle x \rangle, \langle y \rangle, \langle z \rangle)$，$\langle \boldsymbol{p} \rangle = (\langle p_x \rangle, \langle p_y \rangle, \langle p_z \rangle)$，$\langle \boldsymbol{f} \rangle = (\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle, \langle -\frac{\partial V}{\partial y} \rangle, \langle -\frac{\partial V}{\partial z} \rangle)$ である．これを **Ehrenfest(エーレンフェスト) の定理**と呼ぶ．期待値を示す $\langle , \rangle$ がなければ Newton 方程式に等しいので，**波動関数が局在していれば，その期待値は Newton 方程式に従う**ことを示している．

[問題 4.5] Gauss の定理,

$$\int_{\mathrm{V}} \mathrm{div}\boldsymbol{v}d\boldsymbol{r} = \int_{\mathrm{V}} \nabla \boldsymbol{v}d\boldsymbol{r} = \int_{\mathrm{S}} \boldsymbol{v}\cdot d\boldsymbol{s} \tag{4.19}$$

とベクトル解析の公式,

$$\nabla(f\nabla g) = \nabla f \nabla g + f\Delta g \tag{4.20}$$

からグリーンの定理,

$$\int_{\mathrm{V}} f\Delta g d\boldsymbol{r} = \int_{\mathrm{S}} f\nabla g\cdot d\boldsymbol{s} - \int_{\mathrm{V}} \nabla f \nabla g d\boldsymbol{r} \tag{4.21}$$

$$\int_{\mathrm{V}} f\Delta g - g\Delta f d\boldsymbol{r} = \int_{\mathrm{S}} f\nabla g - g\nabla f\cdot d\boldsymbol{s} \tag{4.22}$$

を証明せよ．式 (4.21) は部分積分の公式,

$$\int_a^b fg''dx = [fg']_a^b - \int_a^b f'g'dx \tag{4.23}$$

の 3 次元版と見ることができる．

[問題 4.6] Ehrenfest の定理を Schröringer 方程式から示せ.

[問題 4.7] 1 次元の場合に Ehrenfest の定理 (4.17)，(4.18) を Schrödinger 方程式から導け.

4.6 不確定性原理と交換関係

正しい証明はもう少し後にならないと示せないが量子力学の大事な原理である不確定性原理と交換関係について紹介しておこう．量子力学によれば粒子の位置と運動量は同時に確定することはできず Planck 定数程度の不確定性があるというのが不確定性原理である．式で表すと，

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \sim h, \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \sim h, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z \sim h \tag{4.24}$$

高校の物理で習うような「時刻 $t = 0$ で原点に静止した物体」は原理的にあり得ないことになる．
一方，すでに 3.5 章で見たように交換子 $[,]$ を，

$$[A, B] = AB - BA \tag{4.25}$$

で定義すると，座標演算子と運動量演算子の間には，

$$[x, p_x] = [y, p_y] = [z, p_z] = i\hbar \tag{4.26}$$

という関係が成り立つ．即ち，同じ方向の座標演算子と運動量演算子は交換しない．不確定性原理の式 (4.24) と交換関係 (4.26) は同値であることが後で示される．

5　自由粒子

自由粒子とは何ら束縛を受けることなく無限に広がった空間内を全ての方向に自由に運動する粒子である．束縛を受けないとは力を受けない，即ちポテンシャル $V(\boldsymbol{r}, t)$ が至るところ 0 であるということだ．

5.1　1 次元自由粒子

まず簡単のために 1 次元自由粒子を考える．1 次元なので $V(x) = 0$ となる．ポテンシャルが時間を含まないので時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) = E\phi(x) \qquad (5.1)}$$

を解けば良い．境界条件がないと解けないので，やや人工的であるが L だけ進むと波動関数が元に戻るという周期的境界条件を置くことにする．式で表すと，

$$\boxed{\phi(x+L) = \phi(x) \qquad (5.2)}$$

式 (5.1) は，$\phi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\phi$ となるので一般解は，

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{5.3}$$

となる．これは時間に依存しない Schrödinger 方程式の解で時間部分 $e^{-iEt/\hbar}$ を含めると式 (4.6) から，

$$\psi(x) = (Ae^{ikx} + Be^{-ikx})e^{-iEt/\hbar} \tag{5.4}$$

となる．さらに，$E/\hbar = \omega$ と書くことにするとこれは，

$$\psi(x) = Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{-i(kx+\omega t)} \tag{5.5}$$

となる．従って，式 (5.3) の Ae^{ikx} は x 軸の正の方向に進む波，Be^{-ikx} は x 軸の負の方向に進む波を表すことがわかる．そこで x 軸の正の方向に進む $\phi(x) = Ae^{ikx}$ のみを採用することにする．その代わり，負の方向に伝わる波は k に符号を持たせて，負の k で表現することにする．$\phi(x) = Ae^{ikx}$ を周期 L で規格化すると，

$$\int_0^L \phi^*(x)\phi(x)dx = \int_0^L Ae^{-ikx}Ae^{-kx}dx = \int_0^L A^2dx = 1 \tag{5.6}$$

より，$A = \frac{1}{\sqrt{L}}$ と求まる．また周期境界条件から，

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ik(x+L)} = e^{ikL}\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx} = \phi(x) \tag{5.7}$$

を満たさないといけないので $e^{ikL} = 1$，即ち

$$kL = 2\pi n, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \tag{5.8}$$

従って，波数 k は任意の値を取れるわけではなく，

$$k = \frac{2\pi}{L}n, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \tag{5.9}$$

と飛び飛びの値 (離散的な値) をとる．まとめると **1 次元自由粒子の波動関数**は，

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}, \quad k = \frac{2\pi}{L} n, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \tag{5.10}$$

で与えられる．k に負の値を許すことで (5.3) 式の Be^{-ikx} も含んでいる．また，この粒子のエネルギーは (5.3) 式から，

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{5.11}$$

で与えられる．k が離散的なので，エネルギー E も離散的になる．式 (5.5) から時間も含めた波動関数は，

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i(kx - \omega t)} \tag{5.12}$$

となり「位相速度」$v_{ph} = \omega/k$ で伝搬する正弦波である．

5.2 位相速度と群速度

波の速度には位相速度 v_{ph} と群速度 V_g がある．それぞれ，

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} \tag{5.13}$$

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} \tag{5.14}$$

で定義される．**位相速度は波の位相のそろった波面が進む速度**である．一方，**群速度はまとまった波 (波束) の進む速度**である．古典粒子の速度は群速度である．1 次元自由粒子の場合，$\omega = \frac{E}{\hbar}$ で $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ なので，$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ となり，位相速度 v_{ph} と群速度はそれぞれ，

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} \tag{5.15}$$

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m} \tag{5.16}$$

となり異なる．

[問題 5.1] 式 (5.10) から 1 次元自由粒子の運動量の平均値 $\langle p_x \rangle$ を求めよ．積分領域は 1 周期になることに注意すること．

このことから $\langle p_x \rangle$ は群速度により，$\langle p_x \rangle = m v_g$ と書けることがわかる．同じ理由で Ehrenfest の定理の運動量は古典力学の群速度に対応する．

[問題 5.2] 式 (5.10) から 1 次元自由粒子の運動エネルギーの平均値 $\langle \frac{p_x^2}{2m} \rangle$ を求めよ．

5.3 Gauss 波束

5.1 章で求めた $\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$ は $|\phi(x)|^2 = \frac{1}{L}$ より x 軸上に一様に広がった波であることがわかる．不確定性原理によれば $\Delta x \cdot \Delta p_x \sim h$ において，$\Delta p_x \to 0$ $(\Delta x \to \infty)$ の極限の波である．次に空間的に局在した波 (このような波を波束と呼ぶ) を考えよう．時刻 $t = 0$ で，

$$\psi(x,0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ikx\right) \tag{5.17}$$

で与えられる波動関数を Gauss 波束と呼ぶ．

[問題 5.3] Gauss 波束について以下の問いに答えよ．積分公式,

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\alpha^2 x^2} dx = 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^3} \tag{5.18}$$

は既知として良い．

(1) 規格化定数 A を求めよ．

(2) $|\psi(x,0)|^2$ のグラフの概形を描け．

(3) x の平均値 $\langle x \rangle$ を求めよ．

(4) x^2 の平均値 $\langle x^2 \rangle$ を求めよ．

(5) p_x の平均値 $\langle p_x \rangle$ を求めよ．

(6) p_x^2 の平均値 $\langle p_x^2 \rangle$ を求めよ．

(7) $\Delta x = x - \langle x \rangle$ と定義する．$(\Delta x)^2$ の平均値 $\langle (\Delta x)^2 \rangle$ を計算し，$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ となることを示せ．

(8) $\Delta p_x = p_x - \langle p_x \rangle$ と定義する．$(\Delta p_x)^2$ の平均値 $\langle (\Delta p_x)^2 \rangle$ を計算し，$\langle (\Delta p_x)^2 \rangle = \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2$ となることを示せ．

(9) $\sqrt{\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_x)^2 \rangle} = \frac{\hbar}{2}$，即ちこの波動関数で不確定性原理が成り立つことを示せ．

5.4　3 次元自由粒子

1 次元自由粒子を 3 次元に拡張することを考える．3 次元自由粒子の時間に依存しない Schrödinger 方程式は,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \phi(\boldsymbol{r}) = E \phi(\boldsymbol{r}) \tag{5.19}$$

で与えられる．

[問題 5.4] 波動関数が $\phi(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z)$ と変数分離できるとし，x 軸, y 軸, z 軸の 3 方向に L だけ進むと元に戻るという周期的境界条件 (即ち $X(x+L) = X(x)$, $Y(y+L) = Y(y)$, $Z(z+L) = Z(z)$,) をおいて 3 次元自由粒子の Schrödinger 方程式 (5.19) を解いて，固有値と固有関数を求めよ．

[問題 5.5] 3 次元自由粒子の運動量の期待値 $\langle \boldsymbol{p} \rangle$ を求めよ．

上記の問題の結果は記憶すること．

6　1次元量子系

6.1　デルタ関数

十分滑らかで，かつ遠方で急速にゼロになる任意の関数 $f(x)$ に対して，

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-x_0)dx = f(x_0) \tag{6.1}$$

となる関数を**デルタ関数**と呼ぶ．デルタ関数は通常の関数として表すことはできず，適当な関数列 $\delta_n(x)$ の極限 ($\delta(x) = \lim_{n\to\infty}\delta_n(x)$) で定義され，超関数と呼ばれる．上の定義から

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x_0)dx = 1 \tag{6.2}$$

であることはすぐ分かる．平たい言葉でいうと，**デルタ関数 $\delta(x-x_0)$ は面積が 1 で $x = x_0$ に非常に鋭いピークを持つ関数である．あるいは，クロネッカーのデルタ (δ_{nm}) を実数に拡張したようなものと思っても良い．**
デルタ関数になる関数列はたくさん存在する．以下に証明なしでそのいくつかを載せておく．

1. $\delta(x) = \lim_{n\to\infty}\delta_n(x), \quad \delta_n(x) = \begin{cases} n & |x| \le 1/2n \\ 0 & |x| > 1/2n \end{cases}$
2. $\delta(x) = \lim_{n\to\infty}\delta_n(x) = \lim_{n\to\infty}\dfrac{\sin nx}{\pi x}$
3. $\delta(x) = \lim_{n\to\infty}\delta_n(x) = \lim_{n\to\infty}\sqrt{\dfrac{n}{\pi}}e^{-nx^2}$

[問題 6.1]　式 (6.2) を証明せよ．

[問題 6.2]　デルタ関数に関する以下の関係を証明せよ．

(1) $\delta(x) = \delta(-x)$

(2) $\delta(ax) = \frac{1}{a}\delta(x)$

デルタ関数のフーリエ変換による表現を載せておく．

$$\delta(x-x_0) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x_0)}dk \tag{6.3}$$

デルタ関数が偶関数であることを利用して式 (6.3) を，

$$\delta(x-x_0) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik(x-x_0)}dk \tag{6.4}$$

と書き直そう．両辺に任意の関数 $f(x)$ をかけて x について $-\infty$ から ∞ まで積分すると，

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-x_0)dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\left[\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik(x-x_0)}dk\right]dx \tag{6.5}$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ikx}dx\right]e^{ikx_0}dk = f(x_0) \tag{6.6}$$

このことから次の式が成り立つことがわかる．

$$F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ikx}dx = \mathcal{F}\{f(x)\} \tag{6.7}$$

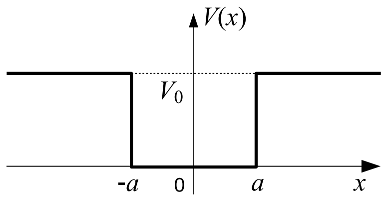
$$f(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} F(k)e^{ikx}dk = \mathcal{F}^{-1}\{F(k)\} \tag{6.8}$$

前者をフーリエ変換，後者を逆フーリエ変換 (あるいは単にフーリエ変換) と呼ぶ．指数関数の肩の符号が逆になっていることに注意すること． (6.8) 式は関数系 $\{e^{ikx}\}$ の重ね合わせによってあらゆる連続な関数を表現できることを示している．このような関数を**完全系を張る関数系**という．
上記の証明からわかるように，重ね合わせによりデルタ関数を作れる関数系は (デルタ関数の定義から) あらゆる関数を重ね合わせにより作れるので完全系を張ることがわかる．
(注：特定の固有値問題に対する線型独立な解全体の集合も，固有値問題の全ての解を線型結合で表現できるので完全系を張るということがある)

6.2 1 次元箱型ポテンシャル

1 次元系のポテンシャルが例えば,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ V_0 & |x| > a, \quad (V_0 > 0) \end{cases} \tag{6.9}$$



という形をしているとき，1 次元箱型ポテンシャルという．こうした系は厳密に解くことができる．

6.2.1 束縛状態と散乱状態

式 (6.9) で V_0 が定数の時，$|x| > a$ で Schrödinger 方程式は,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_0\right)\phi(x) = E\phi(x) \tag{6.10}$$

より,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) = (E - V_0)\phi(x) \tag{6.11}$$

(1) $E > V_0$ **の時**
式 (6.11) の一般解は,

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{6.12}$$

または,

$$\phi(x) = A'\sin kx + B'\cos kx \tag{6.13}$$

ただし,

$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \quad \text{or} \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E - V_0 \tag{6.14}$$

である．この時 A と B(A' と B') をどのようにとっても $\lim_{|x|\to\infty} = 0$ とはできない．$x = \infty$ で $|\phi(x)|^2$ が有限であるということは**無限に広がることができる状態 (散乱状態)** にあるということである．

(2) $E < V_0$ **の時**
式 (6.11) の一般解は,

$$\phi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x} \tag{6.15}$$

または (あまり実用性は無いが式 (6.13) と対にしておくと),

$$\phi(x) = A' \sinh \kappa x + B' \cosh \kappa x \tag{6.16}$$

ただし,

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad \text{or} \quad \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = V_0 - E \tag{6.17}$$

である．この時，$x > 0$ の領域では $A \neq 0$ とすると $\lim_{x\to\infty} |\phi(x)|^2 = \infty$ となり物理的に不合理である．従って $A = 0$ とする必要がある．この時 $\lim_{x\to\infty} |\phi(x)|^2 = 0$ となる．同様にして，$x < 0$ の領域では $B = 0$ とする必要がある．この時 $\lim_{x\to-\infty} |\phi(x)|^2 = 0$ となる．以上のことから $E < V_0$ の時は，$\lim_{|x|\to\infty} |\phi(x)|^2 = 0$ であり，波動関数の振幅従って**粒子の存在確率は有限の領域に限られる．このような状態を束縛状態**という．

6.2.2 境界条件

式 (6.12) と (6.13) や (6.15) と (6.16) の係数 A と $B(A'$ と $B')$ は「ポテンシャルの飛びのあるところ (上の例では $x = \pm a$) でも波動関数とその 1 階導関数が連続である」という境界条件から決められる．Schrödinger 方程式が 2 階の微分方程式なので波動関数は 2 階微分可能で無いといけないのだ．$x = a$ にポテンシャルの飛びがあるとすると，

$$\lim_{\epsilon\to+0} \phi(a+\epsilon) = \lim_{\epsilon\to+0} \phi(a-\epsilon) \tag{6.18}$$

$$\lim_{\epsilon\to+0} \phi'(a+\epsilon) = \lim_{\epsilon\to+0} \phi'(a-\epsilon) \tag{6.19}$$

から係数 A と $B(A'$ と $B')$ は決められる．
ポテンシャルの飛びが無限大の時，即ち $V_0 = \infty$ の時は，ポテンシャルが無限大の領域に粒子は存在できない ($|\phi(x)|^2 = 0$) ので，

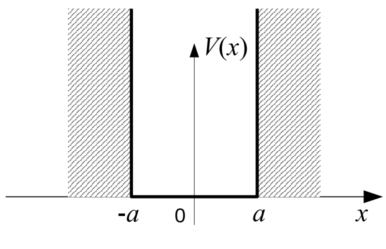
$$\phi(a) = 0 \tag{6.20}$$

とする．

[問題 6.3] 1 次元でポテンシャルが右図のように，

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ \infty & |x| > a \end{cases}$$

で与えられる時，Schrödinger 方程式を解いて固有値，固有関数を求めよ．



6.2.3 偶奇性 (Parity)

1 次元系でポテンシャル $V(x)$ が偶関数なら固有関数は偶関数または奇関数として選ぶことができる．これを偶奇性 (parity:パリティ) と呼ぶ．[問題 6.3] はポテンシャルが偶関数で固有関数は $\frac{1}{\sqrt{a}} \cos kx$(偶関数) と $\frac{1}{\sqrt{a}} \sin kx$(奇関数) となのでこの定理を満たしている．

[問題 6.4] 1 次元系でポテンシャル $V(x)$ が偶関数なら，Schrödinger 方程式,

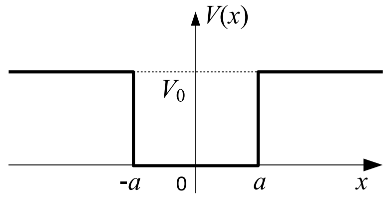
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x)+V_0\phi(x)=E\phi(x) \tag{6.21}$$

の固有関数は必ず偶関数または奇関数に取りうることを示せ.

[問題 6.5] 1 次元では，束縛状態に縮退 (同じ固有値を持つ線形独立な固有関数が複数あること) が無いことを示せ.（ヒント：縮退があると仮定して，その波動関数を ϕ_1，ϕ_2 とすると $\phi_1''\phi_2-\phi_1\phi_2''=0$ であることを導き，これを積分せよ.）

[問題 6.6] 1 次元でポテンシャルが右図のように,

$$V(x)=\begin{cases}0 & |x|<a\\ V_0 & |x|>a,\quad (V_0>0)\end{cases}$$



で与えられる時,

(1) Schrödinger 方程式を解いて束縛状態の固有値，固有関数を求めよ.

(2) $V_0\to\infty$ の極限で固有値，固有関数が [問題 6.3] の場合と一致することを確かめよ.

[問題 6.7] 1 次元でポテンシャルがデルタ関数により,

$$V(x)=-U_0\delta(x),\quad (U_0>0) \tag{6.22}$$

と与えられる時，以下の問いに答えよ.

(1) 原点を含む微小区間 $-\epsilon<x<\epsilon$ で時間に依存しない Schrödinger 方程式の両辺を積分して $\epsilon\to 0$ の極限を考えることで原点における接続条件,

$$\lim_{\epsilon\to+0}\phi'(+\epsilon)-\lim_{\epsilon\to+0}\phi'(-\epsilon)=-\frac{2mU_0}{\hbar^2}\phi(0)$$

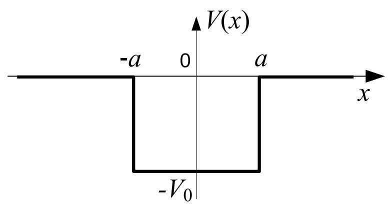
を示せ.

(2) 上記の接続条件を用いて Schrödinger 方程式を解き固有値，固有関数を求めよ.

(注) この問題の場合はポテンシャルがデルタ関数 (超関数) なので通常の接続条件 (6.18)，(6.19) が使えない.

[問題 6.8] 1 次元でポテンシャルが右図のように,

$$V(x)=\begin{cases}-V_0 & |x|<a,\quad (V_0>0)\\ 0 & |x|>a\end{cases} \tag{6.23}$$



で与えられる時,

(1) Schrödinger 方程式を解いて束縛状態の固有値，固有関数を求めよ.

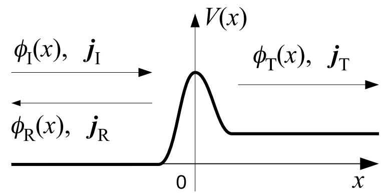
(2) $V_0=\frac{U_0}{2a}$ とし $a\to 0$ の極限で固有値，固有関数が [問題 6.7] の場合と一致することを確かめよ.

6.3 階段型ポテンシャルによる散乱

ポテンシャルが定数のみで与えられて階段状に変化する物を階段型ポテンシャルという．箱型ポテンシャルも階段型ポテンシャルの 1 種である．ここでは束縛状態ではなく階段型のポテンシャルによって散乱される波動関数の様子を見ていくことにする．

透過率と反射率

右図のように原点近傍で何らかのポテンシャルの変化があり，左から入射した波動関数 $\phi_{\mathrm{I}}(x)$ の一部が反射され $\phi_{\mathrm{R}}(x)$ として戻ってきて，また一部は ϕ_{T} として透過したとする．$\phi_{\mathrm{I}}(x)$，$\phi_{\mathrm{R}}(x)$，$\phi_{\mathrm{T}}(x)$ に対して式 (4.10) で定義される確率の流れ密度をそれぞれ，$\boldsymbol{j}_{\mathrm{I}}$，$\boldsymbol{j}_{\mathrm{R}}$，$\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}}$ とすると，反射率 R と透過率 T は，



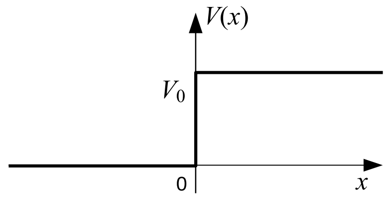
$$R = \frac{|\boldsymbol{j}_{\mathrm{R}}|}{|\boldsymbol{j}_{\mathrm{I}}|} \tag{6.24}$$

$$T = \frac{|\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}}|}{|\boldsymbol{j}_{\mathrm{I}}|} \tag{6.25}$$

でそれぞれ定義される．

[問題 6.9] 1 次元でポテンシャルが右図のように，

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x > 0, \quad (V_0 > 0) \end{cases}$$



で与えられる時，x 軸の負の方向から入射した波はどのように反射され，また透過していくか以下の場合に分けて Schrödinger 方程式を解き調べよ．

(1) 運動エネルギー E が $E > V_0$ の場合

(2) 運動エネルギー E が $V_0 > E > 0$ の場合

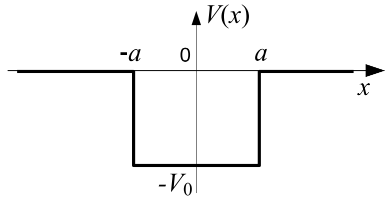
[問題 6.10] 1 次元でポテンシャルがデルタ関数により，

$$V(x) = U_0\delta(x), \quad (U_0 > 0)$$

と与えられる時, x 軸の負の方向から入射した波がどのように反射され, また透過していくか Schrödinger 方程式を解き調べよ．波動関数の原点での接続条件は [問題 6.7] を参考にすること．

[問題 6.11] 1 次元でポテンシャルが右図のように，

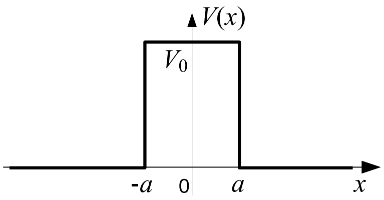
$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| < a, \quad (V_0 > 0) \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$



で与えられる時，x 軸の負の方向から入射した波がどのように反射され，また透過していくか Schrödinger 方程式を解き調べよ．

[問題 6.12] 1 次元でポテンシャルが右図のように，

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & |x| < a, \quad (V_0 > 0) \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$



で与えられる時，以下の問いに答えよ.

(1) x 軸の負の方向から $E < V_0$ である運動エネルギー E を持った波が入射した時，どのように反射されどのように透過するか Schrödinger 方程式を解いて調べよ.

(2) $V_0 = \frac{U_0}{2a}$ とし $a \to 0$ の極限で [問題 6.10] の結果と一致することを確かめよ.

量子力学では，運動エネルギーよりも高いポテンシャル障壁を透過することができる．これをトンネル現象という．CPU やメモリーと言った半導体デバイスは，このトンネル効果を利用して作られている.

7 量子力学の要請

7.1 関数の内積とブラ・ケットの導入

3 次元空間で定義される関数 $f(\boldsymbol{r}) = f(x,y,z)$ と $g(\boldsymbol{r}) = g(x,y,z)$ の内積を

$$(f,g) = \int_V f^*(\boldsymbol{r})g(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} = \int_V f^*(x,y,z)g(x,y,z)dxdydz \tag{7.1}$$

で定義する．ただし,「*」は複素共役を示す．積分は定義域 V で行うとする．数学の定義と異なり前の関数の複素共役を取ることに注意．量子力学ではこれを

$$(f,g) = \langle f|g\rangle = \int_V f^*(\boldsymbol{r})g(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} \tag{7.2}$$

と書くことがある．また，$\langle f|$ と $|g\rangle$ に分けて，$\langle f|$ をブラベクトル f，$|g\rangle$ をケットベクトル g，両方を合わせてブラケットと呼ぶことがある．ベクトルの内積を思い出すと，2 つのベクトル $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ の内積は行列の演算を使うと，

$$(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) = {}^t\boldsymbol{a}^*\boldsymbol{b} \tag{7.3}$$

とかける．

$${}^t\boldsymbol{a}^* \iff \langle f|, \quad \boldsymbol{b} \iff |g\rangle \tag{7.4}$$

という対応関係があると思えば良い．

[問題 7.1] $(f,g) = (g,f)^*$ 即ち $\langle f|g\rangle = \langle g|f\rangle^*$ を示せ．

7.2 線形演算子

以下の関係を満たす演算子 A を線形な演算子と呼ぶ．

$$A(f+g) = Af + Ag \tag{7.5}$$
$$A(cf) = cAf, \quad (c \text{ は定数}) \tag{7.6}$$

f と g がベクトルだと，線形代数で習った一次変換と同じ関係である．ブラケットを使うと，

$$A(|f\rangle + |g\rangle) = A|f\rangle + A|g\rangle \tag{7.7}$$
$$A(c|f\rangle) = cA|f\rangle \tag{7.8}$$

となる．量子力学で出てくる演算子は波動関数の重ね合わせができないといけないので線形演算子である．

7.3 Hermite 演算子

$(Af,g) = (f,Bg)$ 即ち，$\int_V (Af(\boldsymbol{r}))^*g(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} = \int_V f^*(\boldsymbol{r})Bg(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}$ を満たす演算子 B を A の Hermite 共役な演算子と呼び $A^\dagger$ で表す．

$$(Af,g) = (f,A^\dagger g) \tag{7.9}$$

[問題 7.2] $(A^\dagger)^\dagger = A$ を示せ．

特に，

$$A^\dagger = A \tag{7.10}$$

となる演算子を Hermite 演算子と呼ぶ．

[問題 7.3] $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ が Hermite 演算子であることを示せ．

[問題 7.4] $p_x = -i\hbar\frac{d}{dx}$ が Hermite 演算子であることを示せ．

[問題 7.5] A と B がともに Hermite 演算子であれば，$A+B$ も Hermite 演算子であることを示せ．

[問題 7.6] A が Hermite 演算子であれば，$A^n \quad (n=2,3,4,\cdots)$ も Hermite 演算子であり，$(\varphi, A^2\varphi) \geq 0$ であることを示せ．

線形代数を思い出すと，

$$(A\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{a}, {}^tA^*\boldsymbol{b}) \tag{7.11}$$

という関係が成り立ち，${}^tA^* = A$ となる時，行列 A を Hermite 行列と呼ぶ．即ち，

$${}^tA^*(\text{行列}) \iff A^\dagger(\text{演算子}) \tag{7.12}$$

という対応関係を見て取れる．

ブラケットを用いると，$(f, Ag) = \langle f|A|g\rangle = (Ag, f)^* = (g, A^\dagger f)^* = \langle g|A^\dagger f\rangle^*$ より，

$$\langle f|A|g\rangle = \langle g|A^\dagger f\rangle^* \tag{7.13}$$

が成り立つ．**時間反転対称性を満たす物理量の演算子は Hermite 演算子**である．

7.4 Hermite 演算子の固有値と固有関数

$$A\varphi_n = \lambda_n\varphi_n \tag{7.14}$$

を満たす φ_n を演算子 A の固有関数，λ_n を対応する固有値と呼ぶ．ブラケット表示では，

$$A|\varphi_n\rangle = \lambda_n|\varphi_n\rangle \tag{7.15}$$

となる．

定理 1: Hermite 演算子の固有値は実数である

定理 2: Hermite 演算子の異なる固有値に対応する固有関数は直交する

[問題 7.7] 定理 1 と 2 を証明せよ．

定理 1 と 2 は，線形代数における Hermite 行列の固有値と固有関数が満たす性質と同じである．これまで見てきたように，量子力学における演算子と波動関数は，線形代数における行列とベクトルに対応づけられることがわかる．

[問題 7.8] Schwarz の不等式 $|(f,g)| \leq (f,f)^{1/2}(g,g)^{1/2}$ を示せ．

[問題 7.9] Hermite 演算子 A と B が交換関係 $[A,B] = AB-BA = iC$ を満たすなら，$\sqrt{\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle} \geq |\langle C\rangle|/2$ が成り立つことを示せ．ただし，$\langle A\rangle = (\varphi, A\varphi)$，$\Delta\hat{A} = A - \langle A\rangle$ とする．また，C も一般に演算子とする．これは不確定性原理の交換関係による一般的な表式になっている．

8 調和振動子

8.1 Schrödinger 方程式と解

1 次元調和振動子の古典的な力学的エネルギーは，角振動数を ω とすると，$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ で与えられる．Hamiltonian は $p_x \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ の置き換えを行うと，$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ で与えられるので，Schrödinger 方程式は，

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\phi(x) = E\phi(x) \tag{8.1}$$

で与えられる．ここで，

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \tag{8.2}$$

により方程式を無次元化し，対応する波動関数を，

$$\phi(x) = u(\xi) \tag{8.3}$$

とすると，Schrödinger 方程式 (8.1) は，

$$\frac{d^2}{d\xi^2}u(\xi) + (\lambda - \xi^2)u(\xi) = 0 \tag{8.4}$$

となる．

[問題 8.1] 式 (8.4) の $\xi \to \infty$ での漸近解は $u(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ となることを確かめよ．

[問題 8.2] 式 (8.4) の解を $u(\xi) = \chi(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ と仮定すると，$\chi(\xi)$ の満たす方程式は，

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\chi(\xi) - 2\xi\frac{d}{d\xi}\chi(\xi) + (\lambda - 1)\chi(\xi) = 0 \tag{8.5}$$

となることを示せ．

[問題 8.3] 式 (8.5) の解を $\chi(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \xi^k$ と仮定すると，$\lim_{\xi\to\infty} u(\xi) = 0$ となるためには k についての和は有限の $k = n$，$(n = 0, 1, 2, \cdots)$ で終わり，その時 λ は $\lambda = 2n + 1$ となることを示せ．

このことから式 (8.5) は，

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\chi(\xi) - 2\xi\frac{d}{d\xi}\chi(\xi) + 2n\chi(\xi) = 0 \tag{8.6}$$

となる．次の章でわかるが，この方程式の解は Hermite 多項式と呼ばれ $H_n(x)$ で表される．
以上をまとめると，１次元調和振動子の Schrödinger 方程式 (8.1) は，(8.2) の無次元化により，

$$\frac{d^2}{d\xi^2}u(\xi) + (2n + 1 - \xi^2)u(\xi) = 0 \tag{8.7}$$

という式に帰着する．この方程式の解は，微分方程式，

$$\frac{d^2}{d\xi^2}H_n(\xi) - 2\xi\frac{d}{d\xi}H_n(\xi) + 2nH_n(\xi) = 0 \tag{8.8}$$

の解で与えられる Hermite 多項式 $H_n(\xi)$ により，

$$\phi_n(x) = u_n(\xi) = \sqrt{\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}, \quad (n = 0, 1, 2, \cdots) \tag{8.9}$$

で与えられる．Hermite 多項式の前の係数は，波動関数の規格化から決まる (問題 8.7 参照)．対応するエネルギー固有値は，式 (8.2) で $\lambda = 2n + 1$ を代入することで

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \tag{8.10}$$

で与えられる．$n = 0$ の時にエネルギーは 0 にならず，$\frac{1}{2}\hbar\omega$ になることに注意してほしい．運動量と座標の間には $\Delta x \cdot \Delta p_x \sim h$ 程度の不確定さがある．従って x と p_x を同時に 0 にすることは出来ない．調和振動子のエネルギーは $E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ で与えられるので 0 にはならないのである．これを零点振動と呼ぶ.

8.2 Hermite 多項式

Hermite 多項式は Rodrigues の公式により，

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-\xi^2} \tag{8.11}$$

で定義される.

[問題 8.4] Rodrigues の公式より，

$$\left(\frac{d}{d\xi} - 2\xi\right) H_n(\xi) = -H_{n+1}(\xi) \tag{8.12}$$

が成り立つことを示せ.

[問題 8.5] Leibniz の公式より，

$$\frac{d^n}{d\xi^n}(-2\xi e^{-\xi^2}) = -2\xi \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} + 2n \frac{d^{n-1}}{d\xi^{n-1}} e^{-\xi^2} \tag{8.13}$$

が成り立つことを示し，これを上の式に代入して，

$$\frac{d}{d\xi} H_n(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi) \tag{8.14}$$

となることを示せ.

$\left(\frac{d}{d\xi} - 2\xi\right)$ は Hermite 多項式の次数を 1 つ上げる効果を持つので「上昇演算子」，$\frac{d}{d\xi}$ は Hermite 多項式の次数を 1 つ下げる効果を持つので「下降演算子」，両方を合わせて「昇降演算子」と呼ぶ.

$$\left(\frac{d}{d\xi} - 2\xi\right) H_n(\xi) = -H_{n+1}(\xi) \tag{8.15}$$

$$\frac{d}{d\xi} H_n(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi) \tag{8.16}$$

[問題 8.6] Hermite 多項式の昇降演算子を用いて，Hermite 多項式 $H_n(\xi)$ が微分方程式 (8.8) を満たすことを示せ.

[問題 8.7] Hermite 多項式の直交関係,

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_m^*(\xi) H_n(\xi) d\xi = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{mn} \tag{8.17}$$

となることを示せ.

[問題 8.8] 以下の問いに答えよ.

(1) 式 (8.11) より $H_0(\xi)$ を求めよ.

(2) 式 (8.15) より $H_n(\xi)$ を $1 \leq n \leq 4$ について具体的に求めよ.

(3) 規格化係数を省略した調和振動子の Schrödinger 方程式の解 $u_n(\xi) = H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ の概形を $0 \leq n \leq 4$ について示せ.

[問題 8.9] 式 (8.9) と式 (8.11) から基底状態 (エネルギーが最も低い状態) の波動関数は, $\phi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{\xi^2}{2}}$, $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$ で与えられる. 以下の問いに答えよ. $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$, $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \alpha^{-\frac{3}{2}}$ は既知としてよい.

(1) 基底状態での平均値 $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p_x \rangle$, $\langle p_x^2 \rangle$ を求めよ.

(2) $\Delta x \Delta p_x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} \sqrt{\langle (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \rangle}$ を求めよ.

8.3 昇降演算子

式 (8.2) の無次元化により得られる一般化座標 q と対応する運動量 p を,

$$q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x = \xi \tag{8.18}$$

$$p = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} p_x = -i \frac{d}{dq} = -i \frac{d}{d\xi} \tag{8.19}$$

で定義する. Hamiltonian も $\mathcal{H} = \frac{H}{\hbar\omega}$ により無次元化すると,

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} q^2 + \frac{1}{2} p^2 \tag{8.20}$$

とかける.

[問題 8.10] Hamiltonian が式 (8.20) となることを示せ.

無次元化した q, p の線形結合により調和振動子の上昇演算子 $a^\dagger$ と下降演算子 a を,

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (q - ip) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi - \frac{d}{d\xi}) \tag{8.21}$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (q + ip) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi + \frac{d}{d\xi}) \tag{8.22}$$

により定義すると, 調和振動子の Schrödinger 方程式の解である式 (8.9) の $u_n(\xi)$,

$$u_n(\xi) = C_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \quad C_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}} \tag{8.23}$$

に対して,

$$a^\dagger u_n = \sqrt{n+1}u_{n+1} \tag{8.24}$$
$$a u_n = \sqrt{n}u_{n-1} \tag{8.25}$$

が成り立つ．すなわち，$a^\dagger$ はエネルギー固有値が 1 つ上の波動関数を与え，a はエネルギー固有値が 1 つ下の波動関数を与える．そのため $a^\dagger$ を調和振動子の上昇演算子，a を調和振動子の下降演算子，合わせて証拠いう演算子と呼ぶ．上式はブラケットを用いると，

$$a^\dagger|u_n\rangle = \sqrt{n+1}|u_{n+1}\rangle \tag{8.26}$$
$$a|u_n\rangle = \sqrt{n}|u_{n-1}\rangle \tag{8.27}$$

と書ける．

[問題 8.11] 式 (8.24) 及び (8.25) が成り立つことを示せ．

8.4 代数的解法

これまでは調和振動子の Schrödinger 方程式の解が Hermite 多項式で与えられ，そのことから昇降演算子を導いた．この章では逆に無次元化した一般化座標 q と一般化運動量 p の線形結合で定義される昇降演算子 $a^\dagger$ と a 及びこれらの演算子が満たす交換関係のみで調和振動子の Schrödinger 方程式の解を構成できることを見ていこう．ここで学ぶ考え方は，第 2 量子化や場の量子論に応用できるので重要である．繰り返しになるが無次元化した一般化座標と運動量を，

$$q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \quad p = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}p_x = -i\frac{d}{dq} \tag{8.28}$$

とする．q と p の間には交換関係,

$$[q, p] = i \tag{8.29}$$

を満たす．この q と p の線形結合により上昇演算子 $a^\dagger$ と下降演算子 a を,

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip) = \frac{1}{\sqrt{2}}(q - \frac{d}{dq}) \tag{8.30}$$
$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip) = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + \frac{d}{dq}) \tag{8.31}$$

により定義する．また，数演算子 N を,

$$N = a^\dagger a \tag{8.32}$$

により定義する．これらを用いると無次元化した Hamiltonian は,

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}q^2 + \frac{1}{2}p^2 = a^\dagger a + \frac{1}{2} = N + \frac{1}{2} \tag{8.33}$$

と書ける．

[問題 8.12] 数演算子 N が Hermite 演算子であることを示せ．

[問題 8.13] 交換関係 $[q,p]=i$ を用いて交換関係 $[a,a^\dagger]=1$，$[N,a^\dagger]=a^\dagger$，$[N,a]=-a$ を示せ．

[問題 8.14] 式 (8.33) を示せ．

[問題 8.15] 以下の問いに答えよ．

(1) 数演算子 N の固有値を ν，対応する固有関数を $u_\nu(q)$ とすると，下降演算子 a は N の固有値を 1 だけ下げること，すなわち，

$$Nu_\nu(q) = \nu u_\nu(q) \quad \Rightarrow \quad Nau_\nu(q) = (\nu-1)au_\nu(q) \tag{8.34}$$

となることを示せ．

(2) 上昇演算子 $a^\dagger$ は N の固有値を 1 だけ上げること，すなわち，

$$Nu_\nu(q) = \nu u_\nu(q) \quad \Rightarrow \quad Na^\dagger u_\nu(q) = (\nu+1)a^\dagger u_\nu(q) \tag{8.35}$$

となることを示せ．

(3) $u_\nu(q)$ と $Nu_\nu(q)$ の内積 (u_ν, Nu_ν) を考えて，数演算子 $N=a^\dagger a$ の固有値が全て非負であることを示せ．

(4) 数演算子 N の固有値で ν が $0<\nu<1$ であるものが存在したとすると, 上の結果と矛盾することを示し，ν が取りうる値を求めよ．

[問題 8.16] 漸化式

$$au_0(q)=0, \quad u_{n+1}(q) = \frac{1}{\sqrt{n+1}}a^\dagger u_n(q) \quad (n\geq 0) \tag{8.36}$$

で定義される関数 $u_n(q)$ を考える．以下の問いに答えよ．

(1) 上式で定義される $u_n(q)$ が数演算子 N の固有関数であり，その固有値は n であることを数学的帰納法により証明せよ．

(2) $u_0(q)$ が規格化されれば，$u_n(q)$ $(n\geq 1)$ は正しく規格化されること，すなわち，

$$(u_0,u_0)=1 \quad \Rightarrow \quad (u_n,u_n)=1, \quad (n\geq 1) \tag{8.37}$$

を数学的帰納法により証明せよ．

(3) 下記の昇降演算子の性質を示せ．

$$a^\dagger u_n(q) = \sqrt{n+1}u_{n+1}(q) \tag{8.38}$$
$$au_n(q) = \sqrt{n}u_{n-1}(q) \tag{8.39}$$

[問題 8.17] 漸化式 (8.36) で定義される $u_n(q)$ について以下の問いに答えよ．

(1) 微分方程式 $a\,u_0(q)=0$ の規格化された解が

$$u_0(q) = \pi^{-1/4}e^{-q^2/2} \tag{8.40}$$

であることを示せ．$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha q^2}dq = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ は既知として良い．

(2) 微分演算子の間の等式

$$e^{q^2/2}\left(-\frac{d}{dq}\right)e^{-q^2/2}=\sqrt{2}a^\dagger \tag{8.41}$$

を示せ.

(3) 漸化式 (8.36) を繰り返して得られる $u_n(q)$ の表式,

$$u_n(q)=\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n u_0(q) \tag{8.42}$$

に (2) の結果を代入することで，式 (8.9) の結果と一致することを示せ.

[問題 8.18] 無次元化された一般化座標 q と対応する運動量 p は $a^\dagger$ と a により,

$$q=\frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger+a) \tag{8.43}$$

$$p=i\frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger-a) \tag{8.44}$$

と表される．このことと問題 8.14 の交換関係ならびに式 (8.38) と (8.39) に示される昇降演算子の性質のみを用いて以下の問いに答えよ.

(1) 基底状態での q の期待値 $\langle q\rangle=(u_0,qu_0)$ を求めよ.

(2) q^2 の期待値 $\langle q^2\rangle=(u_0,q^2u_0)$ を求めよ.

(3) p の期待値 $\langle p\rangle=(u_0,pu_0)$ を求めよ.

(4) p^2 の期待値 $\langle p^2\rangle=(u_0,p^2u_0)$ を求めよ.

(5) $\Delta q\Delta p=\sqrt{\langle(q-\langle q\rangle)^2\rangle}\sqrt{\langle(p-\langle p\rangle)^2\rangle}$ を求めよ.

[注] $a^\dagger$ は 1 つ上の固有状態に上げる演算子なので上昇演算子，同様に a は 1 つ下の固有状態に下げる演算子なので下降演算子と呼んできた．この場合，粒子は 1 個で固有エネルギーが増減していると考えている．一方で,「$a^\dagger$ を作用させるたびに $\hbar\omega$ のエネルギーを持った粒子が 1 つ生成される」，逆に「a を作用させるたびに $\hbar\omega$ のエネルギーを持った粒子が 1 つ消滅する」という見方もできる．こうした見方をする時，$a^\dagger$ を生成演算子，a を消滅演算子と呼ぶ．ただし，この場合は粒子数は保存しない．この時量子数 n は粒子の数を表すことになる．n を固有値としてもつ演算子 $N=a^\dagger a$ を数演算子と呼ぶ所以である．調和振動子に限らず Hermite な Hamiltonian では生成・消滅演算子を構成することができる．第 2 量子化を行うと，生成・消滅演算子だけで全てを記述できるようになる.

9 行列力学

9.1 波動関数のベクトル表示

任意の関数を線形結合で構成できる関数系を完全系を張る関数系と呼ぶ．ここでは 1 次元で完全系を張る正規直交関数系として $\{u_n(x)\}$ 考える．即ち，

$$(u_i, u_j) = \int_{-\infty}^{\infty} u_i^*(x)u_j(x)dx = \delta_{ij} \tag{9.1}$$

関数 $f(x)$ が $\{u_i(x)\}$ の線形結合により，

$$\boxed{f(x) = \sum_i f_i u_i(x)} \tag{9.2}$$

と書けるとき，係数 $\{f_i\}$ を成分とする列ベクトルにより，

$$\boxed{|f\rangle = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \end{pmatrix}} \tag{9.3}$$

と表現する．これを関数 $f(x)$ の基底 $\{u_i(x)\}$ によるベクトル表現と呼ぶ．特に基底関数は $u_i(x) = u_i(x)$ なのでベクトル表現は i 番目の成分のみ 1 でそれ以外は 0 である列ベクトルになる．即ち，

$$\boxed{|u_i\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad i\text{ 番目の成分}} \tag{9.4}$$

同様にして，

$$g(x) = \sum_j g_j u_j(x) \tag{9.5}$$

と書けるとして内積 (f, g) を考えると，

$$(f, g) = \langle f|g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x)dx \tag{9.6}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_i f_i^* u_i^*(x) \times \sum_j g_j u_j(x)dx = \sum_i \sum_j f_i^* g_j \int_{-\infty}^{\infty} u_i^*(x)u_j(x)dx \tag{9.7}$$

$$= \sum_i \sum_j f_i^* g_j \delta_{ij} = \sum_i f_i^* g_i \tag{9.8}$$

$$= (f_1^*, f_2^*, \cdots) \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{9.9}$$

と書ける．従って，

$$\langle f| = (f_1^*, f_2^*, \cdots) \tag{9.10}$$

という対応関係があることがわかる．

次に成分 f_i を求めることを考えよう．そのために内積 (u_i, f) を考えると，

$$(u_i, f) = \int_{-\infty}^{\infty} u_i^*(x) f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} u_i^*(x) \sum_j f_j u_j(x) dx \tag{9.11}$$

$$= \sum_j f_j \int_{-\infty}^{\infty} u_i^*(x) u_j(x) dx = \sum_j f_j \delta_{ij} = f_i \tag{9.12}$$

となる．従って f_i は,

$$f_i = (u_i, f) = \langle u_i | f \rangle \tag{9.13}$$

で与えられ，式 (9.2) に代入すると，

$$f(x) = \sum_i (u_i, f) u_i \tag{9.14}$$

$$\text{ブラケットを用いると} \tag{9.15}$$

$$|f\rangle = \sum_i \langle u_i | f \rangle |u_i\rangle \tag{9.16}$$

となる．

9.2 完全性について

これまでは関数系 $\{u_i(x)\}$ が完全系を張ることを前提としてきた．ここでは関数系が完全系を張る条件を考えることにする．$\{u_i(x)\}$ が完全系を張っていれば，デルタ関数 $\delta(x - x_0)$ も展開できるはずである．

$$(u_i(x), \delta(x - x_0)) = \int_{\infty}^{\infty} u_i^*(x) \delta(x - x_0) dx = u_i^*(x_0) \tag{9.17}$$

従って，デルタ関数は,

$$\delta(x - x_0) = \sum_i u_i^*(x_0) u_i(x) \tag{9.18}$$

と展開できる．

デルタ関数は偶関数であることを利用して，$\delta(x_0 - x) = \sum_i u_i^*(x_0) u_i(x)$ と書き直しておこう．$\{u_i(x)\}$ によりデルタ関数を表現できれば，任意の関数を以下のようにして表現できる．

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x_0) \delta(x_0 - x) dx_0 = \int_{-\infty}^{\infty} f(x_0) \sum_i u_i^*(x_0) u_i(x) dx_0 \tag{9.19}$$

$$= \sum_i u_i(x) \int_{-\infty}^{\infty} u_i^*(x_0) f(x_0) dx_0 = \sum_i (u_i, f) u_i \tag{9.20}$$

従って，デルタ関数を式 (9.18) のように展開できることが完全性の必要十分条件である．

式 (9.16) を変形すると，

$$|f\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|f\rangle \tag{9.21}$$

となる．従って $\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|$ は単位行列に対応することが予想できる．実際，$|u_i\rangle = (0, \cdots, 0, 1, 0, \cdots, 0)$，$\langle u_i| = {}^t(0, \cdots, 0, 1, 0, \cdots, 0)$ を代入すると，

$$\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = I \tag{9.22}$$

となることがわかる．

9.3 演算子の行列表現

ここでは，演算子が行列に対応することを見ていく．関数 $f(x)$ と，これに演算子 A を作用させたものを完全系を張る基底 $\{u_i(x)\}$ により以下のように展開できたとする．

$$f(x) = \sum_j f_j u_j(x) \tag{9.23}$$

$$Af(x) = \sum_i C_i u_i(x) \tag{9.24}$$

この時，C_i は，

$$C_i = (u_i, Af) = (u_i, A\sum_j f_j u_j) = \sum_j (u_i, Au_j) f_j \tag{9.25}$$

により求まる．ここで，

$$A_{ij} = (u_i, Au_j) = \langle u_i|A|u_j\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} u_i^*(x) A u_i(x) dx \tag{9.26}$$

で与えられる値を (i, j) 成分としてもつ行列 A を定義すると式 (9.25) は，行列とベクトルの積として，

$$A|f\rangle = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{9.27}$$

と表現できる．この行列 A を演算子 A の行列表現と呼ぶ．

9.4 Hermite 演算子の行列表現

任意の関数 $f(x)$ と $g(x)$ に対して，$(f, Ag) = (Bf, g)$ を満たす演算子 B を演算子 A の Hermite 共役演算子と呼び $A^\dagger$ と書くことにした．ここでは A と $A^\dagger$ の行列表現の関係を見ていくことにする．$f(x)$ と $g(x)$ が基底関数 $\{u_i(x)\}$ により，$f(x) = \sum_i f_i u_i(x)$，$g(x) = \sum_j g_j u_j(x)$ と展開できるとすると，

$$(f, Ag) = (\sum_i f_i u_i, A\sum_j g_j u_j) = \sum_i \sum_j f_i^* g_j (u_i, Au_j) = \sum_i f_i^* \sum_j A_{ij} g_j = \langle f|A|g\rangle \tag{9.28}$$

一方，

$$(A^\dagger f, g) = (A\sum_i f_i u_i, \sum_j g_j u_j) = \sum_i \sum_j f_i^* g_j (A^\dagger u_i, u_j) \tag{9.29}$$

$$= \sum_i f_i^* \sum_j g_j \int_{-\infty}^{\infty} u_j(x)(A^\dagger u_i(x))^* dx = \sum_i f_i^* \sum_j g_j (\int_{-\infty}^{\infty} u_j^*(x) A^\dagger u_i(x)) dx)^* \tag{9.30}$$

$$= \sum_i f_i^* \sum_j g_j (u_j(x), A^\dagger u_i)^* = \sum_i f_i^* (A^\dagger_{ji})^* \sum_j g_j \tag{9.31}$$

これが (9.28) と等しくないといけないので，$(A^\dagger_{ji})^* = A_{ij}$ 即ち，

$$\boxed{A^\dagger = {}^t A^*} \tag{9.32}$$

でないといけない．演算子 A の Hermite 共役な演算子 $A^\dagger$ の行列表現は A の行列表現の Hermite 共役であることがわかる．また演算子 A が Hermite 演算子の時は，$A^\dagger = A$ でないといけないので Hermite 演算子の行列表現は Hermite 行列であることがわかる．

[問題 9.1] 式 (8.26) と (8.27) を用いて以下の問いに答えよ．

(1) 調和振動子の昇降演算子 $a^\dagger$，a の行列表現を求めよ．

(2) 数演算子 $N = a^\dagger a$ の行列表現を求めよ．

(3) $N|u_n\rangle = n|u_n\rangle$ となることを確かめよ．

[問題 9.2] 調和振動子の昇降演算子が q 及び p を用いて式 (8.21) と (8.22) で与えられることを利用して以下の問いに答えよ．

(1) 演算子 q の行列表現を求め，$\langle u_0|q|u_0\rangle$ を求めよ．

(2) 演算子 q^2 の行列表現を求め，$\langle u_0|q^2|u_0\rangle$ を求めよ．

(3) 演算子 p の行列表現を求め，$\langle u_0|p|u_0\rangle$ を求めよ．

(4) 演算子 p^2 の行列表現を求め，$\langle u_0|p^2|u_0\rangle$ を求めよ．