量子力学の一般原理 —朝に道を聞かば夕べに死すとも可なり—

これまで学んできたことを整理し，必要ならばさらに説明を加えていく.

物理的状態

物理で扱う系の量子力学的な状態を表すものとして，時刻 t と位置 $\vec{r}$ の関数を用い，それを波動関数とよぶ.

$$\text{波動関数:} \quad \Psi(\vec{r},t)$$

確率振幅

波動関数の絶対値の二乗は，その時刻と位置で粒子が観測される確率に比例する.

粒子が有限の領域内でしか存在できない場合 (束縛状態) では，その領域内のどこかで粒子を見いだす確率は 1 なので

$$\int_V |\Psi(\vec{r},t)|^2 d^3\vec{r} = 1 \quad (V \text{ は粒子が束縛されている領域})$$

となるように $\Psi \to C\Psi$ (C は上の条件を満たすようにとる定数) と波動関数の大きさを調節する (規格化する).

$$\rho(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2$$

を確率密度という.

粒子が束縛されていない場合の規格化については後述する.

観測量と期待値

エネルギーや位置，運動量などの物理的に観測可能な量 (以下物理量とよぶ) に対して，それに対応する演算子があり，その物理量を観測すると，測定値は対応する演算子の固有値のいずれかになる. <u>測定の直後の波動関数は測定値を固有値とする固有関数になる. (波動関数の収縮)</u>

ある演算子を $\hat{O}$ と記すと，関数 ϕ に対し

$$\hat{O}\phi = a\phi \quad (a \text{ は定数})$$

となる場合，ϕ を演算子 $\hat{O}$ の固有関数，a を固有値という. 演算子の固有値は一般に複数個あるので，それらを適当な指標，たとえば n で区別すると

$$\hat{O}\phi_n = a_n\phi_n \quad (a \text{ は定数})$$

のようになる. この指標を**量子数**という.

例) 以前に紹介した無限に深い 1 次元井戸型ポテンシャルの場合で，ハミルトニアン演算子 $\hat{H}$ に対し，波動関数 $\psi_n(x) = \sqrt{\dfrac{2}{L}}\sin(\dfrac{n\pi x}{L})$ $(0 \le x \le L)$ は

$$\hat{H}\psi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_n(x) = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2mL^2}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$$

量子数 n (この場合 $n = 1, 2, 3, \ldots$)，固有値 E_n の固有関数になっている.

ある物理量を測定する場合，系の波動関数 Ψ がその物理量に対応する演算子の固有関数であるとは限らない．その場合，多数の測定を行った結果の平均値 (期待値) は対応する演算子について，以下の計算をすることで得られる．

$$\langle \hat{O} \rangle = \int (\Psi)^* \hat{O} \Psi d^3\vec{r}$$

物理量は実数でなくてはならないので，物理量に対応する演算子には制限がつく．上式の複素共役をとると

$$\langle \hat{O} \rangle^* = \int \Psi (\hat{O}\Psi)^* d^3\vec{r}$$

期待値が実数であるには

$$\int (\Psi)^* \hat{O} \Psi d^3\vec{r} = \int \Psi (\hat{O}\Psi)^* d^3\vec{r} = \int (\hat{O}\Psi)^* \Psi d^3\vec{r}$$

であるべしという条件がつく．

数学的に，ある演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の間に，任意の関数 ξ, η に対して

$$\int (\hat{A}\xi)^* \eta \ d^3\vec{r} = \int \xi^* \hat{B} \eta \ d^3\vec{r}$$

となるとき，$\hat{B}$ を $\hat{A}$ のエルミート共役演算子といい，$\hat{A}^\dagger$ と記す．自分とそのエルミート共役が等しい演算子をエルミート演算子 (あるいは単にエルミート) という: $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$.

物理量に対応する演算子はエルミートでなければならない．

重ね合わせの原理

物理量の演算子 $\hat{O}$ の固有関数を ϕ_n (n は量子数) とする．このとき，任意の波動関数 Ψ は

$$\Psi = \sum_n a_n \phi_n$$

という形に表すことができる．(固有関数での展開．これを数学的には関数の集合 $\{\phi_n\}$ が完全系をなすという．逆にこれが可能なことが物理量の演算子である条件にもなる．) 演習問題 1,2 で示されるように ϕ_n は

$$\int (\phi_n)^* \phi_k d^3\vec{r} = 0 \quad (n \neq k \text{ のとき})$$

とできる (直交する) ので，$\int (\phi_n)^* \phi_n d^3\vec{r} = 1$ と規格化すれば

$$a_n = \int (\phi_n)^* \Psi d^3\vec{r}$$

である．このように互いに直交し，かつ規格化された関数の集合を規格直交系という．$\{\phi_n\}$ は完全規格直交系にとることができる．この場合

$$1 = \int (\Psi)^* \Psi d^3\vec{r} = \int \sum_n \sum_k (a_n \phi_n)^* a_k \phi_k d^3\vec{r} = \sum_n \sum_k (a_n)^* a_k \delta_{nk} = \sum_n |a_n|^2$$

である．これは，$\hat{O}$ の測定値が n 番目の量子数の固有値になる確率が $|a_n|^2$ であることを示している．(測定値は固有値のいずれかになるが，それぞれの場合の確率の和が 1 となっている．)

波動関数の決定

波動関数はシュレーディンガー方程式に従う．

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \hat{H}\Psi(\vec{r},t)$$

波動関数がハミルトニアン (エネルギー) の固有値 E の固有状態である場合は $\Psi((\vec{r},t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(\vec{r})$ と表せて次の方程式が成立する．

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

連続固有値と非束縛系の規格化

エネルギーがポテンシャルの最大値よりも大きい場合，古典力学では粒子は束縛されずに空間中の全ての領域に存在することができる．量子力学でも当然ながら同じ状況を記述しなければならない．簡単のため 1 次元の自由粒子を考えよう．エネルギー E の粒子の波動関数は $\Psi(x,t) = Ae^{-i(Et-px)/\hbar}$ (A は定数) で与えられ，$E = \dfrac{p^2}{2m} > 0$ である．時間変化の部分 $e^{-iEt/\hbar}$ を除いた部分を $\psi_p(x)$ と書くと，$\psi_p(x)$ は運動量演算子 $-i\hbar\dfrac{d}{dx}$ の固有関数であり，固有値は

$$-i\hbar\frac{d}{dx}(Ae^{ipx/\hbar}) = p(Ae^{ipx/\hbar})$$

となる．束縛状態の時と違って p は任意の実数値をとりうる．フーリエ変換を思い出すと，任意の関数 $f(x)$ は

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

と表すことができた．ここで $k = p/\hbar$ と変数変換すれば

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} c(p)e^{ipx/\hbar}\ dp\ ,\quad c(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ipx/\hbar}\ dx$$

と表すことができる．($C(k)$ と $c(p)$ は $\sqrt{\hbar}$ だけ違うことに注意) よって $\{\psi_p(x)\}$ は完全系をなす．規格直交化としては $A = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ にとり

$$\int_{-\infty}^{\infty}(\psi_p(x))^*\psi_{p'}(x)dx = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar}e^{ip'x/\hbar}dx = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)\tilde{x}}d\tilde{x} = \delta(p-p')$$

(2 番目の等式の際に $\tilde{x} = \dfrac{x}{\hbar}$ とした．) が成立するようにする．3 次元の場合は固有値もデルタ関数も 3 次元にとればよい．

$$\int(\psi_{\vec{p}}(\vec{r}))^*\psi_{\vec{p}'}(\vec{r})d^3\vec{r} = \delta^3(\vec{p}-\vec{p}')$$

運動量だけでなく，一般の連続固有値をとる固有関数の集合についても，規格直交化は δ_{mn} でなくデルタ関数を用いる．