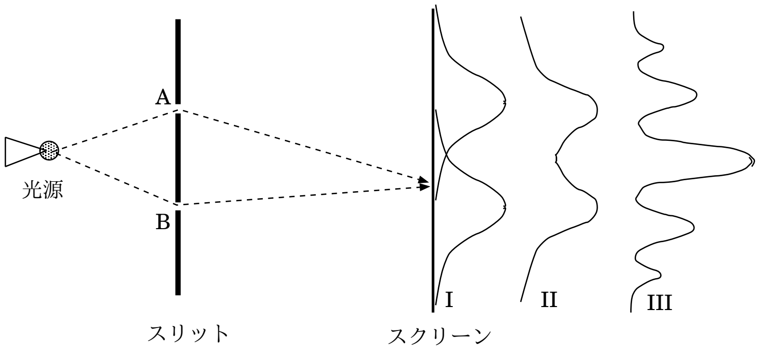
波動関数 (状態ベクトル)

光子の裁判 — あちらと思えばまたこちら —

図のように点光源から光を放出し，A, B 二つの孔を開けたスリットを通してスクリーン上で検出する実験を考える．スクリーンに映る像は以下のようになる．



孔 A を開け，B を塞いだ場合	I の上の図 ($\mid$波$_A\mid^2$)
孔 A を塞ぎ，B を開けた場合	I の下の図 ($\mid$波$_B\mid^2$)
孔 A, B 両方を開けた場合	III の図 (干渉パターンが現れる) ($\mid$波$_A$ + 波$_B\mid^2$)

II は I の二つの図を足し合わせたものであり ($\mid$波$_A\mid^2 + \mid$波$_B\mid^2$)，光でなく古典的な粒子 (マクロな大きさをもつ粒子) を放出した場合に観測される．

孔 A, B 両方を開けている場合,「スクリーンに届いた光子はどちらの孔を通ってきたのか」と問うことは無意味である．スクリーンに干渉パターンが現れるのは $\mid$波$_A$ + 波$_B\mid^2$ という重ね合わせの効果であり，どちらの孔を通ってきたかを確定できるなら重ね合わせは起こらない．

AB 間の距離が光の波長よりも十分大きくなると ($\lambda \ll \overline{\mathrm{AB}}$)，干渉の効果が小さくなり図 II に近づく．

光でなく電子線を照射した場合，AB 間の距離が電子の物質波の波長程度になれば干渉が観測される．

波動関数による物理的状態の表現 — 木を見て森を見ず，森を見て木を見ず —

ミクロな世界では，粒子と思っていたものが波のように振る舞うこともあれば，波と思っていたものが粒子のように振る舞うこともある．では，そういうものをどうやって表せばいいのか??

力学での粒子の表現 — $\vec{r}(t)$: 時刻 t での粒子の位置 $\vec{r}$ を表す．($\vec{r}$ は t の関数)

波の表現 — $Ae^{-i2\pi\nu(t-\frac{\vec{e}_v\cdot\vec{r}}{v})} = e^{-i2\pi(\nu t-\frac{\vec{e}_v\cdot\vec{r}}{\lambda})} = Ae^{-i(\omega t-\vec{k}\cdot\vec{r})}$: 時刻 t，位置 $\vec{r}$ での波の変位を表す．

($\vec{r}$ と t は独立な変数)

ルール 1

- エネルギー，運動量を持つ物理的オブジェクト (電子，光子など) の波的な性質を表すために**波動関数**とよばれる $\vec{r}$ と t の関数を導入し，一つの物理的状態を表現する:

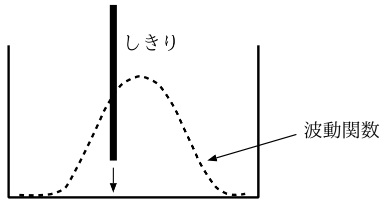
  自由粒子の場合

$$\Psi(\vec{r},t) = Ae^{-i2\pi(\nu t-\frac{\vec{e}_v\cdot\vec{r}}{\lambda})} = Ae^{-i2\pi(\frac{E}{h}t-\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{h})} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\cdot\vec{r})} \quad \text{(ド・ブロイの関係式を用いた)}$$

- 波動関数は重ね合わせの原理に従う: $\Psi_1 + \Psi_2 + \cdots$ ($\Leftarrow$ **複数の状態が共存**) が観測に関わる．

  「光子の裁判」の例では A の孔を通った状態と B の孔を通った状態の重ね合わせの結果，干渉パターンが生じた．

確率解釈 — 神はサイコロをふる —



波動関数をどう解釈すればいいのだろうか．実在する波か？
あるいは . . .
実在する波なら，適当な操作で分割できる．
電子を一つ箱に閉じこめてから仕切りを入れても，分割された電子は観測されない ⇒ 実在する波と考えるには無理がある

粒子が粒子として観測されるのは局在しているから ⇔ 波動関数の拡がりとどう両立させるか

⇓

ルール 2

波動関数の絶対値の二乗 $|\Psi(\vec{r},t)|^2$ を，粒子が時刻 t に位置 $\vec{r}$ で観測される確率と考える．
⇒ 波動性と粒子性の統一的理解

$$\text{規格化条件}：\int |\Psi|^2 d^3r = 1 \qquad (\text{粒子が空間のどこかにいる確率は}\,1)$$

一般の重ね合わせられた状態 $\Psi_1 + \Psi_2 + \cdots$ で，それぞれの状態が排他的 (一つが実現されると他は実現されない) な場合，状態 1 を観測する確率は $|\Psi_1|^2$ に比例する．

いったん状態 1 が観測されると，その直後の波動関数は $\Psi_1 + \Psi_2 + \cdots$ でなく，Ψ_1 になる．
⇒ 「観測」という手続きによって波動関数がいきなり変化する．(波動関数の収縮)

観測量と期待値

粒子が位置 $\vec{r}$ で観測される確率が $|\Psi(\vec{r})|^2$ で与えられるなら，粒子の位置の期待値は

$$\langle \vec{r} \rangle = \int \vec{r} |\Psi(\vec{r})|^2 d^3r$$

運動量の期待値は？

自由粒子の波動関数 $\Psi(\vec{r},t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\cdot\vec{r})}$ から運動量 $\vec{p}$ を得るには

$$\nabla\Psi(\vec{r},t) = \frac{i}{\hbar}\vec{p}\,\Psi(\vec{r},t)$$

これに習い，一般の場合でも $-i\hbar\nabla$ を波動関数に演算することで運動量が得られるとして，

$$\langle \vec{p} \rangle = \int \Psi^*(\vec{r})(-i\hbar\nabla)\Psi d^3r$$

ルール 3

位置，運動量，エネルギーなどの物理量にはそれぞれに対応する演算子 (operator) を導入し，その期待値は次式で求める．

$$\langle X \rangle = \int \Psi^* O_X \Psi d^3r \quad (O_X \text{ は求める物理量の演算子})$$

物理量	演算子
位置	$\vec{r}$
運動量	$-i\hbar\nabla$
角運動量	$\vec{r}\times\vec{p} = \vec{r}\times(-i\hbar\nabla)$
エネルギー	$\frac{(\vec{p})^2}{2m} + V(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$

不確定性原理 — 両雄並び立たず —

自由粒子の波動関数は $\Psi(\vec{r},t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\cdot\vec{r})}$ とした．この場合，$|\Psi|^2 = |A|^2$ であり，位置 $\vec{r}$ によらずに $|\Psi|^2$ の値は一定である．これは空間中のどの地点でも，そこで粒子を観測する確率が等しいことを意味する．すなわち，粒子は空間中のどこにも特定の居場所を持たない．粒子の居場所は不定である．一方，運動量は

$$\Psi^*(-i\hbar\nabla)\Psi = \vec{p}\,|\Psi|^2$$

であり，$\vec{p}$ という決まった値をとっている．

一方，重ね合わせの原理に従って，全ての $\vec{p}$ について波動関数を重ね合わせると

$$\int Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\cdot\vec{r})}d^3p = Ae^{-\frac{i}{\hbar}Et}\int e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}d^3p = Ae^{-\frac{i}{\hbar}Et}(2\pi\hbar)^3\delta^3(\vec{r})$$

この場合，デルタ関数が現れることから分かるように，波動関数は原点でのみ値をとり，粒子の位置は決まっているが，運動量の値は不定になる (全て足し合わせているから).

運動量を決定すると位置が不定になり，位置を決定すると運動量が不定になって，両者を同時に決定することができない．一つの次元 (x 軸方向，y 軸方向など) についての位置の不定性を Δx，運動量の不定性を Δp とすると，両者の間には

$$(\Delta x)(\Delta p) \geq \frac{\hbar}{2}$$

という関係が成立することを示すことができる．これを不確定性原理という．古典力学では現れなかった関係である．これは位置の演算子と運動量の演算子を波動関数に演算するのに順序が変わると結果がかわることに起因する．(一般論は後の授業を参照) 簡単のため，x 軸だけで考えると

$$\begin{aligned} x[(-i\hbar)\frac{d}{dx}\Psi(x)] &= (-i\hbar)x\Psi'(x) \\ (-i\hbar)\frac{d}{dx}[x\Psi(x)] &= (-i\hbar)x\Psi'(x) + (-i\hbar)\Psi(x) \end{aligned}$$

となって，どちらを先に演算するかによって $(-i\hbar)\Psi(x)$ だけ結果が異なっている．

デルタ関数の復習

次の性質を満たすもの $\delta(x-a)$ をディラックのデルタ関数とよぶ.

任意の連続関数 $f(x)$ に対し	$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\delta(x-a)dx = f(a)$
かつ，$x \neq a$ のとき	$\delta(x-a) = 0$

デルタ関数の表現

$$\begin{aligned} \delta(x) &= \frac{1}{2\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in(x-a)} \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}dk \\ \delta^3(\vec{r}) &= \delta(x)\delta(y)\delta(z) \end{aligned}$$