Note.

文責: 吉野 惇郎

2003-02-24

2.1 時間的発展とシュレーディンガー方程式

量子力学では時間は演算子ではない。

時間的発展の演算子 系の状態 $|\alpha\rangle$ の時間的発展

$$|\alpha\rangle = |\alpha, t_0\rangle \xrightarrow{\text{時間的発展}} |\alpha, t_0; t\rangle \tag{1}$$

について考える。この二つのケットを時間的発展の演算子 $\mathcal{U}(t, t_0)$ により

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \mathcal{U}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle \tag{2}$$

のように関連づけるとき、この $\mathcal{U}$ の持つべき性質は以下の通りである。

1. $\mathcal{U}$ はユニタリーである。
   (はじめに 1 に規格化されていたケットは時間がたっても 1 に規格化されていなければならない)
2. $\mathcal{U}$ は合成 $\mathcal{U}(t_2, t_0) = \mathcal{U}(t_2, t_1)\mathcal{U}(t_1, t_0)$ が成り立つ。
3. $\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0)$ は $dt \to 0$ の極限で恒等演算子に一致する。

これらの要請を満たすものとして Ω をエルミート演算子として次のようにかける。

$$\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = \mathbf{1} - i\Omega dt \tag{3}$$

ここの振動数の次元を持つ Ω をハミルトニアン H と $\Omega = H/\hbar$ と関連づけると、ある状態から時間 dt だけ時間的発展した状態を作り出す演算子は

$$\mathcal{U}(t + dt, t) = \mathbf{1} - \frac{iHdt}{\hbar} \tag{4}$$

とかける。

シュレーディンガー方程式　演算子 $\mathcal{U}$ の合成の性質から次式が成立することがわかる。

$$\mathcal{U}(t+dt,t_0)-\mathcal{U}(t,t_0)=(\mathcal{U}(t+dt,t)-\mathbf{1})\mathcal{U}(t,t_0)=-\frac{iHdt}{\hbar}\mathcal{U}(t,t_0) \tag{5}$$

これより、演算子 $\mathcal{U}$ の満たす微分方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{U}(t,t_0)=H\mathcal{U}(t,t_0) \tag{6}$$

が導かれる。これは時間的発展の演算子に対するシュレーディンガー方程式である。

両辺に初期状態ケット $|\alpha,t_0\rangle$ を右からかけると、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{U}(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle=H\mathcal{U}(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle \tag{7}$$

ここで、$|\alpha,t_0\rangle$ は t によらないから、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t_0;t\rangle=H|\alpha,t_0;t\rangle \tag{8}$$

となり、状態ケットに対するシュレーディンガー方程式が得られた。

ハミルトニアン H が時間に依存しないときの時間的発展の演算子に対するシュレーディンガー方程式の解は

$$\mathcal{U}(t,t_0)=\exp(-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}) \tag{9}$$

となる。

時間的発展の演算子に対するシュレーディンガー方程式の解がわかれば、初期状態ケットに作用させることで任意時刻の状態ケットが得られる。

エネルギー固有ケット　任意時刻での状態ケットを得るためには初期状態ケットに時間的発展の演算子を作用させればよいが、この作用を具体的に計算する方法を検討する。

あるオブザーバブル A があって、これがハミルトニアン H と交換するとき、A の固有ケットは H の固有ケット (エネルギー固有ケット) でもある。A の固有ケット $|a'\rangle$ について、次式が成り立つ。

$$H|a'\rangle=E_{a'}|a'\rangle \tag{10}$$

ここで、H が時間によらないときの時間的発展の演算子は A の固有ケットで展開でき、

$$\exp(-\frac{iHt}{\hbar})=\sum_{a'}\sum_{a"}|a"\rangle\langle a"|\exp(-\frac{iHt}{\hbar})|a'\rangle\langle a'|=\sum_{a'}|a'\rangle\exp(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar})\langle a'| \tag{11}$$

となる。これより、初期状態ケット $|\alpha\rangle$ を A の固有ケットで展開すれば、具体的にその時間的発展を計算できる。

H が互いに交換する複数のオブザーバブル $A, B, C, ...$ と交換する場合は、$A, B, C, ...$ の同時固有ケット (H の同時固有ケットでもある)$|a', b', c', ...\rangle$ で時間的発展の演算子を展開でき、

$$\exp(-\frac{iHt}{\hbar}) = \sum_{a',b',c',...} |a', b', c', ...\rangle \exp(-\frac{iE_{a',b',c',...}t}{\hbar})\langle a', b', c', ...| \tag{12}$$

である。

これより、H と交換する、互いに交換するオブザーバブルの完全なセットを見いだし、これらの同時固有ケットでもって初期状態ケットと時間的発展の演算子を展開すれば、H が時間依存しないとき一般的な初期値問題を解くことができる。

期待値の時間依存性　初期状態が H と交換するオブザーバブル A の固有状態の一つ $|a'\rangle$ の場合は、任意のオブザーバブル B についてその期待値 $\langle B\rangle$ は、

$$\langle B\rangle = \langle a'|B|a'\rangle \tag{13}$$

$$\text{時間的発展}\big\downarrow$$

$$\begin{aligned}\langle a'|\mathcal{U}^\dagger(t,0)B\mathcal{U}(t,0)|a'\rangle &= \sum_{a"}\sum_{a"'}\langle a'|a"\rangle \exp(\frac{iE_{a"}t}{\hbar})\langle a"|B|a"'\rangle \exp(-\frac{iE_{a"'}t}{\hbar})\langle a"'|a'\rangle \\ &= \exp(\frac{iE_{a'}t}{\hbar})\langle a'|B|a'\rangle \exp(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar}) \\ &= \langle a'|B|a'\rangle\end{aligned}$$

より時間に依存しない (定常状態)。

初期状態 $|\alpha\rangle$ が非定常状態のときは、

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'}|a'\rangle \tag{14}$$

として、

$$\langle B\rangle = \langle\alpha|B|\alpha\rangle = \sum_{a'}\sum_{a"} c^*_{a'}c_{a"}\langle a'|B|a"\rangle \tag{15}$$

$$\text{時間的発展}\big\downarrow$$

$$\begin{aligned}\sum_{a'}\sum_{a"} c^*_{a'}c_{a"}\langle a'|\mathcal{U}^\dagger(t,0)B\mathcal{U}(t,0)|a"\rangle &= \sum_{a'}\sum_{a"} c^*_{a'}c_{a"}\exp(\frac{iE_{a'}t}{\hbar})\langle a'|B|a"\rangle \exp(-\frac{iE_{a"}t}{\hbar}) \\ &= \sum_{a'}\sum_{a"}\exp(\frac{i(E_{a'}-E_{a"})t}{\hbar})c^*_{a'}c_{a"}\langle a'|B|a"\rangle\end{aligned}$$

と期待値を構成する各項が振動する。

スピン歳差運動

相関の強さおよびエネルギー-時間の不確定関係　ここでは時間がたった後の状態と元の状態がどれだけ似ているか検討する。

相関の強さ $C(t)$ を次のように定義する。

$$C(t) \equiv \langle\alpha|\alpha, 0; t\rangle = \langle\alpha|\mathcal{U}(t, 0)|\alpha\rangle \tag{16}$$

$C(t)$ の絶対値は異なる時刻の状態ケット間の類似の強度を定量的に与える。

初期状態が H と交換するオブザーバブル A の固有状態 $|a'\rangle$ のときは、

$$|C(t)| = |\langle a'| \exp(-\frac{iHt}{\hbar})|a'\rangle| = |\langle a'| \exp(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar})|a'\rangle| = |\exp(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar})| = 1 \tag{17}$$

である。

非定常状態のときの例として、エネルギーが準連続的スペクトルを持つような場合を考える。初期状態ケット

$$|\alpha\rangle = \int dE\rho(E)g(E)|E\rangle \tag{18}$$

について、相関の強さの絶対値は、

$$|C(t)| = \left|\int dE\rho(E)g^*(E)\langle E|\int dE'\rho(E')g(E')\exp(-\frac{iE't}{\hbar})|E\rangle\right| = \left|\int dE|g(E)|^2\rho(E)\exp(-\frac{iEt}{\hbar})\right| \tag{19}$$

となる。ここで、$|g(E)|^2\rho(E)$ が $E = E_0$ のまわりで幅 ΔE のピークを持つとすると、相関の強さの絶対値は

$$|C(t)| = \left|\exp(-\frac{iE_0t}{\hbar})\int dE|g(E)|^2\rho(E)\exp(-\frac{i(E-E_0)t}{\hbar})\right| = \left|\int dE|g(E)|^2\rho(E)\exp(-\frac{i(E-E_0)t}{\hbar})\right| \tag{20}$$

となる。

この式の被積分関数に注目すると、$|E - E_0| < \hbar/t$ のエネルギー範囲の外側では非常に速く振動し、積分への寄与はほとんどなくなっている。これより、スペクトルのピークの幅 ΔE より $\hbar/t$ がずっと小さくなれば、相関の強度の絶対値はゼロに近づくことがわかる。よって、時間 $\Delta t \simeq \hbar/\Delta E$ が経過すると状態ケットはもとの形を失いはじめる。

2.2　シュレーディンガー表示とハイゼンベルク表示

ユニタリー演算子

シュレーディンガー表示とハイゼンベルク表示における状態ケットと観測量
シュレーディンガー表示では時間により変化しない演算子と時間変化する状

態ケットを用いて表す。ハイゼンベルク表示では時間変化する演算子と時間により変化しない状態ケットを用いて表す。

シュレーディンガー表示の演算子 $A^{(S)}$ とハイゼンベルク表示の演算子 $A^{(H)}$ は、時間的発展の演算子 $\mathcal{U}(t,0)=\mathcal{U}(t)$ により次式で関連づけられる。

$$A^{(H)} = \mathcal{U}^\dagger(t)A^{(S)}\mathcal{U}(t) \tag{21}$$

時刻 t におけるオブザーバブル A の期待値 $\langle A\rangle$ は表示によらず等しい。

$${}_S\langle\alpha,0;t|A^{(S)}|\alpha,0;t\rangle_S = (\langle\alpha,0|\mathcal{U}^\dagger(t))A(\mathcal{U}(t)|\alpha,0\rangle) = \langle\alpha,0|(\mathcal{U}^\dagger(t)A\mathcal{U}(t))|\alpha,0\rangle =_H \langle\alpha|A^{(H)}(t)|\alpha\rangle_H \tag{22}$$

ハイゼンベルクの運動方程式　ハイゼンベルク表示の演算子 $A^{(H)}$ は次のハイゼンベルクの運動方程式を満たす。

$$\frac{dA^{(H)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A^{(H)}, H] \tag{23}$$

自由粒子、エーレンフェストの定理

基底ケットと遷移振幅　オブザーバブルの固有ケットを基底ケットに選ぶとき、シュレーディンガー表示では演算子の固有ケットは時間変化しないことより基底ケットも時間変化しない。

ハイゼンベルク表示場合、演算子 $A^{(H)}$ の固有ケットの満たす固有値方程式は

$$A^{(H)}(\mathcal{U}^\dagger(t)|a'\rangle) = \mathcal{U}^\dagger(t)A(0)\mathcal{U}(t)\mathcal{U}^\dagger(t)|a'\rangle = a'(\mathcal{U}^\dagger(t)|a'\rangle) \tag{24}$$

より、固有ケットは時間とともに変化する $\mathcal{U}^\dagger(t)|a'\rangle$ であるから、これを基底ケットに選ぶと基底ケットは時間変化する。

2.3　調和振動子

エネルギー固有ケットとエネルギー固有値　調和振動子の固有ケットとエネルギー固有値を求める。

ハミルトニアン H は次の通りである。

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{25}$$

ここで、消滅演算子 a、生成演算子 $a^\dagger$、個数演算子 N を次のように定義する。

$$a \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x + \frac{ip}{m\omega}) \tag{26}$$

$$a^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x - \frac{ip}{m\omega}) \tag{27}$$

$$N \equiv a^\dagger a = \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \tag{28}$$

これより、H と N には以下の関係が成立する。

$$H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2}) \tag{29}$$

N の固有値 n に属する固有ケットは次式を満たす。

$$N|n\rangle = n|n\rangle \tag{30}$$

ここで、N と H の関係より、

$$H|n\rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega|n\rangle \tag{31}$$

であるから、$|n\rangle$ は H の固有ケットでもあり、エネルギー固有値

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \tag{32}$$

に属することがわかる。

n および $|n\rangle$ の満たすべき条件は a や $a^\dagger$ について検討することにより得られる。

$$[a, a^\dagger] = 1 \tag{33}$$

$$[N, a] = -a \tag{34}$$

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger \tag{35}$$

となることから、

$$Na^\dagger|n\rangle = ([N, a^\dagger] + a^\dagger N)|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle \tag{36}$$

$$Na|n\rangle = ([N, a] + aN)|n\rangle = (n-1)a|n\rangle \tag{37}$$

となり、$a^\dagger|n\rangle$ は N の固有値 $n+1$ に属する固有ケット、$a|n\rangle$ は N の固有値 $n-1$ に属する固有ケットである。

これより、

$$a|n\rangle = c|n-1\rangle \tag{38}$$

とおいて、数定数 c を決定する。両辺の内積をとると、

$$\langle n|a^\dagger a|n\rangle = \langle n|N|n\rangle = n = |c|^2 \tag{39}$$

より、c を正の実数にとると

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \tag{40}$$

また、この結果より

$$\frac{1}{\sqrt{n+1}} a|n+1\rangle = |n\rangle \tag{41}$$

であるから、両辺に $a^\dagger$ を左からかけて整理すると

$$\frac{1}{\sqrt{n+1}}a^\dagger a|n{+}1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}N|n{+}1\rangle = \frac{n+1}{\sqrt{n+1}}|n{+}1\rangle = \sqrt{n+1}|n{+}1\rangle = a^\dagger|n\rangle \tag{42}$$

従って

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \tag{43}$$

が得られた。

ここで、$a|n\rangle$ のノルムが負でないことを要請すると、

$$\langle n|a^\dagger a|n\rangle = \langle n|N|n\rangle = n \geq 0 \tag{44}$$

となり、n は 0 以上でなければならないことがわかる。さらに、$|n\rangle$ に a を次々にかけていくとき、r を正の整数として

$$a^r|n\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)...(n-r+1)}|n-r\rangle \tag{45}$$

であるから、$n \geq 0$ の条件が守られるためには n は負でない整数でなくてはならない。n が負でない整数のときは、$|n\rangle$ に a を次々にかけて得られるケットの列の最後で

$$a|0\rangle = 0 \tag{46}$$

となり、$n \geq 0$ に反するような N の固有ケットは作り出されない。

以上のことより、調和振動子のエネルギー固有状態は、基底状態は $n = 0, |0\rangle$ であり、これに次々に生成演算子をかけていくことにより、$|n\rangle$ を

$$|n\rangle = (\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}})|0\rangle \tag{47}$$

と構成することができる。

最後に、エネルギー固有状態の位置空間での波動関数を具体的に求める。

基底状態については

$$\langle x'|a|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\langle x'|x + \frac{ip}{m\omega}|0\rangle = 0 \tag{48}$$

であるから、

$$\langle x'|p|\alpha\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle \tag{49}$$

に注意すると、微分方程式

$$(x' + x_0^2\frac{d}{dx'})\langle x'|0\rangle = 0, \quad x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{50}$$

が得られるので、これを解いて規格化すると

$$\langle x'|0\rangle = (\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}})\exp(-\frac{1}{2}(\frac{x'}{x_0})^2) \tag{51}$$

となる。

励起状態については生成演算子により次々と微分を実行することにより、

$$\langle x'|n\rangle = \langle x'|(\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}})|0\rangle = (\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}})(\frac{1}{x_0^{n+1/2}})(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'})^n \exp(-\frac{1}{2}(\frac{x'}{x_0})^2) \tag{52}$$

と得られる。

振動子の時間的発展

2.4 シュレーディンガーの波動方程式

時間に依存する波動方程式 ハミルトニアン H を次式のようにとる。

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \tag{53}$$

このときポテンシャル $V(\mathbf{x})$ はエルミート演算子でかつ局所的

$$\langle \mathbf{x}"|V(\mathbf{x})|\mathbf{x}'\rangle = V(\mathbf{x}')\delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x}"), \quad V(\mathbf{x}') \text{ は } \mathbf{x}' \text{の実関数} \tag{54}$$

にとる。

ここで、シュレーディンガー表示で位置固有ブラは時間に依存しないことより、状態ケットに対するシュレーディンガー方程式を x-基底であらわしたものは次のようにかける。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle \mathbf{x}'|\alpha, t_0; t\rangle = \langle \mathbf{x}'|H|\alpha, t_0; t\rangle \tag{55}$$

この式の右辺は

$$-(\frac{\hbar^2}{2m})\nabla'^2\langle \mathbf{x}'|\alpha, t_0; t\rangle + V(\mathbf{x}')\langle \mathbf{x}'|\alpha, t_0; t\rangle \tag{56}$$

である。これより、波動関数 $\langle \mathbf{x}'|\alpha, t_0; t\rangle$ を $\psi(\mathbf{x}', t)$ と書けば、シュレーディンガーの時間に依存する波動方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}', t) = -(\frac{\hbar^2}{2m})\nabla'^2\psi(\mathbf{x}', t) + V(\mathbf{x}')\psi(\mathbf{x}', t) \tag{57}$$

が得られる。

時間に依存しない波動方程式 エネルギー固有状態についてのシュレーディンガー方程式を検討する。

H と交換するオブザーバブル A の時刻 t における固有状態の時間依存性は、

$$|a', t_0; t\rangle = \exp(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar})|a'\rangle \tag{58}$$

である。これを時間に依存するシュレーディンガー方程式に代入すると

$$-(\frac{\hbar^2}{2m})\nabla'^2\langle\mathbf{x}'|a'\rangle + V(\mathbf{x}')\langle\mathbf{x}'|a'\rangle = E_{a'}\langle\mathbf{x}'|a'\rangle \tag{59}$$

となる。

ここでは A を $\mathbf{x}$ と $\mathbf{p}$ の関数として H と一致するように選ぶことができるから、A を具体的に示す必要はない。これより、得られた式からエネルギー固有関数 $u_E(\mathbf{x}')$ の満たす偏微分方程式である、時間に依存しないシュレーディンガーの波動方程式

$$-(\frac{\hbar^2}{2m})\nabla'^2 u_E(\mathbf{x}') + V(\mathbf{x}')u_E(\mathbf{x}') = E_{a'}u_E(\mathbf{x}') \tag{60}$$

が得られる。

波動関数の解釈

古典的極限

半古典的 (WKB) 近似