

数学教育を量子力学の学習に活かす

石 信 一*

Introductory Quantum Mechanics through knowledge of mathematical education

Shin-ichi ISHI

要 旨

本校の数学・応用数学教育を踏まえて、量子力学における固有値問題を単純な例題をあげて解説した。

This paper shows an example of introductory quantum mechanics through knowledge of mathematical education in this college.

1. 序 論

初等的な有機・無機化学や半導体工学の教科書では、電子の軌道(原子軌道, 分子軌道), 化学結合等の本来は量子力学によって説明されるべき事柄が, 経験則として便宜的に説明されている。それ故, それらの内容の理解をより深める為に, 量子力学の系統的な学習が望まれる。高専の現状では, それはカリキュラム等の制約から困難に見える。しかし, 量子力学は現代科学の基礎となる理論の一つであるから, それらの困難さの中でも, 何らかの形で教授・学習は必要であろう。

量子力学の理解の難しさは, 量子力学の概念(不確定性関係, 状態と物理量の関係等々)が日常的のそれと懸け難れていることである。更に, それらの表現に必要な数学的道具に不慣れなことである。大学においても, 量子力学を教授する際に, それに必要な数学が遅れているのが普通である。他方, 本校の4学年までの数学・応用数学教育においては, (2行2列)行列の固有値問題, フーリエ級数・変換, フーリエ級数やラプラス変換の応用としての二階線形常微分方程式の境界値・固有値問題の解法等々を学習する。それらの数学は, 量子力学の学習に正に必要なものである。量子力学の具体的問題は, 固有値問題 (Schrödinger 方程式)を解くことである, と言っても過言

ではない。このように, 量子力学を学習する点においては, 高専の数学教育は, 大学のそれに比べて先行しているのである。それ故, この先行した数学の理解を, 量子力学の物理的内容の理解を深めるのに活用したい, というのが本稿の動機である。このような点から, 両者の関連を強調する具体的な問題について述べる。入門としての天下りの部分もあるが, 量子力学に関する多くの基本的な概念を説明することができる。

第2章において, 数学的準備として, 二階線形常微分方程式の固有値問題について説明する。第3章において, 量子力学の固有値問題——一次元ポテンシャル場の運動——を解き, 前章の結果を対照して, 量子力学の基本的な概念について説明する。第4章は結語である。

2. 数 学 的 準 備

数学としては, 次のように問題設定される: 二階定数係数常微分方程式

$$D^2y(x) = \lambda y(x), \quad (Dy = dy/dx = y') \quad (1.1)$$

において, 境界条件

$$y(0) = y(a) = 0 \quad (1.2)$$

を満たす定数 λ と $y(t)$ を求めよ。但し, $y = 0$ (自明解という)を除く。 λ と $y(x)$ を, それぞれ固有値, 固有関数, (1.1) 式を固有値方程式という。

(1.1) 式は, 微分演算子 (D^2) を固有関数 $y(x)$ に作用させると, $y(x)$ を λ 倍したものになる, と

* 助教授 一般教科

いう内容を表わしている。微分演算子 (D^2) の性質として、次の二つが重要である：

a) 線型性 (linearity)

$$D^2 \Sigma c_i y_i = c_i \Sigma D^2 y_i \quad (2.1)$$

c_i は定数係数である ($i=1, 2, 3 \dots$)。

b) 対称性 (symmetry)

$$\langle D^2 y_1 | y_2 \rangle = \langle y_1 | D^2 y_2 \rangle \quad (2.2)$$

ここで、記号 $\langle | \rangle$ は、

$$\langle D^2 y_1 | y_2 \rangle = \int_0^a (D^2 y_1(x))^* y_2(x) dx \quad (3)$$

を表わしている (*は複素共役を示す)。

(2.2)式が成り立つような演算子をエルミット演算子という。

以下、(1)式の解析的な解法(定数係数微分方程式の一般的な解法 {2.1} とラプラス変換の方法 {2.2}) を述べ、フーリエ級数論の必要な事柄を簡単に述べる ({2.3})。

{2.1} 定数係数微分方程式の方法

解の型を指数関数 $\exp(st)$ に仮定して、それを(1)式に代入して s について解く。特性方程式 ($H(s)$) 及び s の解は、

$$H(s) = s^2 - \lambda = 0, \quad s = \pm \sqrt{\lambda}$$

と書ける。解の型を具体的に書き下す為には、 λ のとる値に対して分類する必要がある：

(A) $\lambda > 0$ の時、解は次の通り：

$$y(x) = c_1 \exp(\sqrt{\lambda}x) + c_2 \exp(-\sqrt{\lambda}x) \quad (4)$$

(B) $\lambda = 0$ の時、

$$y(x) = c_1 + c_2 x \quad (5)$$

(C) $\lambda < 0$ の時、

$$\begin{aligned} y(x) &= c_1 \exp(i\sqrt{\lambda}x) + c_2 \exp(-i\sqrt{\lambda}x) \\ &= d_1 \cos(\sqrt{\lambda}x) + d_2 \sin(\sqrt{\lambda}x) \end{aligned} \quad (6)$$

ここに、 c_i と d_i ($i=1, 2$) は定数を表わす。解(4)及び(5)式は増加あるいは減少関数であるから境界条件(1.2)式を満たさない。(6)式のみが次の条件のとき

$$\sin(\sqrt{\lambda}a) = 0, \quad \sqrt{\lambda}a = n\pi, \quad \therefore \sqrt{\lambda} = n\pi/a \quad (7)$$

境界条件を満たす。 $\sqrt{\lambda} > 0$ であるから、 n は 1, 2, 3... の正整数をとる。即ち、固有値 λ と整数 n の対応は一对一で、かつ、固有値は実数になる。 $n=0$ の時は、 $y=0$ となるので除く。こうして、

解(6)は、

$$y_n(x) = d_2 \sin(\sqrt{\lambda}x) = d_2 \sin(n\pi x/a) \quad (8)$$

と書ける。係数 d_2 は規格化条件 ($\langle y_n(x) | y_n(x) \rangle = 1$) から決まる：

$$d_2 = \sqrt{2/a} \quad (9)$$

{2.2} ラプラス変換の方法

(1)式で両辺のラプラス変換をとる(記号 $L(y(t)) = Y(s)$, $L(y'') = s^2 Y(s) - sy'(0) - y''(0)$)。 $Y(s)$ についての代数方程式を解けば、

$$\begin{aligned} s^2 Y - sy'(0) - y''(0) &= \lambda Y \\ Y &= (y'(0)/(s^2 - \lambda) + y''(0)/H(s)) \end{aligned} \quad (10)$$

となる。これを逆変換すれば解を得る。 λ の分類については上記の(A), (B), (C)に同じ。

{2.3} フーリエ級数展開

$y_n(x)$ ($n=1, 2, 3 \dots$) が解であれば、それらの一次結合

$$y(x) = \Sigma c_n y_n(x) \quad (11)$$

もその方程式の解である。別の表現をすれば、(11)式は、固有関数 $y_n(x)$ による関数 $y(x)$ の展開である(これを固有関数展開という)。 $y_n(x) = \sin(n\pi x/a)$ ならば、(11)式は、 $y(x)$ の区間 $[0, a]$ におけるフーリエ正弦級数展開で、 c_n はそのフーリエ係数に等しい。(11)式の展開係数 c_n は、 $c_n = \langle y(x) | y_n(x) \rangle$ (12)

で与えられる。(8)式より、固有関数の性質として、固有値 n の異なる固有関数は直交する：

$$\begin{aligned} \langle y_n(x) | y_{n+1}(x) \rangle &= \delta_{n,n+1} = 1 \quad (n=n+1) \\ &0 \quad (n \neq n+1) \end{aligned} \quad (13)$$

ここに、 $\delta_{n,n+1}$ はクロネッカーのデルタ記号である。(13)式は、固有関数列 $\{y_n(x)\}$ が規格直交関数系である、ことを示す。こうして、固有値 λ_n は、

$$\begin{aligned} (1.1) \text{ 式から,} \\ \lambda_n &= \langle y_n(x) | D^2 y_n(x) \rangle \end{aligned} \quad (14)$$

によって計算すればよい。(11)式の両辺を自乗して積分すれば、

$$\langle y(x) | y(x) \rangle = \Sigma |c_n|^2 \quad (15)$$

を得る。ここに、 $|c_n|^2$ は、 $y_n(x)$ の $y(x)$ への寄与の割合を表わす、即ち、(15)式が1に規格化されていれば、 n 番目の固有関数の実現確率と考えることができる。

3. 固有値問題の例

—— 一次元ポテンシャル場 ——

前章の結果を活用すべき量子力学の固有値問題を、一粒子（自由度も一）の座標 x のみに依存するポテンシャル場 $V(x)$ の運動として定式化しよう。

一粒子の運動エネルギーを

$$T = mv^2/2 = p^2/2m \quad (p = mv)$$

とすれば、全エネルギー e は、

$$e = p^2/2m + V(x) \equiv T + V \quad (1)$$

である (e を古典論のハミルトニアンという)。 m は粒子の質量, v はその速さ, p は運動量である。ここでは、ポテンシャル $V(x)$ に関して次の仮定を取る (図1 参照)：

$$\begin{aligned} V(x) &= 0, & 0 \leq x \leq a \\ &= \infty, & x < 0, x > a \end{aligned} \quad (2)$$

この仮定は、 $x < 0, x > a$ の領域に粒子が存在できない、つまり、 $0 \leq x \leq a$ にある粒子をこの外側に持っていくには、無限大の仕事が必要とすることを示す。

古典力学から量子力学への移行は、物理量である運動量や位置を次のような演算子 (Operator) に書き換える：

$$p \rightarrow -i\hbar D, \quad x \rightarrow x \quad (3.1)$$

ここに、 $\hbar$ はプランク定数を 2π で割った定数である。(3.1) 式の意味するところは、運動量 (あるいは位置) の固有値が確定値 p (あるいは x) をもち、 y をそれぞれの固有関数とすれば、固有値方程式

$$-i\hbar Dy = py, \quad xy = yx \quad (3.2)$$

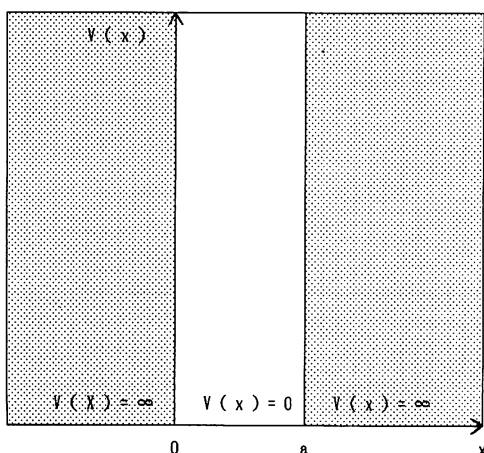


図1 一次元ポテンシャル場の概念図

が成り立つことである。位置の演算子は、単に y を x 倍することである (演算子としての $V(x)$ の働きも同様)。

(3.1) 式を用いて (1) 式を、

$$h = -CD^2 + V(x) \quad (3.3)$$

と書き換える。ここで、 $C = \hbar^2/2m$, h は一粒子の演算子 (ハミルトニアン) である。

量子力学的状態を表わす波動関数を $\psi(x)$ とすれば、 $\psi(x)$ を満たす微分方程式は、(3.3) 式と (2) 式から、 $0 \leq x \leq a$ の領域では、

$$h\psi(x) = -CD^2\psi(x) = \epsilon\psi(x) \quad (4.1)$$

と書ける。あるいは、両辺を $-C$ で割って、

$$D^2\psi(x) = \lambda\psi(x), \quad \lambda = -\epsilon/C \quad (4.2)$$

と変形すれば、前章の固有値方程式と同型になる。固有関数を量子力学では波動関数という。境界条件については、(2) 式から $x > a, x < 0$ の領域では $\psi = 0$ で、波動関数の連続性の要請から、

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \quad (5)$$

でなければならない。それ故、“数学的形式が同じならば、解も同じ”ということから、(4) 式の解は、前章の結果を使って書き下せる：

$$\lambda_n = (n\pi/a)^2, \quad \epsilon_n = -C\lambda_n \quad (6)$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{2/a} \sin(\sqrt{n\pi/a} x) \quad (7)$$

$n = 1$ に対して、具体的に固有値、固有関数を書き下すと、

$$\lambda_1 = (\pi/a)^2, \quad \epsilon_1 = -C\lambda_1 \quad (8)$$

$$\psi_1(x) = \sqrt{2/a} \sin(\pi x/a) \quad (9)$$

である。このとき、 $\psi(x) = 0$ となる零点 (節 (node)) は、 $x = 0, a$ のみである。この状態を基底状態 (ground state) という。 $n > 1$ では、 $0 < x < a$ に $\psi_n = 0$ となる零点は $n = 2$ のとき 1, $n = 3$ の

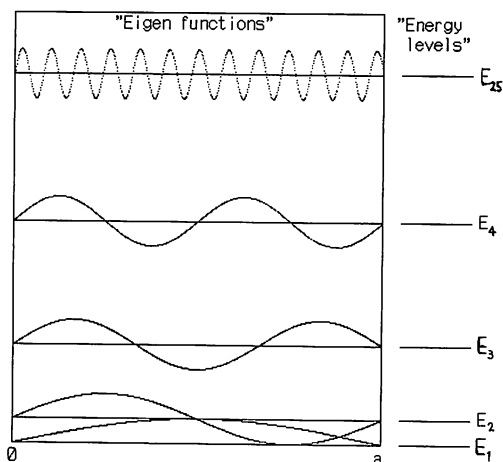


図2 エネルギー準位と固有関数 (波動関数)

とき2, 一般に, $n=m+1$ のとき m である。これらの状態を励起状態 (excited state) という。図2には, エネルギー準位とそれらに対応する固有関数 (波動関数) の幾つかを示した (エネルギー準位の間隔は任意にとってある)。それ故, 系の任意の状態 $\psi(x)$ は, それらの状態の和として,

$$\psi(x) = \sum c_n \psi_n(x) \quad (10)$$

と書ける。(10) 式の両辺を自乗すれば,

$$\langle \psi(x) | \psi(x) \rangle = \sum |c_n|^2 \quad (11)$$

を得る。それ故, $|c_n|^2$ は, 前章の (15) 式の類推から, 系の n 番目の状態を見いだす確率と解釈される。他方, $|\psi_n(x)|^2$ は, 単位体積に粒子を座標 x の位置に見いだす確率で, 確率振幅と呼ばれている。

λ_n は固有値であるが, 量子力学では, ϵ_n を一粒子のエネルギー固有値 (エネルギー準位) という。 n の 1, 2, 3... を量子数という。整数になったのは, 境界条件の為である。(6) 式はエネルギー準位が離散的 (不連続的) かつ非縮退 (固有値と固有関数が一対一) であることを示す。これらのエネルギー準位の組を点スペクトルという。対応する $\psi(x)$ は, (今の場合は時間に依存していないので, 定常状態における) エネルギー固有状態という。

このように, 量子力学的状態は, 波動関数で記述される状態において, 演算子で記述される物理量がどんな値 (固有値) をとるか, によって決まる。他方, 古典論では, エネルギー状態は (1) 式, 即ち, 運動量とポテンシャル ($p, V(x)$) の組によって完全に決まってしまう。

以上は, エネルギー固有値が確定値を持つ場合 (定常的) であったが, 最後に, エネルギーが確定値をとらない場合 (非定常的) に拡張した方程式を示しておこう。

古典論における物理量 (運動量等) を演算子に書き換えたように, エネルギー ϵ を

$$\epsilon = i\hbar d/dt \equiv i\hbar D_t \quad (12)$$

と書き換える。時間に依存する波動関数を $\Psi(x, t)$ を満たす微分方程式は,

$$\hbar \Psi(x, t) = i\hbar D_t \Psi(x, t) \quad (13)$$

と書ける。(13) 式を時間に依存する Schrödinger 方程式 (Time-dependent Schrödinger equation) という。

しかし, ここでは, エネルギーが確定値をもつとき, (13) 式は (4.1) 式 (Time-independent

Schrödinger equation) に帰着されることを示そう。

(13) 式のハミルトニアン $\hbar$ に時間変数が含まれていなければ, $\Psi(x, t)$ は, 変数分離形

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \phi(t) \quad (14)$$

で書ける。エネルギーの確定値 ϵ とすれば, $\phi(t)$ の満たす方程式は,

$$i\hbar D_t \phi(t) = \epsilon \phi(t) \quad (15)$$

で, その解は,

$$\phi(t) = c \exp(-i\epsilon t/\hbar) \quad (16)$$

である (c は任意定数)。こうして, (14) 式を (13) 式に代入し (15) 式を用いれば, (4.1) 式を得る。それ故, 任意の時刻 t にエネルギー ϵ_n を持っている粒子の状態を記述するより一般的な波動関数は,

$$\Psi(x, t) = \sum c_n \exp(-i\epsilon_n t/\hbar) \psi_n(x) \quad (17)$$

である。こうして, (16) 式の両辺を自乗すれば,

$$\langle \Psi(x, t) | \Psi(x, t) \rangle = \sum |c_n|^2 \quad (18)$$

で, (18) 式は (11) 式と同じ内容になる。

4. 結 語

高専の性格からして, 量子力学そのものを授業する必要性はないように見えるが, 物理化学や半導体工学 (固体電子論) では, それに触れざらう得ない。その際, 量子力学に必要な数学的内容が準備されているので, それを積極的に活用することも, 授業・学習方法の一つの選択であろう。本稿では, そうした点を強調して, エネルギーの固有値問題を一次元ポテンシャル場の最も単純なモデルについて, 数理的 (形式的) に述べた。量子力学の基本的な問題の一つは固有値問題であるから, それを解くことによって多くの基本的概念が説明される。本稿の固有値問題の例題は, より進んだ問題の入門的な役割を担うものと思う。例えば, 具体的な応用として, ポテンシャルのとり方を代えればよい。一つはポテンシャル壁を有限にすること, もうひとつは, ポテンシャルの型を決める。前者は, 固体電子論の自由電子モデル・トンネル現象の基礎理論になり, 後者は, 実際的な問題 (調和振動子, 水素原子等) のエネルギー準位を解くことに繋がる。

(平成2年11月19日受理)