3-8. 連続固有値（連続スペクトル）

今まで、観測可能な物理量に対応する演算子として離散的な固有値をとるものを扱ってきた。しかし、位置、運動量などの物理量の観測値は実数であり連続的な値をとる。すなわち、位置とか運動量とかに対応する演算子は**「連続的な固有値」**をとる（**「連続スペクトル」**をとる、とも言う）。**「連続スペクトルを示す固有ケットが張る無限次元の複素ベクトル空間」**について、この節で取り扱い、波動関数で表したSchrödinger方程式を導く。

3-8-1. 波動関数（離散固有値の場合）＜復習を含む＞

今、観測可能な物理量Mに対応するエルミート演算子$\hat{M}$ が、「離散的」な N 個の固有値 λ_i（固有状態$|\lambda_i>$）を持つとする($N=\infty$ でも良い)[1]。この時、固有値方程式、

$$\hat{M}\,|\lambda_i> = \lambda_i|\lambda_i> \qquad (i=1\ldots N) \qquad \text{(3-8-1)}$$

が成り立つ。$\{|\lambda_i>\}$は正規直交基底ケットとして N 次元複素ベクトル空間を張る。この時、

$$<\lambda_i|\lambda_j> = \delta_{ij} \qquad \text{（正規直交性の条件）} \qquad \text{(3-8-2)}$$

が成り立つ。一般の状態$|\Psi>$は$\{|\lambda_i>\}$を使って、

$$|\Psi> = \alpha_1|\lambda_1> + \alpha_2|\lambda_2> + \ldots + \alpha_N|\lambda_N> = \sum_{i=1}^{N}\alpha_i|\lambda_i> \qquad \text{(3-8-3)}$$

と書ける。係数 α_i は

$$\alpha_i = <\lambda_i|\Psi> \qquad \text{(3-8-4)}$$

となる。 式(3-8-4)を式(3-8-3)に代入すると、

$$|\Psi> = \sum_{i=1}^{N}<\lambda_i|\Psi>|\lambda_i> = \sum_{i=1}^{N}|\lambda_i><\lambda_i|\Psi> = \sum_{i=1}^{N}(|\lambda_i><\lambda_i|)|\Psi>$$

となるので、式(3-8-3)が成り立つためには、

$$\sum_{i=1}^{N}|\lambda_i><\lambda_i| = \hat{I} \qquad \text{（完備性の条件}^{2}\text{）} \qquad \text{(3-8-5)}$$

が要求される。

Mを状態$|\Psi>$で観測すると、状態は $\hat{M}$ の固有状態のどれか（例えば、$|\lambda_i>$ ）に「跳び移り」（あるいは、「収縮し」）その時の固有値（λ_i）が測定値となる。

その確率 $P(\lambda_i)$ は、

$$P(\lambda_i) = |\alpha_i|^2 = \alpha_i^*\alpha_i = <\lambda_i|\Psi>^*<\lambda_i|\Psi> = <\Psi|\lambda_i><\lambda_i|\Psi> \qquad \text{(3-8-6)}$$

で与えられる。

---

[1] ここでは簡単のため、同じ固有値を持つ状態が複数無いとしている（縮退が無い）。3-4-5節(p.31)の注釈8参照。

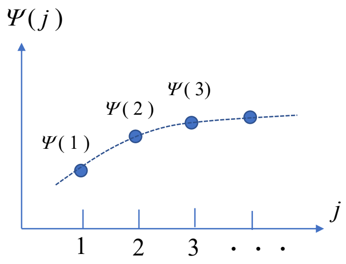
[2] 完全性ともいう。任意のベクトルが$\{|\lambda_i>\}$で記述できることを言う。3-4-5節参照。

今、(3-8-4)の係数 α_j を改めて $\Psi(j)$ と書いてみると、(3-8-4)は、

$$|\Psi> = \Psi(1)|\lambda_1> + \Psi(2)|\lambda_2> + \ldots + \Psi(N)|\lambda_N> = \sum_{j=1}^{N} \Psi(j)|\lambda_j> \qquad (3\text{-}8\text{-}7)$$

あるいは、列ベクトルで表すと、

$$|\lambda_1> \to \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ de4}|\lambda_2> \to \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \cdots, |\Psi> \to \begin{pmatrix} \Psi(1) \\ \Psi(2) \\ \vdots \\ \Psi(j) \\ \vdots \\ \Psi(N) \end{pmatrix} \qquad (3\text{-}8\text{-}8)$$



成分 $\Psi(j)$ は j の値によってその値を変えて行くので、（離散的ではあるが） j の関数と考えることもできるであろう（右上図を見よ）。ただし、この関数の値は基底の選び方によって変わることに注意。この $\Psi(j)$ で表される関数を、**「基底 $\{|\lambda_j>\}$ で表示した波動関数」**と呼ぶ[3]。$|\Psi(j)>$ が時間変化して行く場合は、 $\Psi(j)$ もその値を時間とともに変えて行く[4]。

3-8-2. 波動関数（連続固有値の場合）

連続スペクトルを持つ演算子の場合について見てゆく。
ここでは、粒子の位置 x に対応した演算子 $\hat{x}$ を考える。
粒子が x にいる場合は、 $\hat{x}$ の固有状態 $|x>$ になっているとみなせるので、

$$(\text{固有値方程式}) \qquad \hat{x}|x> = x|x> \qquad (3\text{-}8\text{-}9)$$

のように書ける。固有値 x は実数であり、$-\infty < x < +\infty$ の間を連続的に取る。離散的な場合と同じように考えると、$\hat{x}$ の固有ベクトル $|x>$ は正規直交基底ケットとして、無限次元の複素ベクトル空間[5]を張ることになる。

一般の状態 $|\Psi>$ は、(3-8-7)の和を積分に変えて、

$$|\Psi> = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x)|x> dx \quad (\text{連続固有値の場合}) \qquad (3\text{-}8\text{-}10)$$

のよう書ける。**この $\Psi(x)$ を $|x>$ を基底に取った時の波動関数、あるいは、位置表示（x-表示）の波動関数と呼ぶ**[6]。

---

[3] **「波動」の意味は特に無い。**

[4] 式(3-8-7)で基底|λ>は時間変化しないのでΨ(j)が変化する

[5] ヒルベルト空間（Hilbert space）と呼ばれる。

[6] もし、運動量の固有状態|p>を基底にとると、|Ψ>の成分（係数）Ψ(p)は**運動量表示（p-表示）の波動関数**と呼ばれる。3-8-7節とp.68の表を参照。

離散固有値の場合の $\Psi(j) = <\lambda_j|\Psi>$ に習って $\Psi(x) = <x|\Psi>$ としてみる。

(3-8-10)に左から $<x|$ を掛けると、

$$\Psi(x) = <x|\Psi> \tag{3-8-11}$$

$$= <x|\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi(x')|x'>dx'\right) = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi(x')<x|x'>dx' \tag{3-8-12}$$

(3-8-12)の最右辺が $\Psi(x)$ になるためには、

（**正規直交性**の条件）　$$<x|x'> = \delta(x-x') \tag{3-8-13}$$

であれば良い。ここで、$<x|x'> = \delta_{xx'}$ ではなく**デルタ関数** $\delta(x-x')$ となることに注意しよう。こうして、連続スペクトルの場合は、正規直交性は(3-8-13) $<x|x'> = \delta(x-x')$ で表す。

次に完備性の表記を見る。(3-8-10)式の$\Psi(x)$ に(3-8-11)式を代入すると、

$$|\Psi> = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi(x)|x>dx = \int_{-\infty}^{+\infty}<x|\Psi>|x>dx = \int_{-\infty}^{+\infty}|x><x|\Psi>dx = \left(\int_{-\infty}^{+\infty}|x><x|dx\right)|\Psi> \tag{3-8-14}$$

となるので、

（**完備性**の条件）　$$\int_{-\infty}^{+\infty}|x><x|dx = \hat{I} \tag{3-8-15}$$

が要求される。式(3-8-5)と比べると、和が積分に置きかわっている。

式(3-8-15)を使って、内積の表式を求める。

異なる状態$|\Psi>$と$|\Psi'>$の内積は、

$$<\Psi|\Psi'> = <\Psi|\hat{I}|\Psi'> = <\Psi|\left(\int_{-\infty}^{+\infty}|x><x|dx\right)|\Psi'> = \int_{-\infty}^{+\infty}<\Psi|x><x|\Psi'>dx \tag{3-8-16}$$

と書けるが、最後の積分の中で、(3-8-11)より $<x|\Psi'> = \Psi'(x)$, $<\Psi|x> = \Psi^*(x)$ なので、

（**内積**）　$$<\Psi|\Psi'> = \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x)\Psi'(x)dx \tag{3-8-17}$$

となる。

続いて、粒子がある場所に見つかる確率について述べる。これも、離散固有値の場合の $P(\lambda_i) = |\alpha_i|^2 = \alpha_i^* \alpha_i$ に習い、連続スペクトルである事を考慮すると、

(確率密度) $$P(x) = |\Psi(x)|^2 = \Psi^*(x)\Psi(x) \tag{3-8-18}$$

(粒子を x と $x + dx$ の間に見い出す確率) $$P(x)dx \tag{3-8-19}$$

となる。

ここで、連続的な変数の場合、ある値の出る確率はゼロになってしまうので、幅を持たせなければならない事に注意[7]せよ。今の場合で言うと、「粒子を x と $x + dx$ の間に見い出す確率」、のような表現にしなければならない。したがって、上の $P(x)$ は確率密度であり、「粒子を x と $x + dx$ の間に見い出す確率」は $P(x)dx$ となる[8]。

全空間を考えると、全確率=1より、

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x)\Psi(x)dx = 1 \tag{3-8-20}$$

一方、これは、(3-8-17) より、$\Psi(x)$ どうしの内積ともみなせるので、

$$< \Psi | \Psi > = 1 \tag{3-8-21}$$

とも書ける。この表式は、波動関数の規格化の条件でもある。

すなわち、波動関数が規格化されていれば、全確率は１になる。

3-8-3. 位置表示での時間に依存するSchrödinger方程式

$|\Psi>$ が時間変化する場合は、(3-8-10)式は

$$|\Psi(t)> = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,t)|x> dx \tag{3-8-22}$$

となり、積分の中の波動関数が時間変化する[9]。そこで、$\Psi(x)$ を $\Psi(x,t)$ のように書いた。

---

[7] 連続型の確率変数の場合、その確率変数がある一点の値をとる確率は、取り得る点が無限個あるので、無限分の1になってしまい、その確率は０になってしまう。

[8] P(x)が変化しないくらいの幅dxを考えている。

[9] 離散固有値の場合と同じく、基底|x>は時間変化しない。

$\Psi(x,t)$は、(3-8-11)と同様に、

$$\Psi(x,t) = < x \,|\, \Psi(t) > \qquad \text{(3-8-23)}$$

となる。

次に、(3.7.14)式の「時間に依存するケット版Schrödinger方程式」から、波動関数で表した「時間に依存する位置表示でのSchrödinger方程式」を求める。

ケット版Schrödinger方程式を再度示す。

$$i\hbar \frac{\partial \,|\, \Psi(t) >}{\partial t} = \hat{H} \,|\, \Psi(t) > \qquad \text{(3-8-24)}$$

今、具体性を持たせるために、$\hat{H}$ として、ポテンシャル $V(x)$ の中で運動する１粒子のハミルトニアンを考える。運動量 p に対応する演算子を $\hat{p}$ 、$V(x)$ に対応する演算子を $V(\hat{x})$ と書く事にすると、

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \qquad \text{(3-8-25)}$$

ここで、$V(\hat{x})$ は $\hat{x}$ の関数であるが、$V(\hat{x})$を$\hat{x}$で展開し、$\hat{x}$ のべき乗が作用すると解釈する[10]。しかし、$\hat{x}$ は 実数 x を掛けるだけの演算子なので、結局、$V(\hat{x})$ は関数 $V(x)$ を掛けるだけの作用をする。

さて、(3-8-24)の位置表示を求めるために、両辺に左から $< x \,|$ をかけると[11]、

$$< x \,|\, i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \,|\, \Psi(t) > = < x \,|\, \hat{H} \,|\, \Psi(t) > \qquad \text{(3-8-26)}$$

(3-8-26)の左辺は、(3-8-23)を使うと、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} < x \,|\, \Psi(t) > = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) \qquad \text{(3-8-27)}$$

となり、波動関数を時間微分した項が出てくる。

(3-8-26)の右辺は、(3-8-25)のハミルトニアンを代入し、

$$< x \,|\, \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right) |\, \Psi(t) > = < x \,|\, \frac{\hat{p}^2}{2m} \,|\, \Psi(t) > + < x \,|\, V(x) \,|\, \Psi(t) > . \qquad \text{(3-8-28)}$$

---

[10]同じようなことは、(3.7.37)式 において演算子の指数関数の形で出てきた。

[11] **位置表示にする場合は、<x|を左から掛ける。これは、状態ケットから波動関数をひき出すための常套手段**である。(3-8-11)を見よ。

(3-8-28)の右辺の第２項目は、

$$< x\,|\,V(x)\,|\,\Psi(t) > \,=\, V(x) < x\,|\,\Psi(t) > \,=\, V(x)\Psi(x,t) \qquad \text{(3-8-29)}$$

であるから、単に、波動関数に$V(x)$ をかけたものになる。

(3-8-28)の右辺の第1項目は、

$$< x\,|\,\frac{\hat{p}^2}{2m}\,|\,\Psi(t) > \,=\, \frac{1}{2m} < x\,|\,\hat{p}^2\,|\,\Psi(t) > \,=\, \frac{1}{2m}(\,< x\,|\,\hat{p})\;\hat{p}\,|\,\Psi(t) > \qquad \text{(3-8-30)}$$

となる。ここで、(3-8-30)の最右辺は、次節で示す関係[12]、

$$< x\,|\,\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} < x\,| \qquad \text{(3-8-31)}$$

を２回続けて使う事により、

$$\frac{-i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x} < x\,|\,\hat{p}\,|\,\Psi(t) > \,=\, -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} < x\,|\,\Psi(t) > \,=\, -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) \qquad \text{(3-8-32)}$$

となる。これらをまとめると、(3-8-26)より

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\Psi(x,t) \qquad \text{(3-8-33)}$$

となり、「**波動関数で表した時間に依存する位置表示（x-表示）でのSchrödinger方程式**」が得られた。(3-8-33)式右辺のかっこの中がハミルトニアンに相当している。

結局、式(2-2-10)のSchrödinger方程式が再び得られた。

3-8-4. 平行移動（並進運動）と運動量[13]

3-7-1節では時間発展演算子について述べた。そこでは、状態の時間発展がユニタリー性を持つ時間発展演算子で$\hat{U}(t)$で表記され、式(3.7.10)のようにハミルトニアン $\hat{H}$ が時間生成子として関与していた（ $\hat{U}(\varepsilon) = \hat{I} - \frac{i\varepsilon\hat{H}}{\hbar}$ ）．

この節では平行移動とそれを表す演算子について調べ(3-8-31)を導く。

[12] 右辺で、(+ i h)ではなく(- i h)となっている事に注意せよ（符号に注意）。

[13] 講義補足

まず、無限小の平行移動（Δx の移動）を考える。

$$|x> \to |x+\Delta x> \quad \text{（平行移動）}. \qquad (3\text{-}8\text{-}34)$$

「平行移動の演算子」を $\hat{T}(\Delta x)$ と書く事にすると、

$$|x+\Delta x> = \hat{T}(\Delta x)|x> . \qquad (3\text{-}8\text{-}35)$$

平行移動の際にノルムが保存する要請（最初 $<x|x>=1$ ならば、平行移動後も、$<x+\Delta x|x+\Delta x>=1$ となる）を課すと、$<x|\hat{T}^{\dagger}(\Delta x)\hat{T}(\Delta x)|x>=1$ なので、$\hat{T}^{\dagger}\hat{T}=\hat{I}$ となり、$\hat{T}$ はユニタリー演算子となる。

次に、$\hat{T}(\Delta x)$ の具体的な形として、

$$\hat{T}(\Delta x) = \hat{I} - \frac{i\ (\Delta x)}{\hbar}\hat{p} \qquad (3\text{-}8\text{-}36)$$

を導入する。$\Delta x \to 0$ ならば当然、$\hat{T} \to \hat{I}$（恒等演算子）となる。式(3.7.10)と比較して見るとわかるが、無限小の時間発展の生成子であるハミルトニアン $\hat{H}$ の場所に 運動量演算子 $\hat{p}$ が入っている。これは、解析力学では、無限小の正準変換において「平行移動の生成子が運動量 p 」であった事にならったものである[14]。

今、一般の状態$|\Psi>$ に $\hat{T}(\Delta x)$ を作用させて見る。(3-8-14)式より、

$$|\Psi> = \int_{-\infty}^{+\infty} |x><x|\Psi>dx . \qquad (3\text{-}8\text{-}37)$$

これに $\hat{T}(\Delta x)$ を作用させると、

$$\hat{T}(\Delta x)|\Psi> = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{T}(\Delta x)|x><x|\Psi>dx$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} |x+\Delta x><x|\Psi>dx \qquad (3\text{-}8\text{-}38)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} |x'><x'-\Delta x|\Psi>dx' \qquad (3\text{-}8\text{-}39)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} |x'>\left(<x'|\Psi> - \Delta x\frac{\partial}{\partial x'}<x'|\Psi>\right)dx' \qquad (3\text{-}8\text{-}40)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} |x'><x'|\Psi>dx - \int_{-\infty}^{+\infty} |x'>\Delta x\frac{\partial}{\partial x'}<x'|\Psi>dx' \qquad (3\text{-}8\text{-}41)$$

$$= |\Psi> - \int_{-\infty}^{+\infty} |x'>\Delta x\frac{\partial}{\partial x'}<x'|\Psi>dx' \qquad (3\text{-}8\text{-}42)$$

となる。

---

[14] 3-7-2節の議論参照。また、その節の脚注5を参照

ここで、(3-8-38)から (3-8-39)では、変数変換 $x \to x' - \Delta x \quad (dx \to dx')$ を行った。(3-8-39)から(3-8-40)では $< x' - \Delta x| = < x'| - \Delta x \dfrac{\partial}{\partial x'} < x'| + \ldots$ のように Δx で展開した１次までの項をとった。

一方、式(3-8-36)を使うと、

$$\hat{T}(\Delta x)|\Psi> = \left(\hat{I} - \frac{i\ (\Delta x)}{\hbar}\hat{p}\right)|\Psi> = \hat{I}|\Psi> - \frac{i\ (\Delta x)}{\hbar}\hat{p}|\Psi> \qquad \text{(3-8-43)}$$

であるから、この式を(3-8-42)の結果、

$$\hat{T}(\Delta x)|\Psi> \ = |\Psi> - \int_{-\infty}^{+\infty} |x'> \Delta x \frac{\partial}{\partial x'} < x'|\Psi> dx' \qquad \text{(3-8-42 再掲)}$$

と比べると、

$$\hat{p}|\Psi> = \int_{-\infty}^{+\infty} |x'> \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'} < x'|\Psi> \right)dx' \qquad \text{(3-8-44)}$$

が得られる。

(3-8-44)の左から $< x|$ をかけると、

$$< x|\hat{p}|\Psi> = \int_{-\infty}^{+\infty} < x|x'> \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'} < x'|\Psi> \right)dx' = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} < x|\Psi> \qquad \text{(3-8-45)}$$

となる。ただし、 $< x|x'> = \delta(x - x')$ を使った。(3-8-45)の最左辺と最右辺をくらべる事により、(3-8-31)

$$< x|\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} < x| \qquad \text{(3-8-46)}$$

が導かれた。

最後に、<u>有限の平行移動に関する演算子</u>の表式を求めておく[15]。

有限の距離 x の平行移動は x/N だけの無限小平行移動 $\hat{T}(x/N)$ をN 回繰り返し、$N \to \infty$ する事により得られると考えると、

$$\hat{T}(x) = \lim_{N\to\infty}\left(1 - \frac{ix}{\hbar N}\hat{p}\right)^N = e^{-\frac{i\hat{p}}{\hbar}x} \qquad \text{(3-8-47)}$$

ここで、e^x として極限による次の定義を使った。

$$e^x = \lim_{n\to\infty}\left(1 + \frac{x}{n}\right)^n$$

[15] J.J.Sakuraiの教科書 1.6節を参照せよ

演習8 v.1.4

1.　$|\psi >$、$|\phi >$ を任意の状態ベクトルとするとき、お互いがエルミート共役の関係にある演算子$\hat{M}$と$\hat{M}^\dagger$の間には次の関係式が成りたつ（演習４の(3)、式(3-4-28)で$B \to \phi$, $A \to \psi$ とおいた）。

$$< \phi | \hat{M} | \psi > = < \psi | \hat{M}^\dagger | \phi >^* \qquad (3\text{-}8\text{-}48)$$

$\hat{M}$が$\hat{M}(\hat{x}, \hat{p})$で表される場合、$\hat{x} \to x, \hat{p} \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ で置き換えた$M(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x})$を定義すると、

位置表示の波動関数の表式では、(3-8-48)式のエルミート共役の関係は(3-8-17)式を使って次式で表される。

（エルミート共役の関係）
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) M \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (M^\dagger \phi(x))^* \psi(x) dx \qquad (3\text{-}8\text{-}49)$$

(3-8-49)の定義を使って、以下のことを証明せよ。

(1) $\hat{x}^\dagger = \hat{x}$ （$\hat{x}$ はエルミート演算子）

(2) $\hat{i}^\dagger = -\hat{i}$

(3) $\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger = -\frac{\partial}{\partial x}$

(4) $\hat{p}$ に対応する $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ はエルミート演算子

(5) 期待値 $< \hat{M} >_\phi = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) M \phi(x) dx$

2. 時間に依存しないケット版のSchrödinger方程式(3.7.18)を再掲する。

$$\hat{H} | E_j > = E_j | E_j > \qquad (3.8.50)$$

ここで、$|E_j >$ はハミルトニアン $\hat{H}$ の固有状態で、E_j は固有値である。

この両辺に左から $< x |$ をかける事により、**波動関数で表した時間に依存しないSchrödinger方程式**（位置表示での定常状態のSchrödinger方程式とも言う）。

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \varphi_j(x) = E_j \varphi_j(x) \qquad (3.8.51)$$

を求めよ。ただし、$< x | E_j > = \varphi_j(x)$　とした。$\varphi_j(x)$ はx表示でのエネルギー固有関数とも呼ばれる。

$$\left(| E_j > = \int \varphi_j(x) | x > dx \right)$$

3. 時間に依存したSchrödinger方程式の形式解は (3.7.20)で表された。

$$| \Psi(t) > = \sum_j \alpha_j(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t} | E_j > \qquad (3.8.52)$$

これの両辺に左から $< x |$ をかける事により、形式解の位置表示を求めよ。

$$\Psi(x, t) = \sum_j \alpha_j(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t} \varphi_j(x) \qquad (3.8.53)$$

3-8-5. 位置表示のSchrödinger方程式の形式解

3-8-3節において、ケット版のSchrödinger方程式から、１次元のポテンシャル $V(x)$ 内の粒子に対する「波動関数で表した位置表示（x-表示）での時間に依存するSchrödinger方程式」を求めた。再掲すると、

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi(t)>}{\partial t}=\hat{H}|\Psi(t)> \quad \text{（ケット版）} \qquad (3\text{-}8\text{-}54)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\Psi(x,t) \quad \text{（位置表示）}. \qquad (3\text{-}8\text{-}55)$$

ここで、波動関数$\Psi(x,t)$は、

$$\Psi(x,t)\equiv<x|\Psi(t)>. \qquad (3\text{-}8\text{-}56)$$

3-7-5節で示したようにケット版のSchrödinger方程式(3-8-54)の解（形式解）を求める手順は以下のようになる（復習）。

まず「ケット版の時間に依存しないSchrödinger方程式」

$$\hat{H}|E_j>=E_j|E_j> \quad \text{（ケット版）} \qquad (3\text{-}8\text{-}57)$$

を解き、$\hat{H}$ の固有状態$|E_j>$と固有値を E_j を求めた。

次に、求める解である$|\Psi(t)>$を、固有ケット$|E_j>$を基底として次のように表した。

$$|\Psi(t)>=\sum_j \alpha_j(t)|E_j>. \qquad (3\text{-}8\text{-}58)$$

ここで、$\{|E_j>\}$は時間変化しないので、$|\Psi(t)>$を求める事は、$\alpha_j(t)$を求めるのと同等である。$\alpha_j(t)$ は $\hat{U(t)}=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ を 初期状態$|\Psi(0)>$（$t=0$での状態）に作用させて求めるか、式(3-8-58)を式(3-8-54)に代入し$\alpha_j(t)$ に関する方程式を作って求めた。得られた形式解は、

$$|\Psi(t)>=\sum_j \alpha_j(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_jt}|E_j> \quad \text{（ケット版での形式解）}. \qquad (3\text{-}8\text{-}59)$$

要するに、[1] 式(3-8-57)の固有値問題を解いて $\hat{H}$ の固有状態$|E_j>$、固有値 E_j を求め、

[2] 形式解の(3-8-59)式に代入すれば、 $|\Psi(t)>$が得られる。

これにならい、以下、位置表示のSchrödinger方程式の形式解（一般解）を求める[16]。

まず、エネルギーの固有状態 $|E_j>$を、$|x>$を基底として表す[17]と、

$$|E_j>=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi_j(x)|x>dx \qquad (3\text{-}8\text{-}60)$$

$$\varphi_j(x)=<x|E_j> \qquad (3\text{-}8\text{-}61)$$

となる。ここで $\varphi_j(x)$ は「ハミルトニアン（エネルギー）の固有状態」に対応する波動関数なので、特に「**<u>位置表示（x-表示）でのエネルギーの固有関数</u>**」と呼ばれる。

---

[16]**式(3-8-55)の偏微分方程式を直接、変数分離法で解く方法もある**（演習）

[17]式(3-8-10)で|Ψ>を|Ej>とした場合にあたる

式(3-8-57)の両辺に、左側から $<x|$ をかけ、式(3-8-31) と式(3-8-61)を使うことにより、「**位置表示での時間に依存しないSchrödinger方程式**」（「位置表示での**定常状態**のSchrödinger方程式」とも言う）、

$$H\varphi_j(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\varphi_j(x) = E_j\varphi_j(x) \quad \text{（位置表示）} \qquad \text{(3-8-62)}$$

が導ける[18]（前節末の「演習８」の２の式(3-8-51)をみよ）。

更に、式(3-8-59)の両辺に、左側から $<x|$ をかけ、(3-8-23)(3-8-61)を使うと、

$$\Psi(x,t) = \sum_j \alpha_j(0)\ e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t}\varphi_j(x) \quad \text{（位置表示での形式解）} \text{(3-8-63)}$$

が得られる（前節末の「演習８」の２の式(3-8-53)をみよ）。

こうして「位置表示での時間に依存するSchrödinger方程式」の形式解が得られた。

$\Psi(x,t)$ がわかったので、時刻 t において、粒子が $x \sim x+dx$ に見出される確率 $P(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 dx$ が得られる。もし、初期状態がエネルギーの固有関数の一つであったなら確率密度 $|\Psi(x,t)|^2$ は時間変化しない。例えば、$t=0$ で $|\Psi(0)> = |E_j>$ ならば、式(3-8-58)より、$\alpha_j(0)\ (=1)$ 以外は 0 となるので、式(3-8-63) は、$\Psi(x,t) = e^{-i\frac{E_j}{\hbar}t}\varphi_j(x)$ となる。よって、確率密度は $|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = |\varphi_j(x)|^2$ となり時間によらなくなる。このため、エネルギーの固有状態は「**定常状態**」とも呼ばれる。ただし、$\Psi(x,t)$ それ自身は $e^{-i\frac{E_j}{\hbar}t}$ の時間依存性（位相因子）を持っている。

位置表示での時間に依存する１次元Schrödinger方程式の解法の手順をまとめると、

[手順1] 古典的なハミルトニアンから $p \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$の変換規則を使い、$H(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x})$ を作る

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \qquad \text{(3-8-64)}$$

[手順2] H の固有関数$\varphi_j(x)$と固有値E_jを「位置表示の時間に依存しないSchrödinger方程式」

$$H\varphi_j(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\varphi_j(x) = E_j\varphi_j(x) \qquad \text{(3-8-65)}$$

より求める。

[手順3] 解 $\varphi_j(x)$と E_j を

$$\Psi(x,t) = \sum_j \alpha_j(0)\ e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t}\varphi_j(x) \qquad \text{(3-8-66)}$$

に代入することにより、時間に依存したSchrödinger方程式の一般解が得られる。特殊解は境界条件や初期条件を取り入れることにより得られる。

結局、手順２の「時間に依存しない（定常状態の）Schrödinger方程式」（固有値問題）を解くことが主要な作業となる。このため、手順３まで進まず、**手順2で問題が解けたとする場合も多い。**

---

18 ここで、Hもハミルトニアンと呼ばれ、Hハットに対応する。

3-8-6. 運動量の固有関数[19]

運動量に対応する演算子を $\hat{p}$, その固有状態を $|p>$、固有値を p とすると、

$$\hat{p}|p> = p|p>. \quad (3\text{-}8\text{-}67)$$

$|x>$ と同様に、$|p>$ も正規直交基底をなし、複素ベクトル空間を張ることができる。
この時、正規直交性と完備性は

$$<p|p'> = \delta(p-p') \quad (3\text{-}8\text{-}68)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |p><p| dp = \hat{I} \quad (3\text{-}8\text{-}69)$$

と書ける。
自由粒子（非束縛状態）では p は連続固有値（連続スペクトル）$(-\infty < p < +\infty)$ をとる[20]。

この時、$|p>$ は、$\hat{x}$ の固有状態 $|x>$ を基底に選ぶと、

$$|p> = \int_{-\infty}^{+\infty} u_p(x')|x'> dx' \quad (3\text{-}8\text{-}70)$$

$$u_p(x) \equiv <x|p> \quad (3\text{-}8\text{-}71)$$

と書ける。ここで、波動関数 $u_p(x)$ を特に「位置表示での**運動量の固有関数」**という。

式(3-8-67)の両辺に左から $<x|$ をかけると、

$$<x|\hat{p}|p> = p<x|p> \quad (3\text{-}8\text{-}72)$$

この式の右辺は(3-8-71)を使って

$$p<x|p> = pu_p(x) \quad (3\text{-}8\text{-}73)$$

となる。 式 (3-8-72)の左辺は、式(3-8-31) $<x|\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}<x|$ を使うと、

$$<x|\hat{p}|p> = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}<x|p> = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}u_p(x) \quad (3\text{-}8\text{-}74)$$

となる。式(3-8-72)と式(3-8-74)は等しいので、

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}u_p(x) = p\ u_p(x) \quad (3\text{-}8\text{-}75)$$

が得られる。これは $u_p(x)$ を求める方程式になっている。

これは簡単に解けて、位置表示の運動量の固有関数、

$$u_p(x) = c_p e^{+i\frac{p}{\hbar}x} \quad (3\text{-}8\text{-}76)$$

$$= c_p e^{+ikx} \quad (3\text{-}8\text{-}77)$$

が求まる。c_p は規格化定数である。また、$k = \frac{p}{\hbar}$ とした。(3-8-67)式 $<p|p'> = \delta(p-p')$ により規格化すると、

$c_p = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ となることを示せる[21]。

---

[19] 講義の補足

[20] 後の節で示す。これに対し、**束縛状態ではp（あるいはE）は離散的な値を持つ**。これも後節で扱う。

[21] 演習。そのまま$|u_p(x)|^2$を全空間で積分すると無限大になってしまうので、いくつか特別な規格化が必要になる。ここでは、デルタ関数による規格化を示した。他には周期的境界条件による規格化の方法がある。例えば、松居「量子力学基礎」4章を見よ。**規格化係数は規格化の方法で変わるので注意。**

運動量の固有関数(3-8-76)(3-8-77)式を見ると、平面波の形になっていることがわかる。これは空間全体に広がっているので、この状態で位置を観測すると粒子を見出す確率密度は

$$|u_p(x)|^2 = u_p^*(x)u_p(x) = |c_p|^2 = \text{一定} \qquad \text{(3-8-78)}$$

となるので、どの場所でも同じとなり、粒子の居場所は不確定になってしまう。一方、この状態は運動量の固有状態なので、運動量を測定すれば、きちっと決まり、運動量の固有値pが得られる。これは、$\hat{x}$ と$\hat{p}$との交換関係はゼロにはならず（$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$）**不確定性関係**があるので、片方を正確に決めた場合、他方は全く定まらないことになるからである（演習６の６を参照せよ）。

3-8-7 運動量表示（p-表示）の波動関数[22]

これまで、$\hat{x}$ の固有状態を基底のセット$\{|x>\}$に選んで、位置表示（x-表示）の波動関数 $\Psi(x)$で話を進めてきた。しかし、$\hat{p}$ の固有状態を基底のセット $\{|p>\}$ に選ぶことも当然できる。この時、位置表示と同じようにして、運動量表示（p-表示）の波動関数 $\Phi(p)$ を定義できる。

任意の状態$|\alpha>$において、粒子の位置を測定すると、$x \sim x + dx$ に観測される確率は$P_\alpha(x) = |\Psi_\alpha(x)|^2 dx$となるが、運動量を測定した場合は、$p \sim p + dp$ の値が

$P_\alpha(p) = |\Phi_\alpha(p)|^2 dp$ （運動量が $p \sim p + dp$ の範囲で観測される確率） (3-8-79)

の確率 $P_\alpha(p)$ で観測される。

次ページの表に、位置表示の場合と運動量表示の場合を比較して示す。

最後に、位置表示の波動関数 $\Psi(x)$と運動量表示の波動関数 $\Phi(p)$の関係を示す。それぞれの波動関数の定義、(3-8-88)を(3-8-86)の完備性の式を使って書き換えると、

$$\Psi_\alpha(x) = <x|\alpha> = \int_{-\infty}^{+\infty} <x|p><p|\alpha> dp \qquad \text{(3-8-80)}$$

$$\Phi_\alpha(p) = <p|\alpha> = \int_{-\infty}^{+\infty} <p|x><x|\alpha> dx \qquad \text{(3-8-81)}$$

となる。(3-8-80) (3-8-81)の右辺に、$<x|p> = u_p(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$ （規格化定数を $c_p = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ とした式(3-8-76)）と、その複素共役$<p|x> = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{-ipx}{\hbar}}$、および、$\Psi_\alpha(x) = <x|\alpha>$、$\Phi_\alpha(p) = <p|\alpha>$を代入すると、

$$\Psi_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{ipx}{\hbar}}\ \Phi_\alpha(p)\ dp \qquad \text{(3-8-82)}$$

$$\Phi_\alpha(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{-ipx}{\hbar}}\ \Psi_\alpha(x)\ dx \qquad \text{(3-8-83)}$$

となる。こうして、**位置表示の波動関数 $\Psi(x)$と運動量表示の波動関数 $\Phi(p)$は互いにフーリエ変換と同等の関係**になっていることがわかる。

[22] 講義補足

	運動量表示（p-表示）	位置表示（x-表示）	
[固有値方程式]	$\hat{p}\|p> = p\|p>$	$\hat{x}\|x> = x\|x>$	(3-8-84)
[規格直交性]	$<p\|p'> = \delta(p-p')$	$<x\|x'> = \delta(x-x')$	(3-8-85)
[完備性]	$\int_{-\infty}^{+\infty} \|p><p\|dp = \hat{I}$	$\int_{-\infty}^{+\infty} \|x><x\|dx = \hat{I}$	(3-8-86)

[任意の状態$|\alpha>$の展開と波動関数]

$$|\alpha> = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_\alpha(p)|p>dp \qquad |\alpha> = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_\alpha(x)|x>dx \qquad \text{(3-8-87)}$$

$$\Phi_\alpha(p) \equiv <p|\alpha> \qquad \Psi_\alpha(x) \equiv <x|\alpha> \qquad \text{(3-8-88)}$$

（運動量表示での波動関数）　（位置表示での波動関数）

[固有関数]　$|\alpha> = |p'>$と選ぶと、　$|\alpha> = |p>$と選ぶと、

$$u_{p'}(p) \equiv <p|p'> = \delta(p-p') \qquad u_p(x) \equiv <x|p> = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \qquad \text{(3-8-89)}$$

(運動量表示での運動量の固有関数)　（位置表示での運動量の固有関数）

$|\alpha> = |x>$と選ぶと、　$|\alpha> = |x'>$と選ぶと、

$$u_x(p) \equiv <p|x> = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \qquad u_{x'}(x) \equiv <x|x'> = \delta(x-x') \qquad \text{(3-8-90)}$$

（運動量表示での位置の固有関数）　（位置表示での位置の固有関数）

[演算子の表記]

$$\hat{p} \to p \qquad <x|\hat{p} \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}<x| \qquad \text{(3-8-91)}$$

$$<p|\hat{x} \to +i\hbar\frac{\partial}{\partial p}<p| \text{ [23]} \qquad \hat{x} \to x \qquad \text{(3-8-92)}$$

（注）　運動量表示のSchrödinger方程式も導けるが、これは自由課題とする

[23] 本講義では求め方を示していない。自由課題とする。

演習9

1.「位置表示での時間に依存するSchrödinger方程式」は、 式 (3-8-55)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\Psi(x,t)$$

であった。$\Psi(x,t)=\varphi(x)\cdot f(t)$ と置き、$\varphi(x)$ と $f(t)$ が満たす２つの方程式を求める（変数分離法）。

(1) $\varphi(x)$の満たす方程式は「位置表示の時間に依存しないSchrödinger方程式」式(3-8-61)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)\varphi(x)=E\varphi(x)$$

になっていることを示せ。

(2) $f(t)$ 満たす方程式を書き、$f(t)=Ce^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ が解であることを示せ。

2. 位置表示での位置の固有関数は(3-8-90)式 $u_{x'}(x)\equiv <x|x'>\ =\delta(x-x')$ であることを求めよ。

3. 位置表示での運動量の固有関数(3-8-76)式 $<x|p>=u_p(x)=c_pe^{+i\frac{p}{\hbar}x}$ において、規格化定数 c_p が

$\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ であることを $<x|x'>=\ <x|\hat{I}|x'>=\int_{-\infty}^{+\infty}<x|p><p|x'>dp$ から出発して求めよ。

（hint: 左辺、右辺を別々に計算し、最後に等しいと置く。右辺は、 $<x|p>=c_pe^{+i\frac{p}{\hbar}x}$ とデルタ関数の表式　$\delta(x)=\dfrac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{ikx}dk$　を使う）

4. 連続固有値を持つ $\hat{x}$, $\hat{p}$ に対応する行列の行列要素（基底を$\{|x>\}$に選ぶ）を $<x|\hat{x}|x'>$, $<x|\hat{p}|x'>$ のように考えた時、

(1) $<x|\hat{x}|x'>$ は対角行列、かつ、エルミート行列であることを示せ。

(2) $<x|\hat{p}|x'>$ はエルミート行列であることを示せ。

（hint: δ 関数は偶関数なので、$\delta(-x)=\delta(x)$）