非定常シュレーディンガー方程式の対数微分法による求積
―簡単なポテンシャルの中での波束の運動

山口県立大学 共通教育機構
新谷　明雲

キーワード：非定常シュレーディンガー方程式、対数微分法、波束の運動、調和振動子

Solutions of Time-Dependent Schrödinger Equation based on the Logarithmic Derivative Method
―Motions of Wave Packet in Simple Potentials

Meiun　SHINTANI
The General Education Division of Yamaguchi Prefectural University

Abstract

We present a simple and general method in terms of the logarithmic derivative of wave function to search for solutions of the time-dependent Schrödinger Equation. We apply the method to systems with simple potentials and illustrate how to obtain time-dependent solutions.

Key words: time-dependent Schrödinger Equation, logarithmic derivative, motion of wave packet, harmonic oscillator

§１．はじめに～基本方程式の導出

我々はこれまで時間に依存しない系のシュレーディンガー方程式(定常シュレーディンガー方程式)を対数微分法を用い散乱問題や固有値問題を扱うことが可能であることを示してきた [1][2][3]。次のステップとして非定常な量子系をどのようにしたら扱えるかということである。この章ではその方法を概説する。

議論の単純化のために一体の非定常シュレーディンガー方程式から出発する。(ただし空間次元を１とするが、このことが議論の一般性を損なうことはない。)

$$\widehat{H}\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) \ . \tag{1-1}$$

ここで $\widehat{\mathrm{H}}$ は $\hat{\mathrm{x}}$ 表示のハミルトニアンで以下のように与えられる。

$$\widehat{H}= \frac{\hat{p}^2}{2m}+V(x,t)\ ,\ \left(\ \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\ \right)\ . \tag{1-2}$$

$\psi(x,\ t)$ の対数微分変換した量$T(x,\ t)$ を用い（1-1）式を書きなおすことを考える。

$$T(x,t) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}ln\psi(x,t)\quad , \tag{1-3}$$

ないしは

$$T(x,t)\psi(x,t) = \hat{\mathrm{p}}\psi(x,t). \tag{1-4}$$

いま$\psi(x,\ t)$ が自由場における平面波解 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathrm{px}\text{-}\mathrm{Et})/\hbar}$であれば $T(x,\ t)$ は、運動量 p（＝一定）となり運動量とみなされるが、相互作用がある場合には座標 $(x,\ t)$ に依存することに注意する。方程式（1-1）は

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{\partial}{\partial x}T(x,t)+\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 T^2(x,t)\right\}+V(\mathrm{x},\mathrm{t}) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}ln\psi(x,t)\ , \tag{1-5}$$

となる。この方程式は関数 $T(x,\ t)$ について閉じた形をしていない。が再度 x で微分することによりT $(x,\ t)$ について閉じた非線形偏微分方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}T(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x}V(x,t) + i\hbar\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}T(x,t)-\frac{1}{m}T(x,t)\frac{\partial}{\partial x}T(x,t)\ , \tag{1-6}$$

をうる。方程式（1-6）と古典的なニュートンの運動方程式の間には類似が成り立つ。左辺は運動量の時間変化を表し、右辺第１項は粒子にかかる力を表す。第２項は$\hbar$に依存するので量子力学的ポテンシャルとみなしうる。第３項は第２項とともに確率過程のドリフト項、拡散項と類似的であるが、量子力学を確率過程とみなす試みとの関連性については今後の課題として残すことにする。

＜初期値問題の解法＞

非定常シュレディンガー方程式（1-1）を解く代わりに、まず初期分布 $\psi(x,0)$ から $T(x,0)$ を求め、任意時刻の解の形を予想し非線形方程式（1-6）に代入することにより方程式を解く。そのとき、解 $T(x,t)$ は時間依存関数だけの不定性を生じるが、それを決定するために方程式（1-5）を用いる。その際（1-5）式の右辺の $ln\psi(x,t)$ は（1-3）を x 積分して得られたものを代入する。求積の例として、自由場の波束の時間発展、一様電場があるときの波束の運動および調和振動子ポテンシャルの中での波束の運動を§２で扱う。

＜摂動論の取り扱い＞

$V(x,t)$ が摂動パラメーターgに依存するとき、次の展開式

$$T(x,t)=T_0(x,t)+gT_1(x,t)+g^2T_2(x,t)+g^3T_3(x,t)+\cdots \quad (1\text{-}7)$$

$$\psi(x,t)=\psi_0(x,t)+g\psi_1(x,t)+g^2\psi_2(x,t)+g^3\psi_3(x,t)+\cdots \quad (1\text{-}8)$$

を、（６）に代入しgの冪について整理すれば、

$$O(g^0):\ \frac{\partial}{\partial t}T_0(x,t)=i\hbar\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}T_0(x,t)-\frac{1}{m}T_0(x,t)\frac{\partial}{\partial x}T_0(x,t), \quad (1\text{-}9)$$

$$O(g^1):\ \frac{\partial}{\partial t}T_1(x,t)=-\frac{\partial}{\partial x}V(x,t)+i\hbar\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}T_1(x,t)-\frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial x}\{T_0(x,t)T_1(x,t)\} \quad (1\text{-}10)$$

$$O(g^2):\ \frac{\partial}{\partial t}T_2(x,t)=i\hbar\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}T_2(x,t)-\frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial x}\{T_0(x,t)T_2(x,t)\} \quad (1\text{-}11)$$

$$-\frac{1}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{T}_1(x,t)^2$$

・・・

となり、$O(g^0)$ の式（1-9）を除き高次はすべて非斉次線形偏微分方程式である。これらを逐次解くことにより摂動解を求めることができる。その際不定性の処理は前と同様に式（1-5）を用いて行うものとする。このような方法の具体的応用については別の機会にゆずる。

§２．波束の時間発展

この章では、１章で述べた方法を具体例に適用し、すでに良く知られた時間発展の姿を簡単に再現できることを示そう。具体例として簡単な系の波束の運動、すなわち、自由場での波束の運動（例１）、一様電場での電子の運動（例２）、そして最後に調和振動子ポテンシャルの中での波束の運動（例３）、の３例について波動関数および確率密度関数をそれぞれ求める。

例１．自由場での波束の運動

自由場の方程式は、（1-5）、（1-6）で $V(x,t)=0$ とおけば、

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\left\{\frac{i}{\hbar}\frac{\partial}{\partial x}T(x,t)+\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2T^2(x,t)\right\}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}ln\psi(x,t)\ , \quad (2\text{-}1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}T(x,t)=i\hbar\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}T(x,t)-\frac{1}{m}T(x,t)\frac{\partial}{\partial x}T(x,t)\ , \quad (2\text{-}2)$$

となる。自由空間で $t=0$ で、運動量 $\hbar k_0$をもち、原点付近で広がりaのガウス分布をした波束を考える。すなわち、

$$\psi(x,0)=A\,exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}+ik_0x\right)\ , \quad (2\text{-}3)$$

このとき（1-3）より

$$T(x,0)=\frac{\hbar}{i}\left(-\frac{x}{a^2}+ik_0\right) \quad (2\text{-}4)$$

となる。$T(x,t)$ に対し我々は次のAnsatzを採用する、

$$T(x,t)=\frac{\hbar}{i}\left(-\frac{x}{a^2}+ik_0\right)f(t),\ \ f(0)=1. \quad (2\text{-}5)$$

（2-5）を（2-2）に代入すれば以下の $f(t)$ に対する微分方程式をうる。

$$f'(t)=-\frac{i\hbar}{a^2m}f^2(t)\,,$$

これを初期条件のもとで解けば

$$f(t)=\left(\frac{i\hbar t}{a^2m}+1\right)^{-1}\,, \quad (2\text{-}6)$$

となり

$$T(x,t)=\frac{\hbar}{i}\frac{\left(-\frac{x}{a^2}+ik_0\right)}{\left(\frac{i\hbar t}{a^2m}+1\right)}\ , \quad (2\text{-}7)$$

をうる。（1-3）に代入しｘ積分すれば

$$ln\psi(x,t)=g(\mathrm{t})-\frac{\left(-\frac{x^2}{2a^2}+ik_0x\right)}{\left(\frac{i\hbar t}{a^2m}+1\right)}\ ,\ g(0)=0\,, \quad (2\text{-}8)$$

をうる。g(t) を決定するために式（2-7）と（2-8）を（2-1）に代入しg(t) に対する方程式をうる。

$$i\hbar g'(t)=\frac{\hbar^2\mathrm{k_0}^2}{2\mathrm{m}\left(\frac{i\hbar t}{a^2m}+1\right)^2}+\frac{\hbar^2}{2ma^2\left(\frac{i\hbar t}{a^2m}+1\right)}\,, \quad (2\text{-}9)$$

を解いて、

$$g(t)=\frac{a^2k_0^{\,2}}{2\left(\frac{i\hbar t}{a^2m}+1\right)}-\frac{1}{2}ln\left(\frac{i\hbar t}{a^2m}+1\right)-\frac{a^2k_0^{\,2}}{2}\ , \quad (2\text{-}10)$$

をうる。これを（2-8）に代入し

$$\psi(x,t)=\frac{A}{\sqrt{\frac{i\hbar t}{a^2m}+1}}exp\left\{-\frac{x^2-2ia^2k_0x+i\hbar\,a^2k_0^{\,2}t/m}{2a^2\left(\frac{i\hbar t}{a^2m}+1\right)}\right\}, \quad (2\text{-}11)$$

$$\rho(\mathrm{x,t})\equiv|\psi(x,t)|^2=\frac{|\mathrm{A}|^2}{\sqrt{1+\left(\frac{\hbar t}{a^2m}\right)^2}}\exp\left[-\frac{\left(\mathrm{x}-\frac{\hbar k_0 t}{\mathrm{m}}\right)^2}{a^2\left\{1+\left(\frac{\hbar t}{a^2m}\right)^2\right\}}\right]\ , \quad (2\text{-}12)$$

という通常の結果［4］［5］が再現される。

例２．電子の一様電場での運動

x 軸の正の方向から負の方向にかけた一様電場中の電子の運動は以下のポテンシャルで記述される。

$$V(x,t) = -e\,Ex, \tag{2-13}$$

古典的には電子は正の方向に加速度（eE/m）で運動する。量子論でもこのことが成り立つかを我々の方法で調べてみる。例１の場合と同様に $t=0$ で、運動量 $\hbar k_0$をもち、原点付近で広がり a のガウス分布をした波束を考える。この場合ポテンシャル項の相殺のために次のAnsatzを採用する。

$$T(x,t) = \frac{\hbar}{i}\left(-\frac{x}{a^2}+ik_0\right)f(t)+g(t)\ ,f(0)=1, g(0)=0, \tag{2-14}$$

これを方程式（1-6）に代入する。(1-6）よりf(t), g(t）の従う方程式は

$$f'(t) = -\frac{i\hbar}{a^2m}f^2(t),\ \ g'(t) = -\frac{i\hbar}{ma^2}f(t)g(t)+\frac{ieE}{\hbar}, \tag{2-15}$$

$f(t)$の従う方程式は例１と同じであるので解は(2-6)で与えられる。それを第２式に代入し初期条件のもとで $g(t)$ は次のように与えられる。

$$g(t) = \frac{-a_2t-\frac{1}{2}a_1a_2t^2}{1+a_1t}\ ,a_1=\frac{i\hbar}{ma^2}\ ,a_2=\frac{ieE}{\hbar}, \tag{2-16}$$

この結果を（2-14）に代入し、

$$ln\psi(x,t) = \left(-\frac{x^2}{2a^2}+ik_0\right)\frac{1}{1+a_1t}-\frac{a_2t+\frac{1}{2}a_1a_2t^2}{1+a_1t}x+h(t),\ h(0)=0, \tag{2-17}$$

をうる。これを例1と同様に（1-5）に代入し、$h(t)$の従う一階微分方程式を解いて、

$$h(t) = -\frac{1}{2}\ln(1+a_1t)-\frac{i\hbar}{2ma_1}\left(ik_0+\frac{a_2}{2a_1}\right)^2\left(\frac{1}{1+a_1t}-1\right)+\frac{i\hbar a_2}{24{ma_1}^3}\{(1+a_1t)^3-1\}, \tag{2-18}$$

これより

$$\psi(x,t) = \frac{A}{\sqrt{1+a_1t}}\exp\left[-\frac{i\hbar}{2ma_1}\left(ik_0+\frac{a_2}{2a_1}\right)^2\left(\frac{1}{1+a_1t}-1\right)+\frac{i\hbar a_2}{24{ma_1}^3}\{(1+a_1t)^3-1\}+\left(-\frac{x^2}{2a^2}+ik_0\right)\frac{1}{1+a_1t}-\frac{a_2t+\frac{1}{2}a_1a_2t^2}{1+a_1t}x\right], \tag{2-19}$$

$$\rho(x,t) \equiv |\psi(x,t)|^2 = \frac{|A|^2}{\sqrt{1+\left(\frac{\hbar t}{a^2m}\right)^2}}\exp\left[-\frac{\left(x-vt-\frac{1}{2}\alpha t^2\right)^2}{a^2\left\{1+\left(\frac{\hbar t}{a^2m}\right)^2\right\}}\right], \tag{2-20}$$

ここで v, α は、

$v=\frac{\hbar k_0}{m},\ \ \alpha=\frac{eE}{m}$ ，とした。

この確率密度関数より波束中心 x_0 が$vt+\frac{1}{2}\alpha t^2$の等加速度運動することが分かる。ただし、波束の広がりは標準偏差σの時間依存性からわかり、

$$\sigma = \frac{1}{2}a\sqrt{1+\frac{\hbar^2t^2}{a^4m^2}} \approx \frac{1}{2}a\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{a^4m^2}\right)\ \ for\ t \ll \frac{a^2m}{\hbar}, \tag{2-21}$$

となるため時間とともに急速に広がることが分かる。次の例３では、調和振動子ポテンシャルの中に閉じ込められた波束が時間とともにその形が広がることなく保持されることを示す。

例３．調和振動子ポテンシャルの中での波束の運動

方程式（1-5),（1-6）において、ポテンシャルが調和振動子

$$V(x,t) = \frac{1}{2}kx^2 \tag{2-23}$$

の場合を扱う。いま $t=0$ で波束の中心が原点から離れたx=aを中心とするガウス分布を持つとする。ただし、初速度は０とする。すなわち

$$\psi(x,0) = A\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-a)^2\right\} \tag{2-24}$$

とすると、

$$T(x,0) = -\frac{m\omega}{\hbar}(x-a)$$

であるので、$T(x,t)$ として次のAnsatz を採用する。

$$T(x,t) = -\frac{m\omega}{\hbar}(x-af(t)), f(0)=1 \tag{2-25}$$

この式を、(1-6）に代入すると、$f(t)=e^{-i\omega t}$として求まる。よって、

$$ln\psi(x,t) = -\frac{m\omega}{2\hbar}(x-ae^{-i\omega t})^2-\frac{im\omega ax\sin\omega t}{\hbar}+g(t)\ , \tag{2-26}$$

となる。$g(t)$ を求めるためにこれまでのように（2-26）を方程式（1-5）に代入して

$$g'(t) = -\frac{i\omega}{2}+\frac{im\omega^2a^2\cos2\omega t}{2\hbar}\ , \tag{2-27}$$

これを解いて

$$g(t) = -\frac{i\omega}{2}t+\frac{im\omega a^2\sin2\omega t}{4\hbar}+const.\ , \tag{2-28}$$

となる。したがって、

$$\psi(x,t) = C\exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-ae^{-i\omega t})^2-\frac{im\omega ax\sin\omega t}{\hbar}\right\}\exp\left(-\frac{i\omega}{2}t\right)\exp\left(\frac{im\omega a^2\sin2\omega t}{4\hbar}\right), \tag{2-29}$$

$$\rho(x,t) \equiv |\psi(x,t)|^2 = |C|^2\exp\left\{-\frac{m\omega}{\hbar}(x-a\cos\omega t)^2\right\}, \tag{2-30}$$

として求まる。確率密度関数は時間とともにガウス分布のままで波束の中心が振幅 a の単振動をすることが分かる。これもコヒーレント状態としてよく知られた結果［5］［6］である。

§３　議論と展望

本論文では、厳密解がすでに求まっている系について我々の方法で再導出できることを示した。フーリエ変換による方法［4］［5]、経路積分［6］による方法などいろいろな方法で解が求められるが、我々の方法はそんなに大げさな道具建てがいらず、微文と積分ができる高校生にも容易に理解し使いこなす

ことができる方法と言える。ただし、ここで用いたAnsatzが必ずしも系統的かつ数学的な一般性を帯びたものであるかはこの時点で明言できない。答を知っているからAnsatzの形が誘導的に選択されたともいえる。しかし、我々のAnsatzに任意性がある点はむしろ時間発展するシュレーディンガー方程式が多様な解を内包するが故に有する任意性ともいえるのではないか。波動関数がヒルベルト空間のベクトルである拘束の中においてさえ、初期値関数の選択に多大な自由度が存在することは、定常シュレーディンガー方程式に比しはるかに含む解が多様で豊かなのであろう。我々の方法を用いてその豊かさを例示することが出来そうであるが、この点は将来に委ねさせて頂きたい。

次に残された重要な課題は、すでに§１でも概説したように、ポテンシャルが小さなパラメーターを持つ時に時間に依存する解を求めることである。

References

[１] M. Shintani, Bulletin of Yamaguchi Prefectural University, Faculty of Human Life Sciences（山口県立大学生活科学部研究報告）, vol.26（2000）39-42.

[2] M. Shintani , Bulletin of Yamaguchi Prefectural University, Faculty of Human Life Sciences（山口県立大学生活科学部研究報告）, vol.27（2001）39-42.

[3] M. Shintani, Bulletin of Yamaguchi Prefectural University, Faculty of Human Life Sciences（山口県立大学生活科学部研究報告）, vol.30（2004）29-45.

[4] 例えば、シッフ「量子力学」吉岡書店（1969年）

[5] 例えば、小出昭一郎「量子力学１（改訂版）」裳華房（1998年）

[6] 例えば、Bjorn Felsager, Geometry, Particles and Fields, Odense University Press（1985）