2. 量子力学と波動関数

2.1. 波動関数とシュレーディンガー方程式

光（電磁波）$\longleftrightarrow$ 粒子（光子）

- 黒体輻射
- 光電効果
- コンプトン効果

それならば
粒子（電子など）$\longleftrightarrow$ 波としての性質
（ド・ブロイ）

「ド・ブロイ波」
「物質波」

ド・ブロイ

運動量 $\mathbb{P}$
エネルギー E
の自由粒子

古典的なエネルギー：$E = \frac{\mathbb{P}^2}{2m}$

$\rightarrow$ ド・ブロイ波
波数ベクトル：$\mathbb{k} = \mathbb{P}/\hbar$
角振動数：$\omega = E/\hbar$

で特徴づけられる波動

$$\psi(\underbrace{\mathbb{r}}_{\text{空間の位置ベクトル}}, \underbrace{t}_{\text{時間}}) = e^{i\mathbb{k}\cdot\mathbb{r} - i\omega t} = e^{i\mathbb{P}\cdot\mathbb{r}/\hbar - iEt/\hbar}$$

で記述できると主張

符号は相対論から。

$\boxed{\text{波長：} \lambda = \frac{h}{p} = \frac{1}{k}}$ 「ド・ブロイ波長」

シュレーディンガー： $\psi(\mathbf{r},t) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega t}$

$\rightarrow\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi$ に従うことを発見 $[\nabla = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)]$

$(\text{左辺}) = i\hbar\cdot\frac{\omega}{i}\psi = \hbar\omega\psi = E\psi$

$(\text{右辺}) = -\frac{\hbar^2}{2m}(-i\mathbf{k})^2\psi = \frac{\mathbf{k}^2\hbar^2}{2m}\psi = \frac{\mathbf{P}^2}{2m}\psi$

$$\rightarrow\ (\underbrace{E - \frac{\mathbf{P}^2}{2m}}_{=0})\psi = 0$$

$$\boxed{E}\psi = \boxed{\frac{\mathbf{P}^2}{2m}}\psi$$

$$\Updownarrow$$

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

$$\left.\begin{aligned} E &\rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \\ \mathbf{P} &\rightarrow \frac{\hbar}{i}\nabla \end{aligned}\right)$$

という置き換えをして関数 $\psi(\mathbf{r},t)$ に演算

符号の違いは相対論から

関数 $\psi(\mathbf{r},t)$ に作用する「演算子」
（オペレーター）

（古典論） エネルギー E, 運動量 $\mathbf{P}$ ： 数（「c数」）
（量子論） エネルギー ： $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$
運動量 ： $\hat{\mathbf{P}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$

演算子

「量子化の手続き」

◎ ポテンシャルがある場合にも拡張が可能

(古典) $E = \frac{p^2}{2m} + V(r,t)$

$$\rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r,t)\right)\psi(r,t)}$$

シュレーディンガー方程式

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r,t)$$ (ハミルトニアン)

$$\rightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi}$$

ψ:「波動関数」

◎ 重ね合わせの原理

$$\begin{cases} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1 = \hat{H}\psi_1 \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_2 = \hat{H}\psi_2 \end{cases}$$

とすると、 $\psi(r,t) = \alpha\,\psi_1(r,t) + \beta\,\psi_2(r,t)$

は $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(r,t) = \hat{H}\psi(r,t)$ に従う。

(α, β は r や t によらない定数)

(note) ガウス型 波束

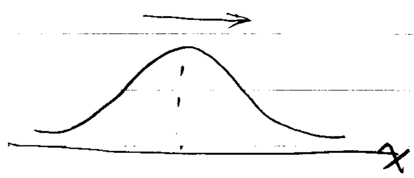
$$\psi_k(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$$ (1次元)

$$\rightarrow \psi(x,0) = \int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{-\gamma(k-k_0)^2/2}\,\psi_k(x,0)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dk \; e^{-\frac{\gamma}{2}\left(k^2 - 2k_0 k + k_0^2 - \frac{2ix}{\gamma}k\right)}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dk \; e^{-\frac{\gamma}{2}\left(k - k_0 - \frac{ix}{\gamma}\right)^2} e^{-\frac{x^2}{2\gamma}} e^{ik_0 x}$$

$$= \sqrt{\frac{2\pi}{\gamma}} \; e^{-\frac{x^2}{2\gamma}} \boxed{e^{ik_0 x}}$$



古典的な「粒子」に対応。
ただし幅は t とともに広がる
(レポート問題)。

四 固有状態

ポテンシャル V が陽に時間に依存しない時

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r})\, e^{-iEt/\hbar}$$

とおくと、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = E\,\phi(\mathbf{r})\,\cancel{e^{-iEt/\hbar}}$$

$$= \cancel{e^{-iEt/\hbar}} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\phi(\mathbf{r})$$

$$\rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)\phi(\mathbf{r}) = E\,\phi(\mathbf{r})$$

又は $\quad \hat{H}\,\phi(\mathbf{r}) = E\,\phi(\mathbf{r})$

「時間に依存しないシュレーディンガー方程式」

自由粒子：$\psi_k(r,t) = e^{ik\cdot r - iEt/\hbar}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi_k(r,t) = \underbrace{\frac{k^2\hbar^2}{2m}}_{=E} \underbrace{\psi_k(r,t)}_{\text{固有関数}}$$

$$\hat{H}\phi(r) = E\phi(r)$$

$\phi(r)$ ： 演算子 $\hat{H}$ の「固有波動関数」

E ： エネルギー「固有値」

$\phi(r)$ で表わされる状態 ： $\hat{H}$ の「固有状態」

2.2. 波動関数の確率解釈

波動関数 $\psi(r,t)$ ： 粒子の状態を表す。

→ 粒子は時刻 t において特定の r にいるわけではなく、ψ に従って分布する。

→ $\psi(r,t)$ は時刻 t において粒子を r に見出す確率の振幅と解釈する。

すなわち、粒子が r と $r+dr$ の間にある確率は

$$P(r,t)\,dr = |\psi(r,t)|^2\, dr.$$

「確率解釈」

(note) ψ ： 一般に複素数
→ 絶対値をとって 2乗する.

(note) $\psi(r,t) \to e^{i\theta}\psi(r,t)$
としても $P(r,t)$ は不変.

↓ 波動関数は位相の分だけ自由度がある。

粒子は空間のどこかにいる

$$\rightarrow \int d\mathbf{r}\ P(\mathbf{r},t) = \int d\mathbf{r}\ |\psi(\mathbf{r},t)|^2 = 1$$

(波動関数の規格化条件)

※ただし ψ は局在している必要がある。

- 重ね合わせ(もう一度)

$$\psi(\mathbf{r},t) = \psi_1(\mathbf{r},t) + \psi_2(\mathbf{r},t)$$

$$\rightarrow P(\mathbf{r},t) = |\psi(\mathbf{r},t)|^2$$

$$= \underbrace{|\psi_1(\mathbf{r},t)|^2 + |\psi_2(\mathbf{r},t)|^2}_{\text{古典的な確率分布}} + \underbrace{\psi_1^*\psi_2 + \psi_1\psi_2^*}_{\text{(波の)干渉}}$$

↑
量子力学に特有

$$\left.\begin{aligned}\psi_1 &= e^{i\theta_1}|\psi_1| \\ \psi_2 &= e^{i\theta_2}|\psi_2|\end{aligned}\right)$$ とすると

$$P = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + |\psi_1||\psi_2|\left(e^{-i\theta_1}e^{i\theta_2} + e^{i\theta_1 - i\theta_2}\right)$$

$$= \underbrace{|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2}_{\text{位相に無関係}} + \underbrace{2|\psi_1||\psi_2|\cos(\theta_1 - \theta_2)}_{\psi_1\text{と}\psi_2\text{の相対位相に関係}}$$

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

No.

◎ 密度とフラックス

(確率)密度 : $\rho(\mathbf{r},t) = |\psi(\mathbf{r},t)|^2$

(確率の)流れ (流束; フラックス)

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^* \nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right)$$

$$\rightarrow \quad \nabla\cdot\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im}\Big(\cancel{\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi} + \psi^*\nabla^2\psi - \cancel{\nabla\psi\cdot\nabla\psi^*} - \psi\nabla^2\psi^*\Big)$$

$$= \frac{\hbar}{2im}\cdot\left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)\left(\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi - \psi\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi^*\right)$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left(\psi^*\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right]\psi - \psi\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right]\psi^*\right)$$

$$= \frac{i}{\hbar}\left(\psi^*\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi - \psi\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi^*\right)$$

$$= \frac{i}{\hbar}\cdot i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = -\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = -\frac{\partial\rho}{\partial t}$$

$$\Updownarrow \quad \boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{j} = 0} \quad \text{(連続の方程式)}$$

→ 全空間で積分すると

$$\frac{\partial}{\partial t}\int d\mathbf{r}\, \rho(\mathbf{r},t) = -\int d\mathbf{r}\, \nabla\cdot\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$$

もし $\psi(\mathbf{r},t)$ が空間のある点 $\mathbf{r}_0$ で不連続があると
この方程式は成り立たない → 非物理的

2.3. 演算子の期待値

$$P(\mathbf{r},t) = |\psi(\mathbf{r},t)|^2$$

$$\rightarrow \quad \langle \mathbf{r} \rangle = \int d\mathbf{r}\ \mathbf{r}\ P(\mathbf{r},t) = \int d\mathbf{r}\ |\psi(\mathbf{r},t)|^2$$

$$\langle f(\mathbf{r}) \rangle = \int d\mathbf{r}\ f(\mathbf{r})\ P(\mathbf{r},t) = \int d\mathbf{r}\ |\psi(\mathbf{r},t)|^2 f(\mathbf{r})$$