DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

(復習) ド・ブロイ の物質波 (粒子 $\leftrightarrow$ 波)

$$\psi(\mathbb{r}, t) = e^{i\mathbb{P}\cdot\mathbb{r}/\hbar - iEt/\hbar} \quad \left(\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}\right)$$

cf. 波の式

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

$$\omega = \frac{2\pi}{T}$$

ド・ブロイ $E = \hbar\omega$

$$\lambda\!\!\!^{-} = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{1}{k} = \frac{\hbar}{p}$$

シュレーディンガー

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi \quad \leftrightarrow \quad E = \frac{\mathbb{P}^2}{2m}$$

$\xrightarrow{\text{拡張}}$ $$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbb{r})\right)}_{\text{ハミルトニアン } \hat{H}}\underset{\text{波動関数}}{\psi}$$

重ね合わせ： $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_k = \hat{H}\psi_k$

$$\rightarrow \psi = \sum_k C_k \psi_k$$

$$\begin{cases} E \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \\ \mathbb{P} \rightarrow \frac{\hbar}{i}\nabla \equiv \hat{\mathbb{P}} \end{cases}$$ 演算子

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

cf. 相対論

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, \mathbb{P}\right), \quad x_\mu = (ct, -\mathbb{r})$$

$$p^\mu x_\mu = Et - \mathbb{P}\cdot\mathbb{r} \rightarrow e^{i(\mathbb{P}\cdot\mathbb{r} - Et)/\hbar} = e^{-ip^\mu x_\mu/\hbar}$$

$$p^\mu = i\hbar\frac{\partial}{\partial x_\mu} = i\hbar\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, -\nabla\right)$$

◎ 重ね合わせの原理

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1(\mathbf{r},t) = \hat{H} \psi_1(\mathbf{r},t) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_2(\mathbf{r},t) = \hat{H} \psi_2(\mathbf{r},t) \end{cases}$$

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

も $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r},t) = \hat{H} \psi(\mathbf{r},t)$ に従う。← 「重ね合せの原理」

(α, β は $\mathbf{r}$ や t によらない定数)

例) ガウス型 波束

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

$$\leftarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_k = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_k$$

$$\begin{aligned} \psi(x,0) &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \; e^{-\gamma(k-k_0)^2/2} \psi_k(x,0) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \; e^{-\frac{\gamma}{2}(k^2-2k_0k+k_0^2-\frac{2ix}{\gamma}k)} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \; e^{-\frac{\gamma}{2}(k-k_0-\frac{ix}{\gamma})^2} e^{-\frac{x^2}{2\gamma}} e^{ik_0x} \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{\gamma}} \; e^{-\frac{x^2}{2\gamma}} e^{ik_0x} \end{aligned}$$

古典的な「粒子」に対応。
ただし幅は t とともに広がる。

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」

$$\hat{H}\phi = E\phi$$

ϕ：演算子 $\hat{H}$ の「固有波動関数」
E：エネルギー「固有値」
ϕ で表わされる状態：$\hat{H}$ の「固有状態」

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_k = \underbrace{\frac{k^2\hbar^2}{2m}}_{E}\underline{\psi_k}$$

固有関数

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

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

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

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

$\phi(\mathbf{r})$ ： 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、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。

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

粒子は空間のどこかにいる

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

(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)

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

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

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

↑ 量子力学に特有

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

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

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

$$\nabla^2(x_k\psi) = \nabla\cdot\left((\nabla x_k)\psi + x_k\nabla\psi\right)$$
$$= \nabla\cdot(\mathbf{e}_k\psi + x_k\nabla\psi)$$
$$= 2\mathbf{e}_k\cdot\nabla\psi + x_k\nabla^2\psi$$

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

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

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

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

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

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

$$\hat{A}\ \psi_n(\mathbf{r}) = \underbrace{A_n}_{\hat{A}\text{の固有値（}n\text{はラベル）}}\ \underbrace{\psi_n(\mathbf{r})}_{\hat{A}\text{の固有関数}}$$

を考えることができる。

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

◎ 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)

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

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

$\downarrow$

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

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

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

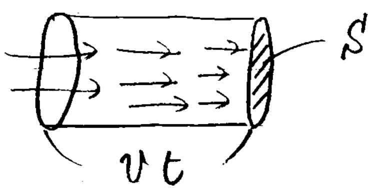
$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t) = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*\right)$$

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

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

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

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



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.