<1粒子系の量子力学の基本原理>

§状態と波動関数

▷ 状態の記述　　ある瞬間におけるひとつの粒子の状態を完全に表わす.

古典力学　$(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ を指定　　(1) $\mathbf{r} = (x, y, z)$, $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$

6つの数!

量子力学　複素数値をとる $\mathbf{r}$ の関数 $\varphi(\mathbf{r})$ を指定　　波動関数(状態関数)

状態は「波」だけを表わすのでもなく「粒子」だけを表わすのでもない.

- $\varphi(\mathbf{r})$ は2乗可積分　(2) $\int d^3 r \, |\varphi(\mathbf{r})|^2 < \infty$
- 「すべての $\mathbf{r}$ において $\varphi(\mathbf{r}) = 0$」という関数はのぞく(状態に対応しない)
- 状態を表すのは $\varphi(\cdot)$ という関数全体

Dirac記号

状態そのもの(関数全体)を表わす記号　$|\varphi\rangle$ (ケットファイ)

(参考 ベクトルの成分表示　$v = (v_j)_{j=1,\cdots,D}$

$|\varphi\rangle$ に相当　　$\varphi(\mathbf{r})$ に相当)

☑ 状態の重ね合わせ

2つの波動関数(状態) $\varphi(x)$, $\psi(x)$

$\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ について (1) $\alpha\varphi(x)+\beta\psi(x)$ も 波動関数(状態)

→ $\varphi(x)$ と $\psi(x)$ の重ね合わせ

(Dirac記号 $\varphi(x) \leftrightarrow |\varphi\rangle$, $\psi(x) \leftrightarrow |\psi\rangle$, $\alpha\varphi(x)+\beta\psi(x) \leftrightarrow \alpha|\varphi\rangle+\beta|\psi\rangle$)

ベクトルと同じ (ただし ここでは無限次元)

☑ 状態の線形独立性

n個の波動関数(状態) $\varphi_1(x), \varphi_2(x), \cdots, \varphi_n(x)$ が 線形独立

$\Updownarrow$

すべてのxについて (2) $\alpha_1\varphi_1(x)+\alpha_2\varphi_2(x)+\cdots+\alpha_n\varphi_n(x)=0$

となるのは $\alpha_1=\alpha_2=\cdots=\alpha_n=0$ のときのみ

▷ 波動関数と物理的状態の対応

複素定数 $\alpha \neq 0$ があって すべての x について (1) $\varphi(x) = \alpha\,\psi(x)$

が成り立つなら 波動関数 $\varphi(x)$ と $\psi(x)$ は 同じ物理的状態を表わす.

(この規則が必要な理由は量子力学2 で…)

▷ 位置の測定

粒子の状態が $\varphi(x)$ のとき, 粒子の位置を測定 → 必らずどこか1点でみつかる.

- 粒子がみつかる位置は ランダム (完全に同じ実験をくり返しても結果はかわる)
- 粒子が x にみつかる確率密度 (2) $p(x) = (\text{定数})\,|\varphi(x)|^2$

特に (3) $\int d^3x\,|\varphi(x)|^2 = 1$ となっているときは

(4) $\boxed{p(x) = |\varphi(x)|^2}$

規格化条件
このような $\varphi(x)$ は 規格化されている.

§ 時間発展の Schrödinger 方程式

- 時刻 0 での状態 $\psi(0, \boldsymbol{x})$ ← $\boldsymbol{x}$ の関数
- 時刻 t での状態 $\psi(t, \boldsymbol{x})$ ← t をとめれば $\boldsymbol{x}$ の関数

(時間発展の) Schrödinger 方程式　$\psi(0, \boldsymbol{x})$ から任意の t での $\psi(t, \boldsymbol{x})$ を求める

例 ポテンシャル $V(\boldsymbol{x})$ からの力をうける粒子 ($V(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{x}$ の実数値関数)

$$(1)\quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(t, \boldsymbol{x}) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{x}) \right\} \psi(t, \boldsymbol{x})$$

$$E \leftarrow \text{古典力学との対応} \rightarrow \frac{|\boldsymbol{p}|^2}{2m} + V(\boldsymbol{x})$$

ハミルトニアン (エネルギーに対応する演算子) を

$$(2)\quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{x})$$

とすると

(1) は $$(3)\quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(t, \boldsymbol{x}) = \hat{H}\psi(t, \boldsymbol{x})$$

§ 定常状態（エネルギー固有状態）のSchrödinger方程式

(1) $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(t,\boldsymbol{r}) = \hat{H}\Psi(t,\boldsymbol{r})$　(2) $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{r})$

Ⅲ 定常状態

定在波のように (3) $\Psi(t,\boldsymbol{r}) = f(t)\varphi(\boldsymbol{r})$ と分離する解はあるか？

(3)を(1)に代入 →
(4) 左辺 $= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\{f(t)\varphi(\boldsymbol{r})\} = i\hbar\dot{f}(t)\varphi(\boldsymbol{r})$
(5) 右辺 $= \hat{H}\{f(t)\varphi(\boldsymbol{r})\} = f(t)\hat{H}\varphi(\boldsymbol{r})$

(4)=(5)として両辺を $f(t)\varphi(\boldsymbol{r})$ で割る（$f(t)\varphi(\boldsymbol{r}) \neq 0$ となる $t, \boldsymbol{r}$ について）

(6) $i\hbar\frac{\dot{f}(t)}{f(t)} = \frac{\hat{H}\varphi(\boldsymbol{r})}{\varphi(\boldsymbol{r})}$ ＝ tにも$\boldsymbol{r}$にもよらない定数 → Eと書く.

よって
(7) $i\hbar\dot{f}(t) = Ef(t)$ → 簡単にとける
(8) $\hat{H}\varphi(\boldsymbol{r}) = E\varphi(\boldsymbol{r})$

$E = \hbar\omega$

(9) $f(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = e^{-i\omega t}$

(1)の解は　(10) $\boxed{\Psi(t,\boldsymbol{r}) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\varphi(\boldsymbol{r})}$

（このEについて(8)をみたす $\varphi(\boldsymbol{r})$ があると仮定）

6

時間発展のSchrödinger方程式(p5-(1))の解　(1) $\Psi(t,\boldsymbol{r}) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\varphi(\boldsymbol{r})$

- tが変化しても($\boldsymbol{r}$によらない)複素数$e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$が変化するだけ。

  物理的状態は変化しない！　(1)は定常状態

  p3 エネルギーに対応

- (1)より　(2) $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t,\boldsymbol{r}) = E\Psi(t,\boldsymbol{r})$

  (1)はエネルギーがEに確定した状態

☑定常状態(エネルギー固有状態)のSchrödinger方程式

$\varphi(\boldsymbol{r})$は p5-(8)　(3) $\hat{H}\varphi(\boldsymbol{r}) = E\varphi(\boldsymbol{r})$　の解

つまり　(4) $\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{r})\right\}\varphi(\boldsymbol{r}) = E\varphi(\boldsymbol{r})$

(3),(4)が成り立つように E と 関数$\varphi(\boldsymbol{r})$をセットで求める ← 固有値問題

エネルギー固有値　エネルギー固有状態

注意　Eは実数であるべき

$t=0$ で　(1) $\int d^3x\,|\Psi(0,x)|^2 = \int d^3x\,|\varphi(x)|^2 = 1$　と規格化

P6-(1)より　(2) $\int d^3x\,|\Psi(t,x)|^2 = |e^{-i\frac{E}{\hbar}t}|^2 \int d^3x\,|\varphi(x)|^2 = |e^{-i\frac{E}{\hbar}t}|^2 = e^{\frac{2\,\mathrm{Im}(E)}{\hbar}t}$

$\mathrm{Im}(E)=0$ つまり Eが実数　でないと，規格化が保たれない！

(3) $\hat{H}\varphi(x) = E\,\varphi(x)$ をみたすEが実数になるのが物理的に正しい設定

参考　時間発展のSchrödinger方程式　(4) $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t,x) = \hat{H}\,\Psi(t,x)$ の一般解

(5) $\hat{H}\varphi_j(x) = E_j\,\varphi_j(x)$　となる $E_j,\ \varphi_j(x)$ が求まったとする $(j=1,2,\cdots)$

(6) $e^{-i\frac{E_j}{\hbar}t}\varphi_j(x)$ はもちろん(4)の解

(4)は線形なので任意の $\alpha_j\in\mathbb{C}$ について　(7) $\Psi(t,x) = \sum_{j=1}^{\infty}\alpha_j\,e^{-i\frac{E_j}{\hbar}t}\varphi_j(x)$

も(4)の解　(実はこれが一般解)