

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

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = - \left(\hbar^2 / 2m \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial q^2} \right) \phi + \left(m \omega^2 / 2 \right) q^2 \phi \quad (1)$$

に対して,

$$\phi = A \exp (iS/\hbar), \quad (A, S: \text{実数}) \quad (2)$$

ととり, 次の連立式がえられる。

$$\left\{ \left(1/2m \right) \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + \frac{\partial S}{\partial t} \right\} A - \left(\hbar^2 / 2m \right) \left(\frac{\partial^2}{\partial q^2} \right) A + \left(m \omega^2 / 2 \right) q^2 A = 0, \quad (3 \cdot a)$$

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \left(1/m \right) \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right) \left(\frac{\partial A}{\partial q} \right) + \left(1/2m \right) A \left(\frac{\partial^2}{\partial q^2} \right) S = 0. \quad (3 \cdot b)$$

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

$$\frac{\partial A}{\partial t} = - \left(\frac{\partial A}{\partial q} \right) \dot{Q}(t) \quad (4)$$

すなわち

$$A = A [(q - Q(t))] \quad (4')$$

ととることにしよう。(3・b)は

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

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、

$$(1/m) \partial S / \partial q = \dot{Q}(t), \quad (5 \cdot a)$$

あるいは

$$S = m \dot{Q}(t) q + \tilde{S}(t), \quad (5 \cdot b)$$

$\tilde{S}(t)$ は t のみの関数。

また、

$$\partial S / \partial t = m \ddot{Q}(t) q + d\tilde{S}/dt. \quad (5 \cdot c)$$

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

$$\begin{aligned} & \{ (m/2) \dot{Q}^2 - (m/2\omega^2) \ddot{Q}^2 + d\tilde{S}/dt \} A \\ & - (\hbar^2/2m) (\partial^2 / \partial q^2) A + (m\omega^2/2) (q + \omega^{-2} \ddot{Q})^2 A = 0. \quad (6) \end{aligned}$$

(4') のように q の原点を c -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。

$$\begin{aligned} & -EA - (\hbar^2/2m) \partial^2 A / \partial (\Delta q)^2 \\ & + (m\omega^2/2) (\Delta q)^2 A = 0. \quad (6 \cdot a) \end{aligned}$$

ただし, $\Delta q = q - Q(t)$ 。このとき、

$$\ddot{Q} = -\omega^2 Q, \quad (6 \cdot b)$$

$$E = -d\tilde{S}/dt - (m/2) \dot{Q}^2 + (m\omega^2/2) Q^2, \quad (6 \cdot c)$$

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

$$\begin{aligned} E_n &= (n + 1/2) \hbar \omega, \\ A_n &= (m\omega/\pi\hbar)^{1/4} (2^{n/2} \sqrt{n!})^{-1} H_n(\Delta q \sqrt{m\omega/\hbar}) \times \\ & \times \exp(-m\omega \Delta q^2/\hbar) \end{aligned} \quad (7)$$

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

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

を (2) により

$$\begin{aligned} &= -i\hbar \dot{Q} \int_{-\infty}^{+\infty} A \partial A / \partial q \, dq \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} A^2 \partial S / \partial t \, dq \end{aligned} \quad (8.a)$$

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。

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

ここで $A, \tilde{S}$ は、(7) のもとでの (6.c) を使い、(6.b) に注意して、

$$\langle H \rangle = (n + 1/2) \hbar \omega + \left\{ (m/2) \dot{Q}^2 + (m\omega^2/2) Q^2 \right\} \quad (8.c)$$

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

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

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、

$$\phi = \exp(R/\hbar) \exp(iS/\hbar) \quad (10)$$

ととると, (3・a), (3・b) は次の 2 式となる。

$$\begin{aligned} & (1/2m) (\partial S/\partial q)^2 + \partial S/\partial t + (m\omega^2/2) q^2 \\ & = (1/2m) (\partial R/\partial q)^2 + (\hbar/2m) (\partial^2 R/\partial q^2), \end{aligned} \quad (11 \cdot a)$$

$$\begin{aligned} & \partial R/\partial t + (1/m) (\partial S/\partial q) (\partial R/\partial q) \\ & = -(\hbar/2m) (\partial^2 S/\partial q^2). \end{aligned} \quad (11 \cdot b)$$

(11・b) は, (9) からの,

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

をとると $\text{div grad } S = 0$ となり

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

と求まる。一方,

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

を導入して, (11・a) は

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

となる。これは

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

に対して

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

であるから,

$$\begin{aligned} & L_c + d\tilde{S}/dt \\ & = (m/2) u^2 + (\hbar/2) \partial \vec{u} / \partial (\Delta q) - (m\omega^2/2) (\Delta q)^2 \end{aligned} \quad (18)$$

竹山尚賢

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。

$$-\frac{d\tilde{S}}{dt} = E + L_c, \quad (18 \cdot a)$$

となり、ここに

$$E = - \frac{\left\{ (m/2) u^2 + (\hbar/2) \frac{\partial \vec{u}}{\partial (\Delta q)} \right\} + (m\omega^2/2) (\Delta q)^2}{\quad} \quad (18 \cdot b)$$

$$= - \frac{(\hbar^2/2m) \left\{ \frac{\partial^2 A}{\partial (\Delta q)^2} \right\} / A + (m\omega^2/2) (\Delta q)^2}{\quad} \quad (18 \cdot c)$$

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， $-(\frac{d\tilde{S}}{dt} + L_c) = E$ 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

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

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 $\vec{u} = (\partial R / \partial (\Delta q)) / m = (\hbar / m) (\partial \ell^{nA} / \partial (\Delta q))$ 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，

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

$\langle \rangle$ は量子力学的期待値，バーは時間平均値を示す。 $\langle H \rangle$ 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ー

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。