ブラウン運動論と量子力学（Ⅲ）

佐賀大・理工・化学　竹 山 尚 賢

（１０月１３日受理）

§１　調和振動子系の量子力学

$$i\hbar\,{}^{\partial\phi}\!/_{\partial t} = -\left({}^{\hbar^2}\!/_{2m}\right)\left({}^{\partial^2}\!/_{\partial q^2}\right)\phi + \left({}^{m\omega^2}\!/_{2}\right) q^2\phi \tag{1}$$

に対して，

$$\phi = A\,\exp\left({}^{iS}\!/_{\hbar}\right),\quad (A,\ S：実数) \tag{2}$$

ととり，次の連立式がえられる。

$$\left\{\left({}^{1}\!/_{2m}\right)\left({}^{\partial S}\!/_{\partial q}\right)^2 + {}^{\partial S}\!/_{\partial t}\right\} A - \left({}^{\hbar^2}\!/_{2m}\right)\left({}^{\partial^2}\!/_{\partial q^2}\right) A + \left({}^{m\omega^2}\!/_{2}\right) q^2 A = 0, \tag{3·a}$$

$${}^{\partial A}\!/_{\partial t} + \left({}^{1}\!/_{m}\right)\left({}^{\partial S}\!/_{\partial q}\right)\left({}^{\partial A}\!/_{\partial q}\right) + \left({}^{1}\!/_{2m}\right) A \left({}^{\partial^2}\!/_{\partial q^2}\right) S = 0. \tag{3·b}$$

ここに問題があるというのではなく，演習問題的レベルであるが，（3·a）から波群の重心の古典的運動を抜き出し，全体としては波群に対する一つの波動方程式（Aに対する）が出ることをみながら，我々の問題に進んでいきたい。

いま，（3·b）で

$${}^{\partial A}\!/_{\partial t} = -\left({}^{\partial A}\!/_{\partial q}\right)\dot{Q}(t) \tag{4}$$

すなわち

$$A = A\left[(q - Q(t))\right] \tag{4'}$$

ととることにしよう。（3·b）は

$$\left\{-\dot{Q}(t) + \left({}^{1}\!/_{m}\right)\left({}^{\partial S}\!/_{\partial q}\right)\right\} A^2 = \text{const.} \tag{3·b'}$$

と積分されるが，波動関数が有界ということで積分定数はゼロととれるから，結局，

$$({}^{1}/_{m})\ {}^{\partial S}/_{\partial q} = \dot{Q}(t), \tag{5·a}$$

あるいは

$$S = m\dot{Q}(t)\,q + \widetilde{S}(t), \tag{5·b}$$

$\widetilde{S}(t)$ は t のみの関数。

また，

$${}^{\partial S}/_{\partial t} = m\ddot{Q}(t)\,q + {}^{d\widetilde{S}}/_{dt}. \tag{5·c}$$

(5·a)，(5·c) を (3·a) に代入，$({}^{m}/_{2}) \times \omega^{-2}\ \ddot{Q}^{\,2} A$ を加減して次式がえられる。

$$\left\{ ({}^{m}/_{2})\,\dot{Q}^{2} - ({}^{m}/_{2\omega^2})\,\ddot{Q}^{2} + {}^{d\widetilde{S}}/_{dt} \right\} A$$
$$- ({}^{\hbar^2}/_{2m})\,({}^{\partial^2}/_{\partial q^2})\,A + ({}^{m\omega^2}/_{2})\,(q + \omega^{-2}\ddot{Q})^2 A = 0。\tag{6}$$

(4′) のように q の原点を c 一数 Q(t) だけずらしたことに対応して，(6) は次の固有値方程式となっているとみられる。

$$- EA - ({}^{\hbar^2}/_{2m})\ {}^{\partial^2 A}/_{\partial(\triangle q)^2}$$
$$+ ({}^{m\omega^2}/_{2})\,(\triangle q)^2 A = 0. \tag{6·a}$$

ただし，$\triangle q = q - Q(t)$。このとき，

$$\ddot{Q} = -\omega^2 Q, \tag{6·b}$$

$$E = -{}^{d\widetilde{S}}/_{dt} - ({}^{m}/_{2})\,\dot{Q}^{2} + ({}^{m\omega^2}/_{2})\,Q^2, \tag{6·c}$$

であらねばならないこととなる。(6·a) は衆知のように解かれて

$$E_n = (n + {}^{1}/_{2})\,\hbar\omega,$$
$$A_n = ({}^{m\omega}/_{\pi\hbar})^{1/4}\,(2^{n/2}\sqrt{n!})^{-1}\,H_n\left(\triangle q\sqrt{{}^{m\omega}/_{\hbar}}\right) \times \tag{7}$$
$$\times \exp\left(-m\omega\triangle q^2/\hbar\right)$$

が，n＝0，1，2，…… に対して求まっている。Schrödinger 方程式 (1) から波群のエネルギーの期待値を求めるには

$$\langle H\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* H \phi \, dq = i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \partial\phi/\partial t \, dq, \tag{8}$$

を（2）により

$$= -\,i\hbar\,\dot{Q} \int_{-\infty}^{+\infty} A\, \partial A/\partial q \, dq$$

$$-\int_{-\infty}^{+\infty} A^2\, \partial S/\partial t \, dq \tag{8·a}$$

として求めればよい。この右辺第1項は消えるから，結局，次の関係が成立する。

$$\begin{aligned}\langle H\rangle &= -\int_{-\infty}^{+\infty} A^2\, \partial S/\partial t \, dq \\ &= -\,m\ddot{Q} \int_{-\infty}^{+\infty} A^2 \cdot \Delta q \; d(\Delta q) \\ &\quad -\,m\ddot{Q} \int_{-\infty}^{+\infty} A^2\, Q\, d(\Delta q) \\ &\quad -\int_{-\infty}^{+\infty} A^2\, d\tilde{S}/dt \; d(\Delta q)\end{aligned} \tag{8·b}$$

ここで A，$\tilde{S}$ は，（7）のもとでの（6·c）を用い，（6·b）に注意して，

$$\langle H\rangle = (n + 1/2)\,\hbar\omega + \{(m/2)\,\dot{Q}^2 + (m\omega^2/2)\,Q^2\} \tag{8·c}$$

となる。（8·b）の右辺第1項は消える。

（8·c）は量子論的調和振動子のエネルギーと波群の重心の古典的調和振動のエネルギーの単純和であり，両階層のエネルギー間には定まった移行関係はない。それは，（6·b）のもとでは，$Q = Q_0 \cos(\omega t + \delta)$ であるが，Q_0 も δ も不定の任意定数であるからである。

（4 or 4′）の条件のもとで，すなわち

$$\partial A/\partial t = -(1/m)\,(\partial A/\partial q)\,(\partial S/\partial q), \tag{9}$$

のもとで（3·b）から，Sが求まり，（3·a）は波群に対する定常の波動方程式（6·a）となったことを注意したい。

§2　調和振動子系に対する拡散の運動学的理論の適用

（2）に代り，

$$\psi = \exp(R/\hbar)\ \exp(iS/\hbar) \qquad (10)$$

ととると，（3・a），（3・b）は次の２式となる。

$$(1/2m)(\partial S/\partial q)^2 + \partial S/\partial t + (m\omega^2/2)q^2$$
$$= (1/2m)(\partial R/\partial q)^2 + (\hbar/2m)(\partial^2 R/\partial q^2), \qquad (11\cdot a)$$

$$\partial R/\partial t + (1/m)(\partial S/\partial q)(\partial R/\partial q)$$
$$= -(\hbar/2m)(\partial^2 S/\partial q^2). \qquad (11\cdot b)$$

（11・b）は，（9）からの，

$$\left.\begin{aligned} &\partial R/\partial t = -(1/m)(\partial R/\partial q)(\partial S/\partial q), \\ &\partial S/\partial q = m\dot{Q}(t) \end{aligned}\right\} \qquad (12)$$

をとると div grad S＝0 となり

$$S = m\dot{Q}(t)\,q + \tilde{S}(t) \qquad (13)$$

と求まる。一方，

$$\partial R/\partial q = m\vec{u} \qquad (14)$$

を導入して，（11・a）は

$$(m/2)\dot{Q}^2 - (m/2\omega^2)\ddot{Q}^2 + d\tilde{S}/dt$$
$$= (m/2)u^2 + (\hbar/2)\,\partial\vec{u}/\partial q - (m\omega^2/2)(q + \omega^{-2}\ddot{Q})^2, \qquad (15)$$

となる。これは

$$\ddot{Q} = -\omega^2 Q\ ;\ \Delta q = q - Q(t) \qquad (16)$$

に対して

$$(m/2)\dot{Q}^2 - (m\omega^2/2)Q^2 = L_c \qquad (17)$$

であるから，

$$L_c + d\tilde{S}/dt$$
$$= (m/2)u^2 + (\hbar/2)\,\partial\vec{u}/\partial(\Delta q) - (m\omega^2/2)(\Delta q^2) \qquad (18)$$

に他ならない。Lc は古典的調和振動子に対する Lagrange 関数。これが（6・a）と同等な式であり．

$$-d\tilde{S}/dt = E + L_c, \tag{18・a}$$

となり，ここに

$$E = -\underline{\underline{\{(m/2)u^2 + (\hbar/2)\,\partial\vec{u}/\partial(\triangle q)\}}} + (m\omega^2/2)(\triangle q)^2 \tag{18・b}$$

$$= -\underline{\underline{(\hbar^2/2m)\{\partial^2 A/\partial(\triangle q)^2\}/A}} + (m\omega^2/2)(\triangle q)^2 \tag{18・c}$$

2重の下線を付した項は相等しく，"量子ポテンシャル"に他ならず，その存在により，（18・c）はAに対する固有値方程式 $HA = EA$ となっていることがわかる。従って，$-(d\tilde{S}/dt + L_c) = E$ により波群の運動に対する運動の定数Eが導入され，かつEは（18・c）を満す固有エネルギー値

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega \qquad (n：非負の\ \text{integer})$$

であり，A_n とともに（7）で与えたものである。従って，（18・b）を $\vec{u} = (\partial R/\partial(\triangle q))/m = (\hbar/m)(\partial \ell n A/\partial(\triangle q))$ なる"拡散速度"について解き，その速度ポテンシャルからAを求めることと全く同等である。

波群の運動の量子力学的期待値は，（8）による（8・a，b & c）と同様に，

$$\begin{aligned}\langle H\rangle &= i\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(2R/\hbar)(\partial R/\partial t)\,d(\triangle q) \\ &\quad -\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(2R/\hbar)(\partial S/\partial t)\,d(\triangle q) \\ &= +m\omega^2 Q^2 + L_c + E_n \\ &= (m/2)\dot{Q}^2 + (m\omega^2/2)Q^2 + (n + 1/2)\hbar\omega \\ &= m\omega^2(\overline{Q^2} + \langle(\triangle q)^2\rangle).\end{aligned} \tag{19}$$

< > は量子力学的期待値，バーは時間平均値を示す。<H> には量子論的波群のひろがりと古典論的振動のひろがりとによってきまる両階層のエネルギ

一が寄与するが，寄与の程度は一義的には決らない。

以上，初等レベルの問題について，Sにより波群の重心の古典的運動を抜き出し，確率振幅Aについての“量子ポテンシャル”と定常状態の固有値方程式との関係をしらべた。

要点は（18・b）と（18・c）との同等性である。