

量子物理学特論

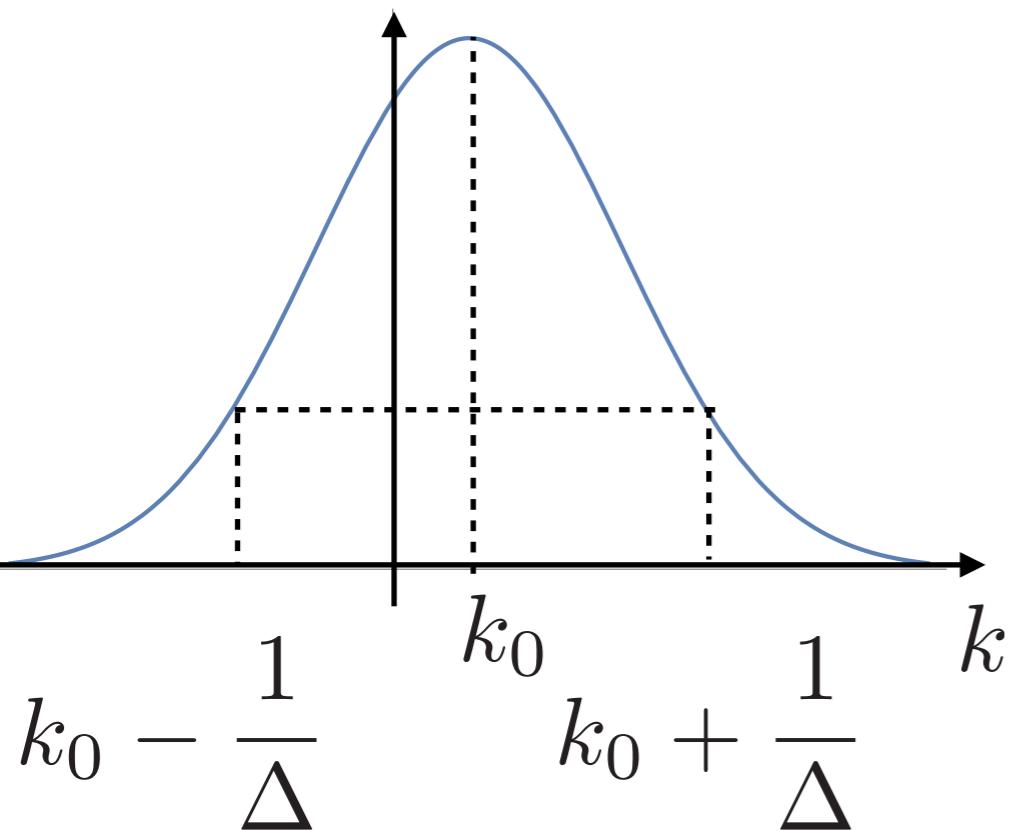
第3回

物質波の分散関係

$\omega(k)$ と k の関係を考える。光の場合は $\omega = ck$

$$\psi(x, t) = \frac{A\Delta}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2}(k - k_0)^2 \Delta^2\right) e^{ikx - i\omega t} dk$$

簡単のため、 $k=k_0$ の周りに 鋭く局在する 波束を考える。



△が大きい

ω をテーラー展開する。

$$\omega(k) \simeq \omega(k_0) + (k - k_0) \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_0} + \frac{1}{2} (k - k_0)^2 \left(\frac{d^2\omega}{dk^2} \right)_{k=k_0} + \dots$$

物質波の分散関係

$$\psi(x, t) = \frac{A\Delta}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2}(k - k_0)^2 \Delta^2\right) e^{ikx - i\omega t} dk$$

$$\omega(k) \simeq \omega(k_0) + (k - k_0) \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} + \frac{1}{2}(k - k_0)^2 \left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k=k_0} + \dots$$

$k - k_0 = k'$ とすると,

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{A\Delta}{\sqrt{2\pi}} \exp[i(k_0 x - \omega(k_0)t)] \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{\Delta^2}{2} k'^2\right] \exp\left[-\frac{i}{2} k'^2 \left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k=k_0} t\right] \exp\left[i k' \left\{x - \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0} t\right\}\right] dk' \end{aligned}$$

ここで, $v_g = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}$ $\xi = \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k=k_0}$ とおくと,

$$\boxed{=} \exp\left[-\left\{\frac{\Delta^2}{2} + i\xi t\right\} k'^2 + ik' \{x - v_g t\}\right]$$

物質波の分散関係

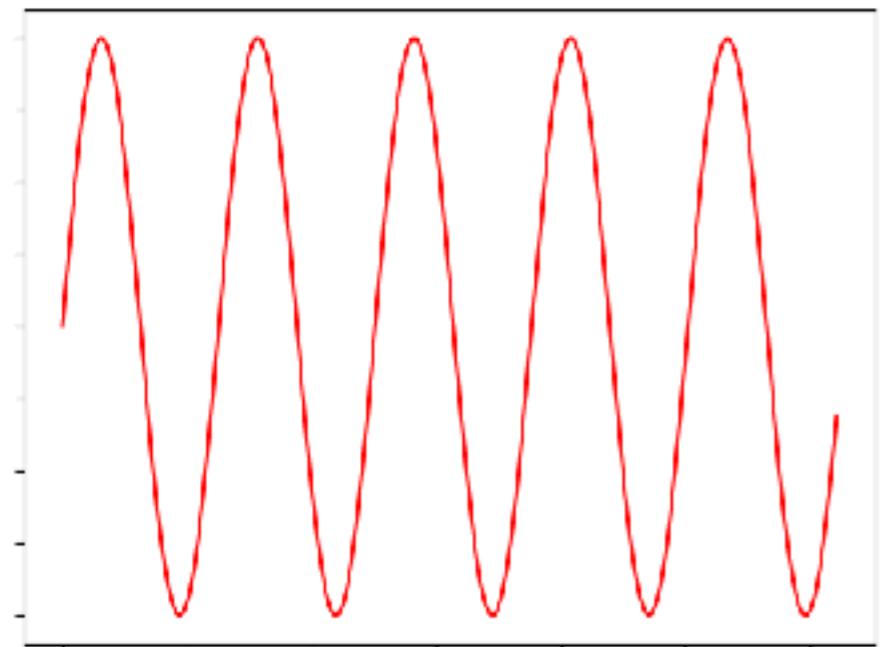
よって、 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz = \sqrt{\pi}$ より

$$\psi(x, t) = A e^{i(k_0 x - \omega(k_0) t)} \sqrt{\frac{1}{1 + \frac{2i\xi}{\Delta^2} t}} \exp \left[-\frac{(x - v_g t)^2}{2\Delta^2 \left(1 + \frac{2i\xi}{\Delta^2} t\right)} \right]$$

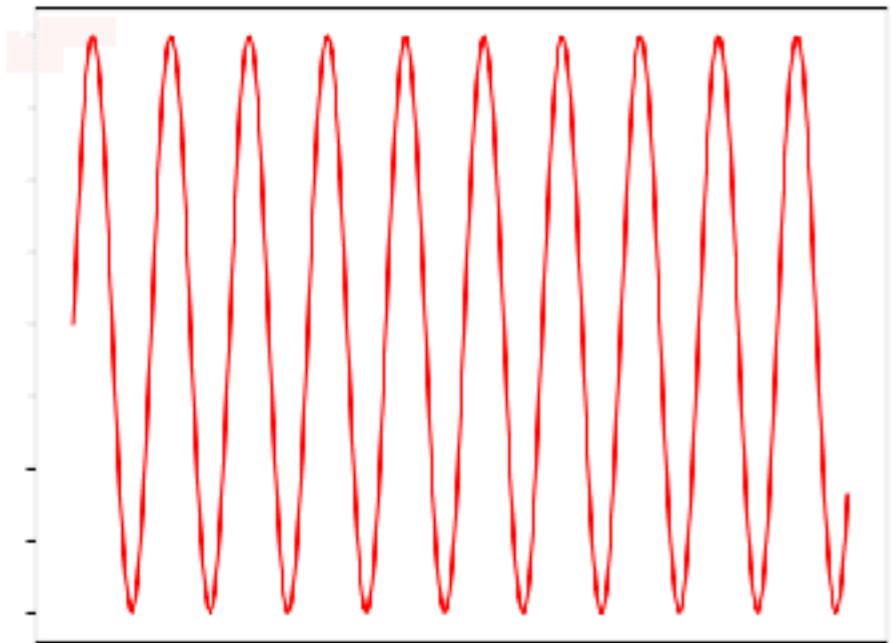
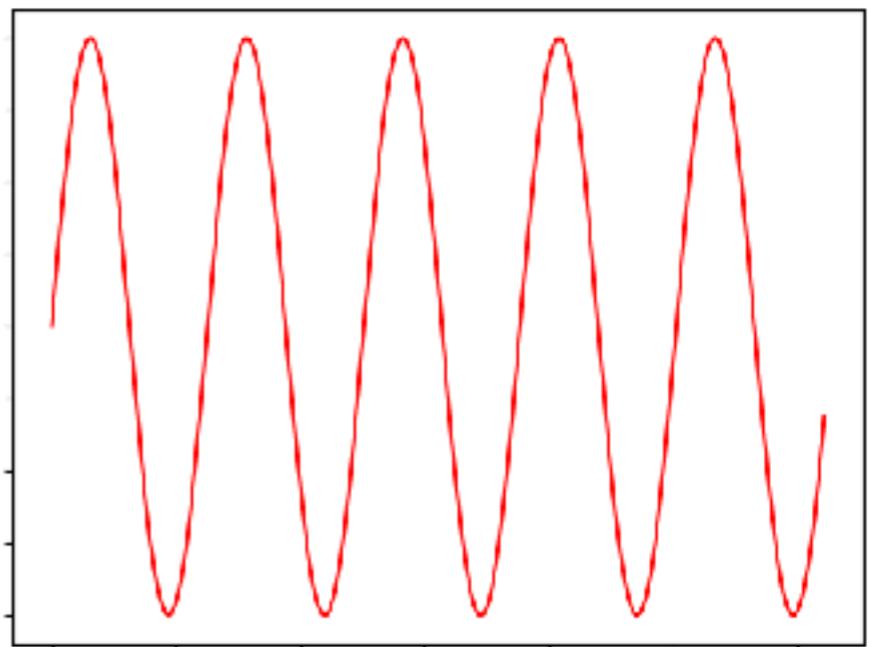
ただし、 $v_g = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}$ $\xi = \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k=k_0}$

波の速度に関する復習

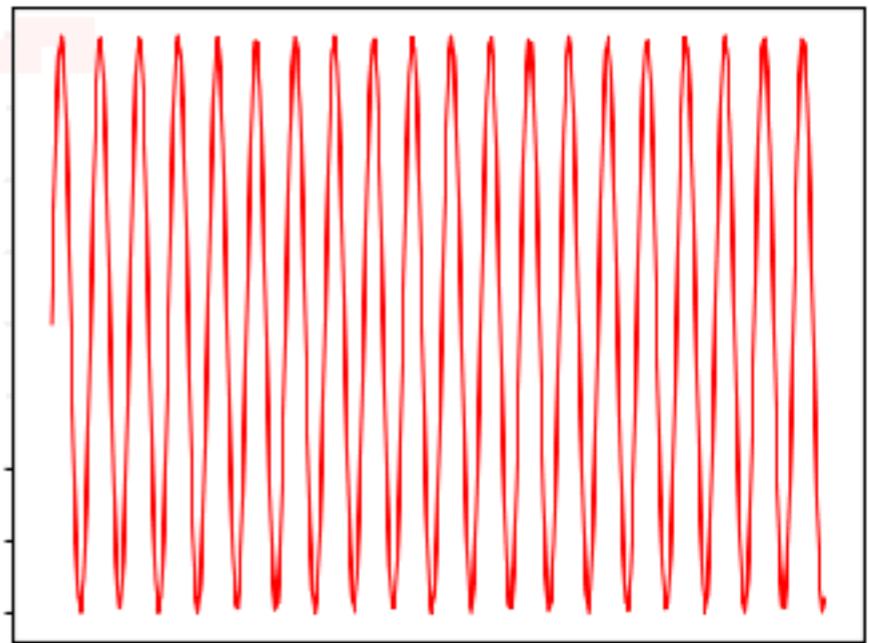
$$y = A \sin(kx - \omega t)$$



ω を2倍



k を2倍

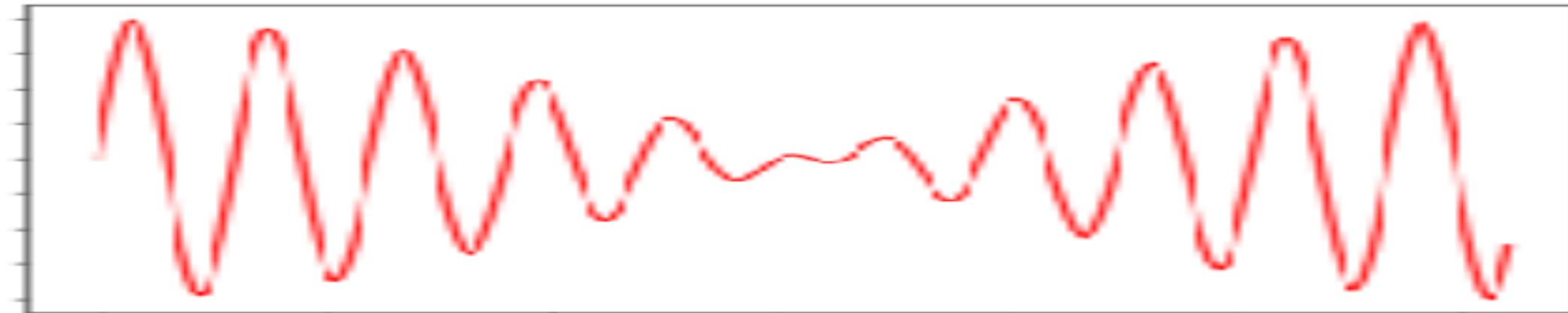
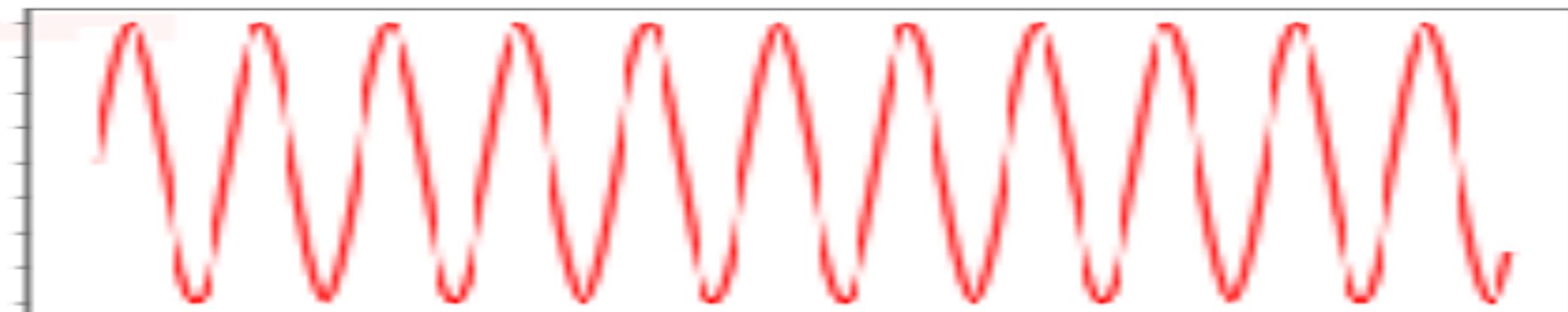
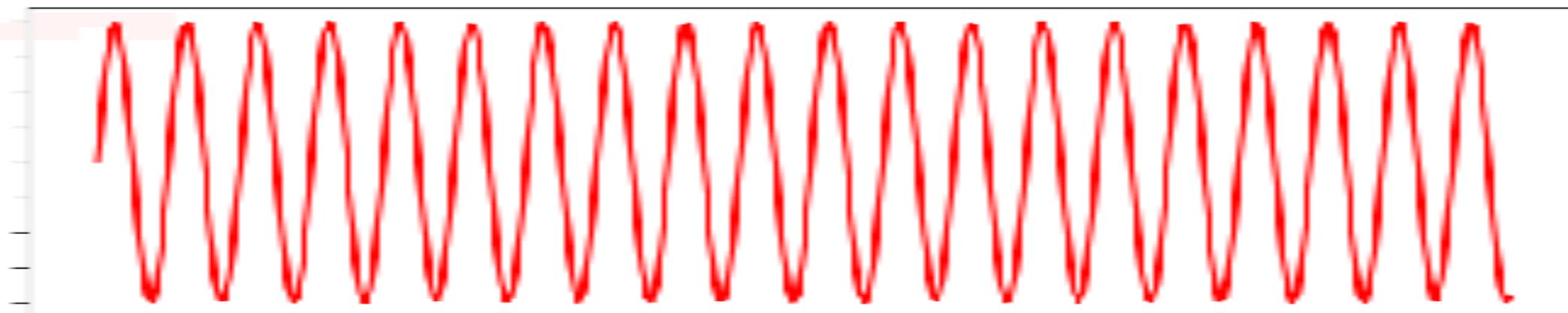


波の速度に関する復習

- ★ k が大きいと波がつまる
- ★ ω が大きいとその場所における振動が速くなる
- ★ 波の速度（位相速度）は $v=\omega/k$ で計算される

群速度

2つの波の合成波を考える



群速度

群速度

$$A \sin(kx - \omega t) + A \sin((k + \Delta k)x - (\omega + \Delta\omega)t)$$
$$= 2A \sin \frac{(2k + \Delta k)x - (2\omega + \Delta\omega)t}{2} \cos \frac{\Delta kx - \Delta\omega t}{2}$$

元の2つの波の平均の波数
と振動数を持つ波

合成波の進行
(うなりの生じ方)

群速度 : $v_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$

物質波の速度

$$\psi(x, t) = A e^{i(k_0 x - \omega(k_0)t)} \sqrt{\frac{1}{1 + \frac{2i\xi}{\Delta^2}t}} \exp \left[-\frac{(x - v_g t)^2}{2\Delta^2 \left(1 + \frac{2i\xi}{\Delta^2}t\right)} \right]$$

ただし, $v_g = \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}$ $\xi = \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k=k_0}$

波束の群速度を表す

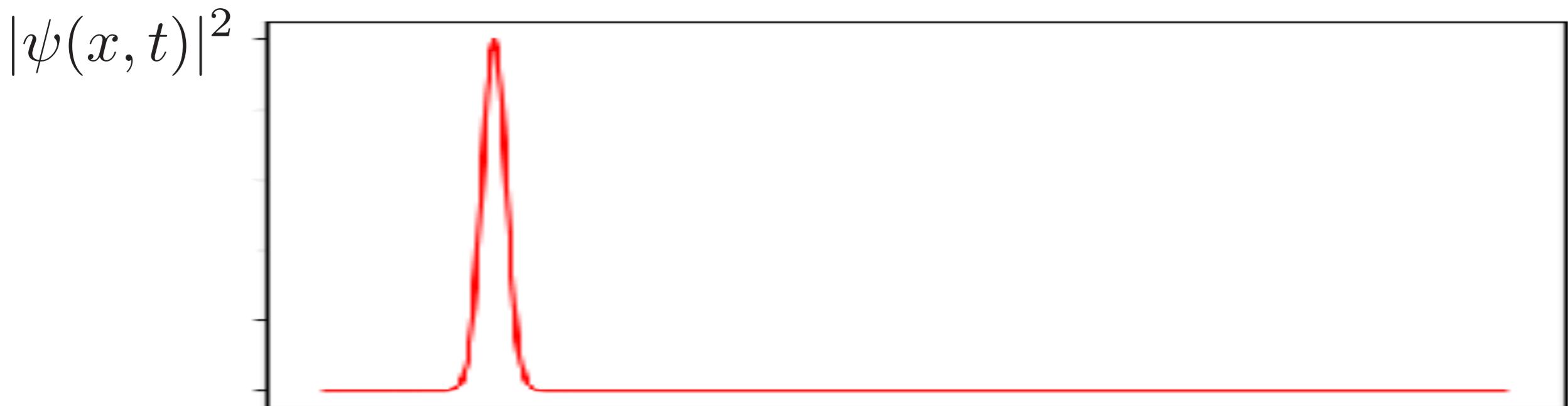


古典粒子の速度に対応

物質波の速度

$$\psi(x, t) = A e^{i(k_0 x - \omega(k_0) t)} \sqrt{\frac{1}{1 + \frac{2i\xi}{\Delta^2} t}} \exp \left[-\frac{(x - v_g t)^2}{2\Delta^2 \left(1 + \frac{2i\xi}{\Delta^2} t\right)} \right]$$

$$|\psi(x, t)|^2 = |A|^2 \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{2\xi t}{\Delta^2}\right)^2}} \exp \left[-\frac{(x - v_g t)^2}{\Delta^2 + \frac{4\xi^2}{\Delta^2} t^2} \right]$$



波束は伝播しながら拡散していく。

物質波の拡散

$$|\psi(x, t)|^2 = |A|^2 \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{2\xi t}{\Delta^2}\right)^2}} \exp \left[-\frac{(x - v_g t)^2}{\Delta^2 + \frac{4\xi^2}{\Delta^2} t^2} \right]$$

波束の空間的広がりを考える

$t=0$ のとき : Δ 程度の広がり

$$t\text{のとき} : \Delta \sqrt{1 + \left(\frac{2\xi}{\Delta^2}\right)^2 t^2}$$

Δ が小さいほど、ぼやけ方が激しい

古典粒子の運動

運動量 p , 運動エネルギー E の古典粒子

$$E = \frac{p^2}{2m} \longrightarrow v = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m}$$

↑
対応
↓

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{p}{m}$$

光量子における次の関係が粒子に対しても成り立つとする

$$E = h\nu = \hbar\omega \longrightarrow \omega = \frac{p^2}{2m\hbar}$$

よって, $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$:物質波の分散関係

ドブロイ波の仮定 $p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$ も成り立っている

波束の式

波束を p で書き換える

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ikx - i\omega(k)t} dk$$



$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} g\left(\frac{p}{\hbar}\right) e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} dp$$

$g(p/\hbar) = \sqrt{\hbar}\varphi(p)$ とすると

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\varphi}(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} dp$$

フーリエ変換の視点から

$\psi(x, t = 0) = \varphi(x)$ とすると

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\varphi}(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp$$

座標空間



$$\tilde{\varphi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \varphi(x) e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx$$

運動量空間

自由粒子に対する物質波方程式

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\varphi}(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} dp$$

この波束をtで微分する

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} E \tilde{\varphi}(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} dp$$

一方、xで二階微分してみる

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p^2}{2m} \tilde{\varphi}(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} dp$$

$$E = \frac{p^2}{2m} \text{ より}$$

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

シュレディンガーエルゴン

シュレディンガーエルミット方程式

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

- ★ $\psi(x, t)$ は複素数関数 (ψ を **波動関数** という)
- ★ 時間 t に関しては 1 階微分 (通常の波動方程式のような 2 階微分ではない)
- ★ 古典方程式との対応 $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ $p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

対応関係と交換関係

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

$$px\psi \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = -i\hbar \frac{\partial x}{\partial x}\psi - i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x}$$



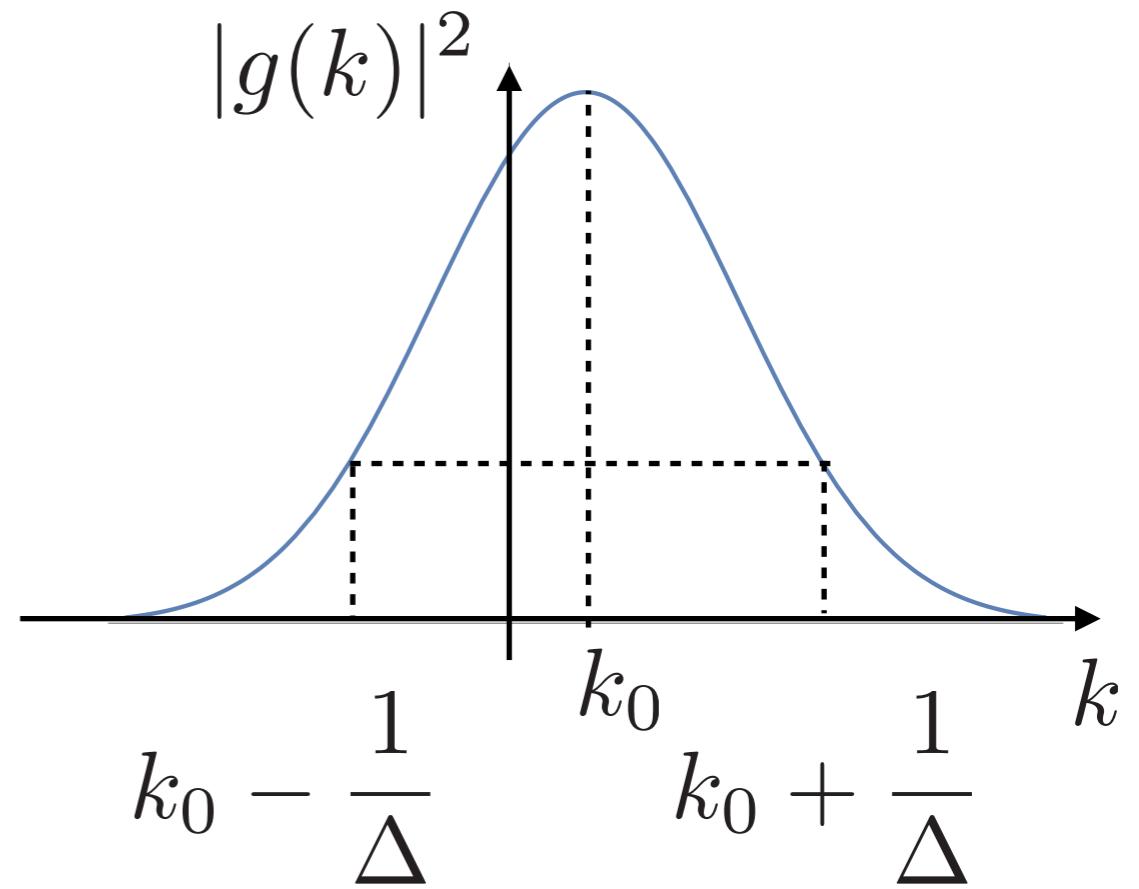
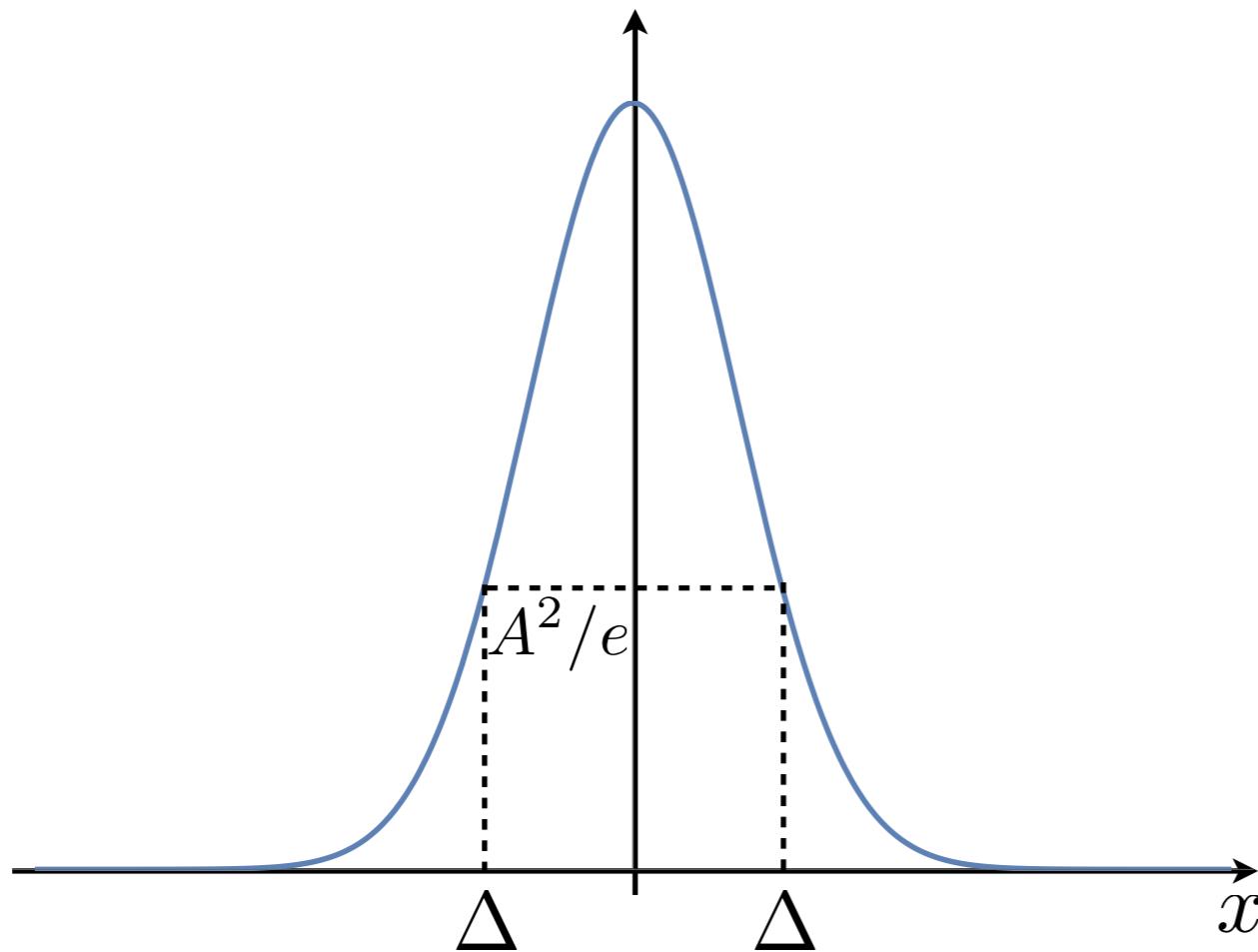
$$px\psi \rightarrow -i\hbar\psi + xp\psi$$

$$[x, p] \equiv xp - px = i\hbar$$

座標と運動量は交換しない

不確定性関係

波束の広がりに注目する



$$\Delta x \cdot \Delta k \simeq \Delta \cdot \frac{1}{\Delta} = 1$$

$$p = \hbar k$$

$$\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar$$

不確定性関係

$$\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar$$

- ★ 波束の幅によらずに，この関係式が成立する
- ★ Δx を小さくすると， Δp が大きくなり，逆に Δp を小さくすると Δx が大きくなる
- ★ 一般の波束に対しては，次の不等式で関係式が与えられる

$$\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar$$

(ハイゼンベルグの不確定性関係)

- ★ 古典力学では現れない，量子力学に特有の関係式
- ★ 2つの量が同時に厳密な値を取れないことを意味する

不確定性関係

具体的な波束を用いて不確定性関係を探る

時刻t=0で， a 程度の広がりを持った，一次元の波束：

$$\psi(x, 0) = \varphi(x) = C \exp\left(\frac{ip_0x}{\hbar} - \frac{x^2}{2a^2}\right)$$

$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1$ となるよう，Cを決める(規格化)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) dx = a|C|^2 \sqrt{\pi} = 1$$



$$C = (a^2 \pi)^{-\frac{1}{4}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-kz^2} dz = \sqrt{\frac{\pi}{k}}$$



不確定性関係

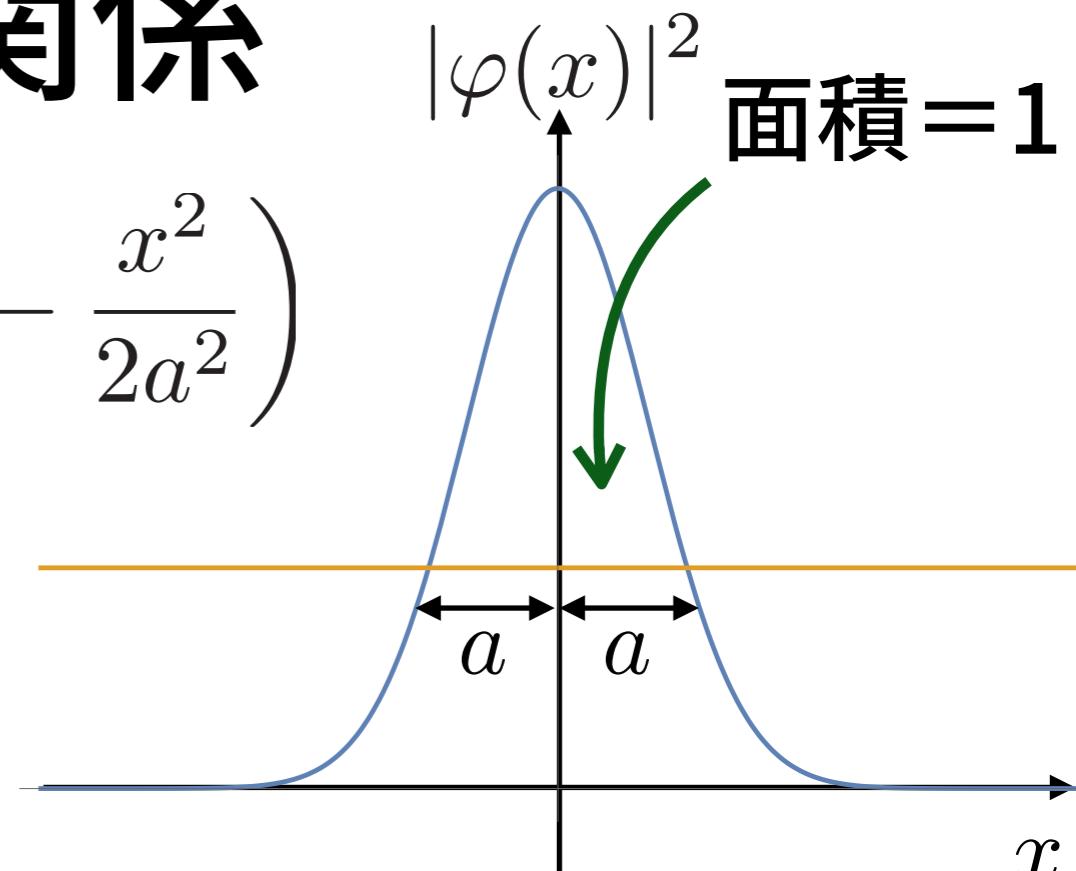
$$\psi(x, 0) = \varphi(x) = \frac{1}{(a^2\pi)^{1/4}} \exp\left(\frac{ip_0x}{\hbar} - \frac{x^2}{2a^2}\right)$$

フーリエ逆変換でpの空間に移る

$$\tilde{\varphi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}(a^2\pi)^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-i\frac{p-p_0}{\hbar}x\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right) dx$$

$$= \sqrt{\frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{a^2}{2\hbar^2}(p-p_0)^2\right)$$



不確定性関係

$$\tilde{\varphi}(p) = \sqrt{\frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{a^2}{2\hbar^2}(p - p_0)^2\right)$$

$|\tilde{\varphi}(p)|^2$ が **確率密度関数** に対応すると思えば良い

運動量の分散を Δp とする。

$$(\Delta p)^2 = \langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 \text{ 分散の公式}$$

$$\langle p^n \rangle = \frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} p^n \exp\left(-\frac{a^2}{\hbar^2}(p - p_0)^2\right) dp \quad \text{だから}$$

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{2a^2}$$

一方、波束の広がりから

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{a^2}{2}$$

$$\Delta p \cdot \Delta x = \frac{\hbar}{2}$$

(ガウス分布のときが積が最小)

いくつかの示唆

- ★ 波動関数とは何か？を考えるヒント
- ★ 規格化しておくことで、波動関数の二乗が確率密度関数と同じように扱えたことに注目
- ★ 不確定性関係は位置と運動量の分散に関する関係式と考えられる
- ★ ガウス分布型の波束は最小波束とよばれる
($\Delta p \Delta x$ が最小になるから)

補足：ガウス積分公式

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-kz^2} dz$$

$$I^2 = \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-kx^2} dx \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ky^2} dy \right) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-k(x^2+y^2)}$$

x-y平面全体で積分

$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta$ と変数変換する。

$$I^2 = \int_0^{\infty} r dr \int_0^{2\pi} d\theta e^{-kr^2}$$
$$I^2 = 2\pi \int_0^{\infty} r e^{-kr^2} dr = 2\pi \int_0^{\infty} dr^2 \frac{e^{-kr^2}}{2} = \pi \left[-\frac{1}{k} e^{-kt} \right]_{t=0}^{t=\infty} = \frac{\pi}{k}$$

よって, $\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-kz^2} dz = \sqrt{\frac{\pi}{k}}}$

不確定性関係とボーア半径

再び水素原子を考える。

クーロン力のポテンシャルは $V(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r}$

電子が陽子から r_0 までの範囲に閉じ込められているとする。

$$\Delta p \simeq \frac{\hbar}{r_0}$$

運動量の平均値を0とすると、不確定性関係と矛盾しない全エネルギーは

$$\langle E \rangle = \frac{(\Delta p)^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r_0} = \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{r_0}$$

ここから、 $\langle E \rangle$ の最小値を求めると、 $\frac{d\langle E \rangle}{dr_0} = 0$

$$r_0 = \frac{4\hbar^2\pi\varepsilon_0}{e^2m} \text{ のときに } \langle E \rangle = -\frac{me^4}{2\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)^2} \simeq -13.6\text{eV}$$

不確定性関係と調和振動子

調和振動子のエネルギーは, $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2x^2$

(バネの運動を思い出すこと)

この運動は, $x=0$ を中心とする振動であり, $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$

よって, 不確定性関係より $|x||p| \geq \frac{\hbar}{2}$

$$E \geq \frac{\hbar^2}{8m} \frac{1}{x^2} + \frac{m}{2}\omega^2x^2$$

E は $x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$ のとき最小値をとる。

$$E \geq \frac{\hbar\omega}{4} + \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\hbar\omega}{2}$$

調和振動子の最小エネルギー !

3次元空間への拡張

1次元空間での波束の扱いを， 3次元空間へ拡張する

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \tilde{\varphi}(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)} d^3 p$$

シュレディンガーエルミオノ方程式は

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t)$$

$$\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad \Delta = \vec{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

古典論との対応関係は次で与えられる。

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \vec{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}$$