§ 2. 関数の内積と不確定性原理

波動関数 $\Psi(x, t)$，$\psi(x)$ と関連するテーマとして，まず "**関数の内積**"，x や p などの物理量の "**平均値（期待値）**" や "**バラツキ（標準偏差）**" について解説しよう。

内積というと，2 つのベクトル $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ の内積 $\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}$ を連想されると思う。これと同様に，2 つの関数についても，その積の積分を内積として定義することができる。そして，これを基にして位置 x や運動量 p のような物理量の平均値 $<x>$ や $<p>$ を求めることができるんだね。さらに，これら物

高校数学では $E(x)$ や $E(p)$ と表していたが，ここではこのように表す。

理量のバラツキ Δx や Δp も，波動関数の内積の式を利用して求められることも解説しよう。そして，ここでは，ハイゼンベルクの不確定性原理 $(\Delta x\cdot\Delta p \gtrsim \hbar)$ についても言及するつもりだ。

これら一連の流れを理解しておくことは，シュレーディンガーの波動方程式を解く上で，重要な基礎知識となるんだね。

● 2 つの複素関数 u と v の内積を定義しよう！

複素関数で表された 2 つの関数 $u(x)$ と $v(x)$ の内積 (u, v) と $u(x)$ のノルム $\|u\|$ の定義を下に示そう。

u と v の内積とノルム $\|u\|$

2 つの複素関数 $u(x)$ と $v(x)$ の内積を (u, v) と表し，次式のように定義する。

$$(u, v) = \int u(x)^* v(x)\,dx \quad \cdots\cdots\cdots(*b_0)$$

（x：実数変数，"$*$" は共役複素数を表す。）

ここで，$(u, u) = \|u\|^2$ とおいて，ノルム $\|u\|$ を次のように定義する。

$$\|u\| = \sqrt{(u, u)} = \sqrt{\int u(x)^* u(x)\,dx} = \sqrt{\int |u(x)|^2 dx}$$

このノルム $\|u\|$ は，ベクトルの大きさに相当する概念であることが分かるはずだ。

また，$(\boldsymbol{u},\ \boldsymbol{v})$ の定義から，次の公式が当然成り立つ。

(ⅰ) $(\boldsymbol{v},\ \boldsymbol{u}) = (\boldsymbol{u},\ \boldsymbol{v})^*$

(ⅱ) $(\alpha\boldsymbol{u},\ \beta\boldsymbol{v}) = \alpha^*\beta(\boldsymbol{u},\ \boldsymbol{v})$　　(α，β：複素定数)

(ⅰ)の証明：$(\boldsymbol{v},\ \boldsymbol{u}) = \int \boldsymbol{v}^*\boldsymbol{u}d\boldsymbol{x} = \int \boldsymbol{u}\boldsymbol{v}^*d\boldsymbol{x}$
$= \underbrace{\int (\boldsymbol{u}^*\boldsymbol{v})^* d\boldsymbol{x}}\ = \underbrace{\left(\int \boldsymbol{u}^*\boldsymbol{v}d\boldsymbol{x}\right)^*} = (\boldsymbol{u},\ \boldsymbol{v})^*$ となる。

共役複素数をとる操作と，積分操作の順序は入れ替えても当然成り立つからね。

(ⅱ)の証明：$(\alpha\boldsymbol{u},\ \beta\boldsymbol{v}) = \int \underbrace{(\alpha\boldsymbol{u})^*}_{\alpha^*\boldsymbol{u}^*}\beta\boldsymbol{v}\,d\boldsymbol{x} = \underbrace{\alpha^*\beta}_{\text{複素定数}}\int \boldsymbol{u}^*\boldsymbol{v}\,d\boldsymbol{x} = \alpha^*\beta(\boldsymbol{u},\ \boldsymbol{v})$ となる。

また，規格化された波動関数 $\Psi(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{t})$ は，

$\int |\Psi|^2 d\boldsymbol{x} = \underbrace{\int \Psi^*\Psi d\boldsymbol{x}}_{(\Psi,\ \Psi)} = \mathbf{1}$ (全確率) より，$(\Psi,\ \Psi) = \mathbf{1}$，すなわち

$\|\Psi\|^2 = \mathbf{1}$ から $\|\Psi\| = \mathbf{1}$ と表すこともできるんだね。

$\psi(\boldsymbol{x})$ についても，これが規格化されているときは，$(\psi,\ \psi) = \mathbf{1}$ より，

$\|\psi\|^2 = \mathbf{1}$ から $\|\psi\| = \mathbf{1}$ と表せる。

● x や p など，物理量の平均値を求めよう！

$\boldsymbol{x}$ や $\boldsymbol{p}$ の平均値をそれぞれ $<\boldsymbol{x}>$，$<\boldsymbol{p}>$ と表し，また一般の物理量を α とおくと，この平均値は $<\alpha>$ と表すんだね。ここでは，この平均値の求め方を示そう。

(Ⅰ) 規格化された波動関数 $\Psi(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{t})$ を用いて，位置 $\boldsymbol{x}$ と運動量 $\boldsymbol{p}$ の平均値 $<\boldsymbol{x}>$ と $<\boldsymbol{p}>$ は次のように求めることができる。

(ⅰ) $<\boldsymbol{x}> = \int \boldsymbol{x}\underbrace{|\Psi(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{t})|^2}_{\text{確率密度：}\Psi(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{t})^*\cdot\Psi(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{t})}d\boldsymbol{x} = \int \Psi(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{t})^*\underbrace{\boldsymbol{x}}_{\hat{x}\text{のこと}}\cdot\Psi(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{t})d\boldsymbol{x}$

(ⅱ) $<\boldsymbol{p}> = \int \Psi(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{t})^*\cdot\underbrace{\hat{\boldsymbol{p}}}_{-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\text{のこと}}\cdot\Psi(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{t})d\boldsymbol{x} = -i\hbar\int \Psi(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{t})^*\cdot\frac{\partial\Psi(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{t})}{\partial\boldsymbol{x}}d\boldsymbol{x}$

一般に，物理量 α の平均値 $<\alpha>$ は，α の演算子 $\hat{\alpha}$ を用いて，次のようにして求めると覚えておこう。

$$<\alpha> = \int \Psi(x,\ t)^* \hat{\alpha} \Psi(x,\ t) dx \quad \cdots\cdots\cdots (*c_0)$$

これは，内積の記号を用いると，次のように簡潔に表せる。

$$<\alpha> = (\Psi,\ \hat{\alpha}\Psi) \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots (*c_0)'$$

(Ⅱ) $\Psi(x,\ t)$ が規格化 (正規化) されていない場合，

物理量 α の平均値 $<\alpha>$ は，全体を $\int \Psi(x,\ t)^* \Psi(x,\ t) dx \ (= \|\Psi\|^2)$ で割る必要があるので，次のように表されるんだね。

$$<\alpha> = \frac{\int \Psi(x,\ t)^* \hat{\alpha} \Psi(x,\ t) dx}{\int \Psi(x,\ t)^* \Psi(x,\ t) dx} \quad \cdots\cdots\cdots (*d_0)$$

または，

$$<\alpha> = \frac{(\Psi,\ \hat{\alpha}\Psi)}{(\Psi,\ \Psi)} = \frac{(\Psi,\ \hat{\alpha}\Psi)}{\|\Psi\|^2} \quad \cdots\cdots\cdots\cdots (*d_0)'$$

次に，ブラ・ベクトルとケット・ベクトルで，内積 $(u,\ v)$ を次のように表す

ブラケットで“括弧”を表す。

ことができる。

Aは演算子 $\hat{\alpha}$ を行列形式で表したものだ。(P210参照)

$$\begin{cases} (u,\ v) = <u|v> & \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots ① \\ (u,\ \hat{\alpha}v) = <u|A|v> & \cdots\cdots\cdots ② \end{cases}$$

①，②の $<u|$ をブラ・ベクトル，$|v>$ をケット・ベクトルという。もちろん①，②の形で u と v が単独の関数の場合，このように表現するメリットは何もないんだけれど，この表記法が役に立つのは，$<u|$ が複素共役な行ベクトル，$|v>$ が列ベクトルで，それぞれ次のように表されているときなんだね。

$$<u| = [u_1^* \quad u_2^* \quad u_3^* \cdots], \qquad |v> = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

このとき，$<u|v>$ は次のように表される。これは 2 つの ∞ 次元のベク

トルの内積の成分表示か，または行列の積の積分と考えればいいんだね。

$<u|v> = \int (u_1^* v_1 + u_2^* v_2 + u_3^* v_3 + \cdots)\,dx$ となる。また②式については，

A は（∞行∞列）の行列で，この演算子の行列形式については，P210 で詳しく教えよう。でも，しばらくは，$<u|$ や $|v>$ の表現は使わずに，内積は $(u,\ v)$ や $(u,\ \hat{\alpha}v)$ でそのまま表現することにする。

ここで，波動関数が $\Psi(x,\ t) = \psi(x)\cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ と表されているとき，

$$(\Psi,\ \Psi) = \int \Psi^* \Psi\,dx = \int \psi^* \underbrace{\cancel{e^{i\frac{E}{\hbar}t}}}_{\left(e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\right)^*} \psi \cancel{e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}\,dx = (\psi,\ \psi)$$ すなわち，$\|\Psi\|^2 = \|\psi\|^2$

となるんだね。

したがって，$\psi(x)$ についても，これまでの解説は同様に成り立つ。

もちろん $\psi(x)$ が実数関数のとき，$\psi(x)^* = \psi(x)$ であることに気を付けよう。

a が実数のとき，
$a^* = (a + 0i)^* = a - 0\cdot i = a$

● 物理量のバラツキと不確定性原理を押さえよう！

では次，x や p などの物理量のバラツキ Δx や Δp について解説しよう。このバラツキとは，数学的には標準偏差のことなんだね。高校数学で習った，確率密度 $f(x)$ に従う連続型の確率変数 X の平均 m_X，分散 $\sigma_X{}^2$，標準偏差 σ_X の公式を右に示しておこう。

量子力学の x や p のバラツキ Δx と Δp も，表記の仕方が異なるだけで，右の標準偏差の公式とまったく同様に，次のように表せるんだね。

確率密度 $f(x)$ の分布に従う確率変数 X の平均（期待値）m_X，分散 $\sigma_X{}^2$，標準偏差 σ_X は，次のようになる。

・$m_X = E(X) = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x)\,dx$

・$\sigma_X{}^2 = E(X^2) - \{E(X)\}^2$
$= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 f(x)\,dx - m_X{}^2$

・$\sigma_X = \sqrt{E(X^2) - \{E(X)\}^2}$

$$\begin{cases} \Delta x = \sqrt{<x^2> - <x>^2} & \cdots\cdots\cdots(*e_0) \\ \Delta p = \sqrt{<p^2> - <p>^2} & \cdots\cdots\cdots(*e_0)' \end{cases}$$

$\sigma_X = \sqrt{E(X^2) - \{E(X)\}^2}$ と同じ

$\sigma_P = \sqrt{E(P^2) - \{E(P)\}^2}$ と同じ

もちろん，一般に $\psi=\sum_{n=1}^{\infty}C_n\psi_n$ ……② の場合，つまり $\{\psi_n\}$ が完全系である場合，同様に $\|\psi\|^2=(\psi,\ \psi)$ を求めると，

$$\|\psi\|^2=(\psi,\ \psi)=(C_1\psi_1+C_2\psi_2+C_3\psi_3+\cdots,\ C_1\psi_1+C_2\psi_2+C_3\psi_3+\cdots)$$

$$=\underbrace{C_1^*C_1}_{|C_1|^2}\underbrace{(\psi_1,\ \psi_1)}_{\|\psi_1\|^2=1}+\underbrace{C_2^*C_2}_{|C_2|^2}\underbrace{(\psi_2,\ \psi_2)}_{\|\psi_2\|^2=1}+\underbrace{C_3^*C_3}_{|C_3|^2}\underbrace{(\psi_3,\ \psi_3)}_{\|\psi_3\|^2=1}+\cdots$$

$=|C_1|^2+|C_2|^2+|C_3|^2+\cdots+|C_n|^2+\cdots$ となる。すなわち，

$\|\psi\|^2=\sum_{n=1}^{\infty}|C_n|^2$ ………$(*g_0)'$ 　が成り立つ。

ここで，波動関数 ψ が規格化されたものであれば $\|\psi\|^2=1$ より，

$(*g_0)'$ は，$\sum_{n=1}^{\infty}|C_n|^2=1$ (全確率) ………③ となるんだね。

よって，$\psi_n\ (n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots)$ で表される固有状態で，エネルギー E_n が観測される確率は，$\underline{|C_n|^2}\ (n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots)$ であることが分かる。

$$\frac{|C_n|^2}{|C_1|^2+|C_2|^2+\cdots+|C_n|^2+\cdots}=\frac{|C_n|^2}{\|\psi\|^2}=\frac{|C_n|^2}{1}=|C_n|^2\quad(\because\ \|\psi\|^2=1)$$

ここで，もう1度，任意の波動関数 $\psi(x)$ を表す関数列 $\{\psi_n(x)\}(n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots)$ の完全性 (完備性) に話を戻すと，実は，$(*g_0)'$ が無限関数列 $\{\psi_n\}$ が完全 (または完備) であるための条件式であり，これは "**パーシヴァル (*Parseval*) の等式**" と呼ばれるものなんだ。一般に，数学では，

$\sum_{n=1}^{\infty}\psi_n(x)\psi_n(t)^*=\delta(x-t)$ ………$(*g_0)$ 　よりも，パーシヴァルの等式 $(*g_0)'$ を固有関数列 $\{\psi_n\}\ (n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots)$ の完全性の条件式として用いる。

たとえば，区間 $(0,\ L)$ において，任意の波動関数 $\psi(x)$ が，関数列 $\{\psi_n\}$ $(n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots)$ 以外に新たな直交関数 $g(x)$ を加えて，

$$\psi(x)=\underbrace{\gamma g(x)+\sum_{n=1}^{\infty}C_n\psi_n(x)}_{g(x)\text{ と }\{\psi_n(x)\}\ (n=1,2,3,\cdots)\text{ の1次結合の式だね。}}\ \cdots\cdots\cdots④\quad(\gamma：0\text{ でない複素定数})$$

で表されるものとしよう。

$g(x)$ と $\{\psi_n(x)\}$ の各関数とは直交するので，当然

$(g,\ \psi_n)=0$ ………⑤ となる。

ここで，$\|\psi\|^2=(\psi,\ \psi)$ を計算してみると，④より

$$\|\psi\|^2=(\psi,\ \psi)$$

$$=(\gamma g+C_1\psi_1+C_2\psi_2+C_3\psi_3+\cdots,\ \gamma g+C_1\psi_1+C_2\psi_2+C_3\psi_3+\cdots)$$

$$=\underbrace{\gamma^*\gamma}_{|\gamma|^2}\underbrace{(g,\ g)}_{\|g\|^2}+\underbrace{C_1^*C_1}_{|C_1|^2}\underbrace{(\psi_1,\ \psi_1)}_{\|\psi_1\|^2=1}+\underbrace{C_2^*C_2}_{|C_2|^2}\underbrace{(\psi_2,\ \psi_2)}_{\|\psi_2\|^2=1}+\underbrace{C_3^*C_3}_{|C_3|^2}\underbrace{(\psi_3,\ \psi_3)}_{\|\psi_3\|^2=1}+\cdots$$

$$=|\gamma|^2\|g\|^2+|C_1|^2+|C_2|^2+|C_3|^2+\cdots+|C_n|^2+\cdots$$

$\therefore\ \|\psi\|^2=\underbrace{|\gamma|^2\|g\|^2}_{0\ (\because (*g_0)'\text{より})}+\sum_{n=1}^{\infty}|C_n|^2$ ………⑥ となる。

ここで，⑥と $(*g_0)'$ を比較すると，$\underbrace{|\gamma|^2}_{0\ (\because \gamma\neq 0)}\|g\|^2=0$ ……⑦ でなければならない。

さらに，γ は 0 でない複素定数なので $|\gamma|^2\neq 0$ である。よって，⑦から，

$\|g\|^2=0$ ………⑧ となる。

これを“零関数”と呼ぶ。

⑧より，$g(x)$ を連続関数と考えると，$g(x)$ は恒等的に $g(x)=0$ とならざるを得ない。この零関数を，正規直交関数系 $\{\psi_n(x)\}$ に加えても無意味だね。よって，$\psi(x)$ は $\{\psi_n(x)\}$ のみによって完全に表されるので，$\{\psi_n(x)\}$ は完全系であることが示せたんだね。面白かった？

このパーシヴァルの等式 $(*g_0)'$ を利用すると，次に示すような無限等比級数の和の公式を導くことができる。

(i) $\dfrac{1}{1^2}+\dfrac{1}{3^2}+\dfrac{1}{5^2}+\dfrac{1}{7^2}+\cdots\cdots=\dfrac{\pi^2}{8}$ ………$(**1)$

(ii) $\dfrac{1}{1^2}+\dfrac{1}{2^2}+\dfrac{1}{3^2}+\dfrac{1}{4^2}+\cdots\cdots=\dfrac{\pi^2}{6}$ ………$(**2)$

(iii) $\dfrac{1}{1^4}+\dfrac{1}{2^4}+\dfrac{1}{3^4}+\dfrac{1}{4^4}+\cdots\cdots=\dfrac{\pi^4}{90}$ ………$(**3)$

$(**1)$ は，次の例題で示すが，$(**2)$ や $(**3)$ をご存知でない方は，「**フーリエ解析キャンパス・ゼミ**」(**マセマ**) で学習されることを勧める。

それでは，例題 7 の固有関数 $\psi_n(x)\ (n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots)$ の 1 次結合を用いて，波動関数 $\psi(x)$ が定数関数である場合を具体的に調べてみよう。

(ex) 波動関数 $\psi(x)=\dfrac{1}{\sqrt{L}}\quad(0<x<L)$ を，固有関数

$\psi_n(x)=\sqrt{\dfrac{2}{L}}\sin\dfrac{n\pi}{L}x\quad(n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots)$ で表してみよう。また，

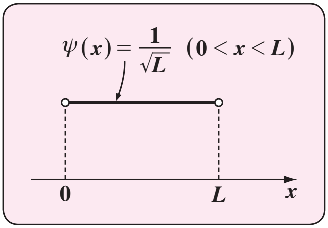
パーシヴァルの等式 $\|\psi_n\|^2=\displaystyle\sum_{n=1}^{\infty}|C_n|^2$ を用いて，公式：

$\dfrac{1}{1^2}+\dfrac{1}{3^2}+\dfrac{1}{5^2}+\dfrac{1}{7^2}+\cdots=\dfrac{\pi^2}{8}$ ……(＊＊1) が成り立つことを示せ。

波動関数 $\psi(x)=\dfrac{1}{\sqrt{L}}\quad(0<x<L)$ は，

$\psi_n(x)=\sqrt{\dfrac{2}{L}}\sin\dfrac{n\pi}{L}x\quad(n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots)$

を用いて，次のように表せる。



$$\psi(x)=\sum_{n=1}^{\infty}C_n\psi_n(x)$$
$$=C_1\psi_1+C_2\psi_2+\cdots+C_n\psi_n+\cdots\quad(C_n：定数)$$

ここで，係数 C_n を求めると，

$$C_n=(\psi_n,\ \psi)=\int_0^L\underbrace{\psi_n(x)}_{\psi_n(x)^*\ (\text{定数関数})}\cdot\psi(x)\,dx$$

$$=\int_0^L\frac{1}{\sqrt{L}}\cdot\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{n\pi}{L}x\,dx=\frac{\sqrt{2}}{L}\int_0^L\sin\frac{n\pi}{L}x\,dx$$

$$=\frac{\sqrt{2}}{\cancel{L}}\left[-\frac{\cancel{L}}{n\pi}\cos\frac{n\pi}{L}x\right]_0^L=-\frac{\sqrt{2}}{n\pi}(\underbrace{\cos n\pi}_{(-1)^n}-\underbrace{\cos 0}_{1})$$

$$=\frac{\sqrt{2}\{1-(-1)^n\}}{n\pi}\quad(n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots)\quad \text{となる。}$$

これから，$n=2,\ 4,\ 6,\ \cdots$ のとき，$C_2=C_4=C_6=\cdots=0$ となる。

よって波動関数 $\psi(x)$ は，次のようになる。

$$\psi_n(x)=\underbrace{\frac{2\sqrt{2}}{\pi}}_{C_1}\underbrace{\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{\pi}{L}x}_{\psi_1}+\underbrace{\frac{2\sqrt{2}}{3\pi}}_{C_3}\underbrace{\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{3\pi}{L}x}_{\psi_3}+\underbrace{\frac{2\sqrt{2}}{5\pi}}_{C_5}\underbrace{\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{5\pi}{L}x}_{\psi_5}+\cdots$$

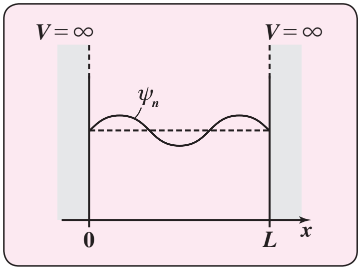
ここで，$\|\psi\|^2=(\psi,\ \psi)=\int_0^L \psi\psi\,dx=\int_0^L\left(\frac{1}{\sqrt{L}}\right)^2 dx=\frac{1}{L}[x]_0^L=\frac{L}{L}=1$ より，

パーシヴァルの等式 $\|\psi\|^2=\sum_{n=1}^{\infty}|C_n|^2$ ………$(*g_0)'$ を用いると，

$1=|C_1|^2+|C_2|^2+|C_3|^2+\cdots=\left(\frac{2\sqrt{2}}{\pi}\right)^2+\left(\frac{2\sqrt{2}}{3\pi}\right)^2+\left(\frac{2\sqrt{2}}{5\pi}\right)^2+\cdots$ より，

$1=\frac{8}{\pi^2}\left(\frac{1}{1^2}+\frac{1}{3^2}+\frac{1}{5^2}+\frac{1}{7^2}+\cdots\right)$ となるので，無限級数の和の公式：

$\frac{1}{1^2}+\frac{1}{3^2}+\frac{1}{5^2}+\frac{1}{7^2}+\cdots=\frac{\pi^2}{8}$ ……$(**1)$ が導けるんだね。大丈夫？



以上で，無限に大きい **1** 次元の井戸型ポテンシャルに閉じ込められた質量 m の粒子の波動関数についての例題 **7** の解説は終了です。かなり長い解説だったけれど，重要な要素をたく山含んでいたので，これで量子力学の基本構造のかなりの部分を学習したことになるんだね。

ここで，最後に，もう **1** 度，$0<x<L$ における，この粒子のシュレーディンガー方程式を書いておくと，

$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}}_{\frac{\hat{p}^2}{2m}=\hat{H}}\psi=E\psi$ ………$(*)'$ だったね。そして，この基本解として，

固有関数 ψ_n と，それに対応する固有値 E_n $(n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots)$ が求まった。

ここで，$(*)'$ の左辺の $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$ を演算子 $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}$ で置き換えると，

$\underbrace{\hat{H}}_{\text{演算子}}\ \underbrace{\psi_n}_{\text{固有関数}}=\underbrace{E_n}_{\text{固有値}}\ \underbrace{\psi_n}_{\text{固有関数}}$ の形になる。この演算子と固有値，固有関数の関係はとても重要なので，また後で (**P180** で) 詳しく解説しよう。

● 調和振動子の問題にもチャレンジしよう！

では，特殊な場合ではあるけれど，次の調和振動子の問題を解いてみよう。

> 例題 8　調和振動子の時刻を含まないシュレーディンガーの波動方程式
>
> $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi}{dx^2}+\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi$ ………①　の 1 つの規格化された解：
>
> $\psi=Ne^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$ ………②　(N，α：正の定数) が与えられている。
>
> (1) 定数 α と N，およびエネルギー E を求めよ。
>
> (2) 位置 x と運動量 p について，$\langle x\rangle$，$\langle x^2\rangle$，$\langle p\rangle$，$\langle p^2\rangle$ を求めよ。
>
> (3) 不確定性原理の式 $\Delta x\,\Delta p=\dfrac{\hbar}{2}$ が成り立つことを示せ。

時刻 t を含まない波動関数 $\psi(x)$ の波動方程式は，一般に

$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi}{dx^2}+V\psi=E\psi$　であり，これに，

調和振動子のポテンシャルエネルギー $V=\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$ を代入したものが，

$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi}{dx^2}+\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi$ ………①　なんだね。

①の式も，$\hat{H}=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}+\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$ とおくと，$\hat{H}\psi=E\psi$ とシンプルに表せる。

この一般的な解法は，エルミート多項式を用いる必要があるため，かなりレベルが高い問題になるんだね。これについては，後で (P148 で) また詳しく解説することにして，今回は，予め 1 つの特殊解 $\psi=Ne^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$ ……② が求まっているものとして，α，N，力学的エネルギー E，バラツキ Δx と Δp の値を求め，不確定性原理の式 $\Delta x\Delta p=\dfrac{\hbar}{2}$ が成り立つことを示すことにしよう。

不確定性原理は，厳密には $\Delta x\Delta p\geqq\dfrac{\hbar}{2}$ と表される。
今回は，この最小値が実現していることになるんだね。

● 不確定性原理の不等式を導こう！

では次に，演算子 $\hat{x}$ と $\hat{p}$ が，エルミート演算子であることと，交換子の知識を利用して，不確定性原理の不等式：

$$\Delta x \cdot \Delta p \geqq \frac{\hbar}{2} \quad \cdots\cdots (*t)'$$

を導くことにしよう。

この $(*t)'$ の不等式は，実は高校数学でも頻出のシュワルツの不等式：

$$\int_a^b \{f(x)\}^2 dx \cdot \int_a^b \{g(x)\}^2 dx \geqq \left\{\int_a^b f(x)g(x)dx\right\}^2 \quad \cdots\cdots (**0)$$

と同様の手法で導くことができるので，参考までに簡単に紹介しておこう。

積分区間 $[a,\ b]$ で積分可能な 2 つの関数 $f(x)$ と $g(x)$ について，新たに変数 t を用いて，次の定積分 $\int_a^b \underbrace{\{tf(x)+g(x)\}^2}_{0\text{以上}} dx$ を実行すると，この被積分関数は 0 以上より，当然次の不等式が成り立つ。

$$\int_a^b \underbrace{\{tf(x)+g(x)\}^2}_{t^2\{f(x)\}^2+2tf(x)\cdot g(x)+\{g(x)\}^2} dx \geqq 0 \quad \cdots\cdots ㋐$$

となる。㋐より，

$$\int_a^b \left(\underbrace{t^2}_{\text{定数扱い}}\{f(x)\}^2 + \underbrace{2t}_{\text{定数扱い}} f(x)g(x) + \{g(x)\}^2\right)\underbrace{dx}_{x\text{で積分}} \geqq 0$$

これは，x での積分より，まず t^2 や $2t$ は定数扱いなので，項別に積分する際，積分記号の外に出せる。

$$\underbrace{t^2\int_a^b \{f(x)\}^2 dx}_{\mathrm{A}(\text{定数})} + \underbrace{2t\int_a^b f(x)g(x)dx}_{\mathrm{B}'(\text{定数})} + \underbrace{\int_a^b \{g(x)\}^2 dx}_{\mathrm{C}(\text{定数})} \geqq 0 \quad \cdots\cdots ㋑$$

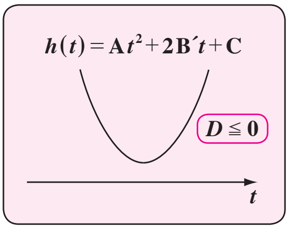
すると，$\int_a^b \{f(x)\}^2 dx$, $\int_a^b f(x)g(x)dx$, $\int_a^b \{g(x)\}^2 dx$ の 3 つの定積分が本当の定数となるので，これらを順に A, B', C とおくと，㋑は，

$\mathrm{A}t^2+2\mathrm{B}'t+\mathrm{C} \geqq 0 \cdots\cdots ㋑$ となって，

t を変数とする 2 次不等式になる。

よって，$h(t) = \underbrace{\mathrm{A}}_{\oplus}t^2+2\mathrm{B}'t+\mathrm{C}$ とおくと，

$h(t)$ は，下に凸の放物線より，すべての実数 t に対して $h(t) \geqq 0 \cdots\cdots ㋑'$ と



なるための条件は，2次方程式 $h(t) = \mathrm{A}t^2 + 2\mathrm{B}'t + \mathrm{C} = 0$ の判別式を D とおくと，

$$\frac{D}{4} = \mathrm{B}'^2 - \mathrm{AC} = \boxed{\left\{\int_a^b f(x)g(x)dx\right\}^2 - \int_a^b \{f(x)\}^2 dx \cdot \int_a^b \{g(x)\}^2 dx \leqq 0}$$

となる。これからシュワルツの不等式：

$$\int_a^b \{f(x)\}^2 dx \cdot \int_a^b \{g(x)\}^2 dx \geqq \left\{\int_a^b f(x)g(x)dx\right\}^2 \quad \cdots\cdots(**0)$$

が導かれるんだね。

それでは，これと同様にして，次の例題を解いて，不確定性原理の不等式 $(*t)'$ を導いてみよう。

> **例題 23** 規格化された波動関数 $\psi(x)$ と，演算子 $\hat{x}$，$\hat{p}$，および任意の値を取り得る実数変数 ξ を用いて，新たな関数 $u(x)$ を
> $u = (\xi\hat{p} + i\hat{x})\psi$ ……① と定義する。
> (1) $(u,\ u) = \langle p^2\rangle\xi^2 + \hbar\xi + \langle x^2\rangle$ ……② が成り立つことを示せ。
> (2) 任意の実数 ξ に対して，$(u,\ u) \geqq 0$ であることから，不確定性原理の不等式：$\Delta x \cdot \Delta p \geqq \dfrac{\hbar}{2}$ ……$(*t)'$ が成り立つことを示せ。
> (ただし，$\langle x\rangle = \langle p\rangle = 0$ とする。)

(1) $u(x) = (\xi\hat{p} + i\hat{x})\psi$ ………① より，$\|u\|^2 = (u,\ u)$ を求めると，

$$\|u\|^2 = (u,\ u) = \big((\xi\hat{p} + i\hat{x})\psi,\ (\xi\hat{p} + i\hat{x})\psi\big) \quad (\xi：\underbrace{\text{任意の実数}}_{\text{定数変数}})$$

$$= (\xi\hat{p}\psi + i\hat{x}\psi,\ \xi\hat{p}\psi + i\hat{x}\psi)$$

$$= (\xi\hat{p}\psi,\ \xi\hat{p}\psi) + (\xi\hat{p}\psi,\ i\hat{x}\psi) + (i\hat{x}\psi,\ \xi\hat{p}\psi) + (i\hat{x}\psi,\ i\hat{x}\psi)$$

$$= \underbrace{\xi^*\xi}_{\xi^2\ (\because\ \xi\text{は実数})}(\hat{p}\psi,\ \hat{p}\psi) + \underbrace{\xi^* i}_{i\xi}(\hat{p}\psi,\ \hat{x}\psi)$$

$$+ \underbrace{i^*\xi}_{-i\xi}(\hat{x}\psi,\ \hat{p}\psi) + \underbrace{i^* i}_{-i\cdot i = -i^2 = 1}(\hat{x}\psi,\ \hat{x}\psi)$$

よって，

$$\|u\|^2=\xi^2(\hat{p}\psi,\ \hat{p}\psi)+i\xi(\hat{p}\psi,\ \hat{x}\psi)-i\xi(\hat{x}\psi,\ \hat{p}\psi)+(\hat{x}\psi,\ \hat{x}\psi)$$

$\hat{p}$ と $\hat{x}$ は，共にエルミート演算子より，移動できる！

$$=\xi^2\underbrace{(\psi,\ \hat{p}^2\psi)}_{<p^2>}+\underbrace{i\xi(\psi,\ \hat{p}\hat{x}\psi)-i\xi(\psi,\ \hat{x}\hat{p}\psi)}_{-i\xi(\psi,\ (\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x})\psi)}+\underbrace{(\psi,\ \hat{x}^2\psi)}_{<x^2>}$$

$$=\xi^2<p^2>-i\xi(\psi,\ \underbrace{(\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x})}_{\text{交換子}[\hat{x},\ \hat{p}]=i\hbar\ (\text{P189より})}\psi)+<x^2>$$

$$=<p^2>\xi^2\underbrace{-i\xi(\psi,\ i\hbar\psi)}_{-i\xi\cdot i\hbar\underbrace{(\psi,\ \psi)}_{\|\psi\|^2=1}=\hbar\xi}+<x^2>$$

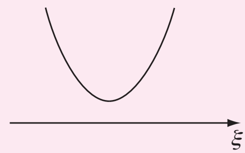
ψ は規格化された
波動関数だからね。

$$\therefore\ \|u\|^2=(u,\ u)=<p^2>\xi^2+\hbar\xi+<x^2>\ \cdots\cdots\cdots②$$ となる。

(2) $\|u\|^2=(u,\ u)=\int_{-\infty}^{\infty}u^*u\,dx=\int_{-\infty}^{\infty}\underbrace{|u|^2}_{0\text{以上}}dx\geqq 0$ である。②より，

$$\|u\|^2=(u,\ u)=\underbrace{<p^2>}_{A}\xi^2+\underbrace{\hbar}_{B}\xi+\underbrace{<x^2>}_{C}$$

$\|u\|^2=A\xi^2+B\xi+C$



$\left(\begin{array}{l}\|u\|^2=0\ \text{の判別式}\ D\ \text{は,}\\ D=B^2-4AC\leqq 0\end{array}\right)$

について，$<p^2>$，$\hbar$，$<x^2>$ を順に **3** つの定数 A，B，C とおくと，
$A=<p^2>\ >0$ より，右図に示すように，②は，ξ を変数とする下に凸の放物線 (**2** 次関数) になる。そして，任意の変数 ξ に対して，$\|u\|^2\geqq 0$ となるための条件は，ξ の **2** 次方程式：
$\|u\|^2=(u,\ u)=A\xi^2+B\xi+C=0$ の判別式を D とおくと，

$$D=B^2-4AC=\boxed{\hbar^2-4\cdot<p^2>\cdot<x^2>\ \leqq 0}$$ である。これから，

$$<x^2><p^2>\ \geqq\frac{\hbar^2}{4}\ \text{より，}\ \sqrt{<x^2>}\sqrt{<p^2>}\ \geqq\frac{\hbar}{2}\ \cdots\cdots\cdots③$$ となる。

ここで，$<x>=<p>=0$　より，

$$\Delta x=\sqrt{<x^2>-\underbrace{\cancel{<x>^2}}_{0^2}}=\sqrt{<x^2>}\ \cdots\cdots\cdots④$$

$$\Delta p=\sqrt{<p^2>-\underbrace{\cancel{<p>^2}}_{0^2}}=\sqrt{<p^2>}\ \cdots\cdots\cdots⑤$$　となる。

④，⑤を③に代入することにより，不確定性原理の不等式：

$$\Delta x\cdot\Delta p\geqq\frac{\hbar}{2}\ \cdots\cdots(*t)'$$　が導けるんだね。

どう？シュワルツの不等式を導くのと同様のプロセスで導くことができて，面白かったでしょう？

さらに，この不確定性原理の不等式 $(*t)'$ は，次の形で表現することもできる。

$$\Delta t\cdot\Delta E\geqq\frac{\hbar}{2}\ \cdots\cdots(*t)''$$

この $(*t)''$ の不等式の導き方も解説しておこう。

ここでは，自由粒子のエネルギーの式 $E=\dfrac{p^2}{2m}$ について考える。

まず，E を p の 2 次関数と考えて，両辺を p で微分すると，

$\dfrac{dE}{dp}=\dfrac{\cancel{2}p}{\cancel{2}m}=\dfrac{p}{m}$　となる。これから，$dE=\dfrac{p}{m}dp$ より，近似的に dE と dp を ΔE と Δp に置き換えると，

$$\Delta E=\frac{p}{m}\Delta p=\frac{\cancel{m}v}{\cancel{m}}\Delta p=\underbrace{v}_{\frac{\Delta x}{\Delta t}}\cdot\Delta p=\frac{\Delta x}{\Delta t}\cdot\Delta p$$　と表せる。よって，

$$\Delta x\cdot\Delta p=\Delta t\cdot\Delta E\ \cdots\cdots\cdots⑥$$　となる。

⑥を $(*t)'$ に代入して，

$$\Delta t\cdot\Delta E\geqq\frac{\hbar}{2}\ \cdots\cdots(*t)''$$　が導けるんだね。

これで，さらに，不確定性原理についての理解が深まったと思う。面白かった？