DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

連続の方程式 $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$

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

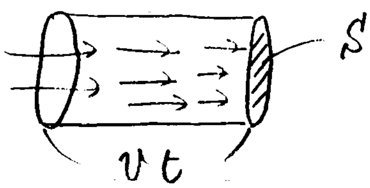
$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right)$$

$\psi(\mathbf{r},t) = A e^{ikz - i\omega t}$ とすると

$$\rho(\mathbf{r},t) = |A|^2$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \underbrace{\frac{k\hbar}{m}}_{v} \underbrace{|A|^2}_{\rho} \mathbf{e}_z$$

$$\frac{p}{m} = v$$



時間 t の間に
$S \cdot vt \cdot \rho$
個の粒子が面を通過

フラックス $j = \frac{S v t \cdot \rho}{S \cdot t} = v\rho$

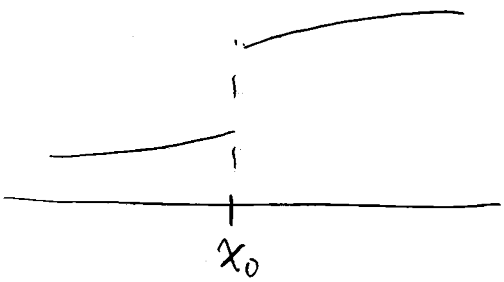
これに電荷 $-e$ をかけると電流密度.

四 波動関数の連続性（補足）

連続の方程式（一次元）： $\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t)+\frac{\partial}{\partial x}j(x,t)=0$

$$j(x,t)=\frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)-\psi(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,t)\right)$$

波動関数が $x=x_0$ で不連続であるとする。
例えば



$$\psi(x,t)=\begin{cases}Ae^{ikx}e^{-iEt/\hbar} & (x<x_0)\\ Be^{ikx}e^{-iEt/\hbar} & (x>x_0)\end{cases}$$

このとき，連続の方程式を $x_0-\varepsilon\le x\le x_0+\varepsilon$ で積分してみる。

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}\rho(x,t)\,dx=\frac{\partial}{\partial t}\left(|B|^2(x_0+\varepsilon)-|A|^2(x_0-\varepsilon)\right)=0$$

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}\frac{\partial}{\partial x}j(x,t)\,dx=j(x_+,t)-j(x_-,t)$$
$$=\frac{\hbar}{2im}\cdot 2ik\left(|B|^2-|A|^2\right)$$
$$=\frac{k\hbar}{m}\left(|B|^2-|A|^2\right)$$

↓

$|B|\neq|A|$ のとき連続の方程式が成り立たない。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)\psi(x,t)$$

を $x_0-\varepsilon \leq x \leq x_0+\varepsilon$ で積分して $\varepsilon\to 0$ とすると

$$\lim_{\varepsilon\to 0} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}\psi(x,t)\,dx = 0$$

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}V(x)\psi(x,t)\,dx = 0$$

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}dx\,\frac{d^2}{dx^2}\psi(x,t)$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d\psi}{dx}\Big|_{x_0+\varepsilon}-\frac{d\psi}{dx}\Big|_{x_0-\varepsilon}\right)$$

$$\Downarrow \qquad \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{>} = \left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{<}$$

$\Downarrow$ 位相を含めて $A=B$ でなければならない。

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

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

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

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

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

・運動量表示と座標表示

波動関数のフーリエ逆変換

$$\tilde{\psi}(\mathbb{p},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d\mathbb{r}\ \psi(\mathbb{r},t)\,e^{-i\mathbb{p}\cdot\mathbb{r}/\hbar}$$

：運動量表示

$$\rightarrow\quad \psi(\mathbb{r},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d\mathbb{p}\ \tilde{\psi}(\mathbb{p},t)\,e^{i\mathbb{p}\cdot\mathbb{r}/\hbar}$$

：座標表示

(note)

$$\langle\mathbb{p}\rangle=\int d\mathbb{r}\ \psi^*(\mathbb{r},t)\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)\psi(\mathbb{r},t)$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d\mathbb{r}\,d\mathbb{p}\,d\mathbb{p}'\ \tilde{\psi}^*(\mathbb{p},t)\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\frac{i}{\hbar}\mathbb{p}'\right)\times\tilde{\psi}(\mathbb{p}',t)\,\underbrace{e^{i(\mathbb{p}-\mathbb{p}')\cdot\mathbb{r}/\hbar}}_{\downarrow\ \delta(\mathbb{p}-\mathbb{p}')}$$

$$=\int d\mathbb{p}\ \ \mathbb{p}\ |\tilde{\psi}(\mathbb{p},t)|^2$$

∿ $|\tilde{\psi}(\mathbb{p},t)|^2$ は粒子が運動量 $\mathbb{p}$ を持つ確率

(note) $$i\hbar\nabla_p\tilde{\psi}(\mathbb{p},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int d\mathbb{r}\ \ \mathbb{r}\ \psi(\mathbb{r},t)e^{-i\mathbb{p}\cdot\mathbb{r}/\hbar}$$

$$\sim\int d\mathbb{p}\ \tilde{\psi}^*(\mathbb{p},t)\left(i\hbar\nabla_p\tilde{\psi}(\mathbb{p},t)\right)$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d\mathbb{p}\,d\mathbb{r}\,d\mathbb{r}'\ \ \psi^*(\mathbb{r},t)\cdot\mathbb{r}'\,\psi(\mathbb{r},t)\,\underbrace{e^{i\mathbb{p}\cdot(\mathbb{r}-\mathbb{r}')/\hbar}}_{\hookrightarrow\ \delta(\mathbb{r}-\mathbb{r}')}$$

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

$$\boxed{\hat{\mathbf{r}} = i\hbar \nabla_p}$$

一般に：量子力学では 物理量 → 演算子の期待値

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d\mathbf{r}\ \psi^*(\mathbf{r},t)\,\hat{A}\,\psi(\mathbf{r},t)$$

$$= \int d\mathbf{p}\ \tilde{\psi}^*(\mathbf{p},t)\,\hat{A}\,\tilde{\psi}(\mathbf{p},t).$$

$$\hat{\mathbf{r}} = i\hbar \nabla_p, \quad \hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla_r$$

(note) $\hat{\mathbf{r}}\,\psi(\mathbf{r},t) = \mathbf{r}\ \psi(\mathbf{r},t)$

$$\hat{\mathbf{p}}\,\tilde{\psi}(\mathbf{p},t) = \mathbf{p}\ \tilde{\psi}(\mathbf{p},t)$$

また，一般に

$$\hat{A}\,\psi_n(\mathbf{r}) = A_n\ \psi_n(\mathbf{r})$$

を考えることができる。

$\hat{A}$ の固有関数

$\hat{A}$ の固有値 (n はラベル)

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$

$[(AB)^\dagger]_{ij} = [(AB)_{ji}]^* = \sum_k A_{jk}^* B_{ki}^* = \sum_k (B^\dagger)_{ik} (A^\dagger)_{kj}$

$= (B^\dagger A^\dagger)_{ij}$

2.4. 演算子のエルミート共役とオブザーバブル

$$A_{12} \equiv \int d\mathbf{r}\ \psi_1^*(\mathbf{r},t)\,\hat{A}\,\psi_2(\mathbf{r},t) = \int d\mathbf{p}\ \tilde{\psi}_1^*(\mathbf{p},t)\,\hat{A}\,\tilde{\psi}_2(\mathbf{p},t)$$

を考える。 $\longrightarrow$ $\hat{A}$ の「行列要素」

すなわち 演算子 $\longleftrightarrow$ 行列

エルミート共役　$\hat{A}^\dagger$

$$(\hat{A}^\dagger)_{ij} \equiv A_{ji}^*$$

$$(A^\dagger)_{12} = \left(\int d\mathbf{r}\ \psi_2^*(\mathbf{r},t)\,\hat{A}\,\psi_1(\mathbf{r},t)\right)^*$$

エルミート演算子　$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$

このとき $\langle \hat{A} \rangle_{11} = \int d\mathbf{r}\ \psi_1^*(\mathbf{r},t)\,\hat{A}\,\psi_1(\mathbf{r},t)$

$$\langle \hat{A}^\dagger \rangle_{11} = \left(\int d\mathbf{r}\ \psi_1^*(\mathbf{r},t)\,\underbrace{\hat{A}^\dagger}_{=\hat{A}}\,\psi_1(\mathbf{r},t)\right)^*$$

$$= \langle \hat{A} \rangle_{11}^*$$

$\longrightarrow$ 期待値は常に実数。

観測可能量（オブザーバブル）

$\longrightarrow$ エルミート演算子を用いて記述。