DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

(復習) ド・ブロイの物質波

$$\psi(\mathbf{r},t) = e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar - iEt/\hbar}$$ ：波動関数

シュレーディンガー： $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi$

$$\leftrightarrow \quad E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$$

$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$
$\mathbf{p} \to \frac{\hbar}{i}\nabla$ 演算子

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

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

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

$$\to \frac{d}{dt}\langle m\mathbf{r}\rangle = \int d\mathbf{r}\ \psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)\psi$$

より $\langle \mathbf{p} \rangle = \int d\mathbf{r}\ \psi^*\,\hat{\mathbf{p}}\,\psi$

一般に：量子力学では物理量 → 演算子の期待値

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

連続の方程式：

$$\rho(\mathbf{r},t) = |\psi(\mathbf{r},t)|^2$$
$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right)$$ ：フラックス

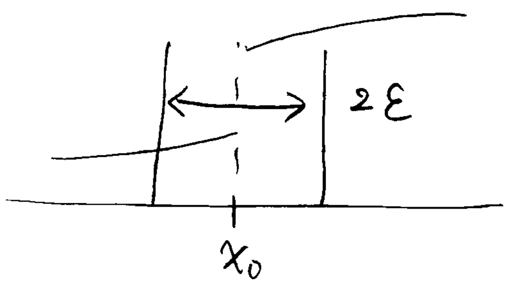
とすると $\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\mathbf{j} = 0$

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。

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

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon}\frac{\partial}{\partial x}j(x,t)\,dx=j(x_+,t)-j(x_-,t)$$

$$=\frac{\hbar}{2im}\cdot 2ik\left(|B|^2-|A|^2\right)$$

$$=\frac{k\hbar}{m}\left(|B|^2-|A|^2\right)$$

$\downarrow$

$|B|\neq|A|$ 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

・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

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

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

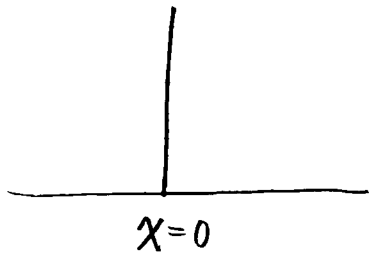
$\int d\mathbb{p}\ \delta(\mathbb{p}-\mathbb{p}')f(\mathbb{p}) = f(\mathbb{p}')$)

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

$\Downarrow$

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

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

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

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

$y = ax$

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

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

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

$$= -f'(a)$$

デルタ関数のいろいろな表現

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

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

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

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

$\Downarrow$

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

$\Downarrow$

$$\boxed{\hat{\mathbf{r}} = i\hbar\nabla_p} \quad \longleftrightarrow \quad \hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$$

(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)

(補足)

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

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

の対応より $\hat{\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r},t) = \mathbf{r}\,\psi(\mathbf{r},t)$

同様に

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

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

の対応より $\hat{\mathbf{p}}\,\tilde{\psi}(\mathbf{p},t) = \mathbf{p}\,\tilde{\psi}(\mathbf{p},t)$