量子力学

＜フーリエ変換の意味＞

ここでは、フーリエ変換の意味を説明します。そして、その意味を理解していただくためには、小出先生の量子力学（Ｉ）の§3.2 の「フーリエ級数とフーリエ積分」を、ある程度習得してもらっておく必要があります。なので、教科書の§3.2 の節をあらかじめ読んでおいて下さい。では、説明に入ります。

§3.2

ある関数$f(x)$が与えられたとし、フーリエ変換したとする。フーリエ変換、フーリエ逆変換の式は、次で表される。

$$F(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-ikx}f(x)dx \qquad \text{—(16b)（フーリエ変換）}$$

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{ikx}F(k)dk =\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{ikx}\frac{F(k)}{\sqrt{2\pi}}dk \qquad \text{—(16a)（フーリエ逆変換）}$$

(16b)式について、$f(x)$のフーリエ変換が$F(k)$であり、これをフーリエ係数という。

(16a)式は、フーリエ逆変換を表す。

$F(k)$ が得られたとする。フーリエ変換とフーリエ逆変換は、片方がわかれば、もう片方もわかる。なので(16b)式というよりも、(16a)式の$f(x)$の表式を考えることにより、$F(k)$の意味を探るのもよい。ここでは、そうやって$F(k)$を見てみよう。

(16a)式は、波e^{ikx}に重み$\frac{F(k)}{\sqrt{2\pi}}$をつけて、kの全範囲で積分したら（重ね合わせたら）、$f(x)$になるという式である。つまり、$f(x)$について$F(k)$は、波数kの波e^{ikx}をどれくらいの寄与で加え合わせているかを表す。

波e^{ikx}というのがイメージしにくければ、$\mathrm{e}^{ikx}=\cos kx+i\sin kx$ を考えてみよう。そして$f(x)$が、各cos　の波、各sin　の波の重ね合わせで表せるという、この節のフーリエ級数の考えを思い出してみて、フーリエ係数$F(k)$の意味を捉え直すのも大方よい。

結論として、フーリエ変換を表す$F(k)$の意味は次のものである。

$$F(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-ikx}f(x)dx \quad \text{—(16b)}$$

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{ikx}F(k)dk \quad \text{—(16a)}$$

(16a)式の$f(x)$について$F(k)$は、波数kの波e^{ikx}をどれくらいの寄与で加え合わせているかを表す。

＜フーリエ変換の応用＞

量子力学におけるフーリエ変換の応用は、次の 2 つが例として挙がります。

1. シュレディンガー方程式（微分方程式）にフーリエ変換を適用して、解となる式を得る。
   （例として、§3.6）
2. 運動量表示の波動関数$C(\boldsymbol{k})$をフーリエ変換より表し、不確定性原理を導く。
   （例として、§3.5）

ここでは 1 の応用例として、波束の拡散の式の導出を計算手順も併せて紹介し、解答のヒントとします。量子力学の設問集ファイルの設問に答えていく方法で、それを行ないます。

§3.6

（３２）波束の波動関数$\psi(x,t)$の初期条件を$\psi(x,0)=f(x)=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}\exp\left(ik_0x-\frac{\alpha}{2}x^2\right)$と与える。そしてそれより、$\psi(x,t)$と波束の拡散を求める。まず$f(x)$のフーリエ変換$F(k)$を求めよ。そして$f(x)$をフーリエ逆変換で考えて$k$積分の式で表せ。P79(10)(11)

（解）$f(x)$のフーリエ変換$F(k)$を求める。

$$F(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{\alpha}{2}x^2+ik_0x-ikx\right)dx$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{\alpha}{2}\left\{x-\frac{i(k_0-k)}{\alpha}\right\}^2-\frac{(k_0-k)^2}{2\alpha}\right]dx$$

ここで、ガウス関数の積分の公式$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-ax^2}dx=\sqrt{\frac{\pi}{a}}$ を用いて

$$F(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}}\exp\left\{-\frac{1}{2\alpha}(k-k_0)^2\right\}$$

$$=\left(\frac{1}{\pi\alpha}\right)^{1/4}\exp\left\{-\frac{1}{2\alpha}(k-k_0)^2\right\}$$

$$\therefore\ \underline{F(k)=\left(\frac{1}{\pi\alpha}\right)^{1/4}\exp\left\{-\frac{1}{2\alpha}(k-k_0)^2\right\}}\ —(10)$$

が得られる。

この$F(k)$にフーリエ逆変換を適用して

$$\underline{f(x)=\left(\frac{1}{4\pi^3\alpha}\right)^{1/4}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{-\frac{1}{2\alpha}(k-k_0)^2\right\}\mathrm{e}^{ikx}dk}\ —(11)$$

が得られる。

（３３）$\psi(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}C(k,t)\,\mathrm{e}^{ikx}dk$—(13)とおいて、外力がはたらかないとして、シュレディンガー方程式より$C(k,t)$を求める。$t=0$のときに(13)式が(11)式と一致することより$C(k,t)$を求めよ。そして、$\psi(x,t)$をk積分の式で表せ。$\omega(k)=\frac{\hbar k^2}{2m}$とする。

P79,P80(14)

（解）(13)式の波動関数を、シュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

に代入して

$$i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial C}{\partial t}\mathrm{e}^{ikx}dk=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}C(k,t)k^2\mathrm{e}^{ikx}dk$$

これが成り立つためには

$$i\hbar\frac{\partial C}{\partial t}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}C$$

である。$t=0$の$C(k,t)$を$C_0(k)$とおくと、上の式の解は

$$\underline{C(k,t)=C_0(k)\exp\left(-i\frac{\hbar k^2}{2m}t\right)}$$

という形に表せる。$C_0(k)$は、$t=0$のときに(13)式が(11)式と一致することより、次のように得られる。

$$\underline{C_0(k)=\left(\frac{1}{4\pi^3\alpha}\right)^{1/4}\exp\left\{-\frac{1}{2\alpha}(k-k_0)^2\right\}}$$

これを(13)式に入れれば

$$\underline{\psi(x,t)=\left(\frac{1}{4\pi^3\alpha}\right)^{1/4}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{-\frac{1}{2\alpha}(k-k_0)^2\right\}\mathrm{e}^{i[kx-\omega(k)t]}dk} \quad \text{—(14)}$$

となる。

（３４）（３３）の$\psi(x,t)$の積分を実行せよ。P80(16),P81(16a)

（解）(14)式の被積分関数の exp の指数の整理をすると

$$-\frac{1}{2\alpha}(k-k_0)^2+ikx-i\frac{\hbar t}{2m}k^2$$

$$=-\frac{1}{2\alpha}\left(k^2-2k_0k+{k_0}^2\right)+ikx-i\frac{\hbar t}{2m}k^2$$

$$=-\left(\frac{1}{2\alpha}+i\frac{\hbar t}{2m}\right)k^2+\left(\frac{k_0}{\alpha}+ix\right)k-\frac{{k_0}^2}{2\alpha}$$

$$=-\left(\frac{1}{2\alpha}+i\frac{\hbar t}{2m}\right)\left\{k-\frac{\left(\frac{k_0}{\alpha}+ix\right)}{2\left(\frac{1}{2\alpha}+i\frac{\hbar t}{2m}\right)}\right\}^2-\frac{{k_0}^2}{2\alpha}+\frac{\left(\frac{k_0}{\alpha}+ix\right)^2}{4\left(\frac{1}{2\alpha}+i\frac{\hbar t}{2m}\right)}$$

ここで、この指数を一旦、(14)式に戻して代入してみよう。

$$\psi(x,t)=\left(\frac{1}{4\pi^3\alpha}\right)^{1/4}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\left(\frac{1}{2\alpha}+i\frac{\hbar t}{2m}\right)\left\{k-\frac{\left(\frac{k_0}{\alpha}+ix\right)}{2\left(\frac{1}{2\alpha}+i\frac{\hbar t}{2m}\right)}\right\}^2\right]dk$$

$$\times\exp\left\{-\frac{{k_0}^2}{2\alpha}+\frac{\left(\frac{k_0}{\alpha}+ix\right)^2}{4\left(\frac{1}{2\alpha}+i\frac{\hbar t}{2m}\right)}\right\}$$

ここで、ガウス関数の積分の公式を用いると

$$\psi(x,t)=\left(\frac{1}{4\pi^3\alpha}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{\pi}{\left(\frac{1}{2\alpha}+i\frac{\hbar t}{2m}\right)}}\exp\left\{-\frac{{k_0}^2}{2\alpha}+\frac{\left(\frac{k_0}{\alpha}+ix\right)^2}{4\left(\frac{1}{2\alpha}+i\frac{\hbar t}{2m}\right)}\right\}$$

である。この式が、(16)式に一致するように計算していく。ここで再び、上式の exp の指数の整理をすると

$$-\frac{{k_0}^2}{2\alpha}+\frac{\left(\frac{k_0}{\alpha}+ix\right)^2}{4\left(\frac{1}{2\alpha}+i\frac{\hbar t}{2m}\right)}$$

$$=-\frac{{k_0}^2}{2\alpha}+\frac{\left(\frac{k_0}{\alpha}+ix\right)^2\alpha}{2\left(\frac{1}{\alpha}+i\frac{\hbar t}{m}\right)\alpha}$$

$$=-\frac{{k_0}^2}{2\alpha}+\frac{\left(\frac{{k_0}^2}{\alpha^2}+i\frac{2k_0x}{\alpha}-x^2\right)\alpha}{2\left(1+i\frac{\alpha\hbar t}{m}\right)}$$

$$=-\frac{{k_0}^2}{2\alpha}+\frac{\frac{{k_0}^2}{\alpha}+i2k_0x-\alpha x^2}{2\left(1+i\frac{\alpha\hbar t}{m}\right)}$$

$$=\frac{-\frac{{k_0}^2}{\alpha}\left(1+i\frac{\alpha\hbar t}{m}\right)+\frac{{k_0}^2}{\alpha}+i2k_0x-\alpha x^2}{2\left(1+i\frac{\alpha\hbar t}{m}\right)}$$

ここで、(16a)式 $\xi=\frac{\alpha\hbar}{m}$の置き換えをし、また上式の分子を整理すると

$$\text{exp の指数}=\frac{-\frac{{k_0}^2}{\alpha}-i\frac{\hbar {k_0}^2}{m}t+\frac{{k_0}^2}{\alpha}+i2k_0x-\alpha x^2}{2(1+i\xi t)}$$

ここで、(16a)式 $\omega_0=\frac{\hbar {k_0}^2}{2m}$の置き換えをすると

$$\text{exp の指数}=\frac{-\frac{1}{2}\alpha x^2+i(k_0x-\omega_0 t)}{1+i\xi t}$$

この指数を$\psi(x,t)$の式に戻して、計算を進めていくと

$$\psi(x,t)=\left(\frac{1}{4\pi^3\alpha}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{\pi}{\left(\frac{1}{2\alpha}+i\frac{\hbar}{2m}t\right)}}\exp\left\{\frac{-\frac{1}{2}\alpha x^2+i(k_0x-\omega_0t)}{1+i\xi t}\right\}$$

$$=\left(\frac{1}{4\pi^3\alpha}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{\pi(2\alpha)}{\left(\frac{1}{2\alpha}+i\frac{\hbar}{2m}t\right)(2\alpha)}}\exp\left\{\frac{-\frac{1}{2}\alpha x^2+i(k_0x-\omega_0t)}{1+i\xi t}\right\}$$

$$=\left(\frac{1}{4\pi^3\alpha}\right)^{1/4}\sqrt{\frac{2\pi\alpha}{\left(1+i\frac{\alpha\hbar}{m}t\right)}}\exp\left\{\frac{-\frac{1}{2}\alpha x^2+i(k_0x-\omega_0t)}{1+i\xi t}\right\}$$

(16a)式のξより

$$\underline{\psi(x,t)=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{1+i\xi t}}\exp\left\{\frac{-\frac{1}{2}\alpha x^2+i(k_0x-\omega_0t)}{1+i\xi t}\right\}} \quad \text{—(16)}$$

と波動関数が得られた。

（３５）$|\psi(x,t)|^2$を計算し、これが最大値になるところの$x=\bar{x}$を求めよ。そして$\left(x-\frac{\hbar k_0}{m}t\right)=x'$と表すとして、(17)式の指数について、$\exp\left\{-\frac{x'^2}{\Delta(t)^2}\right\}$が$\mathrm{e}^{-1}$になる2つの$x'$の間の幅$2\Delta(t)$を求めよ。P81(18)(19)

（解）

$$|\psi(x,t)|^2=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2}\left|\frac{1}{\sqrt{1+i\xi t}}\right|^2\times\left|\exp\left\{\frac{-\frac{1}{2}\alpha x^2+i(k_0x-\omega_0t)}{1+i\xi t}\right\}\right|^2$$

$$=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2}\sqrt{\frac{1}{1+\xi^2t^2}}\left|\exp\left[\frac{\left\{-\frac{1}{2}\alpha x^2+i(k_0x-\omega_0t)\right\}(1-i\xi t)}{(1+i\xi t)(1-i\xi t)}\right]\right|^2$$

$$=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2}\sqrt{\frac{1}{1+\xi^2t^2}}\left|\exp\left\{\frac{-\frac{1}{2}\alpha x^2+k_0\xi xt-\omega_0\xi t^2+i\left(\frac{\alpha\xi}{2}x^2t+k_0x-\omega_0t\right)}{1+\xi^2t^2}\right\}\right|^2$$

$$=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2}\sqrt{\frac{1}{1+\xi^2t^2}}\exp\left(\frac{-\alpha x^2+2k_0\xi xt-2\omega_0\xi t^2}{1+\xi^2t^2}\right)$$

ここで、(16a)式のξとω_0を代入して

$$|\psi(x,t)|^2=\sqrt{\frac{\frac{\alpha}{\pi}}{1+\xi^2t^2}}\exp\left(\frac{-\alpha x^2+\frac{2k_0\alpha\hbar}{m}xt-2\frac{\hbar k_0{}^2}{2m}\frac{\alpha\hbar}{m}t^2}{1+\xi^2t^2}\right)$$

$$= \sqrt{\frac{\frac{\alpha}{\pi}}{1+\xi^2 t^2}} \exp\left\{\frac{-\alpha x^2 + \frac{2\alpha\hbar k_0}{m} x t - \alpha\left(\frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{1+\xi^2 t^2}\right\}$$

$$= \sqrt{\frac{\frac{\alpha}{\pi}}{1+\xi^2 t^2}} \exp\left\{\frac{-\alpha\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{1+\xi^2 t^2}\right\} \quad \text{—}(17)$$

(17)式が最大値になるところのxは

$$\underline{x = \bar{x} = \frac{\hbar k_0}{m} t} \quad \text{—}(18)$$

である。$\left(x - \frac{\hbar k_0}{m} t\right) = x'$と表記し、また(17)式のexpの指数について

$\exp\left(-\frac{\alpha}{1+\xi^2 t^2} x'^2\right)$ を考えると、$\Delta(t) = \sqrt{\frac{(1+\xi^2 t^2)}{\alpha}}$となる。

よって、波束の幅$\underline{2\Delta(t) = 2\sqrt{\frac{(1+\xi^2 t^2)}{\alpha}}}$は、次第に広がっていく（拡散する）。

以上が、微分方程式にフーリエ積分を適用して、波動関数を求めるという応用例の 1 つです。