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

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

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

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

ある解 $\mathit{\Psi}$ があったときに，定数をかけて

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

を満たす解 $\mathit{\Psi}'$ を見つける操作を，正規化という．

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

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

（ただし $\mathit{\Psi}^*$ は $\mathit{\Psi}$ 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，$\langle p\rangle = (\mathrm{const})\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^* x\Psi\mathrm{d}x = 0$.

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

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

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

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

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，$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \psi\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}$, $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x} = \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\varphi$ 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．

3. 2021/4/23

3.1. 要点

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

とする．$\psi(0) = \psi(a) = 0$ として $0 \le x \le a$ の範囲で時間に依存しない Schrödinger 方程式 $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi$ を解くと，n を正の整数として

$$
E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}
$$

$$
\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)
$$

が得られる（計算 1）．

波動関数 Ψ の初期状態 $\Psi(x,0)$ が与えられれば，フーリエ級数展開によって

$$
\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)
$$

と表すことで

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

が得られる．

3.2. 計算 1

$k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ とおくと時間に依存しない Schrödinger 方程式は

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = -k^2\psi$$

と表せるので，一般解は

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$$

ここで $\psi(0) = A\sin 0 + B\cos 0 = B$ で，$\psi(0) = 0$ なので $B = 0$．よって $\psi(x) = A\sin kx$ だが，$\psi(a) = 0$ なのである整数 n が存在して $ka = n\pi$．よって解は定数 A と整数 n を用いて $A\sin\left(\dfrac{n\pi}{a}x\right)$ と表せる．

$n = 0$ のときは $\psi(x) = 0$ となってしまうので不適．また n が負のときは定数 $A' = -A$ と正の整数 $n' = -n$ を用いて $\psi(x) = A'\sin\left(\dfrac{n'\pi}{a}x\right)$ と表せるので，n が正の整数のときだけを考えればよい．

$|\psi|^2 = A^2\sin^2\left(\dfrac{n\pi}{a}x\right)$ を $0 \leq x \leq a$ で積分すると

$$\begin{aligned}
A^2\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x &= A^2\int_0^a \frac{1-\cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2}\mathrm{d}x \\
&= A^2\left[\frac{1}{2}x - \frac{a}{4n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\right]_0^a \\
&= A^2\cdot\frac{a}{2}
\end{aligned}$$

より，$\displaystyle\int_0^a |\psi(x)|^2\mathrm{d}x = 1$ となるためには $A = \pm\sqrt{\dfrac{2}{a}}$ であればよい．ただし物理学の観点で

は $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$ のときを考えれば十分らしい．

さて，$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ と $ka = n\pi$ より E としてありえる値は $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ であり，各 E_n に対応する ψ は $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$ である．これが今回の V に対する時間に依存しない Schrödinger 方程式の解である．

3.3. 問題 2.4

$$
\begin{aligned}
\langle x\rangle &= \int_0^a x\left|\psi_n(x)\right|^2 \mathrm{d}x \\
&= \frac{2}{a}\int_0^a x\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{a}\left(\int_0^a x\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x + \int_0^a (a-x)\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x\right) \\
&= \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{a}{2}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left\langle x^2 \right\rangle &= \int_0^a x^2 \left|\psi_n(x)\right|^2 \mathrm{d}x \\
&= \frac{2}{a}\int_0^a x^2 \sin^2\!\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{a}\int_0^a x^2\left(1-\cos\!\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{a}\int_0^a x^2\,\mathrm{d}x - \frac{1}{a}\int_0^a x^2\cos\!\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{a^2}{3} - \frac{1}{a}\left(\frac{a}{2n\pi}\left[x^2\sin\!\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\right]_0^a - \frac{a}{n\pi}\int_0^a x\sin\!\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x\right) \\
&= \frac{a^2}{3} + \frac{1}{n\pi}\left(-\frac{a}{2n\pi}\left[x\cos\!\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\right]_0^a + \frac{a}{2n\pi}\int_0^a \cos\!\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x\right) \\
&= \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle p\rangle &= \int_0^a \psi_n{}^*(x)\left(-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_n(x)\right)\mathrm{d}x \\
&= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\!\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\left(-i\hbar\cdot\frac{n\pi}{a}\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\!\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{2n\pi i\hbar}{a^2}\int_0^a \sin\!\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\cos\!\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{n\pi i\hbar}{a^2}\int_0^a \sin\!\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x \\
&= 0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left\langle p^2\right\rangle &= \int_0^a \psi_n{}^*(x)\left(-\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2x}\psi_n(x)\right)\mathrm{d}x \\
&= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\left(\hbar^2\cdot\frac{n^2\pi^2}{a^2}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{2n^2\pi^2\hbar^2}{a^3}\int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\sigma_x &= \sqrt{\left\langle x^2\right\rangle - \langle x\rangle^2} \\
&= \sqrt{\frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2} - \frac{a^2}{4}} \\
&= a\sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\sigma_p &= \sqrt{\left\langle p^2\right\rangle - \langle p\rangle^2} \\
&= \frac{n\pi\hbar}{a}
\end{aligned}
$$

より $\sigma_x\sigma_p = \hbar\sqrt{\frac{n^2\pi^2}{12} - \frac{1}{2}}$，これは $n = 1$ のとき最小値 $\hbar\sqrt{\frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}} = 0.568\hbar$ をとるので不確定性原理は成り立っている．