

ポテンシャル中の連続エネルギー状態の非直交パズル解明

～量子遷移解明への貢献に期待～

ポイント

- ・物理的要請を満たす連続固有状態の内積と直交性の証明に成功。
- ・非直交連続状態の重ね合わせは、孤立状態ではないことの証明。
- ・2状態の直交は、短距離ポテンシャルで成立し、長距離ポテンシャルで成立しない。

概要

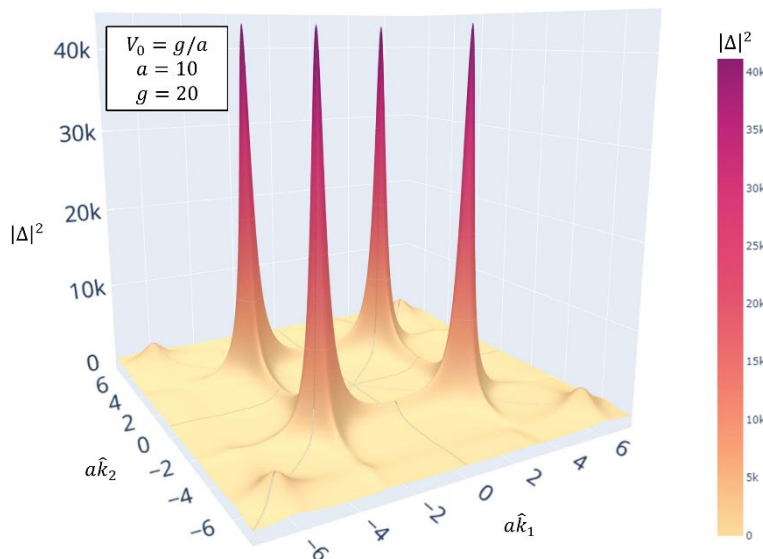
北海道大学の石川健三名誉教授（元大学院理学研究院教授）と同大学大学院理学院修士課程の西尾勇哉氏の研究グループは、量子力学*1の基本方程式である、シュレディンガー方程式のポテンシャル中の連続固有値解に関する長年のパズルを、新たな物理的な観点に基づいて解くことに成功しました。

連続状態の扱いは数学的に複雑で、ヒルベルト空間*2に属している束縛状態と異なり、エルミートであるハミルトニアン固有状態にも、困難が現れます。しかしこれは、数学とは独立に物理学の原理によって解消することができます。つまり、自然現象にかかわる物理的な要請を課すことで初めて明らかにできる事柄です。

本研究では、孤立した物理状態条件とマクロ物理量の条件を課して、連続状態の境界条件と内積、異なる状態の直交性を明らかにしました。さらに遷移確率の正しい計算法も明らかにすることができました。これらより、前方領域を含む全領域でのポテンシャル散乱の散乱確率の絶対値の計算法が解明され、生物を含む広範囲の遷移への量子力学の新たな応用の道が開かれたと言えます。

長く曖昧のままにされていた連続定常状態の内積や直交性が物理的な要請に基づいて明らかになったことは、量子力学の適用範囲を広げるものであり、さらなる応用が期待されます。

なお、本研究成果は、2024年7月31日（水）公開の Annals of Physics 誌に掲載されました。



非直交成分の絶対値の2乗。

【背景】

ポテンシャル散乱は、1930 年前後に標準的な計算法が確立しました。しかしこの方法は、連続状態の直交性に絡む深刻な問題点を含み、幅広い現象に適用できるものではありませんでした。その後見つけた幅広い科学技術の分野の現象に適用できる方法の解明に向けて、問題点と新たな理解・修正を検討しました。

【研究手法・研究成果】

量子力学のポテンシャル問題における標準的な方法の隠れた問題点を、具体的な計算で理論的に洗い出し、正しい計算法を明らかにした上で、現象や実験に適用される公式を解明しました。その結果を適用して、幅広い自然現象を正しく理解する確率の計算法を開発しました。

具体的には、ポテンシャル中の連続エネルギー状態とそれらの内積に対して満たすべき物理的な条件 1 と 2 を調べたところ、条件 1 は、内積のスケール不変性、条件 2 は孤立状態だということが分かりました。2 条件を満足するように連続状態の内積や性質を決定し、定常状態の非直交性と孤立状態の構成法を明らかにしました。また、箱型ポテンシャルにおける厳密解に対する数値計算で結果を確認しました（図 1、図 2）。これらに則って、遷移確率の絶対値の計算法が明らかにされ、様々な現象の発現する確率の計算や、現象の解析・理解が可能となりました。

【今後への期待】

量子力学の基本に直結する本結果は、多様な自然現象の理解と、新たな解明に役立ちます。幅広い分野における量子効果が解明されることは、社会的に大変有益です。これより、実験室における種々の測定や、実験室以外における種々の観測データの解析が可能となりました。多様な状況で使える量子力学的計算は、今までの標準的な方法では得られなかった情報を正しく与えます。これらが、新たな実験や測定によって検証されることが期待されます。

【謝辞】

本研究は、JSPS 科研費（JP21H01107）の助成を受けたものです。

【関連するプレスリリース】

北海道大学プレスリリース「 L^2 空間でのポテンシャル散乱の確率の絶対値の計算に初めて成功～幅広い自然現象の解明への貢献に期待～」

発表日：2025 年 1 月 29 日（水）

URL：<https://www.hokudai.ac.jp/news/2025/01/l-2.html>

論文情報

論文名 Overlap integral of continuum stationary states (連続エネルギー状態の重なり積分)

著者名 石川健三¹、西尾勇哉² (¹北海道大学大学院理学研究院、²北海道大学大学院理学院)

雑誌名 Annals of Physics (物理学の専門誌)

D O I 10.1016/j.aop.2024.169750

公表日 2024年7月31日(水)(オンライン公開)

お問い合わせ先

北海道大学 名誉教授(元大学院理学研究院教授) 石川健三(いしかわけんぞう)

T E L 011-706-4486 F A X 011-706-4926 メール ishikawa@particle.sci.hokudai.ac.jp

配信元

北海道大学社会共創部広報課(〒060-0808 札幌市北区北8条西5丁目)

T E L 011-706-2610 F A X 011-706-2092 メール jp-press@general.hokudai.ac.jp

【参考図】

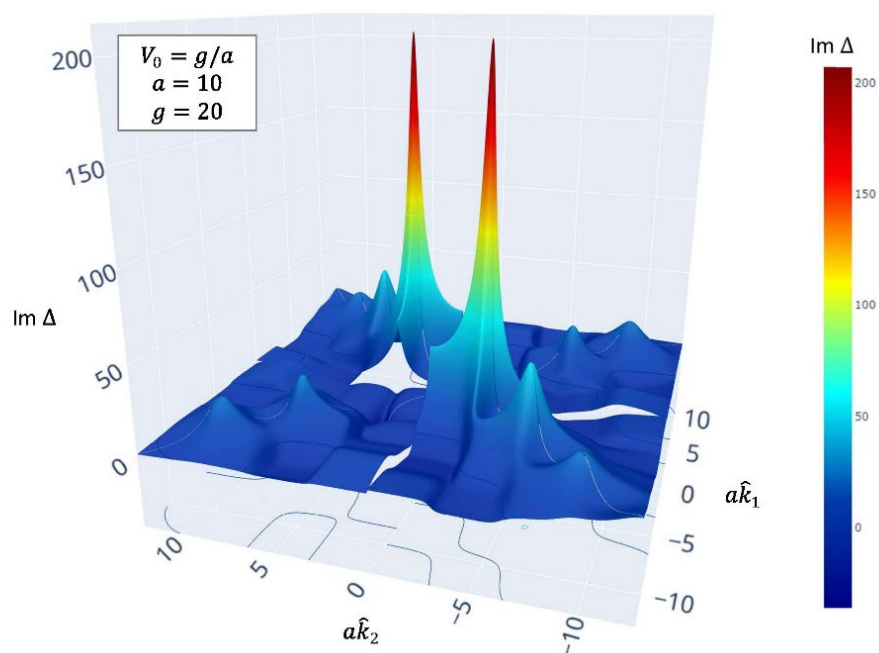


図 1. 箱型ポテンシャルにおける、異なる固有値を持つ二つの連続状態の内積の非対角成分の実数部。

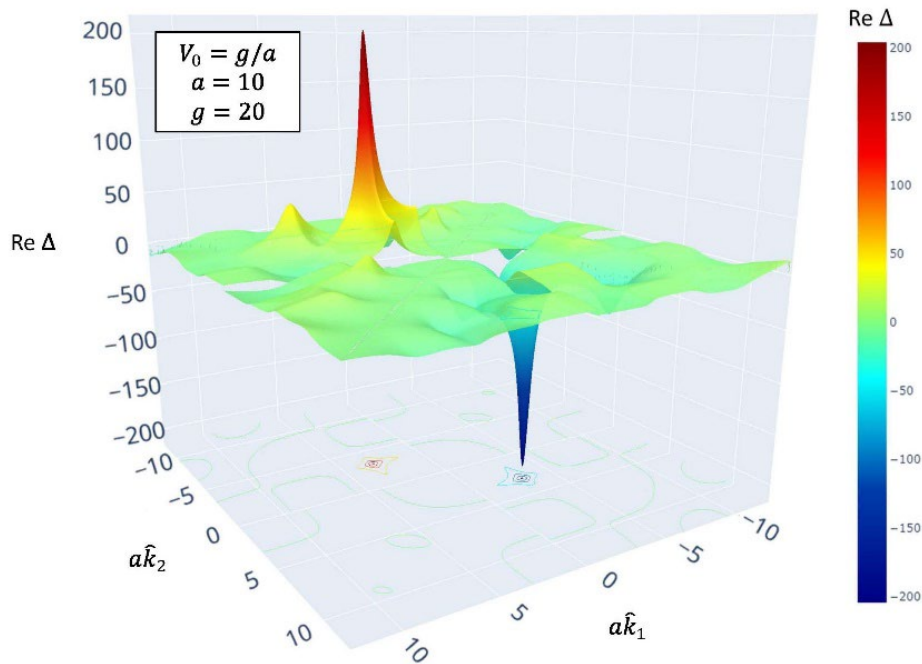


図 2. 箱型ポテンシャルにおける、異なる固有値を持つ二つの連続状態の内積の非対角成分の虚数部。

【用語解説】

*1 量子力学 … 20 世紀初めに発見されたミクロな世界を記述する現代物理学の柱の一つである力学体系。物体の位置の変化を運動方程式で記述するニュートンの運動法則とは異なり、粒子の状態を表す波動はシュレディンガー方程式に従うが複素数であり、古典波動のような物体の変位を表すわけではない。そのかわり、現象の生ずる確率を表す。古典力学は、日常生活における認識や理解の基礎になっているので、理解が易しいが、量子力学は、これらと異質であり理解は易しくない。量子力学は、1900 年のプランクの黒体放射の理論から始まったが、現在も量子情報、量子計算機等の新たな理解や応用が進展中である。また、ミクロ世界だけでなく、マクロな世界でも重要であることが分かりつつある。(石川健三著：レクチャー量子力学、I,II (裳華房))

*2 ヒルベルト空間 … 物理状態を記述する波動関数の集まりは、数学における無限次元の線形ベクトル空間を構成している。ベクトルの大きさ(ノルム)が有限であれば、各種の 4 則演算が簡単で普遍性を持ち、ヒルベルト空間と呼ばれる。束縛状態は、有限のノルムと飛び飛びのエネルギーを持っていて、ヒルベルト空間に属している。一方で、連続エネルギー状態は、空間的に無限に広がっていて、発散するノルムを持ち、種々の演算が複雑であり、ヒルベルト空間に属していない。そのため、ヒルベルト空間で常識的に成立する事柄が必ずしも成り立たず、扱いには注意が必要である。