量子力学ノート

とが

1. 2021/4/21

1.1. 要点

1 次元の直線上を動く質量 m の粒子の波動関数 $\Psi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{C}$ は Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t)$$

を満たす．ただし $V : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ はポテンシャル，$\hbar$ は換算プランク定数，i は虚数単位．

暗黙の了解として，Ψ とその n 次導関数は $x \to \pm\infty$ で 0 に収束するものとする．

ある Ψ が Schrödinger 方程式を満たすなら，定数 A をかけた $A\Psi$ も Schrödinger 方程式を満たす（計算 1）．

Ψ が Schrödinger 方程式を満たすとき，$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\left|\Psi(x,t)\right|^2\mathrm{d}x$ は t に依存しない（計算 2）．

ある解 Ψ があったときに，定数をかけて

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|\Psi'(x,t)\right|^2\mathrm{d}x = 1$$

を満たす解 Ψ' を見つける操作を，正規化という．

波動関数 $\Psi(x,t)$ で表される粒子の「座標の期待値」$\langle x\rangle$ を

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x\left|\Psi(x,t)\right|^2\mathrm{d}x \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*[x]\Psi\mathrm{d}x\end{aligned}$$

（ただし Ψ^* は Ψ の共役複素数）で定義する．$\langle x\rangle$ の時間微分を計算すると

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x}\mathrm{d}x$$

となり（計算 3），これが粒子の「速度の期待値」$\langle v\rangle$ となる．これに m をかけた「運動量の期待値」$\langle p\rangle = m\langle v\rangle$ は

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right]\Psi\mathrm{d}x$$

となる．$\langle x\rangle$ の定義中の x，および $\langle p\rangle$ の定義中の $-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ は作用素とみなせる．こうして x, p の関数 $Q(x,p)$ として表せる任意の物理量の期待値が

$$\big\langle Q(x,p)\big\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left[Q\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\right]\Psi\mathrm{d}x$$

と書ける．

座標 x と運動量 p の標準偏差をそれぞれ σ_x, σ_p とすると，

$$\sigma_x\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

が成り立つ．

1.2. 計算 1

Ψ が Schrödinger 方程式を満たすとする．A を定数とすると

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(A\Psi) &= A\cdot i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} \\ &= A\cdot\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi\right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(A\Psi) + V(A\Psi) \end{aligned}$$

より $A\Psi$ も Schrödinger 方程式を満たす．

1.3. 計算 2

Schrödinger 方程式を変形すると

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V\Psi$$

となり，両辺の複素共役をとると

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar}V\Psi^*$$

となる．これより

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^*\Psi\right) &= \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi \\
&= \Psi^*\left(\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V\Psi\right) + \left(-\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar}V\Psi^*\right)\Psi \\
&= \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\Psi\right)
\end{aligned}$$

である．ここで

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right) &= \Psi^*\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\cdot\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\cdot\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\Psi\right) \\
&= \Psi^*\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\Psi
\end{aligned}$$

に注意すると，

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2\mathrm{d}x &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\Psi\mathrm{d}x \\
&= \frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right]_{-\infty}^{\infty} \\
&= 0
\end{aligned}$$

を得るので，$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2\mathrm{d}x$ が t に依存しないことが分かる．

1.4. 計算 3

計算 2 の途中式を流用すると

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x\rangle &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{\infty} x\cdot\Psi^*\Psi\,\mathrm{d}x\\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x\cdot\frac{\partial}{\partial t}\big(\Psi^*\Psi\big)\mathrm{d}x\\ &= \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} x\cdot\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\mathrm{d}x\end{aligned}$$

となり，部分積分により

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x\rangle &= \frac{i\hbar}{2m}\left(\left[x\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\right]_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\mathrm{d}x\right)\\ &= -\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\mathrm{d}x\end{aligned}$$

となる．ここで部分積分

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\,\mathrm{d}x &= \big[\Psi^*\Psi\big]_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\mathrm{d}x\\ &= -\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\mathrm{d}x\end{aligned}$$

に着目すると

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x\rangle = -\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\mathrm{d}x$$

が得られる．