1 時間の変数分離の物理的意味

1.1 時間を含まないシュレーディンガー方程式の導出

通常, シュレーディンガー方程式を解く場合, まず最初に求めるべき波動関数を $\Psi(\boldsymbol{r},t) = f(t)u(\boldsymbol{r})$ とおき, シュレーディンガー方程式に代入する. 即ち, シュレーディンガー方程式は, ポテンシャルを $V = V(\boldsymbol{r})$ とすると,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi$$

だから,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(f(t)u(\boldsymbol{r})) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2(f(t)u(\boldsymbol{r})) + V(\boldsymbol{r})(f(t)u(\boldsymbol{r}))$$

より, 偏微分に影響の無い部分を前に出して,

$$i\hbar u(\boldsymbol{r})\frac{df(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}f(t)\nabla^2u(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})f(t)u(\boldsymbol{r})$$

とし, 両辺を $f(t)u(\boldsymbol{r})$ で割る. すると,

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{df(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2mu(\boldsymbol{r})}\nabla^2u(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})$$

となる. この式において, 左辺は座標 $\boldsymbol{r}$ を含まず, 右辺は時間 t を含まないので, 両辺は定数でなければならない. よってある定数 C によって,

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{df(t)}{dt} = C \tag{1}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2mu(\boldsymbol{r})}\nabla^2u(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r}) = C \tag{2}$$

となる. 式 (1) は,

$$\left(\frac{d}{dt} - \frac{C}{i\hbar}\right)f(t) = 0$$

より, 解はある定数 A によって,

$$f(t) = A\exp\left(\frac{C}{i\hbar}t\right)$$

と表されるが, $\Psi(\boldsymbol{r},t) = A\exp\left(\frac{C}{i\hbar}t\right)u(\boldsymbol{r})$ だから,

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} &= i\hbar\left(\frac{C}{i\hbar}\right)A\exp\left(\frac{C}{i\hbar}t\right)u(\boldsymbol{r}) \\ &= C\Psi \end{aligned}$$

となるが, 対応原理の

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \longrightarrow E$$

より, C はエネルギーの固有値となる. よってこの固有値 C を改めてエネルギーを表す E と表記すると,

$$\begin{aligned}\Psi(\boldsymbol{r},t) &= A\exp\left(\frac{E}{i\hbar}t\right)u(\boldsymbol{r}) \\ &= \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)Au(\boldsymbol{r})\end{aligned}$$

となる. ここで, $\Psi(\boldsymbol{r},t) = f(t)u(\boldsymbol{r})$ は各変数ごとに規格化してしまった方が便利だろうから,

$$\int_{全空間}\left(A\exp\left(\frac{E}{i\hbar}t\right)\right)^* A\exp\left(\frac{E}{i\hbar}t\right) \quad d\boldsymbol{r} = |A|^2\int_{全空間} d\boldsymbol{r} = 1$$

より, $A = 1$ と求まる. ($\because A$ は正実数でよいから) 結局, 波動関数は,

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) = \quad \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)u(\boldsymbol{r})$$

の形となり, 解くべきシュレーディンガー方程式は (2) だから, 少し変形して,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})u(\boldsymbol{r}) = Eu(\boldsymbol{r})$$

となる. この方程式を『時間を含まないシュレーディンガー方程式』とよび, ここで用いられた $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ を $\Psi(\boldsymbol{r},t) = f(t)u(\boldsymbol{r})$ と置いて解く方法を変数分離と呼ぶ.

だいぶ前置きが長くなってしまったが, 上の流れのように通常量子力学の解説書では『何故変数分離するのか？』『変数分離できない解は無いのか？』等については殆ど触れられていない場合が多い. (定数 C にエネルギーを表す E を用いる理由についても, 充分な説明が無い場合が多い.) ここでは, 時間の変数分離が物理的に何を意味するのかについて述べたい.

1.2 エネルギーと時間との間の不確定性の導出

まず, A, B をエルミート演算子とするとき, (つまり, $A^* = A, B^* = B$),

$$\langle\Psi|\hat{A}^2|\Psi\rangle\langle\Psi|\hat{B}^2|\Psi\rangle \geq \frac{\left|\langle\Psi|\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}|\Psi\rangle\right|^2}{4} \tag{3}$$

が成り立っている. ここでエネルギーの分散と時間の分散は, E, t の期待値をそれぞれ $\langle E\rangle, \langle t\rangle$ で表すと,

$$\begin{aligned}(\Delta E)^2 &= \langle\Psi|(\hat{E}-\langle E\rangle)^2|\Psi\rangle \\ (\Delta t)^2 &= \langle\Psi|(\hat{t}-\langle t\rangle)^2|\Psi\rangle\end{aligned}$$

となる. (なお, 通常 $\hat{E}$ は $\hat{H}$ で表すようだが, ここでは分かり易く $\hat{E}$ を用いた.) そこで今,

$$
\begin{aligned}
\hat{E}' = \quad & \hat{E} - \langle E \rangle \quad & = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \langle E \rangle \\
\hat{t}' = \quad & \hat{t} - \langle t \rangle \quad & = t - \langle t \rangle
\end{aligned}
$$

と置くと,

$$
\begin{aligned}
\langle \Psi | \hat{E}'\hat{t}' | \Psi \rangle &= \int \Psi^* \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \langle E \rangle \right) (t - \langle t \rangle) \Psi d\boldsymbol{r} \\
&= \int \Psi^* \left(i\hbar\Psi + (t - \langle t \rangle) i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} - \langle E \rangle (t - \langle t \rangle)\Psi \right) d\boldsymbol{r} \\
&= i\hbar + \int \Psi^* (t - \langle t \rangle) \left(i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} - \langle E \rangle \Psi \right) d\boldsymbol{r} \\
&= i\hbar + \langle \Psi | \hat{t}'\hat{E}' | \Psi \rangle
\end{aligned}
$$

よって,

$$
\begin{aligned}
\langle \Psi | \hat{E}'\hat{t}' - \hat{t}'\hat{E}' | \Psi \rangle &= \langle \Psi | \hat{E}'\hat{t}' | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{t}'\hat{E}' | \Psi \rangle \\
&= i\hbar
\end{aligned}
$$

が得られる. これを先ほどの式 (3) に代入してやると,

$$
\begin{aligned}
(\Delta E)^2 (\Delta t)^2 &= \langle \Psi | (\hat{E} - \langle E \rangle)^2 | \Psi \rangle \langle \Psi | (\hat{t} - \langle t \rangle)^2 | \Psi \rangle \\
&= \langle \Psi | \hat{E}'^2 | \Psi \rangle \langle \Psi | \hat{t}'^2 | \Psi \rangle \\
&\geq \frac{\left| \langle \Psi | \hat{E}'\hat{t}' - \hat{t}'\hat{E}' | \Psi \rangle \right|^2}{4} \\
&= \frac{|i\hbar|^2}{4} \\
&= \frac{\hbar^2}{4} \\
\therefore \Delta E \Delta t &\geq \frac{\hbar}{2}
\end{aligned}
$$

これはエネルギーと時間の間に不確定性関係が成り立つことに他ならない.

1.3　時間を変数分離した場合のエネルギーの分散（= $(\Delta E)^2$）

$$
\begin{aligned}
(\Delta E)^2 &= \langle \Psi | (\hat{E} - \langle E \rangle)^2 | \Psi \rangle \\
&= \langle \Psi | \hat{E}^2 - 2\langle E \rangle \hat{E} + \langle E \rangle^2 | \Psi \rangle \\
&= \langle \Psi | \hat{E}^2 | \Psi \rangle - 2\langle E \rangle \langle \Psi | \hat{E} | \Psi \rangle + \langle E \rangle^2 \langle \Psi | \Psi \rangle \\
&= \langle E^2 \rangle - 2\langle E \rangle \langle E \rangle + \langle E \rangle^2 \\
&= \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2
\end{aligned}
$$

より, $\langle E^2 \rangle$ と $\langle E \rangle$ を求めればよい.

$$
\begin{aligned}
\langle E \rangle &= \langle \Psi | \hat{E} | \Psi \rangle \\
&= \int \Psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi d\boldsymbol{r} \\
&= \int \Psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \left(\exp\left(-i\frac{E}{\hbar} t \right) u(\boldsymbol{r}) \right) d\boldsymbol{r} \\
&= \int \Psi^* i\hbar \left(-i\frac{E}{\hbar} \right) \left(\exp\left(-i\frac{E}{\hbar} t \right) u(\boldsymbol{r}) \right) d\boldsymbol{r} \\
&= E \int \Psi^* \Psi d\boldsymbol{r} \\
&= E \\
\therefore \langle E \rangle &= E
\end{aligned}
$$

同様にして,

$$
\begin{aligned}
\langle E^2 \rangle &= \langle \Psi | \hat{E}^2 | \Psi \rangle \\
&= \int \Psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 \Psi d\boldsymbol{r} \\
&= \int \Psi^* (i\hbar)^2 \left(\frac{\partial}{\partial t} \right)^2 \left(\exp\left(-i\frac{E}{\hbar} t \right) u(\boldsymbol{r}) \right) d\boldsymbol{r} \\
&= \int \Psi^* (i\hbar)^2 \left(-i\frac{E}{\hbar} \right)^2 \left(\exp\left(-i\frac{E}{\hbar} t \right) u(\boldsymbol{r}) \right) d\boldsymbol{r} \\
&= E^2 \int \Psi^* \Psi d\boldsymbol{r} \\
&= E^2 \\
\therefore \langle E^2 \rangle &= E^2
\end{aligned}
$$

よってこれより,

$$
(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0
$$

となり, エネルギーの分散は 0, つまり, 変数分理解はエネルギーを完全に確定することが分かる.

1.4　時間の変数分離と定常状態

さて, 最後にこの結果がどういう意味を表しているのか, 考えてみよう.

まず, エネルギーと時間との間に不確定性が成り立つ. つまり,

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

であること, 及び $\Delta E = 0$ より, 必然的に $\Delta t = \infty$ が成り立つ． これは一体どういう意味なのであろうか？

実はこれは, エネルギーを観測すると, **そのエネルギー値がいつでも成り立つ**. ことを表している. （と思う）又は, エネルギーを正しく観測しようとすると，その計測に十分な時間が必要であるということを意味している (と思う)． この状況は古いカメラで写真を撮るのに似ているかもしれない． つまり写真がキチンと撮影できるためには十分長い露光時間が必要だが，それはその撮影した写真がどの瞬間の写真なのか？ということが分からない事に相当する (と思う). まさにこれが定常状態と呼ばれるものである. 実際, 存在確率密度は $\Psi^*\Psi$ で与えられるのだったから,

$$\begin{aligned}
\rho(\boldsymbol{r}, t) &= \Psi^*\Psi \\
&= (f(t)u(\boldsymbol{r}))^* f(t)u(\boldsymbol{r}) \\
&= u(\boldsymbol{r})^* f(t)^* f(t)u(\boldsymbol{r}) \\
&= u(\boldsymbol{r})^* \exp^*\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)u(\boldsymbol{r}) \\
&= u(\boldsymbol{r})^* \exp\left(i\frac{E}{\hbar}t\right)\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)u(\boldsymbol{r}) \\
&= u(\boldsymbol{r})^* u(\boldsymbol{r}) \\
&= |u(\boldsymbol{r})|^2
\end{aligned}$$

となり, 存在確率密度は時間に依存しないことが分かる.