量子力学入門　第３回　<u>**波動（波）の表し方と性質**</u>　　小山　裕

電子の存在は波として考えられ、その波がどのように存在するかを解き明かすのが、シュレジンガーの波動方程式です。ここで、波動について基本を復習しておきます。

【波動の表わしかた：三角関数】

波動の表し方について、今後使う形式をいくつか示します。最初は、波を三角関数で表す方法です。波は単純な一つの方向へ伝わる一つの周波数＝振動数であれば、三角関数で表されます。例えば、 x 軸上をプラスの方向に進む正弦波は次のような式で表されました。

$$y = A\sin\left\{2\pi\left(\nu t - \frac{x}{\lambda}\right)\right\}$$

ここで、Aは波動の振幅、ν（ギリシャ語のニュー、英語の n に相当する）は振動数です。λ（ギリシャ語のラムダ、英語のl）は波長、 t は時間です。光はこの波長λが電波と比べて、とても短いもので振動数νがとても高い値を持っています。

またこの波は、 x軸方向に、$c = \nu \times \lambda$　の速さで、波の振幅の強弱が伝わっていきます。振動数νの単位は毎秒、つまり 1/s です。波長λの単位は長さです。 c（光速）は正確には「**位相速度**」です。つまり、ある瞬間 t で、x方向に波の振幅の強弱がどれだけの速さでずれていくかを表す速度です。

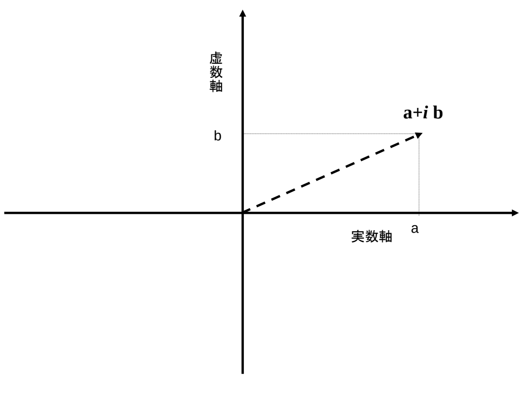
わざわざ位相速度といからには、他の速度もあるはずです。それを「**群速度**」といいます。この群速度は、波の粒子的な性質に関係し、波のエネルギーの塊が移動する速度を言います。

さらに、波や光の世界では、振動数あるいは周波数の代わりに、「**角周波数ω**」を使うことがよくあります。これは前に書いた式　$y = A\sin\left\{2\pi\left(\nu t - \frac{x}{\lambda}\right)\right\}$

これを都合により cos 波を使って　$y = A\cos\left\{2\pi\left(\nu t - \frac{x}{\lambda}\right)\right\}$　と同じ波を

$y = A\cos\{\omega t - kx\}$　と書いて、角周波数ωは　$\omega = 2\pi\nu$　そして　$k = {}^{2\pi}\!/\!_{\lambda}$　を使います。kは**波数**と呼ばれ、単位は m^{-1}、普通は cm^{-1} の単位で表します。この cm^{-1} の単位を、波数を表す時にはカイザーと呼びます（日本だけらしいですが。一般的には wave number と言います。）。この波数は、sin あるいは cos 関数の一周期の単位である２πの間に波長λの波の振幅の強弱がいくつ入っているかを表すので、波数と呼ばれています。波は　$E = h\nu \equiv \hbar\omega$　のエネルギーを持っています。$\hbar = \frac{h}{2\pi}$　で、どちらもプランク定数と呼びます。

【波動の表現：複素数】



次回以降に進む、シュレジンガーの波動方程式などで扱う波では、波を三角関数より複素数の形で表しておくのが便利です。三角関数と複素数との関係は次のように表されることを前提に進めていきます。複素数の復習です。

$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$　ここで、当然ですが、$i = \sqrt{-1}$は虚数の単位です。複素数は一つの二次元的な座標を表すと考えると理解しやすい。　$a + i\,b$　という複素数は下図の、ある点の座標ベクトルを示すことになります。この縦軸が虚

数軸で横軸が実数軸の二次元座標平面を、複素平面といいます。参考書に分かりやすい例題があります。

【例題】ある任意の複素数をCとしたときに　$e^{i\theta}\times C$　という複素数は、複素平面上でCとどのような関係があるか？　任意の複素数Cに$e^{i\theta}$をかける（これを作用させるといいます）と元の複素数Cにどのような結果を与えるか。$e^{i\theta}$は、複素平面上で長さが1で、横軸の実数軸とθという角度をなすベクトルと考えることができます。任意の複素数Cは、ベクトルとして、長さがrで実数軸（横軸）となす角度がαであると考えられますから、$C=r\,e^{i\alpha}$と表すことができる。任意の複素数Cに$e^{i\theta}$を作用させるということは、$e^{i\theta}C=e^{i\theta}\times r\,e^{i\alpha}=r\,e^{i(\theta+\alpha)}$　となりますから、任意の複素数Cの長さは変えないで、角度をθだけ回転させる作用をすることになります。

【複素数で波を表す】

この複素関数の考えを拡張して、波を表すことができます。最初は、ある方向には伝わらない波、位置の関数xが入らない振動は、$e^{i\theta}$のθが時間とともに角速度ωで回転するものとして
$e^{i\omega t}$　で表すことができます。次にある方向、一次元でx方向だけを考えますが、x方向に移動する波は、$y=e^{i(\omega t-kx)}$　で表現することが出来ます。これはxの正の方向に進む波、進行波といいます。xの負の方向に進む波は、後退波と言い、　$y=e^{i(\omega t+kx)}$　で表されます。

【波束：Wave packet】

「パケット」という言葉は通信分野でよく使われています。波の固まりです。この波束はどのように表現されるかについて述べます。簡単のために、そして電子の波動性と関連付けるために、位置の関数のみで変化する波だけを考えてみます。電子の存在を連想するためには、一応時間的に変化しない電子を考えます。電子は物質ですから、位置の違いだけで電子があるとか無いということを考えるということです。そうすると、ある方向に進行する時間的に振動している波の式$y=e^{i(\omega t-kx)}$　において、時間tがゼロの場合を考えますから、$y=e^{-ikx}$　そして進行波でも後退波でも良いわけなので、簡単に見えるように　$y=e^{ikx}$　が波を表すものとします。これは普通の正弦波あるいは余弦波です。位置座標xに対して周期的に振動する波を表しています。

これはある一つの波長λを持つ波ですが、波束はいろいろな違った波長を持った、つまり$\lambda=\dfrac{2\pi}{k}$
という関係で波長λと波数kは関係がありますから、色々な波長ということは色々な波数をもつ波が重なって作られます。実は任意の波の形、ディジタル信号のオン・オフの矩形パルス信号でも、たくさんの正弦波の重ね合わせで作ることができます。（フーリエ変換を思い出してください）波数kが少しづつ違う波をたくさん集めた時、どのような波の形になるかは、波数kが

$k_0-\Delta k$から$k_0+\Delta k$まで足し合わせることになりますから、これは積分することになります。

つまり、$Y=A\displaystyle\int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k}e^{ikx}\,dk$　となります。この式では、xは定数で、kが変数です。

これは計算できて　$\displaystyle\int e^{ikx}dk=\frac{1}{ix}e^{ikx}$　ですから、

$$Y=A\int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k}e^{ikx}\,dk=A\times\frac{1}{ix}\left[e^{ikx}\right]_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k}=A\times\frac{1}{ix}\left[e^{i(k_0+\Delta k)x}-e^{i(k_0-\Delta k)x}\right]$$
$$=A\times\frac{1}{ix}e^{ik_0x}\left(e^{i\Delta kx}-e^{-i\Delta kx}\right)$$

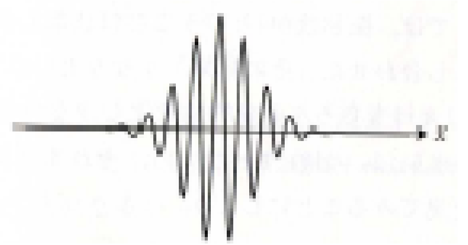
と計算できます。(　)の中は

$$e^{ix} = \cos(x) + i\sin(x)$$
$$e^{-ix} = \cos(x) - i\sin(x)$$

ですから、$2i\sin(\Delta kx)$となり、結局・・・$Y = 2Ae^{ik_0x}\dfrac{\sin(\Delta kx)}{x}$ になります。

そしてＹの実部は

$$Y = 2Ae^{ik_0x}\frac{\sin(\Delta kx)}{x} = 2A\{\cos(k_0x) + i\sin(k_0x)\}\frac{\sin(\Delta kx)}{x}$$
$$= 2A\left[\cos(k_0x)\frac{\sin(\Delta kx)}{x} + i\sin(k_0x)\frac{\sin(\Delta kx)}{x}\right]$$



ですから、実数部は、 $\mathrm{Re}(Y) = 2A\cos(k_0x)\dfrac{\sin(\Delta kx)}{x}$ となります。実部は振動の振幅を表し、虚部は振動の位相、つまり進行方向や進行速度を表します。実部を図に描くと上図のようになります。これはｘがゼロに近いところでは、三角関数部分は１に近づき、ｘが正でも負でもゼロから遠ざかるとともに、振幅が減少してゼロに近づく、合成された波を表しています。この波形をずっと遠くからみると、ｘがゼロに波が集まったようなところが集中しているけれども、しかし近くで見るとたくさんの波が広がっていることが分かるものになります。これを波束といいます。

【不確定性原理】

この波束の計算から、重要な量子力学上の概念が得られます。***不確定性原理***です。上の式では、波数ｋにΔｋのように、ある程度の広がりを持たせると、波束を作ることが出来るわけですが、そうすると波束のように塊が見えてきて、あたかも一定の場所ｘが決まると言えます。一方、$y = e^{ikx}$で表される波を波数ｋを一定に決めてしまうと、周期関数になるのでｘのどこでも波がありますから、位置ｘを決めることができない・・・ということがいえます。これは不確定性原理そのものです。波数ｋは$k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$と書けます。運動量ｐとは、ド・ブロイの物質波の仮説から $p = \dfrac{h}{\lambda} = \dfrac{h}{2\pi}k$ の関係がありますから、上の**不確定性原理は、運動量つまり速度を決めると位置が広がり、位置を決めると運動量を決められなくなる**・・・という答えが数学的に出てきます。このように、塊を波の重ね合わせで表すことを、数学的にはフーリエ変換といいます。粒子と波という、一見矛盾する状態を数学的にはフーリエ変換などによって表します。フーリエ変換によると、一般に関数$f(x)$は $f(x) = \dfrac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} F(k)e^{ikx}dk$ と表されます。つまり、ｘの関数 f(x)が、適当な重み F(x)をつけて周期の異なる振動を足し合わせた、つまり積分した、もので表せる・・ことを示しています。

【例題：光の圧力】

波長$\lambda = 0.6\mu m$（赤色）、強さ$P = 2W$の光が面積$S = 1cm^2$の鏡に当たっています。

問１　鏡には一秒間に何個の光子（フォトン）が当たっていますか？ここで、単位時間内に当たる光子の数Ｎに、１個の光子のエネルギー$h\nu$をかけた値が光の強さＰです。

問２　光が鏡で完全に反射されるとすると、光によって鏡に与えられる圧力を求めなさい。光子１個の運動量は$\dfrac{h}{\lambda}$です。単位時間内の力積・つまり力 Ｆ は $F = \dfrac{2h}{\lambda} \times N$となります。これを面積Ｓで割ると、圧力$p$が求められます。

単位系について確認します。SI 単位系で統一します。$1\mu m = 10^{-4} cm = 10^{-6} m$、$[W] = [J \cdot s^{-1}]$、時間は s （秒)、面積 S は m².

解答例

単位系について確認します。SI 単位系で統一します。$1\mu m = 10^{-4} cm = 10^{-6} m$、$[W] = [J \cdot s^{-1}]$、時間は s （秒)、面積 S は m².

１． 波である光を量子化した**光子（フォトン）** 1 個のエネルギーは、波長が与えられると、$E = h\nu = \dfrac{hc}{\lambda}$ で与えられます。単位時間内に当たる光子の数 N に、1 個の光子のエネルギー $h\nu$ をかけた値が光の強さ P ですから、単位時間内に鏡に当たる光子の個数 N は

$N = \dfrac{P}{h\nu} = \dfrac{P \times \lambda}{hc} = \dfrac{2[W = J \cdot s^{-1}] \times 0.6 \times 10^{-6}[m]}{6.6 \times 10^{-34}[J \cdot s] \times 3 \times 10^{8}[m \cdot s^{-1}]} = 6 \times 10^{18}[個 s^{-1}]$ となります。

２． 光子 1 個の運動量は $\dfrac{h}{\lambda}$ です。光が完全に反射すると、光の運動量の 2 倍を鏡に与えます。

従って、光子 1 個の鏡への衝突で $2 \times \dfrac{h}{\lambda}$ の運動量が鏡へ与えられます。単位時間内の力積・つまり力 F は　$F = \dfrac{2h}{\lambda} \times N$ となります。これを面積 S で割ると、圧力 p が求められますから、

$$p = \frac{F}{S} = \frac{2hN}{\lambda}\left(\equiv \frac{2P}{cS}\right) = \frac{2 \times 2[J \cdot s^{-1}]}{3 \times 10^{8}[m \cdot s^{-1}] \times \left(10^{-2}[m]\right)^{2}} = 1.3 \times 10^{-4}[J \cdot m^{-3}] \equiv 1.3 \times 10^{-4}[(J = N \cdot m) \cdot m^{-3}]$$

$$\equiv 1.3 \times 10^{-4}[N \cdot m^{-2}] \equiv 1.3 \times 10^{-4}[P(パスカル)]$$

となります。余談ですが、気圧の単位に換算すると、1 気圧は 760mmHg（水銀柱で 76cm の高さに相当する圧力）と定義されているので、水銀の比重 $13.6[g/cm^{3}] = 13.6 \times 10^{3}[kg/m^{3}]$、1kgf(キログラムフォース)=1 kg x 9.80665 [m/s²]（重力加速度） =9.80665 [N] $1気圧[atm] = 13.6 \times 10^{3}[kg/m^{3}] \times 0.76[m] \times 9.8[m/s^{2}] = 1.01325 \times 10^{5}[N \cdot m^{-2}] \approx 1 \times 10^{5}[N \cdot m^{-2}]$ なので、光による圧力 p は　$p = 1.3 \times 10^{-4}[N \cdot m^{-2}] \approx 1.3 \times 10^{-9}[気圧]$ です。

【複素数の計算：眠気覚まし】

微分　de^at／dt＝ae^at　⇒　$\dfrac{d}{dt}(e^{j\omega t}) = j\omega e^{j\omega t}$

積分　∫e^at dt＝1/a×e^at　⇒　$\int e^{j\omega t} dt = \dfrac{1}{j\omega} e^{j\omega t}$

$z_1 = 5 + j10$, $z_2 = 3 - j3$ の乗算 $z_1 z_2$、除算 $\dfrac{z_1}{z_2}$ を求めなさい。

$z_1 z_2 = 45 + j15$, $\dfrac{z_1}{z_2} = -\dfrac{5}{6} + j\dfrac{5}{2}$