波動現象の数理の基本事項

国広悌二 (2009 年 6 月作成)

1　はじめに

量子力学状態は波動関数で与えられ、それを記述する Schorödinger 方程式は波動方程式と呼ばれる。量子力学的波動は古典物理学の数理と類似している面が多いので、その理解は量子力学の理解の助けとなる。そこでこの付録では古典波動の基礎について整理しておく。

2　波の表現

波長 λ, 振動数 ν で x の正の方向に進む平面波（a, θ は実の定数):

$$\psi(x,\,t) = a\cos[(\frac{x}{\lambda} - \nu t)2\pi + \theta] = \mathrm{Re}A\mathrm{e}^{i(\frac{x}{\lambda}-\nu t)2\pi}. \quad (A \equiv a\mathrm{e}^{i\theta}) \tag{2.1}$$

角振動数 $\omega = 2\pi\nu$ および (2π[m] 当たりの) 波数 $k = 2\pi/\lambda$ を用いると,

$$\psi(x,\,t) = \mathrm{Re}A\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)}. \tag{2.2}$$

時刻が $t \to t + \Delta t$ となったときの位相は $k(x - \omega\Delta t/k) - \omega t + \theta$ となるので、

$$\psi(x,\,t + \Delta t) = \psi(x - \omega\Delta t/k,\,t). \tag{2.3}$$

すなわち、波は x の正の方向に $\Delta x \equiv (\omega/k)\cdot\Delta t = \nu\lambda\Delta t$ だけ移動する。これは波の速さが $\Delta x/\Delta t = v = \lambda\nu = \omega/k$ であることを意味している。

3 次元空間 ($\boldsymbol{r} = (x,\,y,\,z)$) を波長 λ で単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ 方向に進む波は波数ベクトル

$$\boldsymbol{k} \equiv \frac{2\pi}{\lambda}\boldsymbol{n}, \tag{2.4}$$

を用いて

$$\psi(\boldsymbol{r},\,t) = \mathrm{Re}A\mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}, \tag{2.5}$$

と書ける。$\boldsymbol{n}$ が x 軸に平行で $\boldsymbol{n} = (1,\,0,\,0)$ と書けるときには (2.2) に帰着する。

[問い] 図 1 を参考にして、(2.5) で表される波の等位相面が $\boldsymbol{n}$ に垂直な平面をなすことを確かめよ。

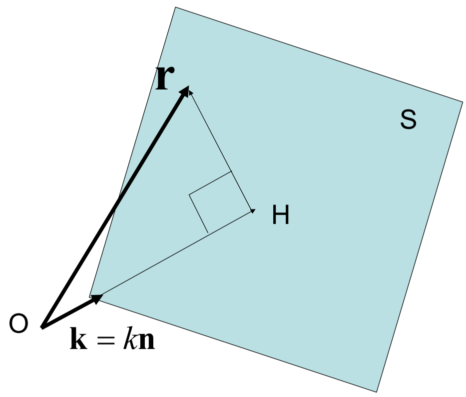

図 1: $\boldsymbol{r}$ の $\boldsymbol{k}$ 方向の射影 $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{n} \equiv \xi$ が一定である面 S は $\boldsymbol{k}$ に垂直であり平面をなす。点 H は点 O から平面 S に降ろした垂線の足である: $\mathrm{OH} = \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{n} = \xi$. 与えられた時刻 t においては、S 上で $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t = k\xi - \omega t =$ 一定. すなわち、平面 S は等位相面を与える.

3　波動方程式とその解の典型例

3.1　波動方程式

平面波 (2.2) は次の**波動方程式**を満たす：

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = v^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}. \quad (\omega = vk.) \tag{3.1}$$

3 次元の波 (2.5) の満たす方程式は、

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = v^2\nabla^2\psi. \tag{3.2}$$

波動方程式 (3.1)（3.2) は**線形**の方程式であり、$\psi_i \quad (i = 1,\, 2)$ が (3.1)（(3.2)) の解であれば、その任意の**重ね合わせ** $\psi \equiv c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ も解である。

なお、「**外力**」$F(\boldsymbol{r},\, t)$ が働いている場合は、波動方程式は

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} - v^2\nabla^2\right]\psi = F(\boldsymbol{r},\, t) \tag{3.3}$$

となる。この**非斉次方程式**の解は (3.3) を満たす特解 $\psi_s(\boldsymbol{r},\, t)$ と**斉次方程式** (3.2) の一般解 $\psi_0(\boldsymbol{r},\, t)$ の重ね合わせで表される: $\psi = \psi_0 + \psi_s$.

3.2　1 次元波動方程式の d'Alembert の解

次の変数変換を行う：

$$\xi = x - vt, \quad \eta = x + vt. \tag{3.4}$$

このとき、(3.2) は次のように変換される；

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \eta \partial \xi} = 0. \tag{3.5}$$

[問い] これを示せ。[ヒント]; $\partial_t = (\partial\xi/\partial t)\partial_\xi + (\partial\eta/\partial t)\partial_\eta = v(-\partial_\xi + \partial_\eta)$, $\partial_x = (\partial\xi/\partial x)\partial_\xi + (\partial\eta/\partial x)\partial_\eta = \partial_\xi + \partial_\eta$.

$\Xi = \partial\psi/\partial\xi$ とおくと、

$$\frac{\partial \Xi}{\partial \eta} = 0, \tag{3.6}$$

だから、Ξ は η に依存しないので、ξ の任意の関数 $f(\xi)$ を用いて、

$$\frac{\partial \psi}{\partial \xi} = \Xi(\xi) = f(\xi). \tag{3.7}$$

これを ξ について積分して、

$$\psi = \int^{\xi} d\xi' f(\xi') \; + \; G(\eta). \tag{3.8}$$

ここで、$G(\eta)$ は ξ 積分に関する積分定数であり、η に依存してよいことをあらわに書いた。

$$\int^{\xi} d\xi' f(\xi') \equiv F(\xi), \tag{3.9}$$

と書くと、

$$\psi = F(\xi) + G(\eta) = F(x - vt) + G(x + vt). \tag{3.10}$$

これを **d'Alembert(ダランベール) の解**という。これより、1 次元波動方程式の解は必ず x の正の方向に進む解 $F(x - vt)$ と負の方向に進む解 $G(x + vt)$ との重ね合わせで表すことができることが分かる。

3.3 1次元波動方程式の初期値問題の解: Stokes の公式

d'Alembert の解 (3.10) を用いて、次の初期値問題を解くことができる :

$$\psi(x,t=0)=h(x),\quad \left.\frac{\partial\psi}{\partial t}\right|_{t=0}=V(x). \tag{3.11}$$

これに (3.10) を代入すると、

$$\begin{aligned}&\text{(i)}\qquad F(x)+G(x)=h(x),\\ &\text{(ii)}\qquad v\frac{d}{dx}(F(x)-G(x))=V(x).\end{aligned} \tag{3.12}$$

これから $F(x),G(x)$ を求め、(3.10) に代入して

$$\psi(x,t)=\frac{1}{2}\left(h(x-vt)+h(x+vt)\right)+\frac{1}{2v}\int_{x-vt}^{x+vt}dx'V(x'), \tag{3.13}$$

を得る。これを **Stokes の公式**という。

[問い] (i), (ii) より Stokes の公式を導け.

特に, 初期速度分布 $V(x)$=0 のとき、(3.13) は

$$\psi(x,t)=\frac{1}{2}\left[h(x-vt)+h(x+vt)\right], \tag{3.14}$$

となる。これは、$t=0$ での媒質の変位 $h(x)$ が $t>0$ では振幅が $\frac{1}{2}$ になって x の正負の方向に進行する 2 つの波に分裂することを意味する。たとえば、二等辺三角形の変位は $t>0$ でまず台形になり、そして媒質が十分長いときは振幅が $\frac{1}{2}$ の二等辺三角形の波に分裂してそれぞれ左右に移動して行く。

3.4 定常波解

変数分離形 $\psi(x,t)=T(t)f(x)$ の解を定常波解という。このとき、

$$\frac{d^2T}{dt^2}f=Tv^2\frac{d^2f}{dx^2}. \tag{3.15}$$

両辺を Tf で割って整理すると、$\frac{1}{T}\frac{d^2T}{dt^2}=v^2\frac{1}{f}\frac{d^2f}{dx^2}$. 左辺と右辺はそれぞれ t,x のみの関数である。逆に言うと、それぞれ t, x に依存しない、すなわち定数である。この定数を $-\omega^2$ とおくと、

$$\frac{d^2T}{dt^2} = -\omega^2T, \tag{3.16}$$

$$\left[\frac{d^2}{dx^2}+k^2\right]f = 0.\quad (k=\omega/v) \tag{3.17}$$

後者を (1 次元)**Helmholtz(ヘルムホルツ)** 方程式という。

同様に、3 次元の場合は $\psi(\boldsymbol{r},t) = T(t)f(\boldsymbol{r})$ と置くと、

$$\left[\nabla^2 + k^2\right] f = 0. \quad (k = \omega/v), \tag{3.18}$$

を得る。

3.5 1 次元 Helmholtz 方程式 (3.17) の解

$$T(t) = a_+ \mathrm{e}^{i\omega t} + a_- \mathrm{e}^{-i\omega t}, \tag{3.19}$$

$$f(x) = b_1 \mathrm{e}^{ikx} + b_2 \mathrm{e}^{-ikx} \tag{3.20}$$

元の方程式が線形なので、上の係数すべてに同じ数を掛ける不定性がある。

固定端境界条件の場合

$$\psi(0,\, t) = \psi(L,\, t) = 0. \tag{3.21}$$

$f(0) = f(L) = 0$ より、$b_1 + b_2 = 0$ および $b_1 \mathrm{e}^{ikL} + b_2 \mathrm{e}^{-ikL} = 0$. 前者より、$b_2 = -b_1$.　これを 2 番目の式に代入して、$2ib_1 \sin kL = 0$. $b_1 \neq 0$ でなければならないから、$kL = n\pi$, $(n = 1,\, 2, ...)$. すなわち、波数 k は次の離散的な値に限られる；

$$k = \frac{n\pi}{L} \equiv k_n, \quad n = 1,\, 2, ... \tag{3.22}$$

負の k は b_i の符号に吸収できることに注意。この境界条件を付した Helmholtz 方程式は次のように**線形演算子** $\hat{\mathcal{L}} \equiv -d^2/dx^2$ に対する**固有値方程式**の形を取る：

$$\hat{\mathcal{L}} f_n = k_n^2 f_n. \quad (k_n^2 \text{が固有値},\ f_n(x) \text{ が固有関数.}) \tag{3.23}$$

[直交性]

固有関数 $f_n(x) = \sin k_n x$ $(n = 1, 2, ...)$ は直交系である：

$$\int_0^L f_n(x) f_m(x) \;=\; \frac{1}{2}\left[\frac{1}{k_n - k_m}\sin(k_n - k_m)x - \frac{1}{k_n + k_m}\sin(k_n + k_m)x\right]_0^L = 0, \quad (n \neq m) \tag{3.24}$$

[内積の導入]
境界条件 (3.21) を満たし、$[0,\, L]$ で定義されている 2 個の関数 $f(x),\, g(x)$ に対して内積を次のように定義する：

$$\langle f|g\rangle = \int_0^L dx f(x)g(x). \quad ただし, f(0) = g(0) = f(L) = g(L) = 0 \tag{3.25}$$

この内積の定義された関数空間では線形演算子 $\hat{\mathcal{L}}$ は**対称（エルミート）**である：

$$\langle f|\hat{\mathcal{L}}|g\rangle \equiv \int_0^L dx f(x)\hat{\mathcal{L}}g(x) = \int_0^L dx(\hat{\mathcal{L}}f(x))\, g(x) = \langle \hat{\mathcal{L}}f|g\rangle. \tag{3.26}$$

[問い] 部分積分を行ってこれを示せ.

さらに、この内積の記法を用いると、

$$\langle f_n|f_m\rangle = 0. \quad (n \neq m) \tag{3.27}$$

[問い] $\hat{\mathcal{L}}$ のエルミート性 (3.26) と固有値の定義 (3.23) だけを用いて、固有関数の直交性 (3.27) を示せ.

[規格化]

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{L}{2}} f_n(x). \tag{3.28}$$

$\{\varphi_n(x)\}_{n=1,2,\ldots}$ は**規格直交系**となる：

$$\langle \varphi_n|\varphi_m\rangle \equiv \int_0^L \varphi_n(x)\varphi_m(x) = \delta_{nm}. \tag{3.29}$$

[基準振動]
このとき、角振動数 ω も離散的な値

$$\omega = vk_n \equiv \omega_n, \tag{3.30}$$

に限られることになる。これを固有角振動数あるいは基準角振動数とよぶ。
こうして固定端の場合の変数分離解は

$$\psi(x,\, t) = (a_{+n}\mathrm{e}^{i\omega_n t} + a_{-n}\mathrm{e}^{-i\omega_n t})\varphi_n(x). \tag{3.31}$$

ただし、$\sqrt{L/2}a_{\pm n}$ をあらためて $a_{\pm n}$ と定義した。この解で表される振動を固有振動あるいは基準振動と呼ぶ。

[一般解: 初期値問題の解]
基準振動を重ね合わせたものが固定端の場合の一般の振動を与える解である：

$$\psi(x,\,t) = \sum_{n=1}^{\infty}(a_{+n}\mathrm{e}^{i\omega_n t} + a_{-n}\mathrm{e}^{-i\omega_n t})\varphi_n(x). \tag{3.32}$$

無限個の係数 $a_{\pm n}$ は初期条件から決まる。
[初期条件の考慮]
t について 2 階の微分方程式だから 2 つの条件が必要である:

$$\psi(x,\,0) = h(x), \quad \left.\frac{\partial\psi}{\partial t}\right|_{t=0} = V(x). \tag{3.33}$$

ここに、$h(x)$, $V(x)$ は任意の連続関数.
これらを (3.32) に代入すると、

$$\sum_{n=1}^{\infty}(a_{+n}+a_{-n})\varphi_n(x) \;=\; h(x), \tag{3.34}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty}i\omega_n(a_{+n}-a_{-n})\varphi_n(x) \;=\; V(x). \tag{3.35}$$

これは、$h(x), V(x)$ を **Fourier 級数**で表す問題である。
[問い] 以下を示せ：

1.

$$a_{+n} \;=\; \frac{1}{2}\langle\varphi_n|h - \frac{i}{\omega_n}V\rangle, \tag{3.36}$$

$$a_{-n} \;=\; \frac{1}{2}\langle\varphi_n|h + \frac{i}{\omega_n}V\rangle. \tag{3.37}$$

[ヒント] (3.34) および (3.35) と $\langle\varphi_n|$ との内積を取り、(3.29) を用いよ。

2. このフーリエ係数を用いて得られた解が Stokes の解 (3.13) の形に書けることを示せ。[ヒント] まず、(3.32) において、$\mathrm{e}^{\pm i\omega t} = \cos\omega t \pm i\sin\omega t$ を代入する。次に、sin,cos の和と差の公式を用い、直接 (3.34) や (3.35) と比較せよ。

3. 片方が「自由端境界条件」になっている場合、すなわち、

$$f(0) = 0, \quad \left.\frac{df}{dx}\right|_{x=L} = 0, \tag{3.38}$$

の場合について、固定端の場合と同様の考察をせよ。

3.6 球面波

原点にデルタ関数形の外力 $F(\boldsymbol{r},\, t) = F_0 v^2 \delta(\boldsymbol{r}) \mathrm{e}^{-i\omega t}$ が働いているとき、波動方程式 (3.3) は

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} - v^2 \nabla^2\right] \psi = F_0 v^2 \delta(\boldsymbol{r}) \mathrm{e}^{-i\omega t}, \tag{3.39}$$

となる。このときの特解を求めよう。$\psi = \mathrm{e}^{-i\omega t} G(\boldsymbol{r})$ と置くと、

$$[\nabla^2 + k^2] G(\boldsymbol{r}) = -F_0 \delta(\boldsymbol{r}), \quad (k = \omega/v). \tag{3.40}$$

Fourier 変換を用いて解くのが簡単である。まず、デルタ関数の Fourier 変換はよく知られているように、

$$\delta(\boldsymbol{r}) = \int \frac{d^3\boldsymbol{q}}{(2\pi)^3} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}. \tag{3.41}$$

$G(\boldsymbol{r})$ の Fourier 変換を次のように定義する：

$$G(\boldsymbol{r}) = \int \frac{d^3\boldsymbol{q}}{(2\pi)^3} g(\boldsymbol{q}) \mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}. \tag{3.42}$$

これを (3.40) に代入して、Fourier 変換の一意性を用いると、

$$(q^2 - k^2) g(\boldsymbol{q}) = F_0. \tag{3.43}$$

この解は

$$g(\boldsymbol{q})/F_0 = \mathrm{P}\frac{1}{q^2 - k^2} + c_+ \delta(q - k) + c_- \delta(q + k), \tag{3.44}$$

と書ける。ここで、P は Cauchy の主値を表し、$c_\pm(q)$ は $q = k$ で正則な任意関数。ただし、デルタ関数の性質

$$(x - a)\delta(x - a) = 0, \tag{3.45}$$

を用いた.

$c_\pm(q)$ は偏微分方程式 (3.39) に付随する境界条件を指定しないと決まらない。ここでは、「外向き波境界条件」の場合を考える。すなわち、

$$g(\boldsymbol{q}) = \frac{F_0}{q^2 - k^2 - i\epsilon}, \quad (\epsilon > 0) \tag{3.46}$$

と取る。

[注]

$$\frac{1}{x \pm i\epsilon} = P\frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x). \tag{3.47}$$

このとき、

$$
\begin{aligned}
G(\boldsymbol{r}) &= F_0 \int \frac{d^3\boldsymbol{q}}{(2\pi)^3} \frac{1}{q^2 - k^2 - i\epsilon} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \\
&= \frac{F_0}{4\pi^2} \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{q^2 - k^2 - i\epsilon} \int_{-1}^1 d\chi \mathrm{e}^{iqr\chi}, \\
&= F_0 \frac{1}{4\pi r} \int_{-\infty}^\infty \frac{dq}{2\pi i} \left[\frac{1}{q - k - i\epsilon} + \frac{1}{q + k + i\epsilon} \right] \mathrm{e}^{iqr}, \\
&= F_0 \frac{\mathrm{e}^{ikr}}{4\pi r}. \qquad (3.48)
\end{aligned}
$$

ここで、上半面を巡る半円に対して Cauchy の積分定理を用いた.

こうして、

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = F_0 \frac{\mathrm{e}^{i(kr - \omega t)}}{4\pi r}. \qquad (3.49)$$

これは、振幅が $1/r$ で減衰しながら r の正の方に広がっていく球対称な波面を持つ波を表している。これを「外向き球面波」という。