(復習)

ド・ブロイ　物質波

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - iEt/\hbar} \qquad \left(\hbar = \frac{h}{2\pi}\right)$$

cf. 波の式

$$y = A \sin 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{x}{\lambda}\right)$$

$$= A \sin \left(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda} x\right) \quad ; \quad \omega = \frac{2\pi}{T}$$

$$E = h\nu = \frac{h}{2\pi} \cdot 2\pi\nu = \hbar\omega$$

$$\bar{\lambda} = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{1}{k} = \frac{\hbar}{p}$$

$$\rightarrow ipx/\hbar = ikx = i\frac{2\pi}{\lambda}x$$

シュレーディンガー

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

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

$$\begin{cases} E \rightarrow i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t} \\ \mathbf{p} \rightarrow \dfrac{\hbar}{i}\nabla \end{cases} \qquad \text{演算子}$$

$$\hat{\mathbf{p}}\,\psi(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{i}\nabla\psi(\mathbf{r})$$

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

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

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

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

No.

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

$\phi(\mathbf{r})$ ： 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、$\psi$ 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) $\psi$ ： 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 $\psi$ 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

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

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

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

◎ 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)

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

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

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

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

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

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

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

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

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

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

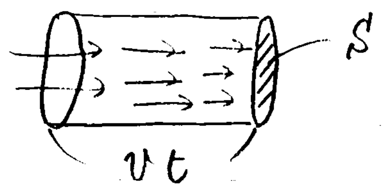
$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right)$$

$\psi(\mathbf{r},t) = A e^{ikz - i\omega t}$ 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 $j = \frac{S vt \cdot \rho}{S \cdot t} = v\rho$

これに電荷 $-e$ をかけると電流密度.

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

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

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

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

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