

原子衝突研究協会誌 2011年第8巻第3号

しよくとつ

Journal of Atomic Collision Research



The Society for
**ATOMIC COLLISION
RESEARCH**

原子衝突研究協会 2011年5月15日発行
<http://www.atomiccollision.jp/>

原子衝突研究協会賛助会員(五十音順)

アイオーピー・パブリッシング・リミテッド (IOP英国物理学会出版局) <http://journals.iop.org/>

Institute *of* **Physics**

アステック株式会社

<http://www.astechnippon.co.jp/>

ASTECH
CORPORATION

有限会社 イーオーアール

<http://www.eor.jp/>



Electronics Optics Research Ltd.

株式会社 オプティマ

<http://www.optimacorp.co.jp/>

Optima Corp.

キャンベラジャパン株式会社

<http://www.canberra.com/jp/>



CANBERRA

クリムゾンインタラクティブプライベートリミテッド

<http://www.enago.jp/>

<http://ulatus.jp/>

<http://www.voxtab.jp/>

enago™

株式会社 サイエンス ラボラトリーズ

<http://www.scilab.co.jp/>



株式会社サイエンスラボラトリーズ

真空光学株式会社

<http://www.shinku-kogaku.co.jp/>

真空光学株式会社 – Vacuum & Optical Instruments –

スペクトラ・フィジックス株式会社

<http://www.spectra-physics.jp/>

Spectra-Physics®

A Newport Corporation Brand

ソーラボジャパン株式会社

<http://www.thorlabs.jp/>



ツジ電子株式会社

<http://www.tsujicon.jp/>



株式会社東京インストルメンツ

<http://www.tokyoinst.co.jp/>



株式会社東和計測

<http://www.touwakeisoku.ecnet.jp/>



株式会社トヤマ

<http://www.toyama-jp.com/>



株式会社 ナバテック

<http://www.navatec.co.jp/>

真空機器の未来と歩む

Navatec

仁木工芸株式会社

<http://www.nikiglass.co.jp/>



伯東株式会社

<http://www.g5-hakuto.jp/>



株式会社パスカル

<http://www.pascal-co-ltd.co.jp/>



丸菱実業株式会社

<http://www.ec-marubishi.co.jp/>

丸菱実業株式会社

MARUBISHI CORPORATION

株式会社メディア研究所

<http://mediken.jp/>

株式会社 **メディア研究所**



MEDIKEN INC.

株式会社 ラボラトリ・イクイップメント・コーポレーション

<http://www.labo-eq.co.jp/>



しょうとつ

第8巻 第3号

目次

(シリーズ) 衝突論ノート VII. 量子論に速度はあるか —動きの速さを表す演算子?—	(島村勲)	... 5
(談話室) 想定外の原子衝突学を	(伊藤秋男)	... 11
大槻一雅さんを偲んで	(木野康志)	... 13
大槻一雅さんを偲ぶ	(田沼肇)	... 13
檀上篤徳先生を偲んで	(副島浩一)	... 16
檀上篤徳さんと過ごした思い出の日々	(小林信夫)	... 17
第36回原子衝突研究協会年会のお知らせ	(行事委員長)	... 21
原子衝突セミナー中止について	(行事委員長)	... 22
雑文 —国際会議発表奨励事業新要項その他—	(庶務幹事)	... 22
国際会議発表奨励事業に関するお知らせ	(庶務幹事)	... 24
「しょうとつ」原稿募集	(編集委員会)	... 24
今月のユーザー名とパスワード		... 25

衝突論ノート

VII. 量子論に速度はあるか

- 動きの速さを表す演算子? -

島村 勲

理化学研究所原子物理研究室

shimamura@ribf.riken.jp

平成 23 年 4 月 8 日 原稿受付

1 速度は位置の時間微分, たぶん

我々はしばしば速度の概念に基づいて衝突論を展開します. 例えば, 質量 m_1 の粒子が速度 v で質量 m_2 の静止粒子にぶつかる時(図1), 重心の速度 v_{cm} や衝突後の2粒子の速度 v', v'' の間にどんな関係があるか, これらは重心系ではどうなるか(図1), 重心系から実験室系へ散乱角や微分断面積を変換するとき粒子速度がどう関わるか(図2)は衝突理論の重要な基礎です [1-4]. これはほんの一例に過ぎません. 粒子速度は多くの場面でダイナミクスの理解に必須です.

でもこれ, 実は古典粒子を頭に描いてはいませんか. 古典論なら時間の連続関数である位置座標 $r(t)$ の時間微分が速度です. 一方, 量子論の物理量, 観測値は演算子とその固有値で表されます. 例えば運動量や角運動量などの演算子とその固有値方程式をよく扱います. しかし, 「速度演算子」とは何なのでしょう.

古典論から類推すれば, 位置演算子の時間微分を速度演算子とすべきでしょう. 時間微分の計算には位置を時間の連続関数 $r(t)$ として明確に決める必要があります. でも, 量子論には不確定性原理があります. 位置 r を明確に決めれば運動量 p は全く決まりません. 運動エネルギー演算子は運動量演算子 \hat{p} と粒子質量 m で $\hat{p}^2/2m$ と書けるので, 運動エネルギー E は $p^2/2m = |\mathbf{p}|^2/2m$ です. p が決まらなければ E も決まりません. 衝突論で速度を使おうとすれば, 運動量 p も衝突エネルギー E も全く指定できないのです. 逆に, p や E を指定すれば粒子の現在位置を点で図示す

ることもできず, 速度も決まりません(第2節). 衝突過程, 散乱現象を速度の概念なしに理解せよとは大きな制限です. 速度に基づく考察のためには量子論を捨て, 古典論に戻らねばならないのでしょうか. でも, 世にある教科書, 論文には速度を用いた衝突過程の量子論的議論がいくつもあります. 衝突論を学び始めた頃, 皆さん, これには悩んだのではないのでしょうか.

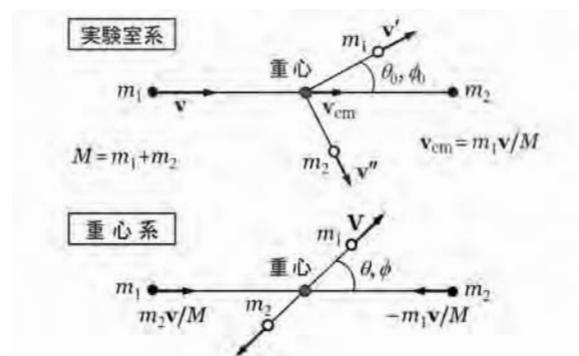


図1. 実験室系と重心系での衝突粒子の速度.

$$\tan \theta_0 = \frac{\sin \theta}{\gamma + \cos \theta}$$

$$\gamma = \frac{|V|}{|v_{cm}|} = \frac{m_1 (E')^{1/2}}{m_2 (E)}$$

$$\frac{d\sigma_0(\theta_0, \phi_0)}{d\omega_0} = \frac{(1 + \gamma^2 + 2\gamma \cos \theta)^{3/2}}{|1 + \gamma \cos \theta|} \frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\omega}$$

図2. 散乱角と微分断面積の重心系から実験室系への変換. E, E' : 衝突前, 衝突後の相対運動エネルギー. 速度ベクトルは図1で定義.

2 粒子性を表せる波動方程式

z 方向の自由運動を表す平面波 $\psi_k(z) = e^{ikz}$ は固有値 $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z) = (0, 0, \hbar k)$ をもつ運動量演算子 \hat{p} の固有関数です。自由な向きの波数ベクトル $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ をもつ平面波 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z}$ は固有値 $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ をもつ運動量固有関数です。これらは固有値

$$E = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m \quad (1)$$

をもつ運動エネルギー演算子 $\hat{T} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2$ の固有関数でもあり、自由運動の時間非依存シュレーディンガー方程式

$$\hat{T}\psi_k(z) = E\psi_k(z), \quad \hat{T}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2)$$

を満たします。

平面波はあいまいさの無い3次元運動量 \mathbf{p} を表すのですから、不確定性原理により、無限に広い位置空間内のどこにいるか全く決まりません。実際、存在確率密度に比例する $|e^{ikz}|^2$ や $|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|^2$ は3次元空間内のどこでも等しく1です。どこにいるか決まらなければ、存在位置の時間微分としての速度はもちろん決まりません。

しかし、元々、量子力学が必要になったのは、光や物質が波動性と粒子性の両面を併せもつという実験事実を古典力学では説明できなかったからです。ですから、量子論の波動方程式は古典的な粒子性をも表せるように工夫されており、したがって何らかの意味で粒子の速度という概念を取り出せるはずで

当時、新たに構築されるべき波動理論、量子力学はその適切な極限として古典論が導かれるようなものでなければならぬというボーアによる提唱、いわゆる対応原理がありました。古典論との関係が注目され、空間や時間の狭い領域に局在する波動関数のかたまり、いわゆる波束(wave packet)の運動が古典粒子の運動に対応するとして論じられました。

波動関数のかたまりを数学的にフーリエ展開すれば、いろいろな運動量 \mathbf{p} や周波数 ν 、したがってエネルギー $E = h\nu$ をもつ波の重ね合せになることが分かります。そこで、波束を表せるようにするため、量子論の波動方程式はこの重ね合せ、数学的には線形結合(1次結合)を許すように構築すべきだと考えられました [1]。自

由運動の時間依存シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{T}\Psi(\mathbf{r}, t) \quad (3)$$

は正にそのように設計されています。つまり、 \mathbf{p} も ν も E も含まない線形方程式なので、異なる \mathbf{p}, ν, E の運動を表すいくつかの波動関数がこの方程式を満たせば、それらのどんな1次結合も同じ方程式を満たします。ポテンシャルエネルギー演算子 \hat{V} を加えたハミルトニアン \hat{H} についての一般のシュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t) = (\hat{T} + \hat{V})\Psi(\mathbf{r}, t) \quad (4)$$

も同じく波動関数の重ね合せを許します。

重ね合せで広がり $\Delta\mathbf{r}$ の波束を作れば空間内の位置 \mathbf{r} を各時点でそこそこの精度 $\Delta\mathbf{r}$ で決められ、速度もそこそこの精度で決まるでしょう。このとき、運動量 \mathbf{p} を精確に指定することは諦めざるを得ません。不確定性原理 $\Delta z \Delta p_z > \hbar$ (および x, y 成分の式)で許されるそこそこの精度 $\Delta\mathbf{p}$ でしか \mathbf{p} が決まらないからです。その程度の範囲に亘って分布した運動量成分を重ね合せて初めて $\Delta\mathbf{r}$ 程度の波束が作れるのです。少なくとも

$$\Delta z \Delta k_z \sim \Delta z \Delta p_z / \hbar \sim 1 \quad (5)$$

および同様な x, y 成分の式を満たす範囲 $\Delta\mathbf{k}$ に亘る波数ベクトル \mathbf{k} の平面波を重ね合せて初めて $\Delta\mathbf{r}$ ほどに絞った波束が作れるのです。

速度を知るには波束の時間変化を見る必要があります。そこで、時間非依存方程式(2)を満たす平面波 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ に時間依存因子 $\alpha_E(t)$ を掛け、

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \alpha_E(t)\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - Et/\hbar)}, \quad (6)$$

$$\alpha_E(t) = e^{-iEt/\hbar} \quad (7)$$

を作ってみます。この変数 t, \mathbf{r} が分離された時間依存平面波は自由運動の時間依存波動方程式(3)を満たすことが次のように示せます。式(3)の Ψ に $\Psi_{\mathbf{k}}$ を代入して $i\hbar \partial \alpha_E / \partial t = E \alpha_E$ を使うと左辺は $E \Psi_{\mathbf{k}}$ になります。この E が式(1)を満たせば、 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ に \mathbf{r} に依らない定数を掛けた $\Psi_{\mathbf{k}}$ も $\psi_{\mathbf{k}}$ と同じく時間非依存方程式(2)を満たし $E \Psi_{\mathbf{k}} = \hat{T} \Psi_{\mathbf{k}}$ 、つまり式(3)の右辺になり、証明は完了します。

時間依存平面波(6)を \mathbf{k} の狭い範囲 $\Delta\mathbf{k}$ に亘り、適当な係数 $c(\mathbf{k})$ を掛けて

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int_{\Delta\mathbf{k}} c(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - Et/\hbar)} d\mathbf{k} \quad (8)$$

と重ね合せれば波束が作れます [1, 3-5]。

3 波束が動く速度: 自由運動の例

簡単な波束モデルを試してみましょう。わずかに異なる波数 $k = k_{\pm} = k \pm \Delta k$ をもつ二つの1次元平面波 $\Psi_k(z, t) = e^{i(kz - Et/\hbar)}$ の重ね合せを作ります。これらはエネルギー $E_{\pm} = E \pm \Delta E = \hbar^2 k_{\pm}^2/2m$ をもちます。重ね合せ関数 $\Phi(z, t)$ の虚部を取り(実部でも結論は同じです), 公式 $\sin 2x + \sin 2y = 2 \cos(x-y) \sin(x+y)$ を使うと

$$\begin{aligned} & \text{Im} \Phi(z, t) \\ &= \text{Im} [e^{i(k_+z - E_+t/\hbar)} + e^{i(k_-z - E_-t/\hbar)}] \\ &= \sin(k_+z - E_+t/\hbar) + \sin(k_-z - E_-t/\hbar) \\ &= F(z, t) \sin(kz - Et/\hbar), \end{aligned} \quad (9)$$

$$F(z, t) = 2 \cos\{(\Delta k)z - (\Delta E)t/\hbar\} \quad (10)$$

が得られます。 Δk を小さく選べば ΔE も小さく, $F(z, t)$ は z や t の変化とともにゆっくり変わりますが, 式(9)最後の \sin 関数は (k, E が極端に小さくない限り) 激しく振動します。激しく振動する関数の振幅 $F(z, t)$ がゆっくり変動するのです。その有様を z の関数として図3に示します。

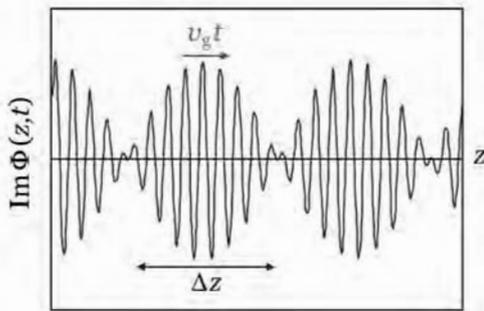


図3. 式(9)の波束モデル $F(z, t) \sin(kz - Et/\hbar)$. $\Delta z \Delta p \sim \pi \hbar$ を満たす大きさ Δz の各波束が一定速度 $v_g = p/m = \hbar k/m$ で z 軸正方向に進む。

図の一つ一つのかたまりを波束と見なせます。かたまりが一つだけでなく, 無数にあるのは, たった二つの平面波の重ね合せという単純なモデルの限界ですが, 物理の本質は表しています。一つの波束の大きさ Δz は, 式(10)で z が Δz ほど増えると振幅 $F(z, t)$ の \cos 関数の位相が π ラジアン増えて $|F(z, t)|$ のある最小点から次の最小点まで進むという条件から $\Delta k \Delta z \sim \pi$ を満たします。これは不確定性原理(5)を表しています。

各波束の頂点では振幅(10)の \cos 関数の位相が π の整数倍になり, 例えば位相ゼロの頂点は

$$z = \frac{\Delta E}{\hbar \Delta k} t \simeq \frac{dE}{d(\hbar k)} t = \frac{\hbar k}{m} t = \frac{p}{m} t \quad (11)$$

と動きます。式(10)により, すべての波束が等距離で全体として動き, どの波束も崩れません。

式(11)はこれらの波束が一定の群速度

$$v_g = \hbar k/m = p/m \quad (12)$$

で進むことを表します。正に古典論の自由運動そのものです。一方, 時間依存平面波 $\Psi_k(z, t)$ の位相のゼロ点は $z = Et/(\hbar k) = (\hbar k/2m)t$ と動き, 位相速度は群速度の半分です。

あいまいさ Δp をもつ運動量 p の時間非依存平面波を時間依存描像に焼き直せば大きさ Δz のかたまりが一定速度 p/m で動くことを表すというわけで, 古典論に似て, 運動量の本質は速度だと言えます。ただ, これは位置と不確定性関係にある量子論的速度で, 位置を明確にすればするほど不明確になる速度なのです。

実はもっと一般の波束(8)を使っても同じ結論が導けます。散乱波動関数の漸近形を頭に置き, 大きな r を考えましょう。式(8)の被積分関数は漸近領域では k の変化とともに激しく振動し, 積分すると殆どゼロになります。例外は位相が k の関数として停留値を取る辺りで, ここでは $d(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - Et/\hbar)/dk \simeq 0$ です。波数ベクトル \mathbf{k} が z 軸を向いていれば $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = kz$ なので, この停留条件から式(11)が導かれます。つまり, 式(8)で表される波束は, 少なくとも大きな r で, 群速度(12)で等速直線運動をします。

4 位置の期待値が動く速度: 一般式

相互作用を受けようが受けまいが, 波動関数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ が波束を表すなら規格化でき, 位置座標の期待値 $\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle$ も運動量の期待値 $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle$ も計算できます ($\hat{\mathbf{r}}$ は座標変数 \mathbf{r} を掛ける演算子です)。そしてこれらの間には古典論に似た関係式

$$\frac{d\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle}{dt} = \frac{\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle}{m} \quad (13)$$

が成り立ちます [1, 4, 5]。例えば, その z 成分

$$\frac{d\langle \hat{z} \rangle}{dt} = \frac{\langle \hat{p}_z \rangle}{m} = \frac{1}{m} \int \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \right) \Psi \, dr \quad (14)$$

を証明します。シュレーディンガー方程式(4)を使い時間微分をハミルトニアン \hat{H} で書き直せば

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \hat{z} \rangle}{dt} &= \frac{d}{dt} \int \Psi^* z \Psi d\mathbf{r} \\ &= \int \left[\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} z \Psi + \Psi^* z \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right] d\mathbf{r} \\ &= \frac{i}{\hbar} \int [(\hat{H}\Psi)^* z \Psi - \Psi^* z \hat{H}\Psi] d\mathbf{r} \\ &= \frac{i}{\hbar} \int \Psi^* [\hat{H}z - z\hat{H}] \Psi d\mathbf{r} \quad (15) \end{aligned}$$

を得ます。最後の行は \hat{H} のエルミート性を使って導きました [6]。さらに、 $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ の \hat{V} の部分が打ち消し合うことと微分関係式

$$\begin{aligned} \nabla^2(z\Psi) &= (\nabla^2 z)\Psi + 2(\nabla z) \cdot (\nabla \Psi) + z\nabla^2\Psi \\ &= 2\frac{\partial}{\partial z}\Psi + z\nabla^2\Psi \quad (16) \end{aligned}$$

を使うと、

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} [\hat{H}z - z\hat{H}] &= \frac{i}{\hbar} [\hat{T}z - z\hat{T}] \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} [\nabla^2 z - z\nabla^2] \\ &= -\frac{i\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial z} = \frac{\hat{p}_z}{m} \quad (17) \end{aligned}$$

となり、これを式(15)に代入すれば式(14)が証明されます。 x 成分、 y 成分の式も同様に導けます。

さらに、証明は省きますが、

$$m \frac{d^2 \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle}{dt^2} = \frac{d \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle}{dt} = -\langle \nabla \hat{V} \rangle = \langle \hat{\mathbf{F}} \rangle \quad (18)$$

も示せます [1, 4, 5]。 $\hat{\mathbf{F}} = -\nabla \hat{V}$ は力の演算子です。波束が鋭く、その範囲内では $\rho = \mathbf{r} - \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle$ が小さくてポテンシャル勾配 $\hat{\mathbf{F}}$ が僅かしか変化しなければ $\hat{\mathbf{F}}(\mathbf{r})$ を ρ のべき級数に展開できます。その初項、定数項は正に $\mathbf{r} = \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle$ での値なので

$$m \frac{d^2 \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle}{dt^2} = -\nabla V(\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle) = \mathbf{F}(\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle), \quad (19)$$

つまり、鋭い波束の運動は古典論のニュートンの運動方程式に従うという対応原理を表します。

べき級数の次の項は ρ に比例し、その期待値は $\langle \rho \rangle = \langle \mathbf{r} - \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle \rangle = \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle - \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle$ により消え、ニュートン方程式(19)の誤差は ρ について2次の微小量の期待値、つまり非常に小さいのです。

式(13)、(18)の組をエーレンフェストの定理と呼びます [1, 4, 5]。粒子性を表す量子論の波束は同じ相互作用を受ける古典粒子と殆ど同じ運動をすることを証明する重要な定理です。

5 ぼやけていく波束

自由運動の線形波動方程式(3)の解二つを重ね合わせた第3節の $\Phi(z, t)$ は同じ方程式(3)を満たし、自由運動を続ける限り時間が経過してもその形を変えず、全体として z 方向に動きます。しかし、単一ピークのそれらしい波束には一般に幅 $\Delta p/m$ の分布をもついろいろな速度成分が含まれ、それらがばらばらに動けば全体が広がってしまいそうです。具体例を調べてみましょう。

Δz 、 Δp_z の定義として、いま期待値からのずれの2乗の期待値に基づく

$$\begin{aligned} (\Delta z)^2 &= \langle (\hat{z} - \langle \hat{z} \rangle)^2 \rangle, \\ (\Delta p_z)^2 &= \langle (\hat{p}_z - \langle \hat{p}_z \rangle)^2 \rangle \quad (20) \end{aligned}$$

を採用すると、必ず不等式 $\Delta z \Delta p_z \geq \hbar/2$ が成り立つと数学的に証明できます [1, 5, 7]。

$z = \bar{z}$ に中心をもつガウス型振幅の平面波

$$\Psi(z, t=0) = C \exp\left[-\frac{(z - \bar{z})^2}{4\zeta^2}\right] e^{ikz} \quad (21)$$

を時刻 $t=0$ で用意してみます。これは何の変哲もなさそうで、実は積 $\Delta z \Delta p_z$ が最小値 $\hbar/2$ になる特別な波束です [1, 4, 5, 7]。規格化定数は $C = (2\pi\zeta^2)^{-1/4}$ です。式(21)による期待値は次のように求まります(添え字0は $t=0$ を表します):

$$\begin{aligned} \langle \hat{z} \rangle &= \bar{z}, \quad \Delta z = (\Delta z)_0 = \zeta, \\ \langle \hat{p}_z \rangle &= k\hbar = p_z, \quad \Delta p_z = (\Delta p_z)_0 = \hbar/2\zeta. \quad (22) \end{aligned}$$

初期条件(21)で $\bar{z}=0$ と選び、そこから自由運動の時間依存波動方程式(3)により時間発展させてみると、時刻 t での存在確率密度分布は

$$|\Psi(z, t)|^2 \propto \exp\left[-\frac{(z - p_z t/m)^2/2}{\{(\Delta z)_0\}^2 + \{(\Delta p_z)_0 t/m\}^2}\right] \quad (23)$$

となります [1, 5]。これを性質(22)をもつ初期波束(21)の形と比べてみると次のことが分かります:

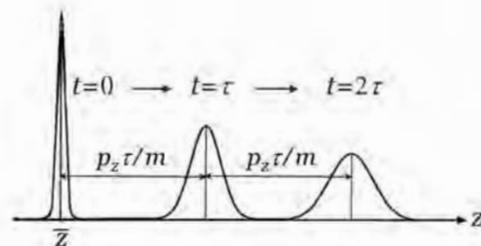


図4. 初期波束(21)の自由運動による時間発展(23)。ピーク位置は速度 $p_z/m = \hbar k/m$ で等速直線運動をする。幅の増加率はほぼ $(\Delta p_z)_0/m$ 。

1) 波束のピーク位置,したがって期待値 $\langle \hat{z} \rangle$ は一定速度 $p_z/m = \hbar k/m$ で正方向に動きます. これは群速度(12)そのものです(図4).

2) 始め $(\Delta z)_0$ であった波束の幅が時間が経つと広がります. $(\Delta z)_0$ が小さければ,ほぼ一定速度 $(\Delta p_z)_0/m$ で広がります(図4).

自由運動でも波束は徐々にぼやけて粒子性を失い,位置の期待値は古典的等速直線運動をしても,期待値の実質の意味が薄れていきます.

6 ぼやけの極限: 時間非依存衝突論

波束の運動量分布を非常に鋭く, Δp を小さくすれば,波動関数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ は殆ど単一の \mathbf{p} E をもつこととなります. このとき, $\Psi(\mathbf{r}, t) = \alpha_E(t)\psi(\mathbf{r})$ と置くと, $\psi(\mathbf{r})$ が時間非依存ハミルトニアン \hat{H} による時間非依存波動方程式 $\hat{H}\psi = E\psi$ を満たせば $\Psi(\mathbf{r}, t)$ が時間依存方程式(4)を満たすことが式(6) (7)のすぐ下の議論と同様にして示せます.

こうして,波束の時間依存衝突問題が時間非依存波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ を求める問題に帰着されます. ただ, Δp が小さいと波束は空間的に非常にぼやけています. でも,いかにぼやけようとも,期待値 $\langle \hat{r} \rangle$, $\langle \hat{p} \rangle$ さえ決まれば,エーレンフェストの定理(13)により $\langle \hat{p} \rangle/m$ が速度を意味します. 極限 $\Delta p \rightarrow 0$ での時間非依存問題を扱うなら,この速度は $\langle \hat{p} \rangle/m \rightarrow \mathbf{p}/m$ と近づきます.

速度のこの物理的考察に基づき,時間非依存衝突論で \mathbf{p}/m を \mathbf{v} と書き,「速度」と呼びましょう. すると,この \mathbf{v} は古典論の速度と同じ諸関係式を満たします. それは,これらの関係式が運動量とエネルギーの保存則から導かれ,またこれらの保存則が量子論でも古典論と同じ形で成り立つからです. 以下にその保存則を証明します.

衝突粒子 1, 2 の位置座標を $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$, 相対距離を $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, 重心の座標を \mathbf{R} とし,さらにそれぞれについての運動量演算子を $\hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{p}}_2, \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{P}}$, 運動エネルギー演算子を $\hat{T}_1, \hat{T}_2, \hat{T}_r, \hat{T}_R$ とします. 以下,議論の簡単化のため,粒子 1, 2 は壊れないものとし,座標変換 $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rightarrow (\mathbf{r}, \mathbf{R})$ による偏微分演算の変換式を使うと,演算子間の関係

$$\hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2 = \hat{\mathbf{P}}, \quad (24)$$

$$\hat{T}_1 + \hat{T}_2 = \hat{T}_R + \hat{T}_r \quad (25)$$

が簡単に証明できます.

衝突系全体に外から力が何も働かなければ,この系の相互作用は \mathbf{r} には依りますが \mathbf{R} には依りません. そのため,式(25)により,ハミルトニアンは \mathbf{R} 依存部分と \mathbf{r} 依存部分に分離できます. つまり,古典論のように重心運動が自由運動として相対運動から分離できます. 自由運動なら運動量 \mathbf{P} は不変で,式(24)により粒子 1, 2 の運動量の和 $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$ も古典論と同じく保存されます.

粒子 1, 2 の内部運動のハミルトニアンを \hat{H}_{in} と書くと,波動方程式の衝突前,後の漸近形とも $(\hat{T}_1 + \hat{T}_2 + \hat{H}_{in})\psi = (\hat{T}_R + \hat{T}_r + \hat{H}_{in})\psi = E\psi$ と,二通りの別け方で3運動自由度が完全に分離され,二種の運動エネルギーと内部エネルギーとの和が定数 E になる古典関係式と同じ形のエネルギー保存則が得られます.

実験室系と重心系での運動エネルギー,運動量ベクトル,散乱角,微分断面積の関係もすべて運動量と運動エネルギーの保存則および座標系の変換式だけから導かれ,古典論でも量子論でも同じ形式になり,これらの関係式を $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ により「速度」に焼き直せば,例えば古典・量子共通の図1, 2 が導けます. この「速度」の本質は運動量であり,位置座標と不確定性関係にあること,この「速度」を明確に指定すれば位置は全く決まらないことさえ肝に銘じれば,古典論の速度が満たす式をそのまま使えます. 以上の考察を踏まえて初めて速度を使った時間非依存量子論を安心して展開できることとなります.

因みに,座標変換は単なる変数変換で,観測値の変換ではないので,位置が決まらなくても上で使った座標変換に何ら問題はありません.

以上,不確定性原理の制限内で位置 \mathbf{r} も運動量 \mathbf{p} もある精度で決めつつ波束の時間発展を追えば速度の概念を表す $d\langle \hat{r} \rangle/dt$ は $\langle \hat{p} \rangle/m$ に等しく(第4節,エーレンフェストの定理(13)),その $\Delta p \rightarrow 0, \Delta r \rightarrow \infty$ への極限として時間非依存量子論で \mathbf{p}/m を \mathbf{v} と書けば古典的速度が満たす諸式をその \mathbf{v} も満たします(本節). むろん,単にこの \mathbf{v} が古典関係式を再現するというだけでは量子論の実体が動く速さを直接表しません. 定理(13)により初めてこの「速度」の物理的意味が分かるのです. 結論として, $\hat{\mathbf{p}}/m$ を速度演算子 $\hat{\mathbf{v}}$ と解釈すれば新しい固有値問題を考えずに物理的にも妥当で矛盾のない理論を構成できます.

おまけ: 演算子の時間微分の落とし穴

ランダウ-リフシッツは「速度演算子 $d\hat{x}/dt$ 」が

$$d\hat{x}/dt = \hat{p}/m \quad (26)$$

を満たすと言います [7] . 彼らはまず

$$d\hat{\Omega}/dt = (i/\hbar)[\hat{H}\hat{\Omega} - \hat{\Omega}\hat{H}] \quad (27)$$

が時間 t を含まない一般の演算子 $\hat{\Omega}$ に対し成り立つと言います(実際は t を含む一般の演算子を論じていますが, ここでは話を単純化します). この $\hat{\Omega}$ を \hat{z} とし, 本稿の式 (17) を使えば式 (27) の右辺は \hat{p}_z/m に等しく, \hat{x}, \hat{y} についても同様にすれば式 (26) が出ると言うのです [7] .

でも, 式 (26) , (27) は奇妙です. まず, $\hat{\Omega}$ が t を含まなければ, $d\hat{\Omega}/dt$ はゼロではないですか. それに, 物理量の演算子の時間微分ですって? ある物理量のある時刻に測ればその物理系は測定により乱され, 量子状態を変えてしまいます. 同じ物理系の同じ物理量を微小時間間隔で 2 回精確には測れません. ですから, 物理量の時間微分を精確に決めるのは不可能で, 物理量演算子の時間微分は物理的意味をもちません.

ただ, 同等で独立な物理系を多数使えば時間に依存する平均値 $\langle \hat{\Omega} \rangle$ を, またその時間微分を決められます. そこでランダウ-リフシッツは, ある演算子 \hat{A} の期待値が $\hat{\Omega}$ の期待値の時間微分に等しければこの \hat{A} を $d\hat{\Omega}/dt$ と呼ぶ, つまり

$$\left\langle \frac{d\hat{\Omega}}{dt} \right\rangle = \frac{d\langle \hat{\Omega} \rangle}{dt} \quad (28)$$

が時間微分演算子 $d\hat{\Omega}/dt$ の定義だと宣言します. あくまでも期待値を通じた便宜的定義, 言葉の約束です. $\hat{\Omega}$ が t を含まなくても波動関数が時間依存なら期待値も時間依存で, この $d\hat{\Omega}/dt$ は一般にゼロではありません. この定義によれば, あたかも純粋な演算子関係式かに見える式 (26) の本当の意味は, 期待値の関係を表すエーレンフェストの定理 (13) そのものです. また, 式 (27) も期待値間の関係式に過ぎず, 通常演算子関係式とは違います. 教科書の上っ面を安易に拾い読みするととんでもない誤解をする一例です.

さて, ハイゼンベルグの運動方程式と称する

$$d\hat{\Omega}_H/dt = (i/\hbar)[\hat{H}\hat{\Omega}_H - \hat{\Omega}_H\hat{H}] \quad (29)$$

は式 (27) と瓜二つです(この $\hat{\Omega}_H$ は後で説明します). これは解析力学の運動方程式に似ていて

量子力学と古典力学の対応の解析に役立ち, 演算子の交換関係の物理的意味や不確定性原理の議論に発展する重要な式です [1, 7] .

以下, 多少上級編ですが, 考え方の概略を解説します [1, 7] . \hat{H} は時間 t に依らないとします. 時間依存波動方程式 (4) を満たす $\Psi(\mathbf{r}, t)$ を時刻 0 から t まで発展させる演算子を \hat{U}_+ , t から 0 に戻す演算子を \hat{U}_- とします. 変数 \mathbf{r} を省略すると

$$\Psi(t) = \hat{U}_+ \Psi(0), \Psi(0) = \hat{U}_- \Psi(t) \quad (30)$$

です. どんな波動関数 $\Psi(t)$, $\Phi(t)$ に対しても, 式

$$\int \Psi^*(t) \hat{\Omega} \Phi(t) d\mathbf{r} = \int \Psi^*(0) \hat{\Omega}_H(t) \Phi(0) d\mathbf{r}, \quad (31)$$

$$\hat{\Omega}_H(t) = \hat{U}_- \hat{\Omega} \hat{U}_+ \quad (32)$$

を証明できます [1, 7] . 時間発展演算子 \hat{U}_+ を波動関数部分から演算子部分に移し, $\hat{\Omega}$ のハイゼンベルグ表示と呼ばれる $\hat{\Omega}_H$ に時間依存性をすべて押し付け, 時間を含まない波動関数 $\Psi(0)$, $\Phi(0)$ を使った積分の表式に書き換えたのです.

この形なら全体の時間微分は積分内の演算子 $\hat{\Omega}_H(t)$ の時間微分だけで代表され, (それが観測量を表すかどうかは別として) $d\hat{\Omega}_H(t)/dt$ が演算子として明確な意味をもちます. これは式 (27) 左辺の見かけ倒し演算子 $d\hat{\Omega}/dt$ とは性格が全く違います. さらに, 時間依存波動方程式 (4) を形式的に解けば $\hat{U}_{\pm} = e^{\mp i\hat{H}t/\hbar}$ も証明でき, これを式 (32) に代入して時間微分すれば運動方程式 (29) が得られます [1, 7] . これは期待値の関係式 (27) と違い, 完全に演算子としての関係式です.

[1] L.I. Schiff, *Quantum Mechanics*, 3rd ed. (McGraw-Hill, N.Y., 1968) [井上健 訳, 量子力学 (吉岡書店, 1970)].

[2] 砂川重信, 散乱の量子論 (岩波書店, 1977).

[3] 高柳和夫, 電子・原子・分子の衝突 (培風館, 1972, 改訂版 1996).

[4] B. H. Bransden and C. J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, 2nd ed. (Pearson Education, Harlow, 2003).

[5] 江沢洋, 量子力学 I (裳華房, 2002).

[6] 島村勲, しょうとつ, 第 7 巻第 4 号 (2010).

[7] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, 3rd ed. (Pergamon, Oxford, 1977) [佐々木健 訳, ランダウ・リフシッツ量子力学 (東京図書)].