5　波束の構成と平面波

Einstein の光量子論から de Broglie の物質波にいたるまでには長い時間がかかりました。波により「粒子」を表すことはできますが、波の位相が一定の条件から速度を決める (位相速度) と粒子の速度と一致しないという問題が長くかかった原因の 1 つでしょう。ここでは近似的に粒子を表す波束とこの波束が動く速度を考えます。

[5.A]　波束の群速度と物質波の角振動数

平面波が $\psi_k(x,t) = \exp(i(kx-\omega t))/\sqrt{2\pi}$ と与えられる場合、平面波の重ね合わせでできる波束の中心の動く速度は位相速度と異なり、

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \tag{5.1}$$

となる。この速度を**群速度**とよぶ。この群速度が古典的な粒子の速度と一致するという要請から、物質波の角振動数とエネルギーの間に次の関係が得られる。(問題 [**5.1**] 参照)

$$E = \hbar\omega + \text{const.} = h\nu + \text{const.} \tag{5.2}$$

[5.B]　自由粒子の Schrödinger 方程式

質量 m の自由粒子の物質波は、次の波動方程式を満たす。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,\psi(x,t) \tag{5.3}$$

5. 例題　(位相速度と群速度, 学生による解答可)

1 次元の平面波 (の振幅) は

$$\psi_k(x,t) = e^{i(kx-\omega t)} \tag{5.4}$$

と表される。これに対して波束は、$|k| \to \infty$ で $g(k) \to 0$ を満たすような $g(k)$ を用いて、

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\,g(k)\,\psi_k(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\,|g(k)|\,e^{i\eta(k)}\,\psi_k(x,t) \tag{5.5}$$

と表される。特に、$t=0$ では、これは Fourier 変換と一致していることに注意せよ。この波の速度について、考えてみよう。

(1) 平面波 Eq. (5.4) について、波の位相が一定である点の速度 (位相速度) v_ϕ を求めよ。

波束においては、様々な波数 k のものが干渉するため、上の位相速度 v_ϕ は必ずしも波の進む速度とはいえない。角振動数を波数 k の関数 $\omega = \omega(k)$ として、波数の近い平面波が干渉により互いに打ち消さない条件を求めてみよう。

(2) 上記の波束の k 成分は、位相 $\theta_k(x,t) = kx - \omega(k)t + \eta(k)$ をもつ。δk が十分小さいとして、波数 k の成分と波数 $k+\delta k$ の成分の相対的な位相差 $\delta\theta(x,t)$ を求めよ。

(3) これら 2 つの平面波が干渉により打ち消しあわない条件は、上記の相対的な位相差が小さいことである。この条件を、x と t の関係として求め、この x の進む速度を求めよ。

$g(k)$ が、ある波数 $k \simeq k_0$ のまわりに鋭く局在しているとき、(3) で求められた速度を、この波束の群速度 v_g とよぶ。

[5.1] (物質波の群速度と角振動数)

質量が有限 ($m \neq 0$) の物質波の場合には、一般に位相速度と群速度は一致しない。de Broglie の物質波に関する関係式 $p = \hbar k = h/\lambda$ を利用して次の問に答えよ。

(1) 群速度 $v_g = d\omega/dk$ が古典的な粒子の速度 p/m と等しいとおき、ω を k の関数として求めよ。

(2) ω を p の関数として求めよ。

(3) 角振動数 ω と運動エネルギー $E = p^2/2m$ の間にはどのような関係が成り立つか答えよ。また、ここで現われる不定性はどのように解釈できるか？

[5.2] (物質波の位相速度)

前問において群速度ではなく、位相速度が古典的な速度と一致するとして角振動数と古典的なエネルギーの関係を求めてみよう。

(1) 位相速度 $v_\phi = \omega/k$ が古典的な粒子の速度 p/m と等しいとおき、ω を k の関数として求めよ。

(2) この場合に、角振動数 ω と運動エネルギー $E = p^2/2m$ の間にはどのような関係が成り立つか答えよ。この関係を光子に対する条件と比較せよ。

[5.3] (自由粒子の Schrödinger 方程式)

問題 [**5.1**] より、自由粒子では $E = \hbar\omega$ としてよいことがわかった。(これは、光に対する条件と同じである。) このとき、一般の波束 Eq. (5.5) が Schrödinger の波動方程式 Eq. (5.3) を満たすことを示せ。

[5.4] (Gauss 波束)

(1) 質量 m の自由粒子の場合を考えよう。波束 (5.5) において、$g(k)$ が

$$g(k) = \left(\frac{a}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2\right] \tag{5.6}$$

と Gauss 関数で与えられる場合に、$\psi(x,t)$ および $|\psi(x,t)|^2$ の具体的な表式が次式で与えられることを示せ。但し、$\hbar\omega_0 \equiv (\hbar k_0)^2/2m$, $v_0 \equiv \hbar k_0/m$, $\lambda = 1 + i\hbar t/ma^2$ である。

$$\psi(x,t) = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}a\lambda}\right)^{1/2} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \exp\left\{-\frac{1}{2a^2\lambda}(x - v_0 t)^2\right\} \tag{5.7}$$

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}a|\lambda|} \exp\left\{-\frac{1}{a^2|\lambda|^2}(x - v_0 t)^2\right\} \tag{5.8}$$

(2) 波の強さは振幅の (絶対値の) 自乗で与えられる。Eq. (5.8) より、波の中心が動く速度を求めよ。これは位相速度、あるいは群速度のいずれに等しいか？

[5.5] (実数の波と複素数の波*)

例題における群速度は「波の位相の一致」を考えていることから、暗黙に複素数の波を仮定している。波が実数である場合には、波の 2 乗振幅のピークが群速度と一致しないことを示してみよう。

(1) 実数の波の重ね合わせ

$$\phi(x,t) = \phi_{k+\delta k}(x,t) + \phi_{k-\delta k}(x,t) \ , \quad \phi_k(x,t) = \cos\theta_k(x,t) \ ,$$

を考える ($\theta_k(x,t) = kx - \omega(k)t$)。$\delta k$ が小さいときにこの波が

$$\phi_k(x,t) = 2\cos\theta_k(x,t)\cos\delta\theta(x,t)$$

と表せることを示し、$\delta\theta$ を求めよ。

(2) 波が実数である場合、2 乗振幅のピークは

$$\frac{\partial\phi}{\partial x} = 0$$

より求まる。この条件を δk についての最低次数 (0 次でもよい) について評価し、2 乗振幅のピークが動く速度を求めよ。

(3) 複素数の波の重ね合わせ

$$\psi(x,t) = \psi_{k+\delta k}(x,t) + \psi_{k-\delta k}(x,t)$$

を考える (ψ_k は例題の平面波)。δk が小さいときにこの波が

$$\psi_k(x,t) = 2\psi_k(x,t)\cos\delta\theta(x,t)$$

と表せることを示せ。ここで $\delta\theta$ は (1) と同じである。

(4) 波が複素数である場合、絶対値 2 乗振幅のピークは

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial x} = 0$$

より求まる。この条件を δk についての最低次数について評価し、2 乗振幅のピークが動く速度を求めよ。

[5.6] (光の位相速度と群速度*)

(1) (電磁気の復習) 電荷分布、電流密度分布の無い真空における Maxwell の方程式から出発し、Lorentz 条件を課すことによりポテンシャル $(\phi, \boldsymbol{A})$ についての方程式を導け。

(2) 前問で得られた方程式に平面波解 $\phi(\boldsymbol{x},t) = \phi_0 \exp\left(i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} - \omega t)\right)$ (ϕ_0 は定数) を代入し、光波 (電磁波) の場合に、ω と k の関係を示せ。

(3) (1) の関係が Einstein の光量子論 $E = \hbar\omega = h\nu, p = \hbar k = h/\lambda$、と矛盾しないことを確かめよ。相対性理論 $E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$ と無矛盾であるためには、光子の質量はいくらでなければならないか？

(4) 光波の位相速度 v_ϕ と群速度 v_g を求めよ。

(5) 光の波束が z 軸の正方向に 1 次元的に進む場合、波束の形が時間によらないことを示せ。
(ヒント: 波束が $\psi(x,t) = \psi(x - ct)$ となることを示せばよい。)

量子力学レポート問題 5.

[R5.1] (自由粒子にたいする Schrödinger 方程式)
1 次元自由粒子を考える。時刻 $t = 0$ で波動関数が

$$\psi(x, t = 0) = C \exp\left(ik_0 x - \frac{\alpha|x|}{\hbar}\right) \tag{5.9}$$

と与えられているとする。(α は実数とする。)

(1) 波動関数 (5.9) を規格化せよ。

(2) 波動関数 (5.9) がフーリエ変換の形

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\, g(k, t)\, e^{i(kx - \omega(k)t)} \tag{5.10}$$

で与えられているとする。このとき、$g(k, t = 0)$ を求めよ。

(3) Schrödinger 方程式を用いて、$g(k, t)$ が時刻によらないことを示せ。ただし、自由粒子であるからポテンシャルはなく、質量は m とする。
(ヒント: 平面波が解であることを要請して $\omega(k)$ を決めてから考えればよい。)

(4) 波動関数のノルムは、自分自身との内積で定義される。

$$N(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x, t)\, \psi(x, t)$$

式 (5.10) と前問の結果を用いて、$N(t)$ が時刻 t によらないことを $\psi(x, t)$ を求めずに示せ。