

## 量子力学の基礎

北野正雄 (京都大学大学院工学研究科)

kitano@kuee.kyoto-u.ac.jp 2007 年 10 月 16 日

この内容は京都大学工学部電気電子工学科における授業「電気電子工学のための量子論」の補助的資料として準備されたものです。個人使用以外の目的で利用される場合には著者の許諾を得てください。

# 第 11 章

## 量子古典対応 — 波束, 群速度

波束の運動を調べることによって, 古典的な粒子との対応について議論する。

### 11.1 群速度

準平面波は平面波に振幅がゆっくり変化する包絡線関数  $\phi_0(\mathbf{x})$  をかけたものである:

$$\phi(\mathbf{x}) = \phi_0(\mathbf{x})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (11.1)$$

$\phi_0(\mathbf{x})$  は波長  $1/k$  程度の空間移動に対して殆んど変化しない。したがって, 局所的には平面波  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$  と見なすことができる。また, 大局的には  $\int |\phi_0(\mathbf{x})|^2 dx^3 = 1$  と正規化することによって, 平面波がもつ特異性を避けることができる。準平面波は波束とも呼ばれる。

式 (10.36) を用いると, 準平面波に対する確率の流れ  $\mathbf{J} = (\hbar\mathbf{k}/m)|\phi_0(\mathbf{x})|^2$  が成り立つことが分かる。これより,  $\hbar\mathbf{k}/m$  が粒子の速度に, また,  $\hbar\mathbf{k}$  は運動量に対応していることが予想される。

一方, 波束の群速度  $\mathbf{v}_g$  は, 分散関係  $\omega(\mathbf{k})$  を用いて

$$\mathbf{v}_g = \nabla_{\mathbf{k}}\omega(\mathbf{k}) \quad (11.2)$$

で与えられる。(導出は後に行う。)  $\nabla_{\mathbf{k}}$  は  $\mathbf{k}$  に対する勾配を意味する。シュレディンガー方程式に対する分散関係

$$\omega(\mathbf{k}) = \hbar k^2/2m + V \quad (11.3)$$

から,

$$\mathbf{v}_g = \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \quad (11.4)$$

が得られる. 波動関数の群速度が古典粒子の速度に対応していることが明らかになった.

### 位相速度

位相速度は単色波の等位相面が伝わる速度である.

$$\psi(t, \mathbf{x}) = \exp i(-\omega(\mathbf{k})t + \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \quad (11.5)$$

時刻  $t_1, t_2$  において同じ位相をもつ等位相面上の点を  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$  とすると,  $-\omega(\mathbf{k})t_1 + \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_1 - \omega(\mathbf{k})t_2 + \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_2 = \phi$  より,

$$-\omega(\mathbf{k})(t_2 - t_1) + \mathbf{k} \cdot (\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) = 0 \quad (11.6)$$

が成り立つ. 最も近い  $\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1$  の間には関係

$$\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 = \mathbf{v}_p(t_2 - t_1), \quad \mathbf{v}_p = \frac{\omega(\mathbf{k})}{k} \mathbf{u} \quad (11.7)$$

が成り立つ.  $\mathbf{u}$  は  $\mathbf{k}$  と平行な単位ベクトルである:  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} = k, k = |\mathbf{k}|$ .  $\mathbf{v}_p$  が位相速度であり,  $\omega(\mathbf{k}) = \hbar k^2/2m + V$  に対しては,

$$\mathbf{v}_p = \left( \frac{\hbar k}{2m} + \frac{V}{\hbar k} \right) \mathbf{u} \quad (11.8)$$

となる. 一般に  $\mathbf{v}_g \neq \mathbf{v}_p$  であることに注意する. シュレディンガーの波動方程式に対する位相速度の振舞には特異性があり, 古典的な粒子における直接的な対応物をもたない量である. その物理的な意味については後に触れる.

### 電磁波の速度

(等方) 媒質中の電磁波に対する分散関係は, 屈折率  $n(k)$  を用いて,

$$\omega(\mathbf{k}) = \frac{ck}{n(k)} \quad (11.9)$$

と表せる. 位相速度は

$$\mathbf{v}_p = \frac{\omega(\mathbf{k})}{k} \mathbf{u} = \frac{c}{n(k)} \mathbf{u}, \quad (11.10)$$

である. 一方, 群速度は

$$\mathbf{v}_g = \nabla_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}) = \frac{c}{n} \left( 1 + \frac{k}{n} \frac{dn}{dk} \right) \mathbf{u}, \quad (11.11)$$

となる.

群速度と波数の比例関係 (11.4) は質量のある量子の著しい特徴である. 光のような質量をもたない量子の場合には波数が変わっても, 群速度は (例外的な状況を除けば) それほど変化しないし, まして波数に比例することはない. 位相速度も波数によらず, ほぼ  $c$  に等しい.

## 11.2 波束の構成

平面波 (正弦波定常解)  $e^{-i\omega t}e^{ikx}$  はよい性質をもっており, その空間部分は基底関数  $\{e^{ikx}\}$  として利用される. しかしながら, 本来 1 に正規化されるべき 2 乗積分が有限の値を持たないという大きい問題を持っている. また, 実験においても, 波を時間的に無限の過去から無限の未来まで, あるいは空間的に地平のかなたまで調べるといのは現実的ではない. そこで, 空間的なサイズが有限な波, すなわち波束を考える必要がでてくる. 波束は波数 (おなじことであるが, 周波数あるいはエネルギー) がやや異なった波を重ね合わせることで構成できる. そして, 2 乗積分が 1 になるように正規化することができる.

波束の長さ  $w$  と系のサイズ  $L$  の間には  $w \ll L$  の関係が当然, 成り立つ必要がある. どのように大きい  $w$  に対しても対処できるように, 前章において, あらかじめ  $L \rightarrow \infty$  の状況を準備しておいたのである.

波束を数学的に扱うための準備をしておく\*1). 無次元の変数  $\xi \in \mathbb{R}$  に対する波束のもとになる, 無次元の関数  $g(\xi) \in \mathbb{C}$  を導入する. この関数は原点を中心とする  $\pm 1$  程度の範囲でのみ 0 でない値をもっており, 正規化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} |g(\xi)|^2 d\xi = 1 \quad (11.12)$$

を満たすものとする\*2). さらに,  $g(\xi)$  の (対称) フーリエ変換

$$G(\eta) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(\xi) e^{i\eta\xi} d\xi \quad (11.13)$$

を導入しておく.

波数の次元をもつ量  $K, \kappa$  に対して

$$h_{\kappa}(K) := \frac{1}{\sqrt{\kappa}} g\left(\frac{K}{\kappa}\right) \stackrel{\text{D}}{\sim} \sqrt{m} \quad (11.14)$$

を定義すると, 波数空間の原点を中心として  $\pm\kappa$  程度に広がった関数を与える. 係数を  $1/\sqrt{\kappa}$  とすることによって, 正規化条件が満たされる;

$$\int_{-\infty}^{\infty} |h_{\kappa}(K)|^2 dK = 1. \quad (11.15)$$

関数 (11.51) のフーリエ変換を

$$H_{1/\kappa}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} h_{\kappa}(K) e^{iKx} dK \stackrel{\text{D}}{\sim} 1/\sqrt{m} \quad (11.16)$$

と定義する. これは実空間で,  $1/\kappa$  程度広がりを持ち, やはり正規化されている;

\*1) 通常, 波束といえばガウス波形が用いられる. 具体的に計算できることや, フーリエ変換の対称性など, 便利なことも多いが, 係数が意外と複雑になって, 却って見通しが悪くなるきらいがある.

\*2) デルタ関数の導入 (9.2) に類似しているが, 積分の次数, 次元などが異なることに注意したい.

	$\hat{x}$ の固有関数 $ x'\rangle$	一般的波束 $ \psi\rangle$	$\hat{k}$ の固有関数 $ k'\rangle$
空間広がり $\Delta x$	0	$w$	$\infty$
波数広がり $\Delta k$	$\infty$	$1/w$	0
$x$ 表示成分	$\delta(x - x')$	$\psi(x)$	$(2\pi)^{-1/2} e^{ik'x}$
$x$ 成分の大きさ	$\infty (\sim 1/w)$	$1/\sqrt{w}$	1
$k$ 表示成分	$(2\pi)^{-1/2} e^{-ix'k}$	$\phi(k)$	$\delta(k - k')$
$k$ 成分の大きさ	1	$\sqrt{w}$	$\infty (\sim w)$

表 11.1 位置と運動量の固有関数と一般の波束を表す波動関数の各種サイズ.  $w$  は波束の空間広がりを表す.

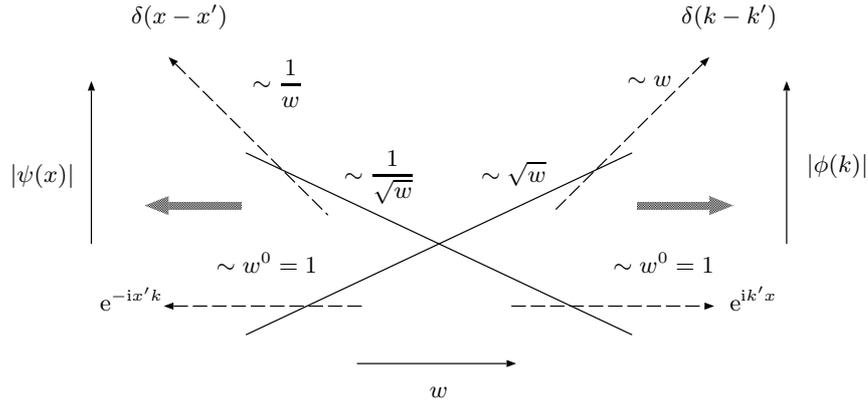


図 11.1 波束の幅  $w$  と  $x$ -表示波動関数の大きさ  $|\psi(x)|$  の関係 (両対数表示). 波束の波動関数をそのまま外挿しても, 位置や運動量の固有関数に対する波動関数にならない.  $k$ -表示の波動関数の大きさ  $|\phi(k)|$  なども同様に表示してある.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |H_{1/\kappa}(x)|^2 dx = 1. \quad (11.17)$$

$H_{1/\kappa}(x)$  は実空間における波動関数の次元をもっている. 式 (11.13) を用いて,  $H_w(x) = (1/\sqrt{w})G(x/w)$ ,  $w = 1/\kappa$  とも書ける.

角周波数  $\Omega$ ,  $\Delta$  に対しても, 正規化された関数

$$h_{\Delta}(\Omega) := \frac{1}{\sqrt{\Delta}} g\left(\frac{\Omega}{\Delta}\right) \stackrel{\mathcal{D}}{\sim} \sqrt{s} \quad (11.18)$$

を定義しておく.

### 11.3 波束のスケーリングと特異関数

長さに関するスケーリングを考慮した波束の表現は

$$\psi_w(x) = \tilde{\psi}_w(x) e^{ikx}, \quad \tilde{\psi}_w(x) = \frac{1}{\sqrt{w}} G(x/w) \stackrel{\mathcal{D}}{\sim} \frac{1}{\sqrt{m}} \quad (11.19)$$

である。正規化は

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_w(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |G(\eta)|^2 d\eta = 1 \quad (11.20)$$

となる。

波束の幅を小さくする極限  $w \rightarrow 0$  を考える。波束の高さ (振幅) は  $1/\sqrt{w}$  にしたがって大きくなる。しかし、面積は

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{\psi}_w(x)| dw \sim \frac{1}{\sqrt{w}} w = \sqrt{w} \rightarrow 0 \quad (w \rightarrow 0) \quad (11.21)$$

のようにゼロに近づく。波束の幅  $w$  を単純に小さくした極限はデルタ関数ではないのである。デルタ関数にするためには、余分に因子  $1/\sqrt{w}$  をかける必要がある。すなわち、

$$\frac{1}{\sqrt{w}} \tilde{\psi}_w(x) \rightarrow \delta(x) \stackrel{D}{\sim} 1/m \quad (w \rightarrow 0) \quad (11.22)$$

逆に波束の幅を大きくする極限  $w \rightarrow \infty$  を考えよう。波束の高さは  $1/\sqrt{w}$  にしたがって小さくなる。したがって、平面波に近づけるためには、

$$\sqrt{w} \psi_w(x) \rightarrow e^{ikx} \stackrel{D}{\sim} 1 \quad (w \rightarrow \infty) \quad (11.23)$$

のように、余分の因子  $\sqrt{w}$  が必要である。

このように基底関数として標準的に用いられる  $\delta(x)$ ,  $e^{ikx}$  はいずれも、(正規化可能な) 波束の単純な極限ではないという、意外な事実が明らかになった。これらの (特異) 関数は  $\hat{x}$ ,  $\hat{p}$  の固有関数であるという性質を充足する代償として、波束がつくる線形空間 (2 乗可積分) の外にはみ出してしまったといえる。展開の足場 (基底) が外の土地 (空間) にあるという奇妙な状況が典型的に実現されているのである。

この節の結果を図 11.2, 表 11.1 にまとめておく。

## 11.4 波束の自由運動

一様な 1 次元ポテンシャル  $V(x) = U$ ,  $(-\infty < x < \infty)$  中の粒子 (質量  $m$ ) に対するシュレディンガー方程式の平面波解 (エネルギー  $E = \hbar\omega$ ) は

$$f(x, t; \omega) = e^{-i\omega t} e^{ikx} \quad (11.24)$$

と表すことができる。  $\omega$  と  $k$  は独立に決めることはできず、  $\omega(k) = \hbar^{-1}[(\hbar k)^2/2m + U]$  で関連づけられる。これらを分散関係という。

平面波解は空間的・時間的に無限に広がっており、現実的なものではない。また、  $|f|^2$  を全空間にわたって積分すると発散してしまう。そこで、より現実な解として有限な広がりをもつ波束を、重ね合わせによって作ってみよう。関数  $h_\kappa(K)$  を用いて、  $k_0$  を中心に  $\kappa$  程度、波数スペクトルの広がった波束

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} h_{\kappa}(K) f(x, t; \omega(k_0 + K)) dK \quad (11.25)$$

をつくる. ここで,  $K$  と  $\omega$  の関係 (分散関係) を,

$$\omega(k_0 + K) \sim \omega_0 + K \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} = \omega_0 + v_g K \quad (11.26)$$

と線形近似する\*3). 分散関係の傾き  $v_g = d\omega/dk|_{\omega_0}$  は群速度を与える. 式 (11.26) を (11.25) に代入して, (11.16) を用いると,

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} h_{\kappa}(K) e^{-iK(v_g t - x)} dK \\ &= e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)} H_{1/\kappa}(x - v_g t) \end{aligned} \quad (11.27)$$

これが波束を表す式であり, 搬送波と包絡線の積になっている. 包絡線  $H_{1/\kappa}(x - v_g t)$  が群速度  $v_g$  で進んでゆく様子がわかる. ここで,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |H_{1/\kappa}(x - v_g t)|^2 dx = 1 \quad (11.28)$$

のように正規化されていることに注意する.

変数変換  $K v_g = \Omega$  によって波束は, 角周波数に対する重ね合わせとして

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{v_g}} h_{\Delta}(\Omega) f(x, t; \omega_0 + \Omega) d\Omega \quad (11.29)$$

と表すこともできる. ただし,

$$h_{\kappa}(K) dK = \frac{1}{\sqrt{\kappa}} g \left( \frac{K}{\kappa} \right) dK = \sqrt{\frac{v_g}{\Delta}} g \left( \frac{\Omega}{\Delta} \right) \frac{d\Omega}{v_g} = \frac{1}{\sqrt{v_g}} h_{\Delta}(\Omega) d\Omega \quad (11.30)$$

を用いた. 周波数空間では, 波束は  $\Delta = \kappa v_g$  程度の広がりをもっていることが分かる. 因子  $1/\sqrt{v_g}$  に注意する.

## 11.5 トンネル問題

トンネル問題に代表される量子力学における散乱問題においては, 定常解を求め, 散乱波の確率振幅と入射波の確率振幅の比の 2 乗を散乱確率としている場合が多い. しかし, 実際の実験では有限の長さをもつ波束を入射し, 散乱波の波束の検出確率から散乱確率を求めるのであるから, 理論と実験の対応は自明なものではない. とくに, 入射側と出射側でポテンシャルが異なっている場合は, 透過係数とトンネル確率は等しくない. ここでは波束を用いて粒子のトン

\*3) この近似が破れると, 群速度にばらつき (群速度分散) ができて, 波束は伝搬につれて波形が崩れる.  $\kappa$  を小さくすると, すなわち,  $w$  を大きくとることで, この影響は小さくすることができる.

ネル確率を求めてみる.

ポテンシャルを

$$V(x) = \begin{cases} U_1 & (x < x_1) \\ U_s(x) & (x_1 \leq x \leq x_2) \\ U_2 & (x_2 < x) \end{cases} \quad (11.31)$$

としよう.  $x_1 < 0 < x_2$  であるとする. 散乱ポテンシャル  $U_s(x)$  は一般的な関数でよい.

領域 1 ( $x < x_1$ ) から波が入射している場合の定常解 (エネルギー  $\hbar\omega$ ) は

$$F(x, t; \omega) = e^{-i\omega t} \times \begin{cases} e^{ik_1x} + r(\omega)e^{-ik_1x} & (x < x_1) \\ \Psi_s(x) & (x_1 \leq x \leq x_2) \\ \tau(\omega)e^{ik_2x} & (x_2 < x) \end{cases} \quad (11.32)$$

ただし,  $k_i(\omega) = \hbar^{-1}\sqrt{2m(\hbar\omega - U_i)}$ , ( $i = 1, 2$ ).  $r(\omega)$ ,  $\tau(\omega)$  はそれぞれ振幅に対する反射係数, 透過係数 (一般に複素数) である. これらは問題を具体的に解くことで求めることができる.  $k_{i0} = k_i(\omega_0)$  ( $i = 1, 2$ ) とおく.

この定常解を重ね合わせることを考える. 前節の結果が入射波束に対応していると考えて, 全領域に対して  $h_\Delta(\Omega)$  の重みで重ね合わせる.

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{v_1}} h_\Delta(\Omega) F(x, t; \omega_0 + \Omega) d\Omega \quad (11.33)$$

$v_i = (dk_i/d\omega|_{\omega_0})^{-1}$  ( $i = 1, 2$ ) はそれぞれの領域における群速度である.

領域 2 ( $x_2 < x$ ) の部分について計算をすすめよう.

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tau(\omega_0 + \Omega) e^{-i[(\omega_0 + \Omega)t + (k_{20} + \Omega/v_2)x]} \frac{1}{\sqrt{v_1}} h_\Delta(\Omega) d\Omega \\ &\sim \tau(\omega_0) e^{-i(\omega_0 t - k_{20} x)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\Omega(t - x/v_2)} \frac{1}{\sqrt{v_1}} h_\Delta(\Omega) d\Omega \end{aligned} \quad (11.34)$$

透過係数は一定と見なせると仮定した:  $\tau(\omega_0 + \Delta) \sim \tau(\omega_0)$ . 重みの部分をさらに変形すると,

$$h_\Delta(\Omega) d\Omega = \sqrt{v_2} h_{\kappa_2}(K_2) dK_2 \quad (11.35)$$

であり, これを用いると

$$\psi(x, t) = \tau(\omega_0) \sqrt{v_2/v_1} e^{-i(\omega_0 t - k_{20} x)} H_{v_2/\Delta}(x - v_2 t) \quad (11.36)$$

同様に計算すると, 全体の様子は

$$\psi(x, t) = e^{-i\omega_0 t} \times \begin{cases} e^{ik_{10}x} H_{v_1/\Delta}(x - v_1 t) + r(\omega_0) e^{-ik_{10}x} H_{v_1/\Delta}(v_1 t + x) \\ \text{省略} \\ \tau(\omega_0) \sqrt{v_2/v_1} e^{ik_{20}x} H_{v_2/\Delta}(x - v_2 t) \end{cases} \quad (11.37)$$

と表すことができる。

ここで、 $T > 1/\Delta$  とおくと、 $t \ll -T$  においては入射波しか存在しないことが分かる。一方、 $t \gg +T$  においては、反射波が領域 1 に、透過波が領域 2 にそれぞれ孤立して存在する。したがって、トンネル (透過) 確率は、量子力学の処方に忠実に従って

$$P_T = \frac{\int_0^\infty |\psi(x, +T)|^2 dx}{\int_{-\infty}^0 |\psi(x, -T)|^2 dx} = \frac{v_2}{v_1} |\tau(\omega_0)|^2 \quad (11.38)$$

と求めることができる。  $P_T = |\tau(\omega_0)|^2$  ではないことに注意する。同様に反射確率は

$$P_R = \frac{\int_{-\infty}^0 |\psi(x, +T)|^2 dx}{\int_{-\infty}^0 |\psi(x, -T)|^2 dx} = |r(\omega_0)|^2 \quad (11.39)$$

と求めることができる。当然、 $P_T + P_R = 1$  が成り立つ。

**問題 11.1** 一般的に用いられる、波束を用いない透過確率の計算方法と比較してみよ。

## 11.6 正準方程式

古典的な粒子の運動方程式はハミルトンの正準方程式 (canonical equations) という対称性の高い形式に帰着できる。1次元の場合、状態を  $(q, p)$  で表し、エネルギーを  $H(q, p)$  とすると、正準方程式は

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (11.40)$$

と与えられる。古典的なハミルトニアンを

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad (11.41)$$

とすれば、通常の運動方程式が得られる。すなわち、

$$\frac{dq}{dt} = \frac{p}{m}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{V}{q} \quad (11.42)$$

となる.

ここでは量子論との関係を調べるために, 形式的に  $\omega = H/\hbar$ ,  $k = p/\hbar$  において, 正準方程式を波動に対する式だと考えてみよう.

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial \omega}{\partial k}, \quad \frac{dk}{dt} = -\frac{\partial \omega}{\partial q} \quad (11.43)$$

ハミルトニアンも

$$\omega(q, k) = \frac{c^2 k^2}{2\omega_c} + \omega_0(q) \quad (11.44)$$

と書き直す. ただし,  $\omega_c = mc^2/\hbar$ ,  $\omega_0 = V/\hbar$  とおいた.

これらの式は波束の (中心の) 運動に対応させることができる.  $q$  は波束の (中心) 位置,  $k$  は波束を構成する単色波の中心波数を表していると考えてみよう. 式 (11.44) は分散関係 ( $\omega$  と  $k$  の関係) を与えている. 分散関係が位置に依存していることに注意する.

分散関係の  $k$  に関する微分は

$$v_g = \left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_k = \frac{c^2}{\omega_c} = \frac{\hbar k}{m} \quad (11.45)$$

は波束の速度, すなわち群速度を与える. したがって, (11.43) の第 1 式は

$$\frac{dq}{dt} = v_g \quad (11.46)$$

となって, 波束の中心  $q$  が群速度  $v_g$  で進行することを意味する.

$k$  と  $q$  は互いに共役な空間の座標である. 式 (11.44) は共役空間における分散関係 ( $\omega$  と  $q$  の関係) と見ることもできる. (11.43) 第 2 式は  $k$  空間における波束の速度を与えていると解釈することができる. ポテンシャル  $\omega_0$  が  $q$  に依存しない場合には,  $dk/dt = \partial \omega / \partial q = d\omega_0/dq = 0$  であり,  $k$  空間における波束の中心位置  $k$  は時間的に変化しない. つまり, 空間的に一樣な場合には波数は保存する. しかし,  $\omega_0$  が  $q$  に依存する場合には,  $k = mv_g/\hbar$  は  $-d\omega_0/dq$  に比例した, 「 $k$  空間における群速度」で移動する. 実空間では,  $v_g$  の変化, すなわち波束の加速や減速 (加速度) として観測される.

粒子に対する古典的なハミルトン方程式が, 波束の運動方程式としても解釈できることが明らかになった.

波束というのは, 波の特別な状況であるが, その伝搬を記述する式は, 一般的な波に対する波動方程式を求める手がかりになるはずである. 実際, 分散関係 (11.44) に帰着できる波動方程式を求めればよいことが分かる. ただし, 同じ分散関係を与える波動方程式は一意ではないので, 試行錯誤は必要である. 今の場合は幸い,  $ik \rightarrow \partial/\partial q$ ,  $-i\omega = \partial/\partial t$  と置くことによって, シュレディンガー型の波動方程式が得られる:

$$i\frac{\partial}{\partial t} = -\frac{c^2}{2\omega_c} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \omega_0(q). \quad (11.47)$$

### 古典近似条件

式 (11.116) に対する, 古典近似条件, すなわち, 波束が粒子として記述可能な条件をしらべておこう. まず, 実空間で波束が形を崩さずに群速度で伝搬する条件は分散関係 (11.116) が  $k$  に対して直線として近似できる条件であり, それは,  $\Delta k \ll |k|$  であれば成り立つ. すなわち, 波数の広がり  $\Delta k$  が中心波数より十分小さいことが条件である. その結果として, 実空間での波束の広がり  $\Delta q \sim 1/\Delta k$  は大きくなる.

一方, 波数空間に関しても群速度が有効であるためには, 同様に分散関係が  $q$  に対して直線で近似できることが条件であり,

$$\left| \frac{d\omega_0}{dq} \Delta q \right| \ll \left| \frac{d^2\omega_0}{dq^2} (\Delta q)^2 \right| \quad (11.48)$$

であることが必要である. 今, ポテンシャルが  $\omega_0(q) = \omega_a \cos Kq$  のように正弦的に変化しているとする. 上の条件は,  $\Delta q \ll |K|^{-1}$  となる.

まとめると,

$$\Delta k \ll |k|, \quad \Delta q \ll |K|^{-1} \quad (11.49)$$

$\Delta k \Delta q \sim 1$  なので, これらを同時に満足させるには,

$$|k| \gg |K| \quad (11.50)$$

が成り立っていることが必要である. ポテンシャルの空間変化が, 波の波長に比べてゆるやかに変化するという条件である. これは幾何光学が成立する条件でもある.

## 11.7 正準交換関係

正準交換関係は古典的な方程式を量子的なものに移行するための, 標準的な処方箋と見なされている. つまり, 「古典的な式の変数  $q, p$  を関係

$$i[\hat{p}, \hat{q}] = \hbar \hat{1} \quad (11.51)$$

を満たす演算子  $\hat{q}, \hat{p}$  で置き換えよ」というものである. しかし, この量子化の手続きはあまりに形式的で意味をとらえにくい. 本稿では, 波動論から出発したので, 上の交換関係は比較的自然な形で導入されたが, ここで再度その意味を確認しておこう. 正準交換関係は次のような2つの部分からなっていると考えられる:

$$\begin{aligned} i[\hat{K}, \hat{q}] &= \hat{1} \quad (\text{波動性}) \\ \hat{p} &= \hbar \hat{K} \quad (\text{粒子性}). \end{aligned} \quad (11.52)$$

前半はすでに何度も見てきたように, 量子論に限らず波動を扱う場合には必然

的に出てくる関係である。後半は1つの量子(粒子)が持つ運動量が対応する波の波数の  $\hbar$  倍であるということを述べている(ド・ブロイの関係)。これは量子のエネルギーが波の角周波数の  $\hbar$  であるということに対応している(ボーアの関係,  $E = \hbar\omega$ )。すなわち, 正準交換関係は, 古典的粒子は「実は波動であり」(前半), かつ「 $\hbar$  を単位として量子化されている」(後半), と2つのことを同時に述べているのである。後半の意味を天降りではなく理解するためには, 場の量子論に進む必要があるが, 前半に関してはこれまで見てきた例などで, 必然性はかなり明らかになっている。本節の残りの部分ではこの点を再度確認する作業を行う。

空間に関する移動演算子  $\hat{T}_a$  を

$$\begin{aligned}\hat{T}_a|\psi\rangle &= \hat{T}_a\left(\int_{-\infty}^{\infty} dq\psi(q)|q\rangle\right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dq\psi(q)|q+a\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dq\psi(q-a)|q\rangle\end{aligned}\quad (11.53)$$

と定義する。ユニタリ演算子であることは容易に確かめられる。 $a$  が十分小さい場合には,

$$\begin{aligned}\hat{T}_a|\psi\rangle &\sim \int_{-\infty}^{\infty} dq\left[\psi(q) - a\frac{d\psi}{dq}(q)\right]|q\rangle \\ &= |\psi\rangle - a\int_{-\infty}^{\infty} dq\frac{d\psi}{dq}(q)|q\rangle = (\hat{1} - ia\hat{K})|\psi\rangle\end{aligned}\quad (11.54)$$

と表すことができる。ここで,

$$\hat{K}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dq\frac{1}{i}\frac{d\psi}{dq}|q\rangle\quad (11.55)$$

は, 移動演算子の生成子(generator)である。 $(\hat{1} - ia\hat{K})$  は無限小移動を表している。有限の移動は

$$\hat{T}_a = \exp(-ia\hat{K})\quad (11.56)$$

と表せる。

$\hat{K}$  の  $q$  表示での行列要素が

$$\langle q'|\hat{K}|q\rangle = \frac{1}{i}\delta'(q' - q)\quad (11.57)$$

となることは簡単に確かめられる。エルミートであることもわかる。

$\hat{K}$  の固有値と対応する固有ケットを  $k$ ,  $|k\rangle$  とすると,  $\hat{K}|k\rangle = k|k\rangle$  より,

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dq'\langle q|\hat{K}|q'\rangle\langle q'|k\rangle &= k\langle q|k\rangle \\ \frac{1}{i}\frac{d}{dq}\langle q|k\rangle &= k\langle q|k\rangle\end{aligned}\quad (11.58)$$

これを微分方程式として解くことで,

$$\langle q|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikq} \quad (11.59)$$

係数は  $|k\rangle$  の規格化条件から決めることができる。

$\{|k\rangle\}$  を基底とする。

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dq \psi(q) |q\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} dq \psi(q) |k\rangle \langle k|q\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) |k\rangle \end{aligned} \quad (11.60)$$

となる。ただし、

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dq \psi(q) e^{-ikq} \quad (11.61)$$

である。

一方、 $k$ -空間における移動演算子  $\hat{S}_b$  を考える。定義は

$$\hat{S}_b |\psi\rangle = \hat{S}_b \left( \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) |k\rangle \right) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k-b) |k\rangle \quad (11.62)$$

である。また、無限小の移動を  $\hat{S}_b \sim (\hat{1} - ib\hat{X})$  とすると、

$$\hat{X} |\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{1}{i} \frac{d\phi}{dk} |k\rangle \quad (11.63)$$

である。有限の移動は

$$\hat{S}_b = \exp(-ib\hat{X}) \quad (11.64)$$

と表せる。

$k$ -表示の行列要素は

$$\langle k' | \hat{X} | k \rangle = \frac{1}{i} \delta'(k' - k) \quad (11.65)$$

である。また、 $q$ -表示では、

$$\langle q' | \hat{X} | q \rangle = q \delta(q - q') \quad (11.66)$$

である。つまり、

$$\hat{X} |\psi\rangle = \hat{X} \left( \int_{-\infty}^{\infty} dq \psi(q) |q\rangle \right) = \int_{-\infty}^{\infty} dq q \psi(q) |q\rangle \quad (11.67)$$

である。結局、 $\hat{X} = \hat{q}$  であるということが出来る。交換関係  $[\hat{X}, \hat{K}] = i\hat{1}$  が成り立つことに注意する。

$\hat{U} = \hat{S}_b^{-1} \hat{T}_a^{-1} \hat{S}_b \hat{T}_a$  という演算子を考える。 $a, b$  はいずれも十分小さいものとする。 $(q, k)$ -平面における小さい四角形に沿った移動に対応している。指数関数を  $a, b$  の2次まで展開して、

$$\begin{aligned}
\hat{U} &\sim \left( \hat{1} + ib\hat{X} - \frac{b^2}{2}\hat{X}^2 \right) \left( \hat{1} + ia\hat{K} - \frac{a^2}{2}\hat{K}^2 \right) \\
&\quad \left( \hat{1} - ib\hat{X} - \frac{b^2}{2}\hat{X}^2 \right) \left( \hat{1} - ia\hat{K} - \frac{a^2}{2}\hat{K}^2 \right) \\
&= \hat{1} + ab[\hat{K}, \hat{X}] = \hat{1}(1 - iab) \sim \hat{1}e^{-iab}
\end{aligned} \tag{11.68}$$

となる。1 巡することで、面積  $ab$  に比例して位相がずれることが分かった。正準交換関係の幾何学的意味の 1 つが表れている。

**問題 11.2**  $\exp i(a\hat{K} + b\hat{X}) \exp(-ib\hat{X}) \exp(-ia\hat{K})$  を同様に展開せよ。

$\hat{K}, \hat{X}$  は Baker-Campbell-Hausdorff の定理 (6.35) の条件を満たしているので、 $(q, k)$ -平面上の有限の大きさの四辺形に対する式を、展開に依らないで、求めることができる。すなわち、

$$\begin{aligned}
\hat{U} &= \exp ib\hat{X} \exp ia\hat{K} \exp(-ib\hat{X}) \exp(-ia\hat{K}) \\
&= \exp ib\hat{X} \exp ia\hat{K} \exp(-ia\hat{K}) \exp(-ib\hat{X}) \exp[-ib\hat{X}, -ia\hat{K}] \\
&= \hat{1} \exp(-iab)
\end{aligned} \tag{11.69}$$

もっと一般に  $(q, k)$ -平面上の閉路  $C$  に対して

$$\hat{U}(C) = \hat{1} \exp(-iS) \tag{11.70}$$

が成り立つことは、 $C$  が囲む“面積”  $S$  を 4 辺形で分割することで確かめることができる。状態  $|\psi\rangle$  を  $(q, k)$ -平面で一巡させると、 $|\psi'\rangle = e^{-i\phi}|\psi\rangle$  となるが、その位相ずれは

$$\phi = S = \oint k(q) dq \stackrel{D}{\approx} \frac{1}{m} m \tag{11.71}$$

のように閉路の囲む面積で表すことができるのである。

**問題 11.3** 面積計 (planimeter) の原理について調べよ。

## 11.8 ポアソン括弧式と交換関係

古典力学ではポアソンの括弧式 (Poisson bracket) が重要な役割を果たしている。1 次元系では物理量は  $q$  と  $p$  の関数で与えられる。ポアソン括弧式は、2 つの物理量  $A(q, p), B(q, p)$  に対して、

$$[A, B]_{\text{PB}} = \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial q} \tag{11.72}$$

で定義される  $(q, p)$  の関数のことである。

これを用いると物理量  $A(q, p)$  の時間変化を

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}A &= \frac{\partial A}{\partial q} \frac{dq}{dt} + \frac{\partial A}{\partial p} \frac{dp}{dt} \\ &= \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} = [A, H]_{\text{PB}},\end{aligned}\quad (11.73)$$

のように簡潔に表すことができる. ただし, 正準方程式 (11.40) を用いた. また, 正準方程式自体もポアソンの括弧式を用いて

$$\frac{d}{dt}q = [q, H]_{\text{PB}}, \quad \frac{d}{dt}p = [p, H]_{\text{PB}},\quad (11.74)$$

と表すことができる.

式 (11.73) は, 量子論のハイゼンベルク描像における物理量の時間変化

$$\frac{d}{dt}\hat{A} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{H}]\quad (11.75)$$

と非常によく対応を示している. したがって, 古典系から量子系へ移行するための処方箋の1つとしてよく用いられる: 「ポアソン括弧式を対応する演算子の交換関係で置き換えよ.」

**問題 11.4** 式 (5.50), (5.51) に対応する式がポアソン括弧式について成り立つことを確かめよ.

ポアソン括弧式と交換関係の間には形式的な類似性があり, 同じ代数にしたがうが, 一方は関数の微分, もう一方は演算子の交換として定義されており, 隔たりは大きい. ここでは, 類似性をもう少し掘り下げてみよう.

量子系から出発する. まず, 正準交換関係  $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar\hat{1}$  が満たされているとしよう. すると,

$$[\hat{q}, \hat{p}^2] = \hat{p}[\hat{q}, \hat{p}] + [\hat{q}, \hat{p}]\hat{p} = (i\hbar)2\hat{p}\quad (11.76)$$

が成り立つ. 一般に,

$$\begin{aligned}[\hat{q}, \hat{p}^n] &= \hat{p}[\hat{q}, \hat{p}^{n-1}] + [\hat{q}, \hat{p}]\hat{p}^{n-1} \\ &= \hat{p}[\hat{q}, \hat{p}^{n-1}] + (i\hbar)\hat{p}^{n-1} \\ &= \hat{p}^2[\hat{q}, \hat{p}^{n-2}] + (2i\hbar)\hat{p}^{n-1} \\ &= \dots = (i\hbar)n\hat{p}^{n-1}\end{aligned}\quad (11.77)$$

が成り立つ. これを利用して, 関数  $g(p) = \sum_n g_n p^n$  に対して

$$[\hat{q}, g(\hat{p})] = (i\hbar) \sum_n n g_n \hat{q}^{n-1} = (i\hbar)g'(\hat{p})\quad (11.78)$$

が成り立つことが分かる. ただし,  $g' = dg/dp$ . 同様に, 関数  $f(q)$  に対しても

$$[f(\hat{q}), \hat{p}] = (i\hbar)f'(\hat{q})\quad (11.79)$$

が得られる。ただし,  $f' = df/dq$ . さらに,

$$\begin{aligned}
[\hat{q}^i, \hat{p}^j] &= \hat{q}[\hat{q}^{i-1}, \hat{p}^j] + [\hat{q}, \hat{p}^j]\hat{q}^{i-1} \\
&= \hat{q}^{i-1}[\hat{q}, \hat{p}^j] + \hat{q}^{i-2}[\hat{q}, \hat{p}^j]\hat{q} + \cdots + [\hat{q}, \hat{p}^j]\hat{q}^{i-1} \\
&= (i\hbar)j (\hat{q}^{i-1}\hat{p}^{j-1} + \hat{q}^{i-2}\hat{p}^{j-1}\hat{q} + \cdots + \hat{p}^{j-1}\hat{q}^{i-1}) \\
&= (i\hbar)ij(\hat{q}^{i-1}\hat{p}^{j-1})_S
\end{aligned} \tag{11.80}$$

が成り立つ。ここで,  $(\dots)_S$  は,  $\hat{q}, \hat{p}$  の積を対称化することを表している。たとえば,

$$(\hat{q}\hat{p})_S = \frac{1}{2}(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}), \quad (\hat{q}^2\hat{p})_S = \frac{1}{3}(\hat{q}^2\hat{p} + \hat{q}\hat{p}\hat{q} + \hat{p}\hat{q}^2), \tag{11.81}$$

のような操作を表す。関数  $f(q, p)$  に対しても, テーラ展開の各項に対称化した積を代入したものを,  $f(\hat{q}, \hat{p})_S$  と書くことにする。たとえば,  $f(q, p) = p^2 + qp$  に対して,

$$f(\hat{q}, \hat{p})_S = \hat{p}^2 + \frac{1}{2}(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q}). \tag{11.82}$$

さらに

$$\begin{aligned}
[\hat{q}^i\hat{p}^j, \hat{q}^k\hat{p}^l] &= \hat{q}^i[\hat{p}^j, \hat{q}^k\hat{p}^l] + [\hat{q}^i, \hat{q}^k\hat{p}^l]\hat{p}^j \\
&= \hat{q}^i\hat{q}^k[\hat{p}^j, \hat{p}^l] + \hat{q}^i[\hat{p}^j, \hat{q}^k]\hat{p}^l + \hat{q}^k[\hat{q}^i, \hat{p}^l]\hat{p}^j + [\hat{q}^i, \hat{q}^k]\hat{p}^l\hat{p}^j \\
&= -\hat{q}^i[\hat{q}^k, \hat{p}^j]\hat{p}^l + \hat{q}^k[\hat{q}^i, \hat{p}^l]\hat{p}^j \\
&= -(i\hbar)kj\hat{q}^i(\hat{q}^{k-1}\hat{p}^{j-1})_S\hat{p}^l + (i\hbar)il\hat{q}^k(\hat{q}^{i-1}\hat{p}^{l-1})_S\hat{p}^j
\end{aligned} \tag{11.83}$$

などが成り立つので,

$$\begin{aligned}
[(\hat{q}^i\hat{p}^j)_S, (\hat{q}^k\hat{p}^l)_S] &= (i\hbar)il(\hat{q}^{i+k-1}\hat{p}^{j+l-1})_S \\
&\quad - (i\hbar)kj(\hat{q}^{i+k-1}\hat{p}^{j+l-1})_S
\end{aligned} \tag{11.84}$$

が得られる。(やや面倒な計算を要するが, 簡単な例で確かめるとよいだろう。) これより, 一般の関数について,

$$\begin{aligned}
[A(\hat{q}, \hat{p})_S, B(\hat{q}, \hat{p})_S] &= \sum_{i,j} \sum_{k,l} A_{ij} B_{kl} [\hat{q}^i\hat{p}^j, \hat{q}^k\hat{p}^l] \\
&= (i\hbar) \sum_{i,j} \sum_{k,l} (iA_{ij}lB_{kl} - jA_{ij}kB_{kl})(\hat{q}^{i+k-1}\hat{p}^{j+l-1})_S \\
&= i\hbar \left( \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial q} \right) (\hat{q}, \hat{p})_S \\
&= i\hbar[A, B]_{\text{PB}}(\hat{q}, \hat{p})_S
\end{aligned} \tag{11.85}$$

量子論において,  $\hat{q}, \hat{p}$  に関する対称化を前提にすると, 演算子  $\hat{A} = A(\hat{q}, \hat{p})_S$ ,  $\hat{B} = B(\hat{q}, \hat{p})_S$  の交換関係は

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar[A, B]_{\text{PB}}(\hat{q}, \hat{p})_S \quad (11.86)$$

のように、古典的なポアソン括弧式を用いて表すことができる。

## 11.9 クライン・ゴールドン方程式

相対論では質量  $m$  に対してエネルギー  $mc^2$  が対応づけられる。一方、量子論ではエネルギーは  $\hbar\omega$  によって角周波数に対応づけられる。これらを組み合わせると、

$$\omega_c = \frac{mc^2}{\hbar} \quad (11.87)$$

は、質量に関連した角周波数であるといえる\*4)。これをコンプトン角周波数とよぶ。また、コンプトン波数  $k_c = \omega_c/c = mc/\hbar$ 、また、コンプトン波長  $\lambda_c = 2\pi/k_c = \hbar/(mc)$  なども定義できる。

クライン-ゴールドン (Klein-Gordon) 方程式

$$\left[ \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \omega_c^2 \right] \Psi(z, t) = 0 \quad (11.88)$$

は相対論的に不変な波動方程式である。  $\omega_c = 0$  の場合、つまり質量がゼロの場合には電磁波に対する波動方程式に帰着する。

まず空間的に一様な解を求める。  $\partial/\partial z = 0$  とすると、

$$\Psi_0(t) = A_+ e^{-i\omega_c t} + A_- e^{i\omega_c t} \quad (11.89)$$

第1項は正のエネルギー、第2項は負のエネルギーに対応する解である。

正エネルギーの解を元に

$$\Psi(z, t) = \psi(z, t) e^{-i\omega_c t} \quad (11.90)$$

をつくる。  $\psi(z, t)$  は時間的、空間的にゆっくり変化する関数 (包絡線関数) である。式 (11.90) に代入すると、

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - 2(-i\omega_c) \frac{\partial \psi}{\partial t} + (-\omega_c^2) \psi - c^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \omega_c^2 \psi = 0 \quad (11.91)$$

となる。左辺第1項は第2項に比べて小さいとすると、

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{c^2}{2\omega_c} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \quad (11.92)$$

となる。これは、自由粒子 ( $V(z) = 0$ ) に対するシュレディンガー方程式の形をしている。

\*4) 電子の場合、質量エネルギーは  $mc^2 = 0.5 \text{ MeV}$  であり、原子内での電子の典型的なエネルギーである数 eV に比べるとはるかに大きい。

クライン・ゴルドン方程式は整数スピンを持つ相対論的な粒子に対する方程式である。電子のように半整数スピンをもつ粒子はディラック方程式に従うことが知られているが、次節で示すように、同様の手続きで、シュレディンガー型の方程式を導くことができる。シュレディンガー方程式は相対論的な波動方程式の正周波数 (正エネルギー) 解の包絡線に従う方程式である。

問題 11.5 式 (11.88) と式 (11.92) の分散関係を描き、関係づけて考えよ。

## 11.10 ディラック方程式

相対論的な電子の波動関数はディラック方程式\*5) に従うことが知られている。

$$\left( \frac{\hat{1}_4}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \sum_{i=1}^3 \hat{\alpha}_i \frac{\partial}{\partial x_i} - i \frac{mc}{\hbar} \hat{\beta} \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (11.93)$$

ここで、 $\hat{1}_4, \hat{\beta}, \hat{\alpha}_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) は  $4 \times 4$  の次のような行列である：

$$\begin{aligned} \hat{1}_4 &= \begin{bmatrix} \hat{1}_2 & 0 \\ 0 & \hat{1}_2 \end{bmatrix}, & \hat{\beta} &= \begin{bmatrix} \hat{1}_2 & 0 \\ 0 & -\hat{1}_2 \end{bmatrix}, \\ \hat{\alpha}_1 &= \begin{bmatrix} 0 & \hat{\sigma}_1 \\ \hat{\sigma}_1 & 0 \end{bmatrix}, & \hat{\alpha}_2 &= \begin{bmatrix} 0 & \hat{\sigma}_2 \\ \hat{\sigma}_2 & 0 \end{bmatrix}, & \hat{\alpha}_3 &= \begin{bmatrix} 0 & \hat{\sigma}_3 \\ \hat{\sigma}_3 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (11.94)$$

波動関数は 4 つ要素からなるベクトル

$$\Psi = [\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \Psi_4]^T \quad (11.95)$$

である。スピンの自由度 (2) と反粒子の自由度 (2) を含んでいる。

ここでは簡単のために、 $z$ -方向の平面波のみを考えることにして、 $\partial/\partial x = \partial/\partial y = 0$  とおく。すると、4 つの式が  $(\Psi_1, \Psi_3)$  に関するものと、 $(\Psi_2, \Psi_4)$  に関するものに分離する。これはスピンの  $+z, -z$  成分に対応し、全く同じ形になる。前者のみを考えればよい：

$$\left[ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + i \frac{\omega_c}{c} \right] \Psi_1 = -\frac{\partial}{\partial z} \Psi_3, \quad \left[ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} - i \frac{\omega_c}{c} \right] \Psi_3 = -\frac{\partial}{\partial z} \Psi_1, \quad (11.96)$$

ただし、 $\omega_c = mc^2/\hbar$  は電子のコンプトン角周波数である。 $\Psi_1(z, t)$  は電子に関する波動関数、 $\Psi_3(z, t)$  は陽電子に関する波動関数で、波長が長い場合 ( $|k| \ll \omega_c/c$ ) の場合、それぞれ、 $\exp(-\omega_c t), \exp(\omega_c t)$  のように振動している (非相対論的極限)。これは、右辺を 0 とおいてみれば分かる。右辺は左辺第 1 項と第 2 項の微

\*5) 発見されたのは、1928 年のことである。有名なディラックの量子力学の教科書を読めば、この方程式の導出のスリルを追体験できる。電子のスピンが必然的に表れただけではなく、陽電子という当時まだ発見されてもいない粒子までも、土俵に引きずり出されたのである。

小さな差を補っている。  $\Psi_1(z, t) \sim \psi(z) \exp(-\omega_c t)$  とおいて、第 2 式に代入して解くと、

$$\Psi_3 = -\frac{ic}{2\omega_c} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_1 \quad (11.97)$$

が得られる。これを第 1 式に代入して整理すると、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \Psi_1 + \hbar\omega_c \Psi_1 \quad (11.98)$$

これは形の上ではシュレディンガー方程式に類似している。ただし、ポテンシャルエネルギー項に電子の質量エネルギー  $\hbar\omega_c$  が表れている。非相対論では、通常静止状態のエネルギーをゼロとおくので、

$$\Psi_1(z, t) = \psi(z, t) e^{-i\omega_c t} \quad (11.99)$$

とおいて、エネルギーの原点をずらすことで、通常のシュレディンガー方程式に帰着する：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi. \quad (11.100)$$

**問題 11.6** 式 (11.96) から、 $\Psi_3$  を消去すると、クライン・ゴールドン方程式と同じ形の式になることを確かめよ。

## 11.11 ガリレイ変換

通常の 1 次元波動関数がガリレイ変換に対してどのように振る舞うか調べておこう。平面波

$$\psi(z, t) = \exp i(-\omega t + kz), \quad \omega = \hbar k^2 / 2m \quad (11.101)$$

を通常の古典的な波動だと考えてガリレイ変換を行う。K 系の座標を  $(z, t)$ 、K' 系の座標を  $(z', t')$  とする。K' 系の原点 ( $z' = 0$ ) が K 系において速度  $v$  で等速運動しているとする。また、 $t = 0$  で両原点が一致したとする。

$$t = t', \quad z = z' + vt' \quad (11.102)$$

を式 (11.101) に代入することにより、K' 系における波動関数は

$$\psi'(z', t') = \psi(z' + vt', t') = \exp i[-(\omega + kv)t' + kz'] \quad (11.103)$$

となると思われる。この結果からは、 $\omega' = \omega + kv$ 、 $k' = k$  と変換することになるが、 $\omega' = \hbar k'^2 / 2m$  が成り立っていない。また、通常の力学によれば、 $p' = p + mv$  となるはずであるが、ここに得られた、 $k' = k$  は両辺に  $\hbar$  をかけると、 $p = p'$  となってしまう、つじつまが合わない。

古典粒子のエネルギーと運動量の変換則が要求する  $p' = p + mv$ ,  $E' = E + mv^2/2$  から,  $K'$  系での波動関数は

$$\psi'(z', t') = \exp i[-(\omega + mv^2/2\hbar)t' + (k + mv/\hbar)z'] \quad (11.104)$$

となるはずである.

この矛盾の原因は, 古典的な波動にならって, 自明と思われる関係式

$$\psi'(z', t') = \psi(z, t) \quad (11.105)$$

を用いたことにある. しかし, 波動関数に対しては, 位相の自由度を残した

$$|\psi'(z', t')| = |\psi(z, t)| \quad (11.106)$$

のような関係式を考えるべきである. すなわち, 未知の位相因子を含めて

$$\psi'(z', t') = \psi(z, t)e^{if_v(z, t)} \quad (11.107)$$

とすべきなのである. この位相因子が

$$f_v(z, t) = \hbar^{-1} \left( mvz + \frac{mv^2}{2}t \right) \quad (11.108)$$

となることは, 式 (11.103), (11.104) の比較によって分かる.

**問題 11.7** シュレディンガー方程式をガリレイ変換することにより, この因子を求めてみよ.

つじつま合わせの感が否めないで, 別の方法で, 位相因子を求めてみよう. 式 (11.98) をみたすディラック方程式の波動関数に対して, 位相を含む変換則

$$\Psi'_1(z', t') = \Psi_1(z, t) \quad (11.109)$$

が成り立っていると仮定しよう.  $K$  系,  $K'$  系に対する式 (11.99)

$$\Psi_1(z, t) = \psi(z, t)e^{-i\omega_c t}, \quad \Psi'_1(z', t') = \psi'(z', t')e^{-i\omega_c t'} \quad (11.110)$$

を比較する.  $\omega_c$  は静止質量  $m$  に対応するもので不変であるとした. 比較によって,

$$\psi'(z', t') = \psi(z, t) \exp[i\omega_c(t' - t)] \quad (11.111)$$

となるので,  $\omega_c(t' - t)$  が  $f_v(z, t)$  に対応するものと想像される. しかし, ガリレイ変換においては,  $t' = t$  なのでこの項は消えてしまう. さて, ここでコンプトン周波数が  $\omega_c = mc^2/\hbar \sim 10^{21}$  /s と非常に大きいものであることを思いだそう. したがって, 相対論的な微小な時間のずれが顕在化する可能性がある. ローレンツ変換を使ってみよう:

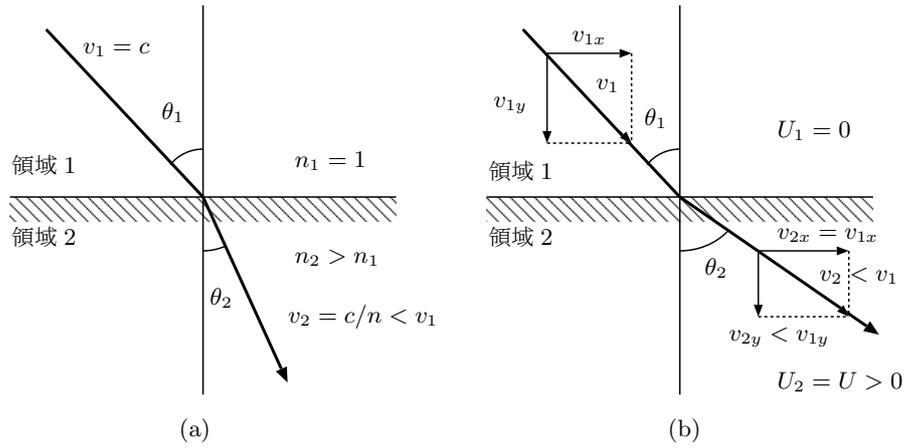


図 11.2 光の屈折と粒子の屈折

$$z' = \gamma(z + \beta ct), \quad ct' = \gamma(ct + \beta z), \quad (11.112)$$

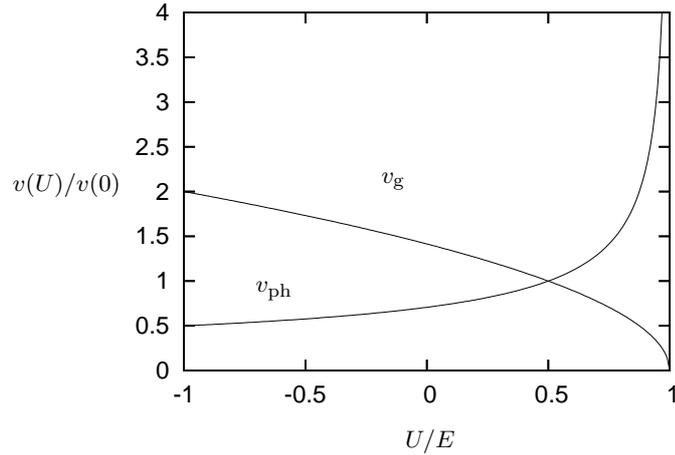
ただし,  $\beta = v/c$ ,  $\gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}$ . これを用いて, 両系の時刻差を  $\beta$  の 2 次まで計算すると,

$$\begin{aligned} \omega_c(t' - t) &= \omega_c \left[ \left( 1 + \frac{\beta^2}{2} + \dots \right) \left( t + \frac{\beta z}{c} \right) - t \right] \\ &\sim \omega_c \left( \frac{\beta z}{c} + \frac{\beta^2 t}{2} \right) = \hbar^{-1} \left( mvz + \frac{mv^2}{2} t \right) \end{aligned} \quad (11.113)$$

となって, 正しい位相補正 (11.108) を与えている. 運動量に寄与する第 1 項にローレンツ変換の非同時性, エネルギーの補正を与える第 2 項に時間短縮が関係していることが見てとれる. このことは, 質量をエネルギー  $mc^2$  として扱い, さらに量子論にしたがって振動  $\omega_c$  とみなすことで, 初めて見えてくる事実である. エネルギーの原点を適当にずらした非相対論的波動関数の場合にはつじつま合わせの位相因子に見えたものが, 物理的な根拠を持つことが明らかになった.

## 11.12 位相速度と波の屈折

媒質の境界面で波が屈折することは, 光などにおいてよく知られていることである. 空気からガラスに光が入る場合には, 図のように光線が曲がる. これを法則として述べているのが, フェルマの原理である: 「光の経路は, 点 A から点 B への伝搬に要する時間が最小 (厳密には極小) になるように決まる.」屈折率が  $n_i$  の媒質中での光の速さは  $v_i = c/n_i$  である. 空気の屈折率が  $n_1 \sim 1$ , 水の屈折率が  $n \sim 1.3$  であることから, 一様な媒質内での最短時間経路である直線よりも, やや遠回りになっても, 水中での経路を短くすることで, 最短時間が実現されている. スネルの法則は, 速度を用いて



$$\frac{\sin \theta_1}{\sin \theta_2} = \frac{n_2}{n_1} = \frac{v_1}{v_2} \quad (11.114)$$

と表すことができる。水に入射する場合、 $\theta_1 > \theta_2$  になる。

シュレディンガー方程式にしたがう波の屈折を考えてみよう。光の場合と同じく、領域2で速度が遅くなる状況をつくるには、領域1でのポテンシャルを0、領域2でのポテンシャル  $U$  を正になるようにすればよいはずである。ポテンシャルが増加するので、粒子の全エネルギーが保存することを考慮すると、その分運動エネルギーが小さくなり、速度が小さくなるからである。 $U > 0$  が  $n > 1$  に対応していると考えられる。

一方、粒子の運動として考えてみる。 $U > 0$  の場合、境界面に斜め方向から到達した粒子の、法線方向の速度は減少し、接線方向の速度は保存したまま、領域2に入ってゆくものと考えられる。たしかに、速さは小さくなっている。(領域1と領域2のポテンシャルの不連続を斜面によって緩和した状況を考えて分かりやすい。) しかし、これでは屈折の方向が逆になってしまい、 $\theta_1 < \theta_2$  になる。粒子の運動に対してはフェルマの原理は成り立たないのであろうか。

このパラドックスの原因は位相速度と群速度の混同である。波の屈折を決めているのは境界面における位相の連続性である。したがって、スネルの法則における速度は位相速度である。光の速さを  $c/n$  としているのも、位相速度のことである。

ところが、古典的な粒子の速度に対応するものは、群速度である。したがって、屈折を扱うには波動関数の位相速度について考え直す必要がある。

シュレディンガー方程式の分散関係

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2 + \frac{U}{\hbar} \quad (11.115)$$

から、領域2における位相速度と群速度を求めると、

$$v_{\text{ph}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} + \frac{U}{\hbar k}, \quad v_{\text{g}} = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m} \quad (11.116)$$

となる。(領域 1 での値は  $U = 0$  とすれば求められる。) これらの式は  $k$  の関数として各速度を表している。全エネルギー  $E$  の関数として表すために、 $\hbar k = \sqrt{2m(E-U)}$  を代入すると、

$$v_{\text{ph}} = \sqrt{\frac{E}{2m}}(1-U/E)^{-1/2}, \quad v_{\text{g}} = \sqrt{\frac{2E}{m}}(1-U/E)^{1/2} \quad (11.117)$$

が得られる。 $U$  の変化によって速度を制御する場合、 $v_{\text{g}}v_{\text{ph}} = E/m$  が  $U$  によらず一定となるという、面白い性質をもっている。

$U$  を増加させると、群速度は減少するが、位相速度は逆に増大するのである。先の例でも、領域 2 での位相速度は領域 1 より速くなっている。したがって、光の場合でいえば  $0 < n < 1$  に相当する屈折が実現されていることになる。

シュレディンガー方程式にしたがう波動に対するスネルの法則は、次のようになる:

$$\frac{\sin \theta_1}{\sin \theta_2} = \frac{v_{\text{ph}1}}{v_{\text{ph}2}} = \sqrt{\frac{E-U_2}{E-U_1}} = \frac{v_{\text{g}2}}{v_{\text{g}1}} \quad (11.118)$$

エネルギーの原点を変化させた場合、すなわち、 $E \rightarrow E + E_0$ ,  $U \rightarrow U + E_0$  とした場合の、 $v_{\text{g}}$  は  $E_0$  に依らないが、 $v_{\text{ph}}$  は変化する。本来、エネルギーの原点は任意に決められるものなので、これは奇妙なことである。波動関数の位相は直接測定にかからない量なので、このようなことが許されるのである。スネルの法則においては、 $E_0$  の効果が打ち消しあっている。

**問題 11.8** フェルマの原理をより一般的で正確なものに改訂せよ。

#### 参考文献

- 福田礼次郎: 「フーリエ解析」(岩波書店, 1997)  
L. E. Ballentine: Quantum Mechanics (World Scientific, 1998) p. 102