(復習)
シュレーディンガー方程式

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

波動関数

系の状態は波動関数 $\psi(\mathbf{r},t)$ で表わされる。

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

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

位相の自由度　$\psi(\mathbf{r},t)\to e^{i\theta}\psi(\mathbf{r},t)$
でも　$P(\mathbf{r},t)=|\psi(\mathbf{r},t)|^2$ は同じ

→ 同じ状態を表わす

期待値

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

一般に

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

例）$\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle=\int d\mathbf{r}\ \psi^*(\mathbf{r},t)\frac{\hbar}{i}\nabla\psi(\mathbf{r},t)$

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

連続の方程式

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

$$\rightarrow \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j} = 0$$

$$\rho = |\psi|^2$$

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

→ 波動関数の連続性

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

No.

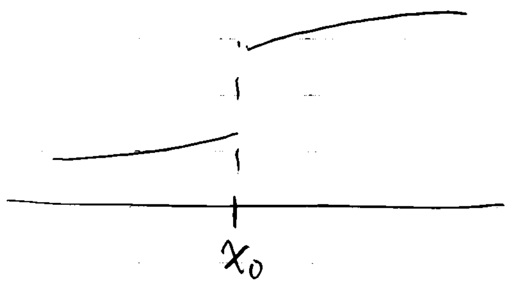
四 波動関数の連続性

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 $x_0-\varepsilon\leq x\leq x_0+\varepsilon$ 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。

(note)

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

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

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

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

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

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x_0+\varepsilon} - \left.\frac{d\psi}{dx}\right|_{x_0-\varepsilon} \right)$$

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

$\Downarrow$ 位相を含めて $A = B$ でなければならない。

→ 波動関数，微係数は空間のあらゆる場所で連続

2.3. 演算子の期待値

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

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

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

$\downarrow$

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

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

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

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

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

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

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

一般に：量子力学では物理量 → 演算子の期待値

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

また，一般に

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

$\hat{A}$ の固有関数

$\hat{A}$ の固有値（n はラベル）

を考えることができる。

・運動量表示と座標表示

波動関数のフーリエ変換

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

：運動量表示

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

：座標表示

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

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

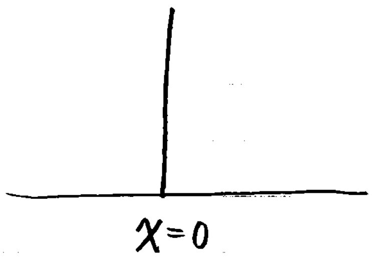
(note) $\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d\mathbb{r}\ e^{-i(\mathbb{p}-\mathbb{p}')\cdot\mathbb{r}/\hbar} = \delta(\mathbb{p}-\mathbb{p}')$

$$\int d\mathbb{p}\ \delta(\mathbb{p}-\mathbb{p}')f(\mathbb{p}) = f(\mathbb{p}')$$

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

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

・デルタ関数



定義：

$$\delta(x)=0 \quad (x\neq 0)$$

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} f(x)\,\delta(x)\,dx = f(0)$$

$$\rightarrow \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x)\,dx = 1.$$

デルタ関数の性質

$$\delta(x) = \delta(-x)$$

$$\rightarrow \int_{0}^{\varepsilon} \delta(x)\,dx = \frac{1}{2}$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\,\delta(x)$$

$$\leftarrow \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(y)\,dy \overset{y=ax}{=} a\int_{-\varepsilon/a}^{\varepsilon/a} dx\,\delta(ax)$$

$$= |a| \int_{-|\varepsilon/a|}^{|\varepsilon/a|} dx\ \delta(ax)$$

$$\int f(x)\,\delta'(x-a)\,dx = -\int f'(x)\,\delta(x-a)\,dx$$

$$= -f'(a)$$

デルタ関数のいろいろな表現

$$\begin{cases} \delta(x) = \lim_{a\to 0} \dfrac{1}{\pi} \dfrac{a}{x^2+a^2} \\[2ex] \delta(x) = \lim_{a\to 0} \mathrm{Im} \dfrac{1}{\pi} \cdot \dfrac{1}{x - ia} \\[2ex] \delta(x) = \lim_{L\to\infty} \dfrac{\sin Lx}{\pi x} \end{cases}$$

すべて $\delta(x)$ の性質を満たす.

(note) $$\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx} = \lim_{L\to\infty} \int_{-L}^{L} e^{ikx} dk$$
$$= \lim_{L\to\infty} \frac{e^{iLx} - e^{-iLx}}{ix} = \lim_{L\to\infty} \frac{2}{x} \sin Lx$$
$$= 2\pi\delta(x).$$

(note) $$\delta(\vec{x}) \equiv \delta^{(3)}(\vec{x}) \equiv \delta(x)\delta(y)\delta(z)$$

(運動量表示の続き)

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

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

$\Downarrow$

$$\int d\mathbf{p}\ \tilde{\psi}^*(\mathbf{p},t)\left(i\hbar \nabla_p \tilde{\psi}(\mathbf{p},t)\right)$$
$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p}\, d\mathbf{r}\, d\mathbf{r}'\ \psi^*(\mathbf{r},t)\ \mathbf{r}'\ \psi(\mathbf{r}',t)\ e^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/\hbar}$$

$\hookrightarrow \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$

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

$\Downarrow$ $\boxed{\hat{\mathbf{r}} = i\hbar \nabla_p}$ $\longleftrightarrow$ $\hat{\mathbf{p}} = \dfrac{\hbar}{i}\nabla$

(note) $\begin{cases} \hat{\mathbf{r}}\,\psi(\mathbf{r},t) = \mathbf{r}\,\psi(\mathbf{r},t) \\ \hat{\mathbf{p}}\,\tilde{\psi}(\mathbf{p},t) = \mathbf{p}\,\tilde{\psi}(\mathbf{p},t) \end{cases}$

と定義しておく。(ブラケット表示を用いるともう少しはっきりと意味がわかる)

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

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。 → $\hat{A}$ の「行列要素」

すなわち 演算子 ⟷ 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 $\langle \hat{A} \rangle_{11} = \int d\mathbf{r}\, \psi_1^*(\mathbf{r},t) \hat{A} \psi_1(\mathbf{r},t)$

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

$\hat{A}$の定義より

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

→ 期待値は常に実数. $(\langle \hat{A} \rangle_{11} = \langle \hat{A} \rangle_{11}^*)$

観測可能量（オブザーバブル）

→ エルミート演算子を用いて記述.