波束と群速度について

9回目の講義では、ある $k-E$ 関係にある電子の粒子としての速度が

$$v=\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}$$

によって記述される、ということを述べました。これは波束の群速度と呼ばれるもので、この資料ではその解説を試みたいと思います。フーリエ解析を学んでいると見覚えのある関係式が多いのでは、と思うのですが、そうでないと少々つらいかもしれません。ごめんなさい。

時間に依存しないシュレーディンガー方程式と振動数

もともとのシュレーディンガー方程式は、波動関数 $\psi(x,t)$ について

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi \tag{1}$$

であった。ハミルトニアン $\hat{H}$ が時間によらないときは、その固有関数 $\psi_k(x)$ と固有値 E_k が定まれば

$$\hat{H}\psi_k=E_k\psi_k \tag{2}$$

であった。なおこの式は「定常状態のシュレーディンガー方程式」と呼ばれることがある。

このとき $\psi(x,t)=\psi_t(t)\psi_k(x)$ のように、波動関数を t の関数 $\psi_t(t)$ と x の関数 $\psi_k(x)$ との積で表現できるとすれば、式 (1), (2) より $\psi_t(t)$ の満たすべき微分方程式が

$$i\hbar\frac{\partial\psi_t}{\partial \mathrm{t}}=E_k\psi_t$$

と整理できる。この解は

$$\psi_t(t)=A\,e^{-i\omega t}\ \left(\text{ただし}\ \omega=E_k/\hbar\right)$$

である。

周期ポテンシャル下にある電子では ψ_k はブロッホ関数になるから、結局 $\psi(x,t)$ は

$$\psi(x,t)=A\exp\{i(kx-\omega t)\}\,u_k(x) \tag{3}$$

のように、進行する平面波に $u_k(x)$ の空間変調がかかった関数として表現できることになる。なおこの場合、ω はエネルギー E_k で定まるので、k の関数と考えてよい。

ここでは、フーリエ解析での流儀と整合性がよくなるよう、式 (3) の exp の内部の符号を逆にしておきたい。すなわち

$$\psi(x,t)=A_1\exp\{i(\omega t-kx)\}\,u_k(x) \tag{4}$$

とする。これは波動関数を複素共役で考えることに相当し、このことによって波の性質に本質的な影響は生じない。

波束

式 (4) のような関数をもとに存在確率を計算すると、($u_k(x)$ による変調を除き) 空間的にあらゆる場所で等しい値を持つことになる。すなわちこの量子状態は、粒子の場所についての情報を全く持たない。これでは、例えばある場所に存在して電場によって影響を受ける電子を記述するには具合が悪い。

このような、粒子としての情報を扱うための概念が、波束と呼ばれるものである（光学の分野でも良く用いられる）。これは、波長（すなわち波数 k）の異なる波を重ねあわせると、うなりと呼ばれる効果によって振幅の大小が生じる現象を利用している。ここでは簡単のために、$u_k(x) \equiv 1$ とした場合について議論を展開しよう。

波束の重ねあわせについては、図やアニメーションを含む説明が、

- 筑波大 武内先生「量子力学Ｉ/群速度と波束の崩壊」https://bit.ly/32XlCkU
- 広江克彦さん「ＥＭＡＮの物理学－群速度」https://eman-physics.net/math/group_vel.html
- 琉球大 前野先生「位相速度と群速度」http://irobutsu.a.la9.jp/movingtext/Vgvp/

などのサイトにあるので参照してみるとよい。

紹介したサイトのアニメーションでは、複数の波の和をとっている。そのような和をとった結果は、繰り返し現れるパターンになる。これを連続的な積分に移行すると、空間的に孤立した波を作ることができる（フーリエ解析を勉強したひとは、フーリエ展開→フーリエ変換、のときの話を思い出そう）。このような積分の結果として得られる、実空間での波 $u(x,t)$ は

$$u(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} U(k)\exp\{i(\omega t - kx)\}\,dk \tag{5}$$

となる（これはフーリエ逆変換にあたる）。この積分における因子 $U(k)$ は時刻 $t=0$ における波 $u(x,0)$ のフーリエ変換によって、

$$U(k) = \int_{-\infty}^{\infty} u(x,0)\exp(ikx)\,dx$$

と求められる k の関数である。

フーリエ解析のクラスでは、$u(x,0)$ がガウス関数

$$u(x,0) = \exp(-ax^2)$$

の場合、そのフーリエ変換が

$$U(k) = \sqrt{\frac{a}{\pi}}\exp\left(-\frac{k^2}{4a}\right)$$

のように、やはりガウス関数となることを学んだ（学んでないひとはすみません…）。このように、実空間において局在している波は、周波数軸においても局在している。よって式 (5) のような積分には、ある k の近辺の周波数成分のみが寄与すると考えてよい。

このように $U(k)$ の広がりが小さい場合には、$\omega(k)$ を波数成分 k の中央値 $\bar{k}$ のまわりにテイラー展開して、近似をすることが可能だろう。$\omega(k)$ の $\bar{k}$ まわりのテイラー展開は以下となる。

$$\omega(k) = \omega(\bar{k}) + \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k=\bar{k}}(k-\bar{k}) + \frac{1}{2}\left.\frac{d^2\omega}{dk^2}\right|_{k=\bar{k}}(k-\bar{k})^2 + \cdots$$

ここで $(k-\bar{k})$ が小さいとして、二次以降の項を無視して式 (5) に代入すると、

$$u(x,t) = \frac{1}{2\pi}\exp\{i(\omega(\bar{k})t - \bar{k}x)\}\int_{-\infty}^{\infty} U(k)\exp\left\{-i\left(x - \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k=\bar{k}}t\right)(k-\bar{k})\right\}dk$$

が得られる。一方、式 (5) に $t=0$ を入れれば

$$u(x,0)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}U(k)\exp\{-ikx\}\ dk$$

となることを考慮すれば、

$$u(x,t)=\exp\{i(\omega(\bar{k})t-\bar{k}x)\}u\left(x-\left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k=\bar{k}}t,0\right) \tag{6}$$

が得られる。

この式は、位相として振動する項 $\exp\{i(\omega(\bar{k})t-\bar{k}x)\}$（存在確率を求める際に絶対値の自乗をとれば 1 になる）を除けば、$u(x,t)$ は $u(x,0)$ のかたちを保ちつつ、右方向に

$$v_g\equiv\left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k=\bar{k}}$$

と定義される速さ v_g で移動する波であることを示している。この v_g が「群速度」と呼ばれるもので、波束（存在確率が局在している波動関数）の移動速度を表しているのである。電子の波動関数では $\omega=E/\hbar$ だったので、これが求めたかった関係と等しい。

なお、波束を構成する波が持つエネルギーは、$E_{\bar{k}}$ の近辺にあるものの、その周りに揺らいでいることになる。これは空間的な局在を実現するためにやむを得ないトレードオフで、いわゆる不確定性原理の現れの一種になっている。

参考文献

鶴田匡夫「応用光学」応用物理学選書1, 培風館 (1990)、1.8 節

大津元一「現代光科学 I〜光の物理的基礎」朝倉書店 (1994) 1.6 節