波束

ここではガウス型の波束を扱っていますが、波の話で出てくるものと同じです。
1 次元で行いますが、3 次元でも同じ積分が余計に出てくるだけです。

一般的に波動関数は空間全体の確率分布を与えます。しかし、古典的な粒子は空間の 1 点に存在します。このため、量子力学と古典的な粒子との対応を取るなら、ある範囲内で高い確率を持ち、それ以外の領域ではほぼ 0 となるような波動関数が必要になります。そのような波動関数は重ね合わせの原理から作れ、それは波の重ね合わせなので波束 (wave packt) と呼ばれます。ただし、波束が必要になる話は入門的な範囲ではほとんどないです (確率解釈あたりで出てくる程度)。

他の波束を作る分かりやすい理由は速度です。平面波は

$$\exp[i(kx-\omega t)]$$

と与えられ、角振動数 (振動数 ν とは $\omega=2\pi\nu$)ω と波数 k は運動量 p とエネルギー E とは

$$p=\hbar k\ ,\ E=\frac{p^2}{2m}=\hbar\omega\ ,\ \omega=\frac{\hbar k^2}{2m}$$

という関係を持ちます。位相速度 (波の伝わる速度、波面の速度)v_{ph} は

$$kx-\omega t=k(x-\frac{\omega}{k}t)=k(x-v_{ph}t)$$

で与えられるので、

$$v_{ph}=\frac{\omega}{k}=\frac{E}{p}=\frac{p}{2m}$$

これは古典的な自由粒子の速度 $v_{cl}=p/m$ の半分なので、量子力学での確率の波は古典的な粒子の速度で動いていません。このため、古典的な速度で動く確率の波が必要になります。

平面波の重ね合わせを、α_n を展開係数、波数 k_n を離散的として

$$\psi(x,t)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\alpha_n e^{i(k_nx-\omega_nt)}$$

連続的にすれば

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dk\ \alpha(k)e^{i(kx-\omega(k)t)} \tag{1}$$

$1/\sqrt{2\pi}$ は後の規格化に合わせています。$t=0$ では 1 次元フーリエ変換になり

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dk\ \alpha(k)e^{ikx}\ ,\ \alpha(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dx\ \psi(x)e^{-ikx}$$

後は $\alpha(k)$ を与えればいいです。

頻繁に出てくるガウス型の波束を見ていきます。これは $\psi(x)$ を

$$\psi(x) = Ae^{ik_0x}\exp[-\frac{x^2}{2a^2}]$$

として、ガウス分布の形にしたものです (e^{ik_0x} は位相因子なので確率に影響しない)。A は規格化定数、k_0 は定数です。この形のガウス分布は $x=0$ でピークを持ち、$x=0$ から離れると減少していく形です (統計力学の「ガウス分布」参照。ただし a の定義が異なっている)。A は波動関数の規格化

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx|\psi(x)|^2 = 1$$

から

$$\begin{aligned}
1 &= A^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\exp[-\frac{x^2}{a^2}] \\
&= aA^2\int_{-\infty}^{\infty} dx'\exp[-x'^2] \quad (x' = \frac{x}{a}) \\
&= \sqrt{\pi}aA^2 \\
A &= (\frac{1}{\pi a^2})^{1/4}
\end{aligned}$$

途中でガウス積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} ds\ e^{-s^2} = \sqrt{\pi}$$

を使っています。

フーリエ変換から α を求めます。α は

$$\alpha(k) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \ \exp[-\frac{x^2}{2a^2} - i(k-k_0)x]$$

平方完成することで

$$\begin{aligned}
\alpha(k) &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \ \exp[-(\frac{x}{\sqrt{2}a} + \frac{ia(k-k_0)}{\sqrt{2}})^2 - \frac{a^2(k-k_0)^2}{2}] \\
&= \frac{A}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{2}a\int_{-\infty}^{\infty} ds\ e^{-s^2}\exp[-\frac{a^2(k-k_0)^2}{2}] \quad (s = \frac{x}{\sqrt{2}a} + \frac{ia(k-k_0)}{\sqrt{2}}) \\
&= Aa\exp[-\frac{a^2(k-k_0)^2}{2}]
\end{aligned} \tag{2}$$

これもガウス分布の形です (k_0 を中心に分布)。$|\alpha(k)|^2$ は

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dk|\alpha(k)|^2 &= A^2a^2\int_{-\infty}^{\infty} dk\exp[-a^2(k-k_0)^2] \\
&= a^2A^2\frac{1}{a}\int_{-\infty}^{\infty} dk'\exp[-k'^2] \qquad (k'=a(k-k_0)) \\
&= \sqrt{\pi}aA^2 \\
&= \sqrt{\pi}a\frac{1}{\sqrt{\pi}a} \\
&= 1
\end{aligned}$$

として、1 に規格化されています。$\psi(x)$ に戻るのかも確かめると

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\ \exp[-\frac{a^2(k-k_0)^2}{2}+ikx] \\
&= \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\ \exp[-(\frac{a}{\sqrt{2}}(k-k_0)-\frac{ix}{\sqrt{2}a})^2-\frac{x^2}{2a^2}-i(k-k_0)x+ikx] \\
&= \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}}\frac{\sqrt{2}}{a}\int_{-\infty}^{\infty} ds\ \exp[-s^2-\frac{x^2}{2a^2}+ik_0x] \qquad (s=\frac{a}{\sqrt{2}}(k-k_0)-\frac{ix}{\sqrt{2}a}) \\
&= \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}}\frac{\sqrt{2\pi}}{a}e^{ik_0x}\exp[-\frac{x^2}{2a^2}] \\
&= Ae^{ik_0x}\exp[-\frac{x^2}{2a^2}]
\end{aligned}$$

となって、$\psi(x)$ になります。

　$\psi(x)$ による期待値 $<x>$ は

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ xe^{-x^2}=0$$

から

$$<x>=\int_{-\infty}^{\infty} dx\ x|\psi(x)|^2=(\frac{1}{\pi a^2})^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty} dx\ x\exp[-\frac{x^2}{a^2}]=0$$

ガウス分布での位置の期待値は分布の中心 $x=0$ になります。分散 $\Delta x^2=<(x-<x>)^2>=<x^2>$ は

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2e^{-x^2}dx=\sqrt{\frac{\pi}{4}}$$

を使って

$$
\begin{aligned}
\Delta x^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x^2 |\psi(x)|^2 &= \sqrt{\frac{1}{\pi a^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x^2 \exp[-\frac{x^2}{a^2}] \\
&= \sqrt{\frac{1}{\pi a^2}} a^3 \int_{-\infty}^{\infty} dx'\ x'^2 \exp[-x'^2] \quad (x' = \frac{x}{a}) \\
&= \sqrt{\frac{1}{\pi a^2}} a^3 \sqrt{\frac{\pi}{4}} \\
&= \frac{a^2}{2}
\end{aligned}
$$

同様に $\alpha(x)$ から波数の分散 Δk^2 を求めます。期待値 $< k >$ は分布の中心 k_0 なので

$$
\begin{aligned}
\Delta k^2 = & \int_{-\infty}^{\infty} dk\ (k - < k >)^2 |\alpha(k)|^2 \\
&= A^2 a^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk\ (k - k_0)^2 \exp[-a^2 (k - k_0)^2] \\
&= A^2 a^2 \int_{-\infty}^{\infty} dk'\ k'^2 \exp[-a^2 k'^2] \\
&= A^2 a^2 \frac{1}{a^3} \int_{-\infty}^{\infty} dk'\ k'^2 \exp[-k'^2] \\
&= \sqrt{\frac{1}{\pi a^2}} \frac{1}{a} \sqrt{\frac{\pi}{4}} \\
&= \frac{1}{2a^2}
\end{aligned}
$$

そうすると、標準偏差 $\Delta x, \Delta k$（分散の正の平方根）の積は

$$
\Delta x \Delta k = \frac{a}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2} a} = 1
$$

これは、位置のばらつきを小さくすれば波数のばらつきは大きくなること (もしくは逆) を言っているので、等号での不確定性関係です（a の依存性が現れない)。不確定性関係は

$$
\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2} \quad (\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2})
$$

なので、今は 1/2 になっていませんが、ガウス分布の exp 内の係数を操作すればいいだけです。その部分だけを見るなら、ガウス分布において分散は

$$
\frac{|\psi(\Delta x)|^2}{|\psi(0)|^2} = \exp[-\frac{\Delta x^2}{a^2}] = e^{-1/2}\ ,\ \ \frac{|\alpha(k - k_0 = \Delta k)|^2}{|\alpha(k - k_0 = 0)|^2} = \exp[-a^2 \Delta k^2] = e^{-1/2}
$$

となることを使えばいいです。そうすると、a を

$$
\exp[-\frac{2\Delta x^2}{a'^2}] = e^{-1/2}\ ,\ \exp[-\frac{a'^2 \Delta k^2}{2}] = e^{-1/2}
$$

このように $a'=\sqrt{2}a$ に置き換えれば、$\Delta x^2 = a'^2/4,\ \Delta k^2 = 1/a'^2$ なので

$$\Delta x\Delta k = \frac{1}{2}$$

と出来ます。これから、ガウス型の波束は不確定性関係の最小の関係を持ちます。また、今の話から分かるように、不確定性関係は波の関係として言えます。

時間依存性を含めるなら、(1) を使って

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\ \alpha(k)e^{i(kx-\omega(k)t)} \\ &= \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\ \ \exp[-\frac{a^2(k-k_0)^2}{2} + ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t]\end{aligned} \tag{3}$$

exp 内は

$$-c_1h^2 + ic_2h = -c_1(h-\frac{ic_2}{2c_1})^2 - \frac{c_2^2}{4c_1}$$

を利用して

$$\begin{aligned}-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2 + ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t =&\ -(\frac{a^2}{2}+i\frac{\hbar t}{2m})(k-k_0)^2 + i\frac{\hbar t}{2m}k_0^2 - 2i\frac{\hbar t}{2m}k_0k + ikx \\ =&\ -(\frac{a^2}{2}+i\frac{\hbar t}{2m})(k-k_0)^2 + i(x-\frac{\hbar t}{m}k_0)(k-k_0) + ik_0x - i\frac{\hbar t}{2m}k_0^2 \\ =&\ -(\frac{a^2}{2}+i\frac{\hbar t}{2m})(k-k_0)^2 + i(x-\frac{\hbar t}{m}k_0)(k-k_0) + i(x-\frac{\hbar t}{2m}k_0)k_0 \\ =&\ -c_1k'^2 + ic_2k'^2 + i(x-\frac{\hbar t}{2m}k_0)k_0 \quad (c_1 = \frac{a^2}{2}+i\frac{\hbar}{2m}t\ ,\ c_2 = x-\frac{\hbar k_0}{m}t) \\ =&\ -c_1(k'-\frac{ic_2}{2c_1})^2 - \frac{c_2^2}{4c_1} + i(x-\frac{\beta_2}{2}t)k_0\end{aligned}$$

c_1, c_2 は

$$c_1 = \frac{a^2}{2}+i\frac{\hbar}{2m}t = \frac{a^2}{2}+i\beta_1 t\ ,\ c_2 = x-\frac{\hbar k_0}{m}t = x-\beta_2 t \quad (\beta_1 = \frac{1}{2k_0}\beta_2)$$

これでガウス積分の形になり

$$\begin{aligned}\psi(x,t) =&\ \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}}\exp[-\frac{c_2^2}{4c_1} + i(x-\frac{\beta_2}{2}t)k_0]\int_{-\infty}^{\infty} dk'\ \ \exp[-c_1(k'-\frac{ic_2}{2c_1})^2] \\ =&\ \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\sqrt{c_1}}\exp[-\frac{c_2^2}{4c_1} + ik_0(x-\frac{\beta_2}{2}t)]\int_{-\infty}^{\infty} ds\ \ \exp[-s^2] \quad (s = \sqrt{c_1}(k'-\frac{ic_2}{2c_1})) \\ =&\ \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}}\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{c_1}}\exp[-\frac{c_2^2}{4c_1} + ik_0(x-\frac{\beta_2}{2}t)]\end{aligned}$$

exp 内は

$$-\frac{c_2^2}{4c_1}+ik_0(x-\frac{\beta_2}{2}t)=-\frac{c_2^2-ik_0c_1(x-\frac{\beta_2}{2}t)}{4c_1}$$

c_2^2 は

$$c_2^2=(x-\beta_2t)^2=x^2+\beta_2^2t^2-2\beta_2xt$$

$ik_0c_1(x-\beta_2t/2)$ は

$$\begin{aligned}4ik_0c_1(x-\frac{\beta_2}{2}t)&=4ik_0(\frac{a^2}{2}+i\beta_1t)(x-\frac{\beta_2}{2}t)\\&=4ik_0(\frac{a^2}{2}x+i\beta_1xt-\frac{1}{4}a^2\beta_2t-i\frac{1}{2}\beta_1\beta_2t^2)\\&=2ia^2k_0x-4\beta_1k_0xt-ia^2\beta_2k_0t+2\beta_1\beta_2k_0t^2\\&=2ia^2k_0x-2\beta_2xt-ia^2\beta_2k_0t+\beta_2^2t^2\end{aligned}$$

合わせれば

$$x^2+\beta_2^2t^2-2\beta_2xt-2ia^2k_0x+4\beta_1k_0xt+ia^2\beta_2k_0t-\beta_2^2t^2=x^2-2ia^2k_0x+ia^2\beta_2k_0t$$

となり

$$-\frac{c_2^2}{4c_1}+ik_0(x-\frac{\beta_2}{2}t)=-\frac{x^2-2ia^2k_0x+i\frac{\hbar}{m}a^2k_0^2t}{2(a^2+i\hbar t/m)}$$

よって

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\frac{Aa}{\sqrt{2c_1}}\exp[-\frac{c_2^2}{4c_1}+i(x-\frac{\hbar t}{2m}k_0)k_0]\\&=\frac{A}{\sqrt{1+i\hbar t/ma^2}}\exp[-\frac{x^2-2ia^2k_0x+i\frac{\hbar t}{m}a^2k_0^2}{2(a^2+i\hbar t/m)}]\end{aligned}$$

と求まります。

波束の速度を求めます。ガウス型のように $\alpha(k)$ は $k=k_0$ 付近で大きな値を持つとします。そうすると、積分における寄与は $k=k_0$ 付近が大きいので、角振動数 ω を k_0 周りで

$$\omega(k)=\omega(k_0)+\frac{d\omega}{dk}|_{k=k_0}(k-k_0)+\cdots=\omega_0+v_g(k-k_0)+\cdots$$

と展開し、1 次までを (1) に入れると

$$
\begin{aligned}
\psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\ \alpha(k)e^{i(kx-\omega(k)t)} \\
&\simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\ \alpha(k)e^{i(kx-\omega_0 t)}e^{-iv_g(k-k_0)t)} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i(\omega_0-v_gk_0)t}\int_{-\infty}^{\infty} dk\ \alpha(k)e^{ik(x-v_gt)}
\end{aligned}
$$

$t=0$ での

$$
\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dk\ \alpha(k)e^{ikx}
$$

によって

$$
\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i(\omega_0-v_gk_0)t}\psi_0(x-v_gt)
$$

これは形を変えずに動く波の関数 $f(x,t)=g(x-vt)$ の形です。そして

$$
|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2\pi}|\psi_0(x-v_gt)|^2
$$

なので、$|\psi(x,t)|^2$ は時間に依存しない定数です。このため、$x-v_gt=C$ での適当な定数 C によって与えられる形で $|\psi(x,t)|^2$ は動いていくので、波束全体の速度は v_g です。v_g は群速度と呼ばれます。

また、k_0 付近での積分として、$\alpha(k)\simeq\alpha(k_0)$ と近似すれば

$$
\begin{aligned}
\psi(x,t) &\simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i(\omega_0-v_gk_0)t}\alpha(k_0)\int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} dk\ e^{ik(x-v_gt)} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i(\omega_0-v_gk_0)t}e^{ik_0(x-v_gt)}\alpha(k_0)\int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} dk\ e^{i(k-k_0)(x-v_gt)} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik_0(x-ut)}\alpha(k_0)\int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} dk\ e^{i(k-k_0)(x-v_gt)} \qquad (u=\frac{\omega_0}{k_0})
\end{aligned}
$$

積分は

$$
\begin{aligned}
\int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} dk\ e^{i(k-k_0)(x-v_gt)} &= \int_{-\Delta k}^{\Delta k} dk'\ e^{i(x-v_gt)k'} \qquad (k'=k-k_0) \\
&= \frac{1}{i(x-v_gt)}(e^{i(x-v_gt)\Delta k}-e^{-i(x-v_gt)\Delta k}) \\
&= \frac{1}{x-v_gt}\sin[(x-v_gt)\Delta k]
\end{aligned}
$$

となり

$$\psi(x,t) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{x-v_gt}\alpha(k_0)\sin[(x-v_gt)\Delta k]e^{ik_0(x-ut)} \qquad (u=\frac{\omega_0}{k_0})$$

振幅が sin で与えられ、微小な Δk がいるので振幅の変化は緩やかです。

角振動数はエネルギー E と $E=\hbar\omega$ と対応するので、群速度は

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} \qquad (p=\hbar k)$$

適当な位置に依存するポテンシャル $V(x)$ での自由粒子とすれば

$$v_g = \frac{d}{dp}(\frac{p^2}{2m}+V(x)) = \frac{p}{m}$$

よって、波束の速度は古典的な粒子の速度と一致します。つまり、波束がガウス型のような確率分布のとき、波束は古典的な粒子の速度で移動します。ただし、これは $\omega(k)$ を 1 次まで展開した結果であって、一般的な結果ではないです。

2 次までを使った場合も見ておきます。2 次まで展開すると

$$\omega(k) \simeq \omega(k_0) + \frac{d\omega}{dk}|_{k=k_0}(k-k_0) + \frac{d^2\omega}{dk^2}|_{k=k_0}(k-k_0)^2 = \omega_0 + v_g(k-k_0) + \eta(k-k_0)^2$$

これを使えば

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dk\ \alpha(k)e^{i(kx-\omega(k)t)} \\ &\simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dq\ \alpha(k)e^{iq(x-v_gt)}e^{-i\eta q^2t} \qquad (q=k-k_0)\end{aligned}$$

$f(x,t)=g(x-v_gt)$ の形ではないので、波の形は変化します。α に (2) を使うと

$$\psi(x,t) \simeq \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}}e^{ik_0(x-ut)}\int_{-\infty}^{\infty}dk\ \exp[-\frac{a^2}{2}q^2]e^{iq(x-v_gt)}e^{-i\eta q^2t}$$

積分は (3) と同じように変形して

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq \ \exp[-\frac{a^2}{2}q^2 - i\eta q^2 t + iq(x - v_g t)]$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dq \ \exp[-(\frac{a^2}{2} - i\eta t)q^2 + i(x - v_g t)q]$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dq \ \exp[-d_1 q^2 + i d_2 q)] \quad (d_1 = \frac{a^2}{2} - i\eta t \ , \ d_2 = x - v_g t)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dq \ \exp[-d_1(q - \frac{id_2}{2d_1})^2 - \frac{d_2^2}{4d_1}]$$

$$= \exp[-\frac{d_2^2}{4d_1}]\frac{1}{\sqrt{d_1}}\int_{-\infty}^{\infty} ds \ \exp[-s^2]$$

$$= \exp[-\frac{d_2^2}{4d_1}]\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{d_1}}$$

と求まり

$$\psi(x,t) \simeq \frac{Aa}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{d_1}}e^{ik_0(x-ut)}\exp[-\frac{d_2^2}{4d_1}] = \frac{Aa}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{d_1}}e^{ik_0(x-ut)}\exp[-\frac{(x - v_g t)^2}{2(a^2 - 2i\eta t)}]$$

このときの確率密度は

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{A^2a^2}{2d_1}\exp[-\frac{d_2^2}{4}(\frac{1}{d_1} + \frac{1}{d_1^*})] = \frac{A^2a^2}{2d_1}\exp[-\frac{(x - v_g t)^2}{4}\frac{a^2}{|d_1|^2}]$$

よって、中心からの広がり (分散) は時間に依存し

$$\frac{|d_1|^2}{a^2} = \frac{a^4 + 4\eta^2 t^2}{4a^2} = \frac{a^2 + 4\eta^2 t^2/a^2}{4}$$

で与えられ、t の増加で大きくなります。つまり、ガウス型のような波束は時間経過で中心からの幅が広がっていきます。