量子力学

2020.11.08現在

鹿児島現代物理勉強会
御領　悟志

量子論の発端・量子仮説（1900年）

- １９世紀の末頃ドイツを中心に製鋼業が盛んになる。
- 高温物体からの放射の性質が詳しく調べられた。
- 黒体放射の放射公式を電磁気学から導こうとするが成功しなかった。
- プランクが１９００年に、振動数ν[Hz]の放射のエネルギーが、hν[J]ずつの単位で行動すると仮定し、**プランクの公式**を導いた。
- エネルギーが、hν[J]の整数倍しか許さない仮説を**量子仮説**という。

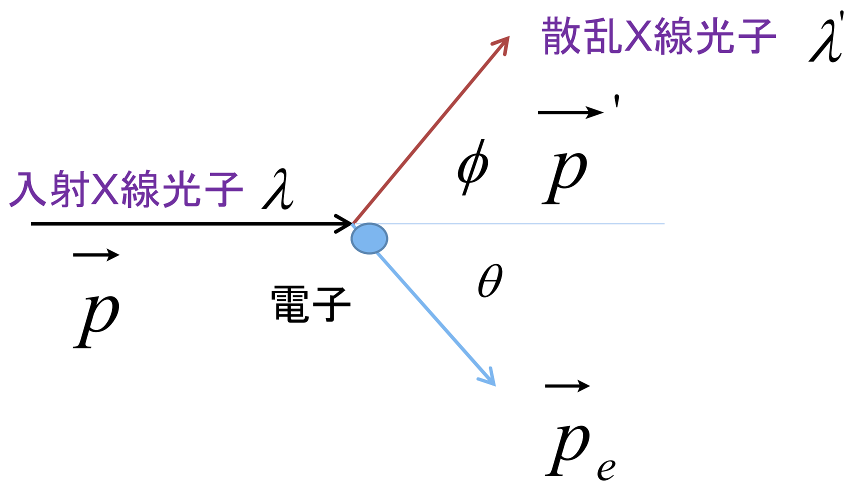
光電効果（1905年）

- 金属面にX線を当てると電子が飛び出す現象（光電効果）が詳しく調べられ、従来の電磁気学では説明できないことがいろいろ出てきた。
- アインシュタインは**プランクの量子仮説**を押し進め、振動数v[Hz]の光はそれぞれhv[J]のエネルギーをもち、
- 光の粒子（光子）として行動し、金属中の自由電子は光子からエネルギーを吸収し運動エネルギーを得て、金属表面から飛び出すと説明した。
- 光は、粒子と波動の両方の性質をもつことになる。

コンプトン効果(1923年)

- X線を物質に当てたときに入射X線よりも波長の長い散乱X線について詳しく調べられた。
- その波長のずれが、曲げられた角Φだけで定まり入射X線の波長や散乱物質に無関係であることがわかった。

$$\Delta\lambda = 0.024(1-\cos\phi)\text{Å}$$



コンプトン効果(計算)

電子についての特殊相対論的スカラー保存より

$$\frac{E^2}{c^2}-p_x{}^2-p_y{}^2-p_z{}^2=(m_e c)^2$$

$$\frac{E}{c}=\sqrt{\left(p_x{}^2+p_y{}^2+p_z{}^2\right)+(m_e c)^2}=\sqrt{p_e{}^2+(m_e c)^2}\cdots①$$

4元運動量の時間部分(エネルギー)についての保存より

$$p+m_e c=p'+\frac{E}{c}\cdots②$$

4元運動量の空間部分(運動量)についての保存より

$$(p_e)^2=(p)^2+(p')^2-2pp'\cos\phi\cdots③$$

$$p-p'+m_e c=\frac{E}{c}\cdots④$$

$$(p)^2+(p')^2+(m_e c)^2-2pp'+2pm_e c-2p'm_e c=p_e{}^2+(m_e c)^2\cdots⑤$$

③の関係式を⑥に代入すると

$$-2pp'+2pm_e c-2p'm_e c=p_e{}^2-(p)^2-(p')^2\cdots⑥$$

$$2pm_e c-2p'm_e c=2pp'-2pp'\cos\phi$$

$$m_e c(p-p')=pp'(1-\cos\phi)$$

$$m_e ch\left(\frac{1}{\lambda}-\frac{1}{\lambda'}\right)=\frac{h}{\lambda}\frac{h}{\lambda'}(1-\cos\phi)$$

$$m_e ch\left(\frac{\lambda'-\lambda}{\lambda\lambda'}\right)=\frac{h}{\lambda}\frac{h}{\lambda'}(1-\cos\phi)$$

$$\Delta\lambda=(\lambda'-\lambda)=\frac{h}{m_e c}(1-\cos\phi)\cdots⑦$$

ド・ブロイの物質波（1923年）

- 運動量をもつ粒子は、波動性を示し、その波長は次の式で示される。

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

- ダビットソンとガーマーは、電子線を結晶に当てド・ブロイの物質波の波長と同じ干渉現象が現れることを確かめた。（1927年）

シュレディンガー方程式(1926年)

- シュレディンガーが、定式化した量子力学の基本方程式
- ψの2乗は、粒子の存在する確率密度を意味する。

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

プランク定数　$h=6.625\times10^{-34}[\mathrm{J\cdot s}]$　$\hbar=\frac{h}{2\pi}$

シュレディンガー方程式の作り方

力学的エネルギー保存則の式は

$$\frac{1}{2}mv^2+V=E \cdots ①$$

①式を運動量を用いて書き替えると

$$p=mv \qquad v=\frac{p}{m}$$

$$\frac{p^2}{2m}+V=E \cdots ②$$

更に②式の物理量を以下の演算子で書き替える

$$p=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad E=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2+V=i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \cdots ③$$

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

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

3次元的に書き替えると　※ 詳細は補遺参照

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right]\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \cdots ④$$

エルミート演算子

$$(\phi, Q\varphi) = \int \phi^* Q\varphi d\vec{r} \quad \cdots ①$$

次の②の関係を満たす演算子Qをエルミート演算子という。

$$(\varphi, Q\phi)^* = (\phi, Q\varphi) \quad \cdots ②$$

$$(\varphi, Q\phi)^* = \left(\int \varphi^* Q\phi d\vec{r}\right)^* = \int (Q\phi)^* \varphi d\vec{r} \quad \cdots ③$$

$$(\varphi, Q\phi)^* = (Q\phi, \varphi) \quad \cdots ④$$

②と④式からエルミート演算子は次の関係を満たす。

$$(\phi, Q\varphi) = (Q\phi, \varphi) \quad \cdots ⑤$$

$$Q\varphi = q\varphi \quad \cdots ⑥$$

$$(\varphi, Q\varphi)^* = (\varphi, Q\varphi) \quad \cdots ⑦$$

$$(\varphi, q\varphi)^* = (\varphi, q\varphi) \quad \cdots ⑧$$

$$q^* = q \quad \cdots ⑨$$

エルミート演算子Qの固有値qは、実数である。

観測される物理量の演算子は、エルミート演算子である。

物理量の期待値

物理量Aの期待値＜A＞の時間変化について

$$< A >= (\varphi, A\varphi) \quad < A >= \iiint \varphi^* A \varphi dxdydz$$

$$\frac{d}{dt} < A >= (\frac{\partial \varphi}{\partial t}, A\varphi) + (\varphi, A\frac{\partial \varphi}{\partial t}) + (\varphi, \frac{\partial A}{\partial t}\varphi)$$

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H\varphi \qquad -i\hbar \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} = H^* \varphi^*$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{H}{i\hbar}\varphi \qquad \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} = -\frac{H^*}{i\hbar}\varphi^*$$

$$\frac{d}{dt} < A >= (\frac{H}{i\hbar}\varphi, A\varphi) + (\varphi, A\frac{H}{i\hbar}\varphi) + (\varphi, \frac{\partial A}{\partial t}\varphi)$$

$$\frac{d}{dt} < A >= -\frac{1}{i\hbar}(H\varphi, A\varphi) + \frac{1}{i\hbar}(\varphi, AH\varphi) + (\varphi, \frac{\partial A}{\partial t}\varphi)$$

Hはエルミート演算子なので

$$\frac{d}{dt} < A >= -\frac{1}{i\hbar}(\varphi, HA\varphi) + \frac{1}{i\hbar}(\varphi, AH\varphi) + (\varphi, \frac{\partial A}{\partial t}\varphi)$$

$$\frac{d}{dt} < A >= \frac{1}{i\hbar}(\varphi, -HA\varphi) + \frac{1}{i\hbar}(\varphi, AH\varphi) + (\varphi, \frac{\partial A}{\partial t}\varphi)$$

$$\frac{d}{dt} < A >= \frac{1}{i\hbar}(\varphi, (AH - HA)\varphi) + (\varphi, \frac{\partial A}{\partial t}\varphi)$$

$$i\hbar\frac{d}{dt} < A >= (\varphi, [A, H]\varphi) + i\hbar(\varphi, \frac{\partial A}{\partial t}\varphi)$$

$$i\hbar\frac{d}{dt} < A >=< [A, H] > + i\hbar < \frac{\partial A}{\partial t} >$$

$< \frac{\partial A}{\partial t} >= 0$ ならば $i\hbar\frac{d}{dt} < A >=< [A, H] >$

不確定性原理

位置を確定させようとすると運動量が不確定になり、運動量を確定させようとすると位置が不確定になる。

<u>位置と運動量が同時に決まらない</u>ことを表す。

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

（位置の不確定）×（運動量の不確定）

不確定性原理・計算(1)

$<x>$, $<p>$ を x, p の期待値として

$$(\Delta x)^2 \Rightarrow (x-<x>)^2$$

$$(\Delta p)^2 \Rightarrow (p-<p>)^2$$

$$[x-<x>, p-<p>]$$

$$=(x-<x>)(p-<p>)-(p-<p>)(x-<x>)$$

$$=xp-x<p>-<x>p+<x><p>$$

$$-px+p<x>+<p>x-<p><x>$$

$$=[x, p]=i\hbar$$

次の負にならない積分を考える。

$$I(\lambda)=\int\left|\{\lambda(x-<x>)-i(p-<p>)\}\varphi\right|^2 dx \geq 0$$

λ は、任意の実数とする。

$$I(\lambda)=\int\{\lambda(x-<x>)-i(p-<p>)\}^*\varphi^*\{\lambda(x-<x>)-i(p-<p>)\}\varphi dx$$

$$I(\lambda)=\int\{\lambda(x-<x>)^*+i(p-<p>)^*\}\varphi^*\{\lambda(x-<x>)-i(p-<p>)\}\varphi dx$$

$$I(\lambda)=\int\{\lambda(x-<x>)^*+i(p-<p>)^*\}\varphi^*\{\lambda(x-<x>)\}\varphi dx$$
$$+\int\{\lambda(x-<x>)^*+i(p-<p>)^*\}\varphi^*\{-i(p-<p>)\}\varphi dx$$

$$I(\lambda)=\lambda^2((x-<x>)\varphi,(x-<x>)\varphi)$$
$$-i\lambda((x-<x>)\varphi,(p-<p>)\varphi)$$
$$+i\lambda((p-<p>)\varphi,(x-<x>)\varphi)$$
$$+((p-<p>)\varphi,(p-<p>)\varphi)$$

x p は、エルミート演算子なので

$$I(\lambda)=\lambda^2\left(\varphi,(x-<x>)^2\varphi\right)-i\lambda(\varphi,(x-<x>)(p-<p>)\varphi)$$
$$+i\lambda(\varphi,(p-<p>)(x-<x>)\varphi)+\left(\varphi,(p-<p>)^2\varphi\right)$$

$$I(\lambda)=\lambda^2(\Delta x)^2+i\lambda[p,x]+(\Delta p)^2$$

$$I(\lambda)=\lambda^2(\Delta x)^2-i\lambda[x,p]+(\Delta p)^2$$

$$I(\lambda)=\lambda^2(\Delta x)^2-i\lambda i\hbar+(\Delta p)^2=\lambda^2(\Delta x)^2+\lambda\hbar+(\Delta p)^2$$

不確定性原理・計算（2）

全ての実数λに成立する条件について。

$$I(\lambda)=(\Delta x)^2\lambda^2+\hbar\lambda+(\Delta p)^2\geq 0$$

$$a=(\Delta x)^2>0$$

$$b=\hbar>0$$

$$c=(\Delta p)^2>0$$

$$I(\lambda)=a\lambda^2+b\lambda+c\geq 0$$

$$I(\lambda)=a\left(\lambda^2+\frac{b}{a}\lambda\right)+c\geq 0$$

$$I(\lambda)=a\left\{\left(\lambda+\frac{b}{2a}\right)^2-\frac{b^2}{4a^2}\right\}+c\geq 0$$

$$I(\lambda)=a\left(\lambda+\frac{b}{2a}\right)^2+c-\frac{b^2}{4a}\geq 0$$

$$I(\lambda)=a\left(\lambda+\frac{b}{2a}\right)^2+\frac{4ac-b^2}{4a}\geq 0$$

$$\frac{4ac-b^2}{4a}\geq 0 \qquad 4ac\geq b^2 \qquad 4(\Delta x)^2(\Delta p)^2\geq\hbar^2$$

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2\geq\frac{\hbar^2}{4} \Longrightarrow \Delta x\Delta p\geq\frac{\hbar}{2}$$

位置と運動量が同時に決まらないことを表す

$$\Delta x\Delta p\geq\frac{\hbar}{2}$$

不確定性原理・計算(3)

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad \cdots ①$$

$$E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m}$$ なので

$$\Delta E = \frac{p \Delta p}{m}$$

$$\Delta p = \frac{m}{p} \Delta E \quad \cdots ②$$

$$\Delta x = v \Delta t \quad \cdots ③$$

$$p = m v \quad \cdots ④$$

②と③を①に代入して④を用いると

$$\Delta t \Delta E \frac{m v}{p} = \Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad \cdots ⑤$$

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad \cdots ⑥$$

（エネルギーの不確定）×（時間の不確定）

エーレンフェストの定理

- シュレディンガー方程式を用いて**量子力学的に位置の期待値を計算する**ことで、**ニュートンの運動方程式を導く**ことが出来る。

$$< x >= \iiint \varphi^* x \varphi dxdydz \qquad \frac{d < x >}{dt} = \frac{i\hbar}{m} \iiint \left(\frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \cdot \varphi \right) dxdydz$$

$$m \frac{d^2 < x >}{dt^2} = < -\frac{\partial V}{\partial x} >$$

エーレンフェストの定理・計算（１）

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right]\varphi=i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}\cdots①$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right]\varphi^*=-i\hbar\frac{\partial\varphi^*}{\partial t}\cdots②$$

x の期待値は

$$< x >=\iiint\varphi^* x\,\varphi\, dxdydz \quad\cdots③$$

x の期待値の時間微分は

$$\frac{d< x >}{dt}=\iiint\left(\frac{d\varphi^*}{dt}x\varphi+\varphi^* x\frac{d\varphi}{dt}\right)dxdydz \quad\cdots④$$

$$\frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right]\varphi=\frac{\partial\varphi}{\partial t}\cdots⑤$$

$$\frac{-1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right]\varphi^*=\frac{\partial\varphi^*}{\partial t}\cdots⑥$$

$$\frac{d< x >}{dt}=\iiint\left(\frac{-1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right]\varphi^*(x\varphi)+\varphi^* x\frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right]\varphi\right)dxdydz$$

$$\frac{d< x >}{dt}=\frac{-1}{i\hbar}\iiint\left(\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right]\varphi^*(x\varphi)-\varphi^* x\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right]\varphi\right)dxdydz$$

$$\nabla\left(\nabla\varphi^*(x\varphi)-(\varphi^*x)\nabla\varphi\right)-\left(\nabla\varphi^*\nabla(x\varphi)-\nabla(\varphi^*x)\nabla\varphi\right)=\nabla^2\varphi^*(x\varphi)-(\varphi^*x)\nabla^2\varphi$$

$$=-\frac{i\hbar}{2m}\iiint\left(\Delta\varphi^*\cdot(x\varphi)-(\varphi^*x)\Delta\varphi\right)dxdydz$$

$$=-\frac{i\hbar}{2m}\iiint\nabla\left(\nabla\varphi^*(x\varphi)-(\varphi^*x)\nabla\varphi\right)-\left(\nabla\varphi^*\nabla(x\varphi)-\nabla(\varphi^*x)\nabla\varphi\right)dxdydz$$

$$=-\frac{i\hbar}{2m}\iint\left(\nabla\varphi^*(x\varphi)-(\varphi^*x)\nabla\varphi\right)dS+\frac{i\hbar}{2m}\iiint\left(\nabla\varphi^*\nabla(x\varphi)-\nabla(\varphi^*x)\nabla\varphi\right)dxdydz$$

$$=\frac{i\hbar}{2m}\iiint\left(\nabla\varphi^*\nabla(x\varphi)-\nabla(\varphi^*x)\nabla\varphi\right)dxdydz$$

$$=\frac{i\hbar}{2m}\iiint\left(\nabla\varphi^*(\nabla x\cdot\varphi+x\nabla\varphi)-(\nabla\varphi^*\cdot x+\varphi^*\nabla x)\nabla\varphi\right)dxdydz$$

$$=\frac{i\hbar}{2m}\iiint\left(\nabla\varphi^*(\nabla x\cdot\varphi)-(\varphi^*\nabla x)\nabla\varphi\right)dxdydz$$

$$\frac{d< x >}{dt}=\frac{i\hbar}{2m}\iiint\left(\frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\cdot\varphi-\varphi^*\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)dxdydz \quad\cdots⑦$$

エーレンフェストの定理・計算(2)

$$\frac{i\hbar}{2m}\iiint\left(\frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\cdot\varphi\right)dxdydz = \frac{i\hbar}{2m}\iint\varphi^*\cdot\varphi dS - \frac{i\hbar}{2m}\iiint\left(\varphi^*\cdot\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)dxdydz$$

$$\frac{i\hbar}{2m}\iiint\left(\frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\cdot\varphi\right)dxdydz = -\frac{i\hbar}{2m}\iiint\left(\varphi^*\cdot\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)dxdydz$$

$$\frac{d<x>}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\iiint\left(\frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\cdot\varphi - \varphi^*\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)dxdydz$$

$$\frac{d<x>}{dt} = \frac{i\hbar}{m}\iiint\left(\frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\cdot\varphi\right)dxdydz \quad \cdots$$ ⑧

$\frac{d}{dt}<x>$ のさらに時間微分は

$$\frac{d^2<x>}{dt^2} = \frac{i\hbar}{m}\iiint\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\varphi^*}{\partial t}\right)\cdot\varphi + \frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right)dxdydz \quad \cdots$$ ⑨

$$m\frac{d^2<x>}{dt^2} = i\hbar\iiint\left(\frac{-1}{i\hbar}\frac{\partial}{\partial x}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi^* + V\varphi^*\right]\cdot\varphi + \frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi + V\varphi\right]\right)dxdydz$$

$$= -\iiint\left(\frac{\partial}{\partial x}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi^* + V\varphi^*\right]\cdot\varphi - \frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi + V\varphi\right]\right)dxdydz$$

$$= -\iiint\left(\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\frac{\partial\varphi^*}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}(V\varphi^*)\right]\cdot\varphi - \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\Delta\varphi + \frac{\partial\varphi^*}{\partial x}V\varphi\right]\right)dxdydz$$

$$= -\iiint\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\varphi + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\Delta\varphi + \frac{\partial}{\partial x}(V\varphi^*) - \frac{\partial\varphi^*}{\partial x}V\varphi\right)dxdydz$$

$$= -\iiint\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Delta\frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\varphi - \frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\Delta\varphi\right] + \frac{\partial}{\partial x}(V\varphi^*) - \frac{\partial\varphi^*}{\partial x}V\varphi\right)dxdydz$$

$$= -\iiint\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Delta\frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\varphi - \frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\Delta\varphi\right] + \varphi^*\frac{\partial V}{\partial x}\varphi + V\frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\cdot\varphi - V\frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\varphi\right)dxdydz$$

$$= -\iiint\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Delta\frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\varphi - \frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\Delta\varphi\right] + \varphi^*\frac{\partial V}{\partial x}\varphi\right)dxdydz$$

$$= \iiint\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Delta\frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\varphi - \frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\Delta\varphi\right] - \varphi^*\frac{\partial V}{\partial x}\varphi\right)dxdydz \quad \cdots$$ ⑩

$$= \iiint\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\left(\nabla\frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\cdot\varphi - \frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\cdot\nabla\varphi\right) - \varphi^*\frac{\partial V}{\partial x}\varphi\right]dxdydz \quad \cdots$$ ⑪

$$m\frac{d^2<x>}{dt^2} = \iiint\varphi^*\left(-\frac{\partial V}{\partial x}\right)\varphi dxdydz \quad \cdots$$ ⑫

$$m\frac{d^2<x>}{dt^2} = <-\frac{\partial V}{\partial x}> \quad \cdots$$ ⑬

確率密度の流れ（ψ の意味）

次のシュレンディンガー方程式①の複素共役をとる。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right]\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\cdots①$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right]\psi^*=-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\cdots②$$

$\psi^*\times①-\psi\times②$ を計算する。

$$\psi^*\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right]\psi=i\hbar\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}\cdots③$$

$$\psi\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right]\psi^*=-i\hbar\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\cdots④$$

③−④

$$\psi^*\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right]\psi-\psi\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right]\psi^*=i\hbar\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+i\hbar\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\cdots⑤$$

$$\frac{\hbar}{2mi}\left(-\psi^*\Delta\psi+\psi\Delta\psi^*\right)=\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)\cdots⑥$$

$$\frac{\hbar}{2mi}\nabla\left(-\psi^*\nabla\psi+\psi\nabla\psi^*\right)=\frac{\partial\psi\psi^*}{\partial t}\cdots⑦$$

$$0=\frac{\partial\psi\psi^*}{\partial t}+\nabla\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)\cdots⑧$$

$$\rho=\psi\psi^* \qquad \vec{J}=\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)$$

と置くと次のようにある密度の保存の式が得られる。

$$0=\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\vec{J}\cdots⑨$$

粒子について確率密度の流れがあると考えれば良い。

シュレディンガー方程式の解(１)

３次元的にシュレディンガー方程式を書くと

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V\right]\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\cdots ①$$

簡単のために一次元方向のみに話を限定する。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\psi(x,t)=i\hbar\frac{d\psi(x,t)}{dt}$$

$\psi(x,t)=\varphi(x)\phi(t)$　　と変数分離すると

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\varphi(x)\phi(t)=i\hbar\frac{d\varphi(x)\phi(t)}{dt}$$

$$\phi(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\varphi(x)=\varphi(x)i\hbar\frac{d\phi(t)}{dt}$$

$$\frac{\phi(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\varphi(x)}{\varphi(x)\phi(t)}=\frac{\varphi(x)i\hbar\frac{d\phi(t)}{dt}}{\varphi(x)\phi(t)}$$

$$\frac{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\varphi(x)}{\varphi(x)}=\frac{i\hbar\frac{d\phi(t)}{dt}}{\phi(t)}=E(\text{一定})$$

このように左辺と右辺で変数を分離できる

シュレディンガー方程式の解（２）

$$\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt} = -i\frac{E}{\hbar} \qquad \log\phi(t) = -i\frac{E}{\hbar}t + C$$

$$\phi(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t+C} = Ae^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\frac{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\varphi(x)}{\varphi(x)} = E$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\varphi(x) = E\varphi(x) \cdots ②$$

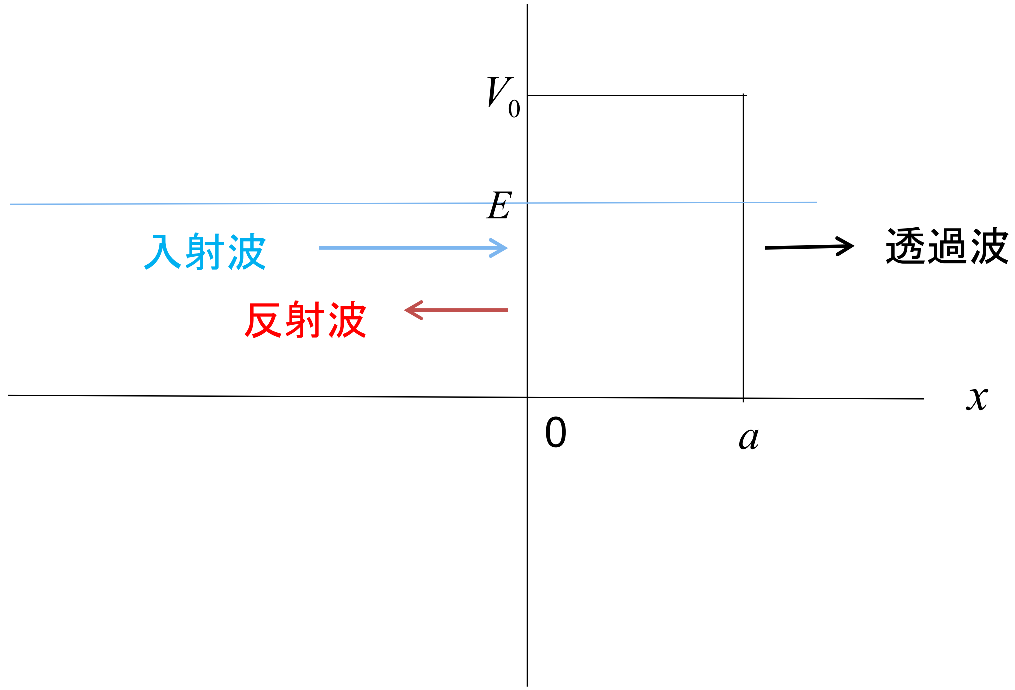
方程式の一般解は次のようになる。

$$\psi(x,t) = \varphi(x)\phi(t) = A\varphi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \cdots ③$$

となり、x軸方向についての式②を解けばいいことになる。

トンネル効果(1)

エネルギーEの粒子(質量m)が、図のように $x < 0$ と $a < x$ で $V(x) = 0$、$0 < x < a$で $V(x) = V_0$ という長方形のポテンシャル障壁に $x < 0$ から入射したとする。



太陽の内部で核融合がゆっくりと進んだり
無の揺らぎの中から宇宙が生まれたりすることの基本となる現象

トンネル効果(2)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\varphi(x)=E\varphi(x)$$

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2}=\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\varphi(x)$$

$\varphi(x)=Ae^{kx}$ と仮定する。

$$k^2e^{kx}=\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}e^{kx}$$

$$k=\pm\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

$x<0 \qquad V_0=0$

$$k_1=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\varphi_1(x)=A_1e^{ik_1x}+A_2e^{-ik_1x}\cdots①$$

$$\frac{d\varphi_1(x)}{dx}=ik_1A_1e^{ik_1x}-ik_1A_2e^{-ik_1x}$$

$0\le x\le a \qquad V_0>E$

$$k_2=\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$$

$$\varphi_2(x)=B_1e^{k_2x}+B_2e^{-k_2x}\cdots②$$

$$\frac{d\varphi_2(x)}{dx}=k_2B_1e^{k_2x}-k_2B_2e^{-k_2x}$$

トンネル効果(3)

$a < x \qquad V_0 = 0$

$\varphi_3(x) = C_1 e^{ik_1 x} + C_2 e^{-ik_1 x} \cdots$ ③

$$\frac{d\varphi_3(x)}{dx} = ik_1 C_1 e^{ik_1 x} - ik_1 C_2 e^{-ik_1 x}$$

$x = 0$ のとき

$A_1 + A_2 = B_1 + B_2$

$ik_1(A_1 - A_2) = k_2(B_1 - B_2)$

$x = a$ のとき $C_2 = 0$ なので

$B_1 e^{k_2 a} + B_2 e^{-k_2 a} = C_1 e^{k_1 a}$

$k_2\left(B_1 e^{k_2 a} - B_2 e^{-k_2 a}\right) = ik_1 C_1 e^{ik_1 a}$

$k_2\left(B_1 e^{k_2 a} - B_2 e^{-k_2 a}\right) = ik_1\left(B_1 e^{k_2 a} + B_2 e^{-k_2 a}\right)$

$k_2 B_1 e^{k_2 a} - k_2 B_2 e^{-k_2 a} = ik_1 B_1 e^{k_2 a} + ik_1 B_2 e^{-k_2 a}$

$(ik_1 + k_2)B_2 e^{-k_2 a} = (-ik_1 + k_2)B_1 e^{k_2 a}$

$$B_2 = \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a} B_1$$

$A_1 + A_2 = B_1 + B_2$

$$A_1 - A_2 = \frac{k_2}{ik_1}(B_1 - B_2)$$

$$A_1 = \frac{1}{2}\left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1}\right)B_1 + \frac{1}{2}\left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1}\right)B_2$$

$$A_1 = \frac{1}{2}\left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1}\right)B_1 + \frac{1}{2}\left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1}\right)\frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a} B_1$$

トンネル効果(4)

$$C_1 e^{k_1 a} = e^{k_2 a} B_1 + e^{-k_2 a} B_2 = e^{k_2 a} B_1 + e^{-k_2 a} \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a} B_1$$

$$= e^{k_2 a} B_1 + \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{k_2 a} B_1 = \left(1 + \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)}\right) e^{k_2 a} B_1$$

$$C_1 e^{k_1 a} = \left(\frac{(k_2 + ik_1)}{(k_2 + ik_1)} + \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)}\right) e^{k_2 a} B_1 = \frac{(2k_2)}{(k_2 + ik_1)} e^{k_2 a} B_1$$

$$C_1 = \frac{(2k_2)}{(k_2 + ik_1)} e^{(k_2 - k_1)a} B_1$$

$$\frac{C_1}{A_1} = \frac{\dfrac{(2k_2)}{(k_2 + ik_1)} e^{(k_2 - k_1)a} B_1}{\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{k_1 - ik_2}{k_1}\right) B_1 + \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{k_1 + ik_2}{k_1}\right) \dfrac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a} B_1}$$

$$= \frac{\dfrac{(2k_2)}{(k_2 + ik_1)} e^{(k_2 - k_1)a}}{\dfrac{1}{2}\dfrac{(k_2 + ik_1)(k_1 - ik_2)}{k_1 (k_2 + ik_1)} + \dfrac{1}{2}\dfrac{(k_1 + ik_2)(k_2 - ik_1)}{k_1 (k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a}}$$

$$= \frac{\dfrac{(4k_1 k_2)}{(k_2 + ik_1)} e^{(k_2 - k_1)a}}{\dfrac{(k_2 + ik_1)(k_1 - ik_2)}{(k_2 + ik_1)} + \dfrac{(k_1 + ik_2)(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a}}$$

$$= \frac{4k_1 k_2 e^{(k_2 - k_1)a}}{(k_2 + ik_1)(k_1 - ik_2) + (k_1 + ik_2)(k_2 - ik_1) e^{2k_2 a}}$$

トンネル効果(5)

$$\frac{C_1}{A_1} = \frac{4k_1k_2e^{(k_2-k_1)a}}{(k_2+ik_1)(k_1-ik_2)+(k_1+ik_2)(k_2-ik_1)e^{2k_2a}}$$

$$= \frac{4k_1k_2e^{(k_2-k_1)a}}{i(-ik_2+k_1)(k_1-ik_2)-i(k_1+ik_2)(ik_2+k_1)e^{2k_2a}}$$

$$= \frac{4k_1k_2e^{(k_2-k_1)a}}{i(k_1-ik_2)^2-i(k_1+ik_2)^2e^{2k_2a}}$$

$$= \frac{4ik_1k_2e^{(k_2-k_1)a}}{-(k_1-ik_2)^2+(k_1+ik_2)^2e^{2k_2a}}$$

$$= -\frac{4ik_1k_2e^{(k_2-k_1)a}}{(k_1-ik_2)^2-(k_1+ik_2)^2e^{2k_2a}}$$

$$T = \left(\frac{C_1}{A_1}\right)^2 = \left(\frac{4ik_1k_2e^{(k_2-k_1)a}}{(k_1-ik_2)^2-(k_1+ik_2)^2e^{2k_2a}}\right)^2$$

透過率　T＞０　であり、通り抜ける粒子が
存在することを示している。

トンネル効果（6）

$$A_2 = \frac{1}{2}\left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1}\right)B_1 + \frac{1}{2}\left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1}\right)B_2$$

$$A_2 = \frac{1}{2}\left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1}\right)B_1 + \frac{1}{2}\left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1}\right)\frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)}e^{2k_2a}B_1$$

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{\frac{1}{2}\left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1}\right)B_1 + \frac{1}{2}\left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1}\right)\frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)}e^{2k_2a}B_1}{\frac{1}{2}\left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1}\right)B_1 + \frac{1}{2}\left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1}\right)\frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)}e^{2k_2a}B_1}$$

$$= \frac{\left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1}\right)B_1 + \left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1}\right)\frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)}e^{2k_2a}B_1}{\left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1}\right)B_1 + \left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1}\right)\frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)}e^{2k_2a}B_1}$$

$$= \frac{\left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1}\right) + \left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1}\right)\frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)}e^{2k_2a}}{\left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1}\right) + \left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1}\right)\frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)}e^{2k_2a}}$$

$$= \frac{\frac{(k_1 + ik_2)(k_2 + ik_1)}{k_1(k_2 + ik_1)} + \frac{(k_1 - ik_2)(k_2 - ik_1)}{k_1(k_2 + ik_1)}e^{2k_2a}}{\frac{(k_2 + ik_1)(k_1 - ik_2)}{k_1(k_2 + ik_1)} + \frac{(k_1 + ik_2)(k_2 - ik_1)}{k_1(k_2 + ik_1)}e^{2k_2a}}$$

$$= \frac{(k_1 + ik_2)(k_2 + ik_1) + (k_1 - ik_2)(k_2 - ik_1)e^{2k_2a}}{(k_2 + ik_1)(k_1 - ik_2) + (k_1 + ik_2)(k_2 - ik_1)e^{2k_2a}}$$

$$= \frac{i(k_1 + ik_2)(k_2 + ik_1) + i(k_1 - ik_2)(k_2 - ik_1)e^{2k_2a}}{i(k_2 + ik_1)(k_1 - ik_2) + i(k_1 + ik_2)(k_2 - ik_1)e^{2k_2a}}$$

トンネル効果(7)

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{(k_1 + ik_2)(ik_2 - k_1) + (k_1 - ik_2)(ik_2 + k_1)e^{2k_2 a}}{(ik_2 - k_1)(k_1 - ik_2) + (k_1 + ik_2)(ik_2 + k_1)e^{2k_2 a}}$$

$$= \frac{-\left(k_1{}^2 + k_2{}^2\right) + \left(k_1{}^2 + k_2{}^2\right)e^{2k_2 a}}{-(k_1 - ik_2)^2 + (k_1 + ik_2)^2 e^{2k_2 a}}$$

$$T = \left(\frac{C_1}{A_1}\right)^2 = \left(\frac{4ik_1k_2e^{(k_2-k_1)a}}{(k_1 - ik_2)^2 - (k_1 + ik_2)^2 e^{2k_2 a}}\right)^2$$

$$R = \left(\frac{A_2}{A_1}\right)^2 = \left(\frac{\left(k_1{}^2 + k_2{}^2\right) + \left(k_1{}^2 + k_2{}^2\right)e^{2k_2 a}}{(k_1 - ik_2)^2 - (k_1 + ik_2)^2 e^{2k_2 a}}\right)^2$$

$$= \left(\frac{\left(k_1{}^2 + k_2{}^2\right)\left(1 + e^{2k_2 a}\right)}{(k_1 - ik_2)^2 - (k_1 + ik_2)^2 e^{2k_2 a}}\right)^2$$

量子力学の行列表示（１）

$$\left|\Psi(t)\right\rangle = \sum_{n=1}^{n} \mathrm{c_n(t)} \left|n\right\rangle \quad \mathrm{c_n(t)} = \left\langle n \middle| \Psi(t) \right\rangle \quad \cdot\cdot ①$$

ただし $\left\{\left|n\right\rangle\right\}$ は規格直交系である。

$$\hat{\mathrm{H}}\left|n\right\rangle = E_n\left|n\right\rangle \quad \left\langle n \middle| m\right\rangle = \delta_{nm} \quad \cdot\cdot ②$$

シュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi(t)\right\rangle = \hat{\mathrm{H}}\left|\Psi(t)\right\rangle$$ に代入する。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{n=1}^{n}\mathrm{c_n(t)}\left|n\right\rangle\right) = \hat{\mathrm{H}}\left(\sum_{n=1}^{n}\mathrm{c_n(t)}\left|n\right\rangle\right) \quad \cdot\cdot ③$$

$$i\hbar\sum_{n=1}^{n}\frac{\partial \mathrm{c_n(t)}}{\partial t}\left|n\right\rangle = \sum_{n=1}^{n}\mathrm{c_n(t)}\,\hat{\mathrm{H}}\left|n\right\rangle$$

$$i\hbar\sum_{n=1}^{n}\frac{\partial \mathrm{c_n(t)}}{\partial t}\left|n\right\rangle = \sum_{n=1}^{n}\mathrm{c_n(t)}E_n\left|n\right\rangle$$

$$i\hbar\frac{\partial \mathrm{c_n(t)}}{\partial t} = \mathrm{c_n(t)}E_n$$

$$\frac{1}{\mathrm{c_n(t)}}\frac{\partial \mathrm{c_n(t)}}{\partial t} = \frac{E_n}{i\hbar} = -i\frac{E_n}{\hbar}$$

$$\ln \mathrm{c_n(t)} = -i\frac{E_n}{\hbar}t + c$$

$$\mathrm{c_n(t)} = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t+c} = e^c e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} = c_n(0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \quad \cdot\cdot ④$$

量子力学の行列表示（２）

$$\mathrm{c_n(t)} = c_n(0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \quad \cdot\cdot④$$

$$\left|\Psi(t)\right\rangle = \sum_{n=1}^{n} \mathrm{c_n(t)}\left|n\right\rangle = \sum_{n=1}^{n} c_n(0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\left|n\right\rangle \quad \cdot\cdot⑤$$

$\left|\Psi(t)\right\rangle$ を $\{\left|n\right\rangle\}$ を基底ベクトルとすると

状態関数の行列成分は次の通りになる。

$$\left|\Psi(t)\right\rangle = \begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ c_3(t) \\ c_n(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1(0)e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \\ c_2(0)e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t} \\ c_3(0)e^{-i\frac{E_3}{\hbar}t} \\ c_n(0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \end{bmatrix} \quad \cdot\cdot⑥$$

基底ベクトルを $\left|u_n(t)\right\rangle = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}\left|n\right\rangle$ とすれば

状態関数の行列成分は次の通りになる。

$$\left|\Psi(t)\right\rangle = \begin{bmatrix} c_1(0) \\ c_2(0) \\ c_3(0) \\ c_n(0) \end{bmatrix} \quad \cdot\cdot⑦$$

演算子 $\hat{Q}$ のハイゼンベルグ表示は

$\hat{Q}\left|u_m(t)\right\rangle = \hat{Q}e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t}\left|m\right\rangle$ $\hat{Q}$ は固有ベクトルのみに作用

$$\left\langle u_n(t)\right| = e^{i\frac{E_n}{\hbar}t}\left\langle n\right|$$

$$\left\langle u_n(t)\middle|\hat{Q}\middle|u_m(t)\right\rangle = e^{i\frac{E_n}{\hbar}t}e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t}\left\langle n\middle|\hat{Q}\middle|m\right\rangle = e^{i\frac{(E_n-E_m)}{\hbar}t}\left\langle n\middle|\hat{Q}\middle|m\right\rangle$$

波動関数の時間変化を表示する演算子(1)

$$e^{\hat{A}} = 1 + \hat{A} + \frac{1}{2!}\hat{A}^{2} + \frac{1}{3!}\hat{A}^{3} + \quad + \frac{1}{k!}\hat{A}^{k} \quad \cdot\cdot ⑧$$

$$e^{\hat{A}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\hat{A}^{k} \quad \cdot\cdot ⑨$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{H}}\,t\right)^{k} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathbf{H}}\,t} \quad \cdot\cdot ⑩$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t}\left|n\right\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t\right)^{k}\left|n\right\rangle$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\left(-\frac{i}{\hbar}E_{n}t\right)^{k}\left|n\right\rangle \quad \cdot\cdot ⑪$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t}\left|n\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_{n}}\left|n\right\rangle \quad \cdot\cdot ⑫$$

$$\left|\Psi(t)\right\rangle = \sum_{n=1}^{n} c_{n}(0)e^{-i\frac{E_{n}}{\hbar}t}\left|n\right\rangle$$

$$= \sum_{n=1}^{n} c_{n}(0)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t}\left|n\right\rangle$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t}\sum_{n=1}^{n} c_{n}(0)\left|n\right\rangle \quad \cdot\cdot ⑬$$

$$\left|\Psi(t)\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}\,t}\left|\Psi(0)\right\rangle \quad \cdot\cdot ⑭$$

波動関数の時間変化を表示する演算子(2)

$$\left|\Psi(t_0)\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t_0}\left|\Psi(0)\right\rangle \quad \cdot\cdot⑮$$

$$\left|\Psi(t)\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}(t-t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t_0}\left|\Psi(0)\right\rangle$$

$$\left|\Psi(t)\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}(t-t_0)}\left|\Psi(t_0)\right\rangle \quad \cdot\cdot⑯$$

$t=t_0$における状態ベクトル$\left|\Psi(t_0)\right\rangle = \Psi(r,t_0)$
が求まれば、その他の時刻の状態ベクトルは

$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}(t-t_0)}$ を作用させることで求まる。

$$\left|u_m\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t}\left|m\right\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_m}\left|m\right\rangle$$

$$\left\langle u_n(t)\right| = \left\langle n\right| e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t}$$

演算子Qの行列要素は

$$\left\langle u_n(t)\right|\hat{Q}\left|u_m(t)\right\rangle = \left\langle n\right| e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t}\,\hat{Q}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t}\left|m\right\rangle \quad \cdot\cdot⑰$$

$$\hat{Q}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t}\,\hat{Q}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t} \quad \cdot\cdot⑱$$

演算子 $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t}$ はシュレディンガー表示からハイゼンベルク表示への基底ベクトルの変換を表す。

$$\left\langle n\right|\hat{Q}(t)\left|m\right\rangle$$

波動関数の時間変化を表示する演算子（3）

物理量Qの期待値＜Q＞

$$<\hat{Q}>=\langle\psi(t)|\hat{Q}|\psi(t)\rangle \quad \cdot\cdot⑲$$

演算子Qそのものに時間変化の性質はない。全て状態ベクトルの時間的変化により決まる。

状態ベクトルは変化せず演算子の方が時間とともに変化する記述も可能である。

$$|\Psi(t)\rangle=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}(t-t_0)}|\Psi(t_0)\rangle \quad \cdot\cdot⑯$$

を用いる。

$$\hat{Q}(t)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t}\,\hat{Q}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}t}$$

$$<\hat{Q}>=\langle\psi(t)|\hat{Q}|\psi(t)\rangle$$

$$=\langle\psi(t_0)|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}(t-t_0)}\,\hat{Q}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}(t-t_0)}|\psi(t_0)\rangle$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}(t-t_0)}\,\hat{Q}\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{\mathrm{H}}(t-t_0)}=\hat{Q}(t-t_0)$$ とおくと $\cdot\cdot⑳$

$$\langle\psi(t)|\hat{Q}|\psi(t)\rangle=\langle\psi(t_0)|\hat{Q}(t-t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

状態ベクトルは時刻の基準$t=t_0$にとどまり,物理量を表す演算子 $\hat{Q}(t-t_0)$ の方が時間とともに変化する。

ディラック方程式(1928年)

- ディラックが、定式化した特殊相対論に従う相対論的量子力学方程式
- γμなど4行4列の行列を用いて方程式は記述される。
- ψの2乗が粒子の存在する確率密度を意味することはシュレディンガー方程式と同じだが、ψは4成分で表される。

$$\left(i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-mc\right)\psi=0$$

プランク定数　$h=6.625\times10^{-34}[\mathrm{J\cdot s}]$　$\hbar=\dfrac{h}{2\pi}$

補遺(1)

$$\nabla = \vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\Delta = \nabla^2$$

$$= \left(\vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(\vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

留数定理

$$\oint_C f(z)dz = \oint_{C_1} f(z)dz + \oint_{C_2} f(z)dz$$

$$\oint_C f(z)dz = 2\pi i b_1 = 2\pi i \operatorname{Re} s(z_0)$$