DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

（復習）

ド・ブロイ　物質波

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

シュレーディンガー

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

$$\xrightarrow[\text{拡張}]{}\quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right)\underbrace{\psi}_{\text{波動関数}}$$

$$\begin{cases}E\to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\\ \mathbf{p}\to\frac{\hbar}{i}\nabla\end{cases}$$

・波動関数の意味

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

粒子が点 $\mathbf{r}$ にいる確率

$$\to\quad 1=\int d\mathbf{r}\,|\psi(\mathbf{r},t)|^2\qquad\text{（規格化）}$$

◎ ポテンシャルがある場合にも拡張が可能

(古典) $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t)$

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

シュレーディンガー方程式

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

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

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

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

(α, β は $\mathbf{r}$ や t によらない定数)

(note) ガウス型 波束

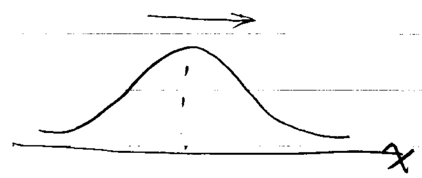
$$\psi_k(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} \quad \text{(1次元)}$$

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

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

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

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



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

「時間に依存しないシュレーディンガー方程式」

自由粒子： $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r},t) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - iEt/\hbar}$

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

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

$\phi(\mathbf{r})$ ： 演算子 $\hat{H}$ の「固有波動関数」

E ： エネルギー「固有値」

$\phi(\mathbf{r})$ 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 $\psi(\mathbf{r},t)$ ： 粒子の状態を表す。

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

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

すなわち、粒子が $\mathbf{r}$ と $\mathbf{r}+d\mathbf{r}$ の間にある確率は

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

「確率解釈」

(note) ψ ： 一般に複素数
→ 絶対値をとって2乗する.

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

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

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

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

◎ 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)

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

$$\begin{aligned}
\rightarrow \quad \nabla\cdot\mathbf{j} &= \frac{\hbar}{2im}\left(\cancel{\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi} + \psi^*\nabla^2\psi - \cancel{\nabla\psi\cdot\nabla\psi^*} - \psi\nabla^2\psi^*\right) \\
&= \frac{\hbar}{2im}\cdot\left(-\frac{2m}{\hbar^2}\right)\left(\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi - \psi\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi^*\right) \\
&= \frac{i}{\hbar}\left(\psi^*\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right]\psi - \psi\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right]\psi^*\right) \\
&= \frac{i}{\hbar}\left(\psi^*\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi - \psi\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi^*\right) \\
&= \frac{i}{\hbar}\cdot i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = -\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = -\frac{\partial\rho}{\partial t}
\end{aligned}$$

$\Downarrow$ $\boxed{\dfrac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{j} = 0}$ (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

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

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

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

$$\downarrow$$

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{r} \rangle = \int d\mathbf{r} \; \mathbf{r} \, [\, \dot{\psi}^* \psi + \psi^* \dot{\psi} \,]$$

(note) $i\hbar \dot{\psi} = H\psi$
$-i\hbar \dot{\psi}^* = H\psi^*$

$$= \int d\mathbf{r} \; \mathbf{r} \cdot \frac{1}{i\hbar} \Big[+ \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 \psi^*) \psi - \cancel{V \psi^* \psi} - \frac{\hbar^2}{2m} \psi^* (\nabla^2 \psi) + \cancel{V \psi^* \psi} \Big]$$

$$= \frac{\hbar}{2im} \int d\mathbf{r} \; [\, \psi^* \nabla^2 (\mathbf{r}\psi) - \psi^* (\nabla^2 \psi)]$$

$$= \frac{\hbar}{im} \int d\mathbf{r} \; \psi^* \nabla \psi$$

$$\rightarrow \quad \underbrace{\frac{d}{dt} \langle m\mathbf{r} \rangle}_{\updownarrow \; \langle \mathbf{p} \rangle} = \int d\mathbf{r} \; \psi^* \underbrace{\left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right)}_{= \hat{\mathbf{p}}} \psi$$