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 $\varPsi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{C}$ は Schrödinger 方程式

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

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

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

ある解 $\varPsi$ があったときに，定数をかけて

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

を満たす解 $\varPsi'$ を見つける操作を，正規化という．

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

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

（ただし $\varPsi^*$ は $\varPsi$ 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，

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

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

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

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

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

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．

2. 2021/4/22

2.1. 問題 1.9

$\Psi(x,t) = Ae^{-a\left[\left(mx^2/\hbar\right)+it\right]}$ より $\left|\Psi(x,t)\right|^2 = \Psi(x,t)\Psi^*(x,t) = A^2e^{-2amx^2/\hbar}$ なので

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \left|\Psi(x,t)\right|^2 \mathrm{d}x &= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2am}{\hbar}x^2} \mathrm{d}x \\
&= A^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2am}}
\end{aligned}
$$

よって，$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \left|\Psi(x,t)\right|^2 \mathrm{d}x = 1$ となるためには $A = \left(\dfrac{2am}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$ であればよい．

Ψ を微分すると

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial\Psi}{\partial t} &= -ia\Psi \\
\frac{\partial\Psi}{\partial x} &= -\frac{2amx}{\hbar}\Psi \\
\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} &= \frac{2am\left(2amx^2 - \hbar\right)}{\hbar^2}\Psi
\end{aligned}
$$

となるので，Schrödinger 方程式より

$$
\hbar a\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{2am\left(2amx^2 - \hbar\right)}{\hbar^2}\Psi + V\Psi
$$

V について解いて $V(x) = 2a^2mx^2$．

$\left|\Psi\right|^2$ は正規分布 $N\left(0, \sqrt{\dfrac{\hbar}{4am}}\right)$ の密度関数なので，$\langle x\rangle = 0$，$\sigma_x = \sqrt{\dfrac{\hbar}{4am}}$，$\left\langle x^2\right\rangle = \sigma_x^2 = \dfrac{\hbar}{4am}$．

$-i\hbar\dfrac{\partial\Psi}{\partial x} = (\mathrm{const})x\Psi$ より，$\langle p\rangle = (\mathrm{const})\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x\Psi \mathrm{d}x = 0$．

$$
\begin{aligned}
\left\langle p^2\right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*\left(-h^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right)\mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*\left(-2am\left(2amx^2 - \hbar\right)\Psi\right)\mathrm{d}x \\
&= -2am\left(2am\left\langle x^2\right\rangle - \hbar\right) \\
&= \hbar am
\end{aligned}
$$

$\sigma_x = \sqrt{\dfrac{\hbar}{4am}}$, $\sigma_p = \sqrt{\hbar am}$ より $\sigma_x \cdot \sigma_p = \sqrt{\dfrac{\hbar}{4am} \cdot \hbar am} = \dfrac{\hbar}{2}$.

2.2. 問題 1.15

Schrödinger 方程式より

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Psi_1{}^*}{\partial t} &= -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_1{}^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar}V\Psi_1{}^* \\
\frac{\partial \Psi_2}{\partial t} &= \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V\Psi_2 \\
\therefore \frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi_1{}^*\Psi_2\right) &= \frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial^2 \Psi_1{}^*}{\partial x^2}\Psi_2 - \Psi_1{}^*\frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2}\right)
\end{aligned}$$

よって

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1{}^*\Psi_2 \,\mathrm{d}x = \frac{i\hbar}{2m}\left[\frac{\partial \Psi_1{}^*}{\partial x}\Psi_2 - \Psi_1{}^*\frac{\partial \Psi_2}{\partial x}\right]_{-\infty}^{\infty} = 0$$

2.3. 要点

t に依存しない $\psi(x)$ と x に依存しない $\varphi(t)$ を用いて $\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$ と表せると仮定すると，$\dfrac{\partial \Psi}{\partial t} = \psi\dfrac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}$, $\dfrac{\partial^2 \Psi}{\partial x} = \dfrac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\varphi$ より Schrödinger 方程式は

$$i\hbar\psi\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\varphi + V\psi\varphi$$

となり，両辺を $\psi\varphi$ で割って

$$i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V$$

とすると左辺は φ，右辺は ψ だけの式になるから，ある定数 E が存在して

$$
i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = E
$$

$$
-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V = E
$$

よって，時間に依存しない Schrödinger 方程式

$$
-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V\psi = E\psi
$$

を解けば，そこに $i\hbar \dfrac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = E\varphi$ の解である $\varphi = e^{-iEt/\hbar}$ をかけることで Ψ が得られる．