# シッフ　量子力学

## 12□自由な波束の一次元運動


12-1　不確定性の積の最小値
12-2　最小波束の形
12-3　運動量固有関数による展開係数
12-4　最小波束の時間による変化



ノート by 若林


自由な波束　$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$

不確定さ $\Delta x$, $\Delta p$ の定義 ⟶ 平均からの2乗のズレの平均

$$
\begin{cases}
(\Delta x)^2 = \langle (x-\langle x\rangle)^2\rangle = \langle x^2\rangle - 2\langle x \overset{\text{定数}}{\langle x\rangle}\rangle + \langle\langle x\rangle^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 \\
(\Delta p)^2 = \langle (p-\langle p\rangle)^2\rangle = \qquad = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2
\end{cases}
$$

ここで

$$\alpha = x - \langle x\rangle \quad , \quad \beta = p - \langle p\rangle = -i\hbar\left[\frac{d}{dx} - \underbrace{\left\langle\frac{d}{dx}\right\rangle}_{\text{純虚定数}}\right]$$

とおく。

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\alpha^2\psi\,dx\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\beta^2\psi\,dx$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty}(\alpha^*\psi^*)(\alpha\psi)\,dx\int_{-\infty}^{\infty}(\beta^*\psi^*)(\beta\psi)\,dx$$

ここで、$\alpha = \alpha^*$ ; 実数　及び、部分積分により、

$$\int\psi^*\beta^2\psi\,dx = -i\hbar\int\psi^*\left[\frac{d}{dx} - \left\langle\frac{d}{dx}\right\rangle\right](\beta\psi)\,dx$$
$$= -i\hbar\left[\psi^*\beta\psi\right]_{-\infty}^{\infty} + i\hbar\int\frac{d\psi^*}{dx}(\beta\psi)\,dx + i\hbar\int\psi^*\left\langle\frac{d}{dx}\right\rangle\beta\psi\,dx$$
$$= i\hbar\int\left\{\left[\frac{d}{dx} + \left\langle\frac{d}{dx}\right\rangle\right]\psi^*\right\}(\beta\psi)\,dx$$
$$= \int(\beta^*\psi^*)(\beta\psi)\,dx$$

を用いた。

そこで、積分公式

$$\int\left|f - g\frac{\int fg^*dx}{\int|g|^2dx}\right|^2 dx \geqq 0 \ ,$$

等号は $f = \gamma g$ , $\gamma$ : 定数 のときに限る。

より

$$\int|f|^2dx\int|g|^2dx \geqq \left|\int f^*g\,dx\right|^2$$

であるから。

ここで　$f = \alpha\psi$ , $g = \beta\psi$ 　とおくと、

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq \left|\int(\alpha^*\psi^*)(\beta\psi)\,dx\right|^2 = \left|\int\psi^*\alpha\beta\psi\,dx\right|^2$$ とかける。

$$= \left|\int\psi^*\left[\frac{1}{2}(\alpha\beta-\beta\alpha)+\frac{1}{2}(\alpha\beta+\beta\alpha)\right]\psi\,dx\right|^2$$

$$= \frac{1}{4}\left|\int\psi^*(\alpha\beta-\beta\alpha)\psi\,dx\right|^2+\frac{1}{4}\left|\int\psi^*(\alpha\beta+\beta\alpha)\psi\,dx\right|^2$$

$$+\frac{1}{4}\left(\int\psi^*(\alpha\beta-\beta\alpha)\psi\,dx\right)^*\int\psi(\alpha\beta+\beta\alpha)\psi\,dx$$

$$+\frac{1}{4}\left(\int\psi^*(\alpha\beta+\beta\alpha)\psi\,dx\right)^*\int\psi(\alpha\beta-\beta\alpha)\psi\,dx$$

ここで

$$\left(\int\psi^*\alpha\beta\psi\,dx\right)^* = \int\psi\alpha^*\beta^*\psi^*\,dx = \int(\beta^*\psi^*)(\alpha\psi)\,dx$$

$$= i\hbar\int\left\{\left[\frac{d}{dx}+\left\langle\frac{d}{dx}\right\rangle\right]\psi^*\right\}(\alpha\psi)\,dx$$

$$= -i\hbar\int\psi^*\frac{d}{dx}(\alpha\psi)\,dx + i\hbar\int\psi^*\left\langle\frac{d}{dx}\right\rangle\alpha\psi\,dx$$

$$= -i\hbar\int\psi^*\left[\frac{d}{dx}-\left\langle\frac{d}{dx}\right\rangle\right](\alpha\psi)\,dx$$

$$= \int\psi^*\beta\alpha\psi\,dx$$

同様に

$$\left(\int\psi^*\beta\alpha\psi\,dx\right)^* = \int\psi^*\alpha\beta\psi\,dx$$

の2つの関係を使うと、

最後の2つの項は打ち消し合って0となる。

$$\therefore\ (\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq \frac{1}{4}\underbrace{\left|\int\psi^*(\alpha\beta-\beta\alpha)\psi\,dx\right|^2}_{\downarrow\ \hbar^2}+\frac{1}{4}\underbrace{\left|\int\psi^*(\alpha\beta+\beta\alpha)\psi\,dx\right|^2}_{\geq 0}$$



ここで、

$$(\alpha\beta-\beta\alpha)\psi = -i\hbar\alpha\left[\frac{d}{dx}-\left\langle\frac{d}{dx}\right\rangle\right]\psi$$

$$+i\hbar\left[\frac{d}{dx}-\left\langle\frac{d}{dx}\right\rangle\right]\alpha\psi$$

$\left\langle\frac{d}{dx}\right\rangle$：定数

$$= -i\hbar\left[\alpha\frac{d\psi}{dx}-\frac{d}{dx}(\alpha\psi)\right]$$

$$= i\hbar\psi$$

であるから、

$$\int\psi^*(\alpha\beta-\beta\alpha)\psi\,dx = i\hbar\int|\psi|^2dx = i\hbar$$

よって、右辺の第一項は $\hbar^2/4$，第2項は、正数であるから

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq \hbar^2/4$$

∴ 不確定性原理 $\Delta x\cdot\Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

---

不確定性が最小になる（等号が成り立つ）のは、

$$\begin{cases} \text{a)} & \alpha\psi = \gamma\beta\psi & (f=\gamma g) \\ \text{b)} & \int\psi^*(\alpha\beta+\beta\alpha)\psi\,dx = 0 & (\text{第2項}=0) \end{cases}$$

の2つの条件が成り立つときのみ。

α, βの定義をa)に代入して、

$$(x-\langle x\rangle)\psi = -i\hbar\gamma\left[\frac{d\psi}{dx}-\left\langle\frac{d}{dx}\right\rangle\psi\right]$$

$$= -i\hbar\gamma\frac{d\psi}{dx}-\gamma\langle p\rangle\psi$$

これより ψ についての微分方程式を得る。

$$\frac{d\psi}{dx} = \left[ \frac{i(x-\langle x\rangle)}{\gamma\hbar} + \frac{i\langle P\rangle}{\hbar} \right]\psi$$

積分できて

$$\psi(x) = N\exp\left[ \frac{i(x-\langle x\rangle)^2}{2\gamma\hbar} + \frac{i\langle P\rangle x}{\hbar} \right] \quad , N: 規格化定数$$

一方 条件(b)を(a)で書きかえると、

$$\int \psi^*(\alpha\beta+\beta\alpha)\psi\, dx = \int \psi^*\alpha\beta\psi\, dx + \left(\int \psi^*\alpha\beta\psi\, dx\right)^*$$

$$= \frac{1}{\gamma}\int \psi^*\alpha^2\psi\, dx + \left(\frac{1}{\gamma}\int \psi^*\alpha^2\psi\, dx\right)^*$$

$$= \left(\frac{1}{\gamma} + \frac{1}{\gamma^*}\right) \underbrace{\int \psi^*\alpha^2\psi\, dx}_{(\Delta x)^2}$$

$$= 0$$

不確定性原理を満たす条件のもとでは $(\Delta x)^2$ が 0になり得ないこと
規格化積分 $\int |\psi|^2 dx$ が 波束$\psi$の場合 収斂しなければならないことから、
$\gamma$ は 負の純虚数でなくてはならぬ。

規格化　$\gamma = -i\xi$，$\xi > 0$ とおくと、

$$\int |\psi|^2 dx = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{(x-\langle x\rangle)^2}{\hbar\xi}\right] dx = N^2\sqrt{\pi\hbar\xi} = 1$$

$$\int (x-\langle x\rangle)^2 |\psi|^2 dx = N^2 \int_{-\infty}^{\infty} s^2 \exp\left[-\frac{s^2}{\hbar\xi}\right] dx = N^2\frac{(\hbar\xi)^{3/2}\sqrt{\pi}}{2} = (\Delta x)^2$$

但し、$s = x - \langle x\rangle$ とおいた。

両式より　$\xi = 2(\Delta x)^2/\hbar$　即ち　$\gamma = -2i(\Delta x)^2/\hbar$　が定まり

規格化定数　$N = [2\pi(\Delta x)^2]^{-1/4}$　が求まる。

従って、自由な波束の波動関数は、$\langle x\rangle, \langle P\rangle$, と不確定さ$\Delta x$で記述できる。

$$\therefore\ \psi(x) = [2\pi(\Delta x)^2]^{-1/4} \exp\left[ -\frac{(x-\langle x\rangle)^2}{4(\Delta x)^2} + \frac{i\langle P\rangle x}{\hbar} \right]$$



12-3 時間を含む波動関数$\psi(x,t)$の運動量固有関数による展開

一次元運動量固有関数

① 箱：$u_k(x) = L^{-1/2} e^{ikx}$　，② δ関数：$u_k(x) = (2\pi)^{-1/2} e^{ikx}$

これに対応して、$\psi(x,t)$を次のように展開できるとする。

$$\psi(x,t) = \sum_k \underbrace{A_k}_{定数} \underbrace{e^{-iE_kt/\hbar}}_{時間変化} \underbrace{u_k(x)}_{空間変化} \quad \left( \text{or } \sum_k^{①} \longrightarrow \int^{②} dk \right)$$

このとき、$E_k = \dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$　とすれば、上の展開式は右定かれ、時間を含むSchrödinger方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

を満たす解となっている。

(pr) 代入して

$$\begin{cases} 左辺 = i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t} = \displaystyle\sum_k A_k e^{-iE_kt/\hbar}\, u_k(x)\, \boxed{E_k} \\ 右辺 = -\dfrac{\hbar}{2m}\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \displaystyle\sum_k A_k e^{-iE_kt/\hbar}\, u_k(x)\, \boxed{\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}} \end{cases} \quad \left( \because\ u_k(x) = Ne^{ikx},\ \frac{\partial^2 u_k}{\partial x^2} = -k^2 u_k(x) \right)$$

展開係数 $A_k$ は、$t=0$ のとき、展開式に左から $u_{k'}^*(x)$ をかけて
積分することによって得られる。時間依存の指数部分は$t=0$で1となる。

$$\int u_{k'}^*(x)\psi(x,0)\, dx = \int u_{k'}^*(x) \sum_k A_k u_k(x)\, dx$$

$$= \sum_k A_k \int u_{k'}^*(x) u_k(x)\, dx$$

$u_k(x)$ の規格直交性

$$= \sum_k A_k \delta_{k'k}$$

$$= A_{k'}$$

$A_k$が時間に無関係な定数であるから、

確率関数　$P(k) = |A_k e^{-iE_kt/\hbar}|^2 = |A_k|^2$　：常数

であり，$\langle P\rangle = \sum_p P\,P(k)$，$\langle \Delta P\rangle$ なども常数である。

## 12-4. 最小波束の時間変化

$t=0$ で $\langle x\rangle=\langle p\rangle=0$ , $\psi(x,0)$ が前々頁の結果で表されるとすると、

$$\psi(x,0)=\left[2\pi(\Delta x)^2\right]^{-1/4}\exp\left[-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2}\right].$$

任意の時刻 $t$ における $\psi(x,t)$ を $u_k(x)$ で展開したものは前頁で、

$$\left.\begin{aligned}&\psi(x,t)=\sum_k A_k e^{-iE_kt/\hbar}u_k(x) \qquad (\text{箱})\\ &\text{但し}\quad u_k(x)=L^{-1/2}e^{ikx},\quad E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\end{aligned}\right\}(*)$$

展開係数 $A_k$ を上の $\psi(x,0)$ から計算する。

$$A_k=\int u_k^*(x)\psi(x,0)\,dx$$

$$=\left[2\pi L^2(\Delta x)^2\right]^{-1/4}\int_{-L/2}^{L/2}\exp\left[-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2}+ikx\right]dx$$

平方完成

$$=\left[2\pi L^2(\Delta x)^2\right]^{-1/4}e^{-k^2(\Delta x)^2}\int_{-L/2}^{L/2}\exp\left[-\left(\frac{x}{2(\Delta x)}-ik(\Delta x)\right)^2\right]dx$$

ここで、$s=\dfrac{x}{2(\Delta x)}-ik(\Delta x)$ とおき、$L\gg\Delta x$ とすると

$$=\left[2\pi L^2(\Delta x)^2\right]^{-1/4}e^{-k^2(\Delta x)^2}\,2(\Delta x)\int_{-L/4(\Delta x)}^{L/4(\Delta x)}e^{-s^2}ds$$

ここで、波束が十分局在していて、$|x|>\frac{L}{2}$ では積分への寄与が小さいとすると、積分領域を $L/4(\Delta x)\to\infty$ までとってよいことになり、

$$=\frac{2(\Delta x)e^{-k^2(\Delta x)^2}}{\left[2\pi L^2(\Delta x)^2\right]^{1/4}}\sqrt{\pi}$$

$$\therefore\quad A_k=\left[\frac{8\pi(\Delta x)^2}{L^2}\right]^{1/4}e^{-k^2(\Delta x)^2}\qquad \text{— } (**)$$

結局任意の時刻 $t$ の波動関数は、(*) (**) より、

$$\psi(x,t)=\sum_k\underbrace{\left[\frac{8\pi(\Delta x)^2}{L^2}\right]^{1/4}e^{-k^2(\Delta x)^2}}_{A_k}\underbrace{e^{-\frac{i\hbar k^2t}{2m}}}_{\text{時間依存部分}}\underbrace{L^{-1/2}e^{ikx}}_{u_k(x)}$$



まとめて、

$$\psi(x,t)=\sum_k\frac{\left[8\pi(\Delta x)^2\right]^{1/4}}{L}\exp\left[-k^2(\Delta x)^2-\frac{i\hbar k^2t}{2m}+ikx\right]$$

もともと $k=\dfrac{2\pi n}{L}$ , $n$: 整数 (周期的境界条件) であり、ここで $L\to\infty$ とすると、$n\to$ 連続変数となり、$\sum_k\longrightarrow\dfrac{L}{2\pi}\int dk$ となる。

$$\psi(x,t)=\left[\frac{(\Delta x)^2}{2\pi^3}\right]^{1/4}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-k^2(\Delta x)^2-\frac{i\hbar k^2t}{2m}+ikx\right]dk$$

平方完成

$$=\left[\frac{(\Delta x)^2}{2\pi^3}\right]^{1/4}\exp\left[-\frac{x^2}{4\left\{(\Delta x)^2+\frac{i\hbar t}{2m}\right\}}\right]\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\left\{\left((\Delta x)^2+\frac{i\hbar t}{2m}\right)^{1/2}k-\frac{ix}{2\left((\Delta x)^2+\frac{i\hbar t}{2m}\right)^{1/2}}\right\}^2\right]dk$$

$$s=\left\{(\Delta x)^2+\frac{i\hbar t}{2m}\right\}^{1/2}k-\frac{ix}{2\left\{(\Delta x)^2+\frac{i\hbar t}{2m}\right\}^{1/2}}\qquad \text{とおくと、}$$

$$=\left[\frac{(\Delta x)^2}{2\pi^3}\right]^{1/4}\left\{(\Delta x)^2+\frac{i\hbar t}{2m}\right\}^{-1/2}\exp\left[-\frac{x^2}{4\left\{(\Delta x)^2+\frac{i\hbar t}{2m}\right\}}\right]\overbrace{\int_{-\infty}^{\infty}e^{-s^2}ds}^{\sqrt{\pi}}$$

故に波動関数

$$\therefore\ \psi(x,t)=(2\pi)^{-1/4}\left\{(\Delta x)+\frac{i\hbar t}{2m(\Delta x)}\right\}^{-1/2}\exp\left[-\frac{x^2}{4\left\{(\Delta x)^2+\frac{i\hbar t}{2m}\right\}}\right]$$

---

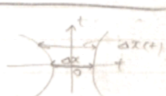
確率関数

$$|\psi(x,t)|^2=\left\{2\pi\left[(\Delta x)^2+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2(\Delta x)^2}\right]\right\}^{-1/2}\exp\left[-\frac{x^2}{2\left\{(\Delta x)^2+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2(\Delta x)^2}\right\}}\right]$$

---

$|\psi(x,0)|^2$ と比べると、次のように $(\Delta x)$ を置き換えた形となっている。

$$(\Delta x)^2\longrightarrow(\Delta x)^2+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2(\Delta x)^2}=(\Delta x)^2+\frac{(\Delta p)^2t^2}{m^2}$$




3頁前の $\psi(x)$ と比べるとわかるように、波束の位置 $\langle x\rangle$ は変わらず、時刻 $t$ の前後で波束の幅 $(\Delta x)$ が広がっている。不確定性原理から $t=0$ で $(\Delta x)$ が小さい程広がり方は大きい。