DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

2.9 シュレーディンガー描像とハイゼンベルク描像

時間に依存する S.-eq：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

系の「時間発展」を記述

V が時間に依らないとき,

$$|\psi(t)\rangle = \underbrace{e^{-i\hat{H}t/\hbar}}_{\text{時間発展演算子} \equiv \hat{U}(t)} |\psi(0)\rangle$$

(note) $\hat{U}^{+}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}$

$\Rightarrow \hat{U}(t)\hat{U}^{+}(t) = \hat{U}^{+}(t)\hat{U}(t) = 1$

$\Rightarrow \boxed{\hat{U}^{+}(t) = \hat{U}^{-1}(t)}$ 「ユニタリー演算子」

一般に $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$
(Vがtに依存しても)

$\rightarrow \boxed{i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} = \hat{H}\hat{U}}$

演算子 $\hat{A}$ の期待値

$$\langle \hat{A} \rangle (t) = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$$

$$= \langle \psi(0) | \hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U} | \psi(0) \rangle$$

$\hat{A}$ は変化せず, $|\psi\rangle$ が時間変化：「シュレーディンガー描像」

$$[\hat{H}, e^{\pm i\hat{H}t/\hbar}] = 0$$

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

一方で、 $\langle \hat{A} \rangle(t) = \langle \psi(0) | \underbrace{\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}}_{\equiv \hat{A}_H(t)} | \psi(0) \rangle$

とみると、$|\psi\rangle$ は変化せず、演算子 $\hat{A}$ が時間変化

「ハイゼンベルグ描像」

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) &= i\hbar \left(\frac{d\hat{U}^\dagger}{dt} \hat{A} \hat{U} + \hat{U}^\dagger \hat{A} \frac{d\hat{U}}{dt} \right) \\ &= -\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{A} \hat{U} + \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{H} \hat{U} \\ &= -\hat{H} \hat{A}_H(t) + \hat{A}_H(t) \hat{H} \\ &= [\hat{A}_H(t), H] \quad = \hat{U}^\dagger [\hat{A}, H] \hat{U} \end{aligned}$$

$[e^{\pm iHt/\hbar}, H] = 0$

ハイゼンベルク方程式

$[\hat{H}, \hat{A}]$ のとき、$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = 0$

$\rightarrow \hat{A}_H(t) = \hat{A}_H(0)$

$\rightarrow$ A は保存量

3. 1次元固有値問題

3.1. 1次元系の特徴

$$\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)}_{\hat{H}}\phi(x)=E\phi(x)$$

ハミルトニアン $\hat{H}$ の固有状態 $\hat{H}\phi(x)=E\phi(x)$

$$\rightarrow \psi(x,t)=e^{-i\hat{H}t/\hbar}\phi(x)=e^{-iEt/\hbar}\phi(x)$$

位相が変わるだけ

$$\rho(x,t)\equiv|\psi(x,t)|^2=|\phi(x)|^2= t\text{に依らない}$$

「定常状態」

$V(x)\to 0 \quad (x\to\pm\infty)$ として

$E<0$ の解 ：束縛状態

$E>0$ 〃 ：散乱 〃

$x\to\pm\infty$ で $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x)=E\phi(x) \quad (x\to\pm\infty)$

$$E<0:\quad \phi(x)=\underline{Ae^{\kappa x}}+\underline{Be^{-\kappa x}} \quad \left(\kappa=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}|E|}\right)$$

(条件) 波動関数が発散しない

$$\leftrightarrow \quad \phi(x)=\begin{cases}Ae^{\kappa x} & (x\to-\infty)\\ Be^{-\kappa x} & (x\to\infty)\end{cases}$$

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

$E > 0$

$$\phi(x) \to \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx} & (x \to \infty) \\ A' e^{ikx} + B' e^{-ikx} & (x \to -\infty) \end{cases}$$

A, B, A', B' は定数　　$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix}$

● 1次元系の特徴

(1) 縮退した束縛状態はない.

$$\left.\begin{aligned} H\phi_1 &= \boxed{E}\,\phi_1 \\ H\phi_2 &= \boxed{E}\,\phi_2 \end{aligned}\right\} \text{とする} \ (E<0)$$

「エネルギーが縮退する」

ただし　ψ と $e^{i\theta}\psi$ は 同じ状態

(あらゆる物理量の期待値が同じになる)

↓

$$\phi_2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \cancel{V}\right)\phi_1 = \cancel{E\phi_1\phi_2}$$

$$-)\ \phi_1 \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \cancel{V}\right)\phi_2 = \cancel{E\phi_1\phi_2}$$

↓

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx}\left(\phi_2\frac{d\phi_1}{dx} - \phi_1\frac{d\phi_2}{dx}\right) = 0$$

$$\phi_2\frac{d\phi_1}{dx} - \phi_1\frac{d\phi_2}{dx} = \text{const.} = 0$$

↑ $x = \pm\infty$

↓

$$\frac{1}{\phi_1}\frac{d\phi_1}{dx} = \frac{1}{\phi_2}\frac{d\phi_2}{dx}$$

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

No.

$\phi_2(x) = f(x)\,\phi_1(x)$ とすると

$$\phi_2' = f'\phi_1 + f\phi_1'$$

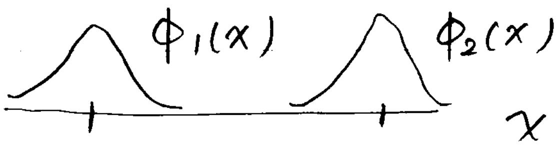
$$\downarrow \quad \frac{\phi_2'}{\phi_2} = \frac{f'\phi_1 + f\phi_1'}{f\phi_1} = \frac{f'}{f} + \frac{\phi_1'}{\phi_1} = \frac{\phi_1'}{\phi_1}$$

$$\Downarrow \quad \frac{f'}{f} = 0 \quad \to f = \text{const.}$$

規格化条件より $f = e^{i\theta}$

$\Downarrow$ ϕ_1 と ϕ_2 は同じ状態

(但し ϕ_1 と ϕ_2 のオーバーラップが 0 のときはこの限りではない。)



など
cf. 二重井戸の問題

(2) 1次元束縛状態の波動関数は実数にとれる

$\phi(x) = \phi_R(x) + i\,\phi_I(x)$ とする。

(note) E は実数

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\phi_R'' + V\phi_R = E\phi_R \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\phi_I'' + V\phi_I = E\phi_I \end{cases}$$

$\longrightarrow$ $\phi_I(x) = C\,\phi_R(x)$ (C は定数)

$\Downarrow$ $\phi(x) = (1+iC)\,\phi_R(x) \to n\,\phi_R(x)$ (規格化因子を適当にとる)

(3) 1次元の引力ポテンシャルは少なくとも1つの束縛状態をもつ。

$\int_{-\infty}^{\infty} V(x)\,dx < 0$ のとき

最低エネルギー状態：「基底状態」

(note) 変分原理 $\dfrac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0$

どんな wf でも成り立つ

例えば $\psi(x) = \left(\dfrac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$ $(\alpha > 0)$ ととると、

$$\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x)\right)$$

$$= \frac{\hbar^2\alpha}{4m} + \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\alpha x^2} V(x)$$

$\alpha \to 0$ を考えると $\alpha \ll \sqrt{\alpha}$

$$\sim \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\alpha x^2} V(x)$$

$$\sim \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, V(x) < 0$$

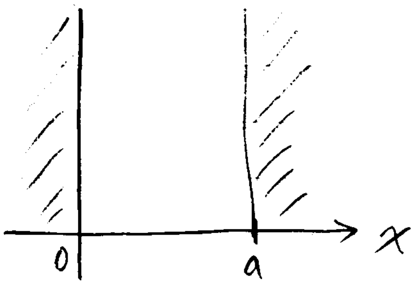
$\Downarrow$

$$\boxed{E_0 < 0}$$

$\sin^2\theta = \frac{1-\cos 2\theta}{2}$

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

3.2. 無限井戸型ポテンシャル



$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \le x \le a \\ \infty & \text{それ以外} \end{cases}$$

波動関数は境界でゼロ : $\phi(0) = \phi(a) = 0$

もし $x < 0$ か $x > a$ で波動関数が有限だと $\langle V \rangle = \infty$

$$\rightarrow \quad \phi(x) = 0 \qquad (x \le 0,\ x \ge a)$$

$0 \le x \le a$ で

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) = E(x)$$

$$\rightarrow \quad \phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad \left(k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right)$$

$$(E > 0)$$

$$= A'\sin kx + B'\cos kx$$

$\phi(0) = 0 \quad \rightarrow \quad B' = 0$

$\phi(a) = 0 \quad \rightarrow \quad ka = n\pi \qquad (n = 1, 2, \cdots)$

規格化条件 : $1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\phi(x)|^2 = A'^2 \int_0^a dx \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$

$$= A'^2\left[\frac{x}{2} - \frac{1}{2}\cdot\frac{a}{n\pi}\sin\frac{2n\pi}{a}x\right]_{x=0}^{a} = \frac{a}{2}A'^2 \rightarrow A' = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$\phi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) & 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases}$$

$$E = \frac{k^2\hbar^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \equiv E_n \qquad (n = 1, 2, \cdots)$$

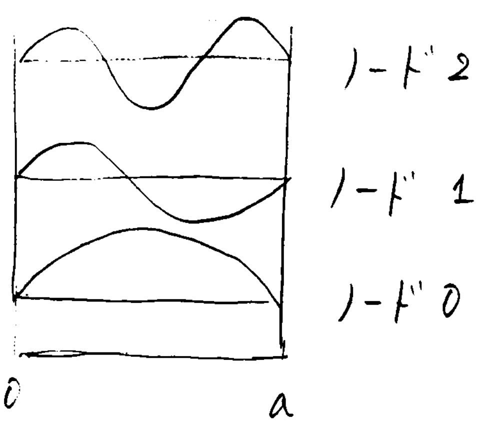
・エネルギーは離散的

・最低エネルギー状態が存在（基底状態）

・$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$（最低エネルギー）$\neq 0$

「ゼロ点運動」　cf. 不確定性関係 $\Delta p \sim \frac{\hbar}{\Delta x} \sim \frac{\hbar}{a}$

・$n=2 \rightarrow$「第1励起エネルギー」
$n=3 \rightarrow$「第2　〃　」
⋮　　　⋮

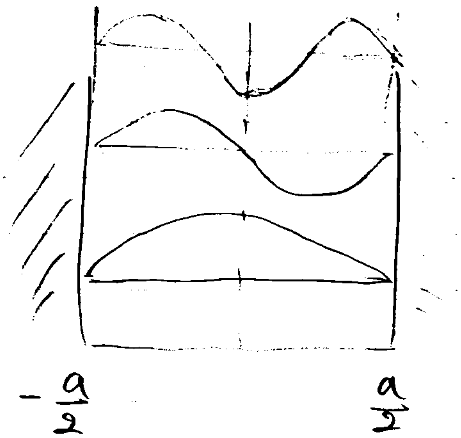


一般的な特徴

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

四 パリティ

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -\frac{a}{2} \le x \le \frac{a}{2} \\ \infty & それ以外 \end{cases}$$



ポテンシャルは $x \to -x$ で不変 ($V(-x) = V(x)$).

$$\Pi V(x) \Pi^{-1} \equiv V(-x) = V(x)$$

「パリティ変換で不変」

$\to$ $\Pi H \Pi^{-1} = H$, すなわち $[H, \Pi] = 0$

$\to$ H と Π の同時固有状態を作れる

(note) $\Pi \phi(x) = \phi(-x)$
$\Pi^2 \phi(x) = \Pi \phi(-x) = \phi(x)$

$\to$ $\Pi^2 = 1$, すなわち Π の固有値は ± 1.

$$\begin{cases} \Pi \phi_{2n-1}(x) = \phi_{2n-1}(x) & 「正パリティ状態」 \\ \Pi \phi_{2n}(x) = -\phi_{2n}(x) & 「負パリティ状態」 \end{cases}$$