ガウス波束とそのダイナミクス

KENZOU

2006 年 3 月 4 日

まだレポートとしてまとめきっていない Henry&Thirring 著「初等場の量子論」の付録としてまとめていたものとて、本体のレポートがいつになったら纏まるのかたいへん不明瞭となりしゆえ、ここに一本のレポートとして載せることとしました。もとより独断・偏見、誤りなど多数ありと思われますが、見るけられればご一報いただくとありがたい。

1　古典論と量子論の対応関係

量子論と古典論との対応関係がどこまで成り立つかという問題を考えてみよう。この問題は、古くて新しい問題である。まず初めに、原子核の束縛から完全に開放された自由電子について考えてみよう。これは一見、粒子が運動量Pで運動している古典的状態に対応しているように見える。ところが、この状態は、運動量が確定しているから、不確定性原理から電子の位置については、∞の不確定性がある。つまりは、どこに粒子がいるのかまったく分からない完全な平面波の状態である。そうすると、この運動量の固有状態は、粒子が位置と速度をもって動いているという古典的な状態になんら対応してはいないことが分かる。それでは位置の固有状態ならば位置が確定しているだろうといえば、今度は運動量の不確定性が∞になって、これも古典状態からほど遠い。古典的状態とはけっして量子力学的エネルギーや運動量の固有状態に対応しているのではないことが分かる。古典的状態と対応させるには、位置、運動量など正準共役変数がある程度の範囲で、同時に決定できる状態でなければならない。ところが、ここで不確定性原理、いいかえれば交換関係、$[x, p_x] = i$ が、量子－古典対応の“ 邪魔をしている ”のである。これが第 1 の関門である。この関門をなんとか逃れるためにどうすればいいかといえば、それは位置や運動量の固有状態ではなく、その多数の重ね合わせである波束をつくって、両者の非同時決定性を見かけ上、緩和してやることである。古典的状態とはけっして量子力学的にエネルギーや運動量が確定した状態ではなく、ぼんやりした波束の中心の運動であると考えることである。こう考えると、位置も運動量もある程度ぼんやりしているが、波動関数は位置空間でも運動量空間でも滑らかな山を作っているから、平均値では両者がほどよい調和 (?) を保ち、ある程度の同時測定が可能な状態になるだろう。**』**
以上, 「スペクトロアセニアム　知の現代」より引用させていただきました。素晴らしい解説ですね。

2　ガウス波束 (最小波束) について

簡単のために $-L/2 \le x \le L/2$ に閉じ込められた 1 次元自由粒子を考える。この粒子の時間を含む波動関数は $Shrödinger$ の方程式を解いて

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{i(kx-Et/\hbar)}, \quad k = \frac{2\pi}{L}n \quad (n = 0, \pm1, \pm2, \cdots) \tag{1}$$

と求まる[1]。自由粒子の位置の期待値 $\langle x \rangle$ は

$$\langle x \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} dx\, \psi^* x\, \psi = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-i(kx - Et/\hbar)} x\, e^{i(kx-Et/\hbar)} = 0 \tag{2}$$

x の期待値は粒子の存在位置の平均値であるから、これがゼロということは、粒子が $-L/2 \leq x \leq L/2$ のあらゆる場所に均等に存在している、つまり場所によらず一定ということになる。一方、運動量の期待値 $\langle p \rangle$ は

$$\langle p \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} dx\, \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi = \hbar k \tag{3}$$

となって、位置としての運動が見られないのに運動量は持っているという、古典論な粒子像からはまったく想像できないできない状態である。平面波を重ね合わせると空間的に局在した波をつくれる。そこで、粒子性を考える場合、平面波を重ね合わせた波束をつくれば古典的粒子のイメージに近いものとなるだろう。

2.1 簡単な波束の例

時刻 $t = 0$ での波動関数 $\psi(x)$ を平面波の重ね合わせであるフーリエ展開で表す。

$$\psi(x, 0) = \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k C_k e^{ikx} \tag{4}$$

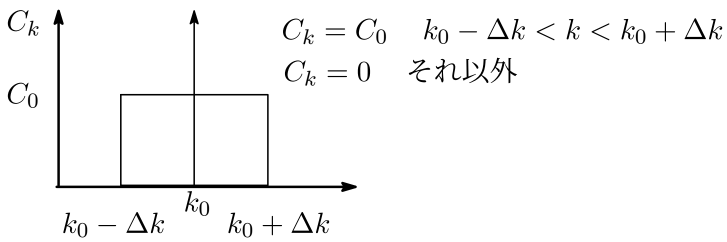


図 1: 一様な重ね合わせ

k_0 を中心に $(k_0 - \Delta k) \sim (k_0 + \Delta k)$ の範囲の平面波を一様に重ね合わせてつくった波束は

$$\psi(x) \propto \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} dk\, e^{ikx} = e^{ik_0 x} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} dk'\, e^{ik'} = 2e^{ik_0 x} \frac{sin(\Delta k x)}{x} \quad (k' = k - k_0) \tag{5}$$

となる。これは図.2 で示されるように $x = 0$ で急峻な山をもつ。波束の確率密度は

$$|\psi(x)|^2 \propto \left| \frac{sin(\Delta k\, x)}{x} \right|^2 \tag{6}$$

で、図.3 に示すように確率密度は原点周りに局在している。$x = \pm\pi/\Delta k$ で $|\psi(x)|^2$ がゼロとなるから、粒子の存在する範囲を Δx とすると $\Delta x = 2\pi/\Delta k$ となる[2]。ところで、$p = \hbar k$, $\hbar = h/2\pi$ であるからこの関係は $\Delta x \Delta p = h$ となり、不等号のない不確定性原理が成り立っていることを示している。つまり、位置も運動量もそこそこの精度で同時に測定できるということだから、まさに古典的粒子のイメージを描くことができるというわけである。

[1] これは平面波を表す。この状態は運動量の固有状態で、不確定性原理 ($\Delta x \Delta p \geq \hbar$) から位置はまったく不定となることを意味している。つまりハッキリした位置を持つ粒子というイメージはどこにもでてこない！

[2] $\Delta x \Delta k = 2\pi$ この位置と波数の関係は $Heisenberg$ の不確定性原理を想起させるが、これは Fourie 展開から帰結されることで量子論とは関係ない。量子力学では位置と ”運動量 ”の不確定性に驚きが走ったということである。

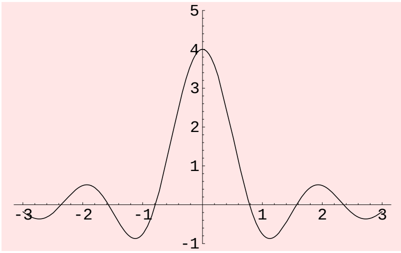


図 2: 波束の例

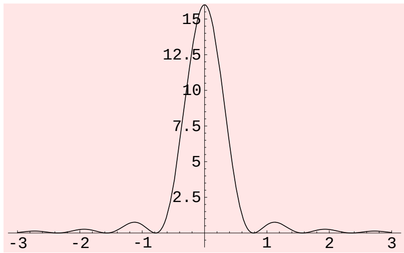


図 3: 波束の確率密度

2.2 ガウス波束

古典的な粒子像に近い状態を作るのに k のわずかに異なる状態を重ね合わせればよかった。

確率密度関数

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

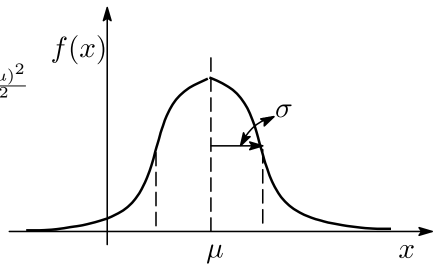


図 4: ガウス分布

その典型例として平面波を $C_k = (4\pi\sigma^2/L^2)^{\frac{1}{4}} exp[-\frac{\sigma^2}{2}(k-k_0)^2]$ という重ね合わせ係数で重ね合わせた状態を考えてみよう。この状態は (4) より

$$\begin{aligned}
\psi(x,0) &= L^{-\frac{1}{2}} \sum_k C_k e^{ikx} \\
&= L^{-1}(4\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}} \sum_k exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}(k-k_0)^2 + ikx\right] \\
&= \left(\frac{\sigma^2}{4\pi^3}\right)^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{\infty} dk\, exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}(k-k_0)^2 + ikx\right] \\
&= (\pi\sigma^2)^{-\frac{1}{4}} exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2} + ik_0 x\right]
\end{aligned} \tag{7}$$

(但し L が十分大きいとすると $L \to \infty$ で $\sum_k \longrightarrow \frac{L}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk$ と置き換えられることを使った。)

これはガウス分布であるから、この波束をガウス波束と呼んでいる。ガウス波束は後でわかるように、位置の拡がりと運動量の拡がりの不確定積が最小の $2\pi\hbar$ となることから「最小 (不確定) 波束」とも呼ばれる。粒子をみいだす確率密度は

$$\begin{aligned}
|\psi(x,0)|^2 &= \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{\frac{1}{2}}} exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2} - ik_0 x\right] \cdot exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2} + ik_0 x\right] \\
&= \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{\frac{1}{2}}} exp\left[-\frac{x^2}{\sigma^2}\right]
\end{aligned} \tag{8}$$

となる。これもガウス関数である。期待値は次の通り。

$$\langle x\rangle = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{\frac{1}{2}}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2}-ik_0x\right] x\, exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2}+ik_0x\right] = 0 \tag{9}$$

$$\langle x^2\rangle = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{\frac{1}{2}}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2}-ik_0x\right] x^2\, exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2}+ik_0x\right] = \frac{1}{2}\sigma^2 \tag{10}$$

$$\langle p\rangle = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{\frac{1}{2}}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2}-ik_0x\right]\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2}+ik_0x\right] = \hbar k_0 \tag{11}$$

$$\langle p^2\rangle = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{\frac{1}{2}}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2}-ik_0x\right]\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2}+ik_0x\right] = \hbar^2k_0^2+\frac{\hbar^2}{2\sigma^2} \tag{12}$$

位置と運動量の不確定性は次の通りとなる。

$$\langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = \frac{1}{2}\sigma^2, \quad \langle(\Delta p)^2\rangle = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{2\sigma^2} \tag{13}$$

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \tag{14}$$

ついでに波動関数 (7) の運動量表示を求めておく。運動量表示の波動関数 $\psi(p,0)$ は $\psi(x,0)$ のフーリエ変換

$$\psi(p,0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ipx/\hbar}\psi(x,0) \tag{15}$$

で定義されるから、(7) の運動量表示は

$$\begin{aligned}\psi(p,0) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}}\frac{1}{(\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2}+i\frac{p_0}{\hbar}x-i\frac{p}{\hbar}x\right]\\ &= \frac{1}{[\pi(\hbar/\sigma)^2]^{\frac{1}{4}}} exp\left[-\frac{(p-p_0)^2\sigma^2}{2\hbar^2}\right]\end{aligned} \tag{16}$$

ちなみに (15) の逆変換は

$$\psi(x,0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}}\int_{-\infty}^{\infty} dp\, e^{ipx/\hbar}\psi(p,0) \tag{17}$$

運動量 p を見出す確率は

$$|\psi(p,0)|^2 = \frac{1}{[\pi(\hbar/\sigma)^2]^{\frac{1}{2}}} exp\left[-\frac{(p-p_0)^2\sigma^2}{\hbar^2}\right] \tag{18}$$

で与えられる。運動量表示での位置座標 x は $x = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$ で与えられることに注意して[3]座標と運動量の期待値を求めると

$$\langle x\rangle = \frac{1}{[\pi(\hbar/\sigma)^2]^{\frac{1}{2}}}\int_{-\infty}^{\infty} dp\, exp\left[-\frac{(p-p_0)^2\sigma^2}{2\hbar^2}\right]\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right) exp\left[-\frac{(p-p_0)^2\sigma^2}{2\hbar^2}\right] = 0 \tag{19}$$

$$\langle x^2\rangle = \frac{1}{[\pi(\hbar/\sigma)^2]^{\frac{1}{2}}}\int_{-\infty}^{\infty} dp\, exp\left[-\frac{(p-p_0)^2\sigma^2}{2\hbar^2}\right]\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^2 exp\left[-\frac{(p-p_0)^2\sigma^2}{2\hbar^2}\right] = \frac{1}{2}\sigma^2 \tag{20}$$

$$\langle p\rangle = \frac{1}{[\pi(\hbar/\sigma)^2]^{\frac{1}{2}}}\int_{-\infty}^{\infty} dp\, exp\left[-\frac{(p-p_0)^2\sigma^2}{2\hbar^2}\right] p\, exp\left[-\frac{(p-p_0)^2\sigma^2}{2\hbar^2}\right] = p_0 \tag{21}$$

$$\langle p^2\rangle = \frac{1}{[\pi(\hbar/\sigma)^2]^{\frac{1}{2}}}\int_{-\infty}^{\infty} dp\, exp\left[-\frac{(p-p_0)^2\sigma^2}{2\hbar^2}\right] p^2\, exp\left[-\frac{(p-p_0)^2\sigma^2}{2\hbar^2}\right] = p_0^2+\frac{\hbar^2}{2\sigma^2} \tag{22}$$

[3]交換関係 $[x,\ p] = i\hbar$ は表示形式に関係なく成り立つ。$x \to i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$ とすると $[i\hbar\frac{\partial}{\partial p},\ p] = i\hbar$ となるから、運動量表示での位置座標は $i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$ で表示されることがわかる。

3　波束のダイナミクス

3.1　自由粒子

いよいよ波束の時間変化、ダイナミクスを調べていきましょう。簡単のために 1 次元 (長さ L) 空間の質量 m の自由粒子を取り上げる。時刻 $t=0$ での $\psi(x,0)$ を固有関数 $L^{-\frac{1}{2}}exp(ikx)$ で展開し、その波束がガウス型波束になったとする。

$$\psi(x,0)=(\pi\sigma^2)^{-\frac{1}{4}}exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2}+ik_0x\right]=L^{-\frac{1}{2}}\sum_k C_k e^{ikx} \tag{23}$$

展開係数 C_k は

$$C_k=\left(\frac{4\pi\sigma^2}{L^2}\right)^{\frac{1}{4}}exp\left[\frac{\sigma^2}{2}(k-k_0)^2\right] \tag{24}$$

となる。時刻 t における波動関数は $\psi(x,t)=e^{-iEt/\hbar}\psi(x)$ と書かれる。E は $\psi(x)$ の固有エネルギーであるから、$\psi(x,t)=L^{-\frac{1}{2}}\sum_k C_k e^{iE_kt/\hbar}e^{ikx}$ となる。これに (24) を入れて整理すると

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=L^{-\frac{1}{2}}\sum_k C_k e^{iE_kt/\hbar}e^{ikx}\\&=L^{-1}\sum_k(4\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}(k-k_0)^2+i\left(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t\right)\right]\\&=\left(\frac{\sigma^2}{4\pi^3}\right)^{\frac{1}{4}}\int_{-\infty}^{\infty}dk\,exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}(k-k_0)^2+i\left(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t\right)\right]\\&=(\pi\sigma^2)^{-\frac{1}{4}}\left(1+\frac{i\hbar t}{m\sigma^2}\right)^{-\frac{1}{2}}exp\left[-\frac{x^2-2i\sigma^2k_0x+(i\hbar tk_0^2\sigma^2/m)}{2\sigma^2+(2i\hbar t/m)}\right]\end{aligned} \tag{25}$$

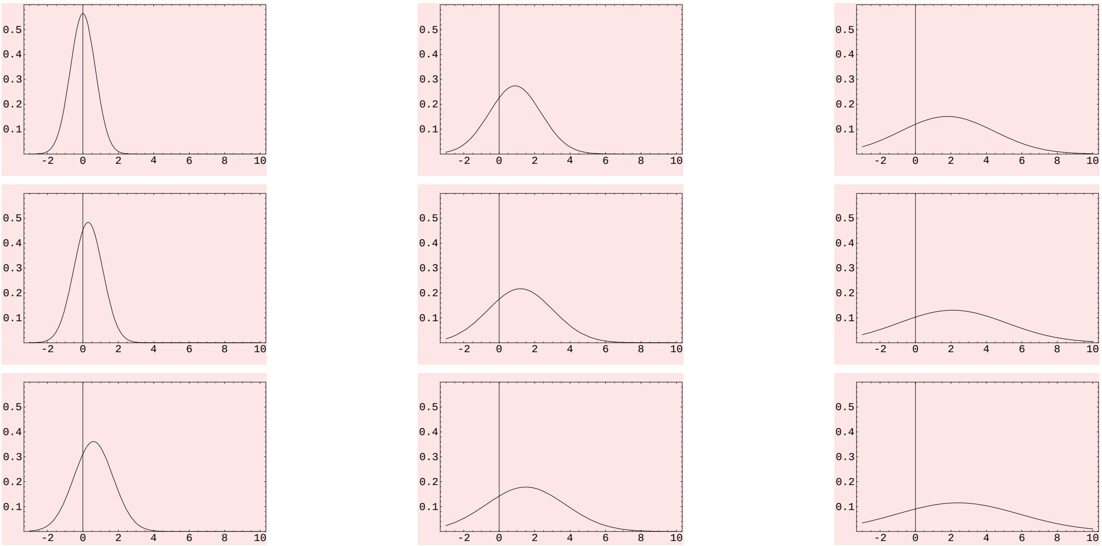
となる。ここで L を十分大きいとして $L\to\infty$ とすると

$$\sum_k\longrightarrow\frac{L}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dk \tag{26}$$

となることをつかった。確率密度関数は

$$|\psi(x,t)|^2=(\pi\sigma(t)^2)^{-\frac{1}{2}}exp\left[-\frac{(x-\hbar k_0t/m)^2}{\sigma(t)^2}\right],\quad \sigma(t)^2=\sigma^2\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{m^2\sigma^4}\right) \tag{27}$$

であり、中心が $\hbar k_0t/m$、幅が $\sigma(t)^2$ のガウス関数となる。中心位置は古典力学の等速運動に従っていることに注意しよう。波束の幅は $\sigma(t)^2$ に従って時間の経過とともに広がっていく。幅が広がるのは、この波束にはいろいろな位相速度 ($\hbar k/m$) をもった平面波の重ね合わせであるから、波形の形は徐々に崩れていくことになる。



3.2 1次元調和振動子ポテンシャル内の粒子

自由粒子の場合は時間とともにガウス波束が崩れていった。それでは調和振動子ポテンシャルが存在する場合はどうか。1次元調和振動子の場合について以下に調べていこう。時刻 $t = 0$ におけるガウス波束を

$$\psi(x,0) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} exp\left[-\frac{\alpha^2}{2}(x-\alpha)^2\right] \qquad (\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}) \tag{28}$$

とする。これは**ガウス分布の中心が原点から α の点にある**ことに留意しておこう。時刻の t における波動関数 $\psi(x,t)$ は固有関数 $\psi_n(x)$ で展開し、

$$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n\, e^{-iE_n t/\hbar}\psi_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n\, e^{-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega\, t}\psi_n(x) \tag{29}$$

となる。$\psi_n(x)$ は1次元調和振動子の固有関数で、$\psi_n(x) = N_n H_n(\alpha\, x)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$。$H_n(\xi)$ はエルミート多項式で $N_n = \sqrt{\alpha/\sqrt{\pi}2^n n!}$ である。$\xi = \alpha x,\ \xi_0 = \alpha a,$ とおき、展開係数 A_n を、(28) と (29) から求めると[4]

$$\begin{aligned} A_n &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)\psi(x,0)dx = N_n/\sqrt{\alpha\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}H_n(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\, e^{-\frac{1}{2}(\xi-\xi_0)^2}d\xi \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\int_{-\infty}^{\infty}H_n(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\, e^{-\frac{1}{2}(\xi-\xi_0)^2}d\xi \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\,\xi_0^n\, e^{-\frac{\xi_0^2}{4}} \end{aligned} \tag{30}$$

これを (29) に入れて整理すると

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}e^{\frac{1}{2}\xi^2-\frac{1}{4}\xi_0^2-\frac{1}{2}i\omega\, t}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{H_n(\xi)}{n!}\left(\frac{1}{2}\xi_0\, e^{-i\omega\, t}\right)^n \tag{31}$$

---

[4] Mathematica で一般式は求められず。そこで具体的な n の場合を求めると $\int_{-\infty}^{\infty}$ `HermiteH[5,x]e`$^{\xi^2/2}$`e`$^{-(\xi-\xi_0)^2/2}d\xi \longrightarrow e^{-\xi_0 2/4}\sqrt{\pi}\xi_0^5$ となり、`Hermite[n,ξ]` の n をいろいろ変えると ξ_0 の冪数がそれに対応して変わるだけということが分かる。

エルミート多項式 $H_n(\xi)$ の母関数表示[5]は

$$g(s,\xi) \equiv exp(2s\,\xi - s^2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n \tag{32}$$

これを使って (31) を整理すると、時刻 t における波動関数は

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} exp\left[-\frac{1}{2}\xi^2 - \frac{1}{4}\xi_0^2 - \frac{i}{2}\omega t - \frac{1}{4}\xi_0^2\, e^{-2i\omega\, t} + \xi\, \xi_0\, e^{-i\omega t}\right] \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} exp\left[-\frac{1}{2}(\xi - \xi_0\, cos\omega t)^2 - i\left(\frac{1}{2}\omega t + \xi\xi_0\, sin\omega t - \frac{1}{4}\xi_0^2\, sin2\omega t\right)\right]\end{aligned} \tag{33}$$

となる。確率密度関数は

$$\begin{aligned}|\psi(x,t)|^2 = \psi^*(x,t)\,\psi(x,t) &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} exp[-(\xi - \xi_0 cos\omega t)^2] \\ &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} exp[-\alpha^2(x - acos\omega t)^2]\end{aligned} \tag{34}$$

となる。これは $|\psi(x,t)|$ の形を変えず（←波束はつぶれない！）、波束の中心が古典的調和振動子の運動方程式にしたがって運動する。

（以上）

[5] $g(s,\xi)$ をエルミート多項式の母関数と呼ぶ。