量子物理学特論

第２回

基本法則を求めて

- 粒子性と波動性を併せ持つ対象の基本法則を構築する
- 力学や電磁気学などの古典物理とは全く異なる新しい指導原理が必要
  - 量子力学の基本方程式を，古典物理から演繹的に導き出すことはできない
  - ただし，マクロ極限として古典物理学の諸法則を含んでいることは必要
- 「粒子性」をどう表せば良いか？がポイント

重ね合わせの原理

- 波動の振る舞いを粒子的描像から作るのは難しい
  - 粒をたくさん集めて波のように動かしても，しょせん粒は粒。
- 波動的描像から粒子的描像を作り出す
- ドブロイ波も干渉する→重ね合わせの原理

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$$

  - ドブロイ波の方程式は線形

波束としての粒子描像

- 粒子は空間的広がりを持たない
  - 空間のある限られた領域だけに存在する波を考える
- 波束
  - 波の発生装置の出口をごく短時間だけ開いて閉じる
  - 出てくる波は限られた範囲にのみ存在
  - このような波のかたまりを波束とよぶ

$e^{i(kx-\omega t)}$ の重ね合わせで作ることができる

１次元の波束

波の重ね合わせ（様々なkの波を重ね合わせる）

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

重み

t=0のとき

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ikx} dk$$

逆フーリエ変換

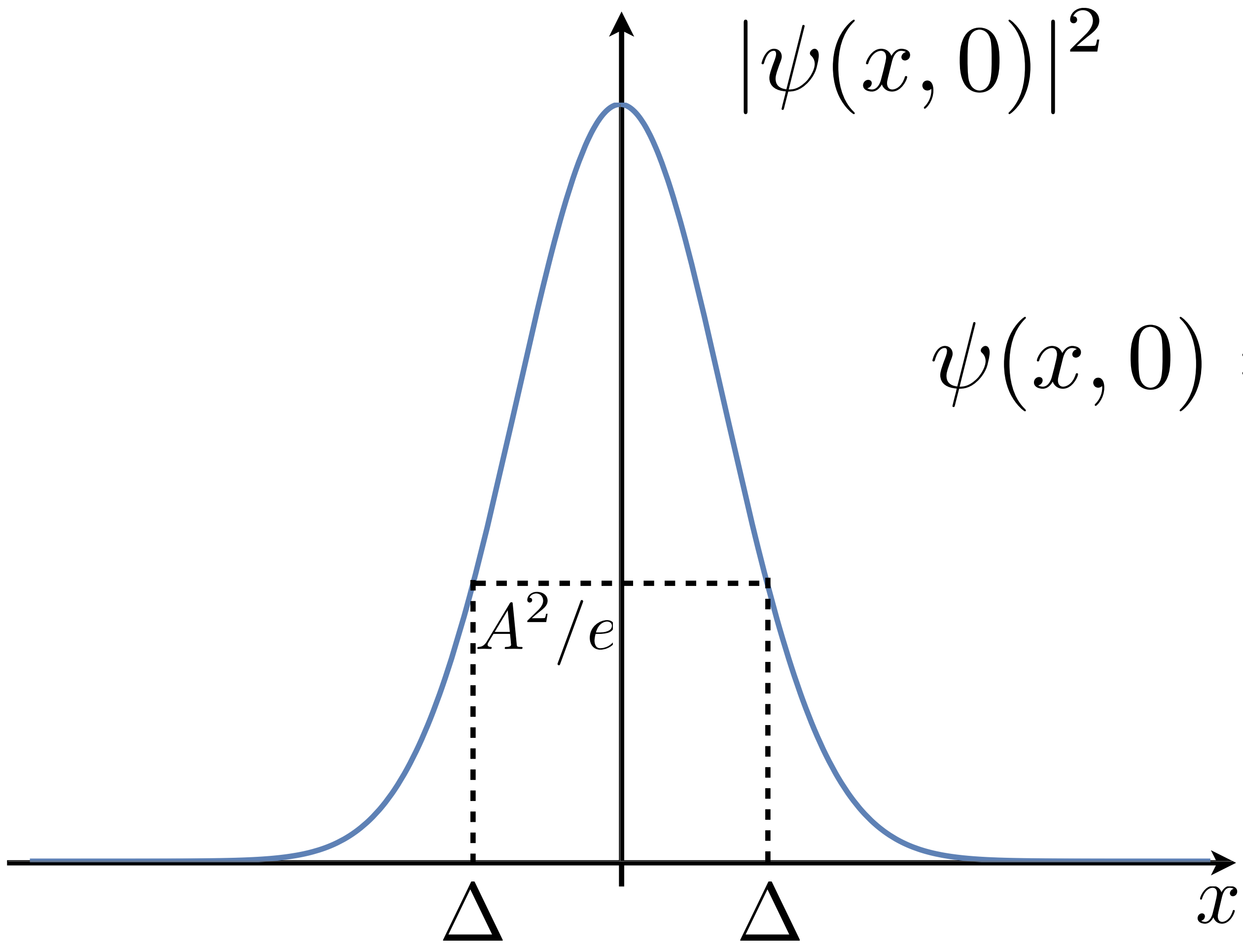
$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0) e^{-ikx} dx$$

$g(k)$がもとまる

空間のある一部分に局在する波の例として，次を考える

$$\psi(x,0) = A \exp(ik_0 x) \exp\left(-\frac{x^2}{2\Delta^2}\right)$$

１次元の波束



$$\psi(x,0) = A\exp(ik_0x)\exp\left(-\frac{x^2}{2\Delta^2}\right)$$

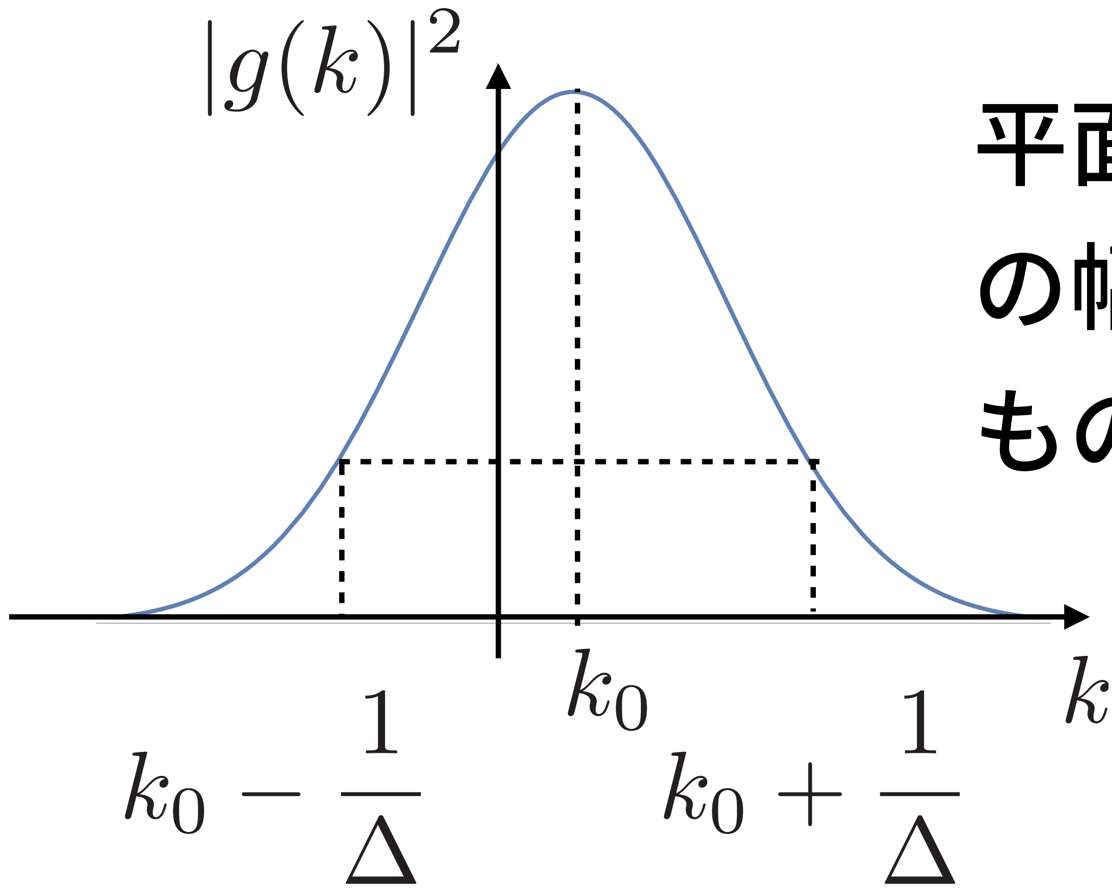
$$g(k) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}}\int \exp\left(-\frac{x^2}{2\Delta^2}\right)\exp(-i(k-k_0)x)dx$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2}dz = \sqrt{\pi}$$

$$g(k) = A\Delta\exp\left[-\frac{1}{2}(k-k_0)^2\Delta^2\right]$$

１次元の波束

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



平面波を$k=k_0$のまわりの1/Δ程度の幅で重み付けして足し合わせたもの

波の伝搬

真空中の光の場合

$$\omega = 2\pi\nu \qquad \lambda = \frac{2\pi}{k} \qquad \nu = \frac{c}{\lambda}$$

角振動数　振動数　波長　波数　速度

よって，$\omega = ck \longrightarrow e^{ikx-i\omega t} = e^{ik(x-ct)}$

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

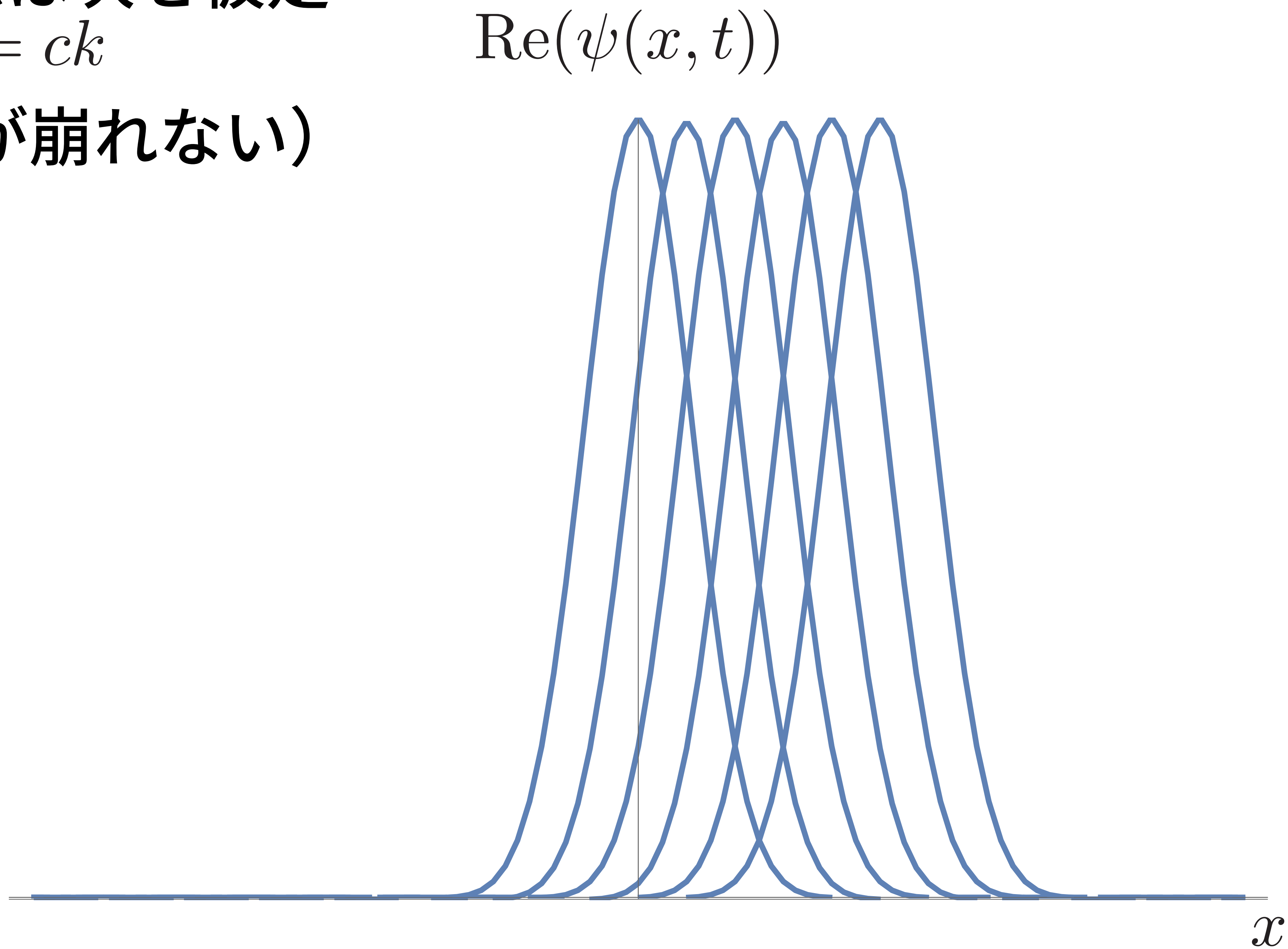
この場合，波束は形を保ったまま空間を伝搬していく

波の伝播

分散関係は次を仮定

$$\omega = ck$$

(波の形が崩れない)



波の伝搬

粒子を記述する波束の場合，ω=ckとは限らない。

一般に，ωはkの関数で表される（分散関係という）

$$\omega = \omega(k)$$

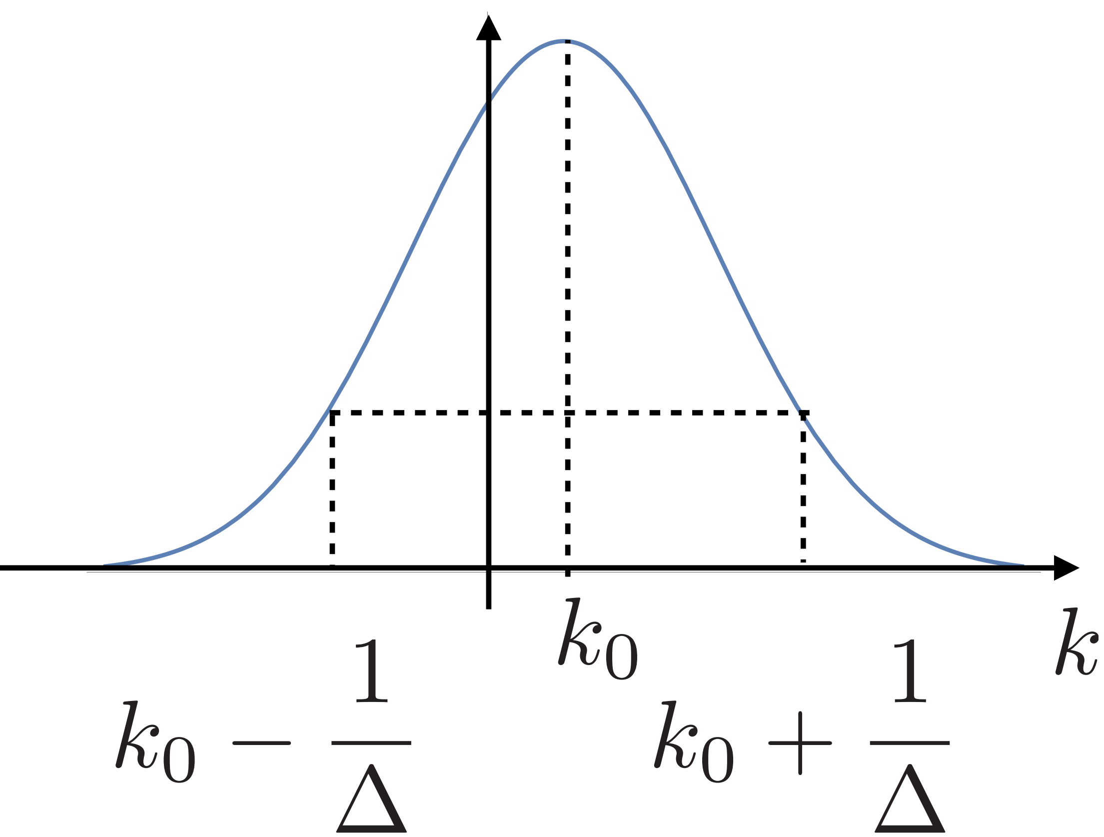
自由に運動する古典粒子に対応する波束の場合，
ω(k)はどのようになるべきか？

物質波の分散関係

ω(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。



Δが大きい

ωをテーラー展開する。

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

物質波の分散関係

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

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

$k-k_0=k'$ とすると，

$$\psi(x,t)=\frac{A\Delta}{\sqrt{2\pi}}\exp\left[i(k_0x-\omega(k_0)t)\right]$$

$$\times\int_{-\infty}^{\infty}\boxed{\exp\left[-\frac{\Delta^2}{2}k'^2\right]\exp\left[-\frac{i}{2}k'^2\left(\frac{d^2\omega}{dk^2}\right)_{k=k_0}t\right]\exp\left[ik'\left\{x-\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}t\right\}\right]}dk'$$

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

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

物質波の分散関係

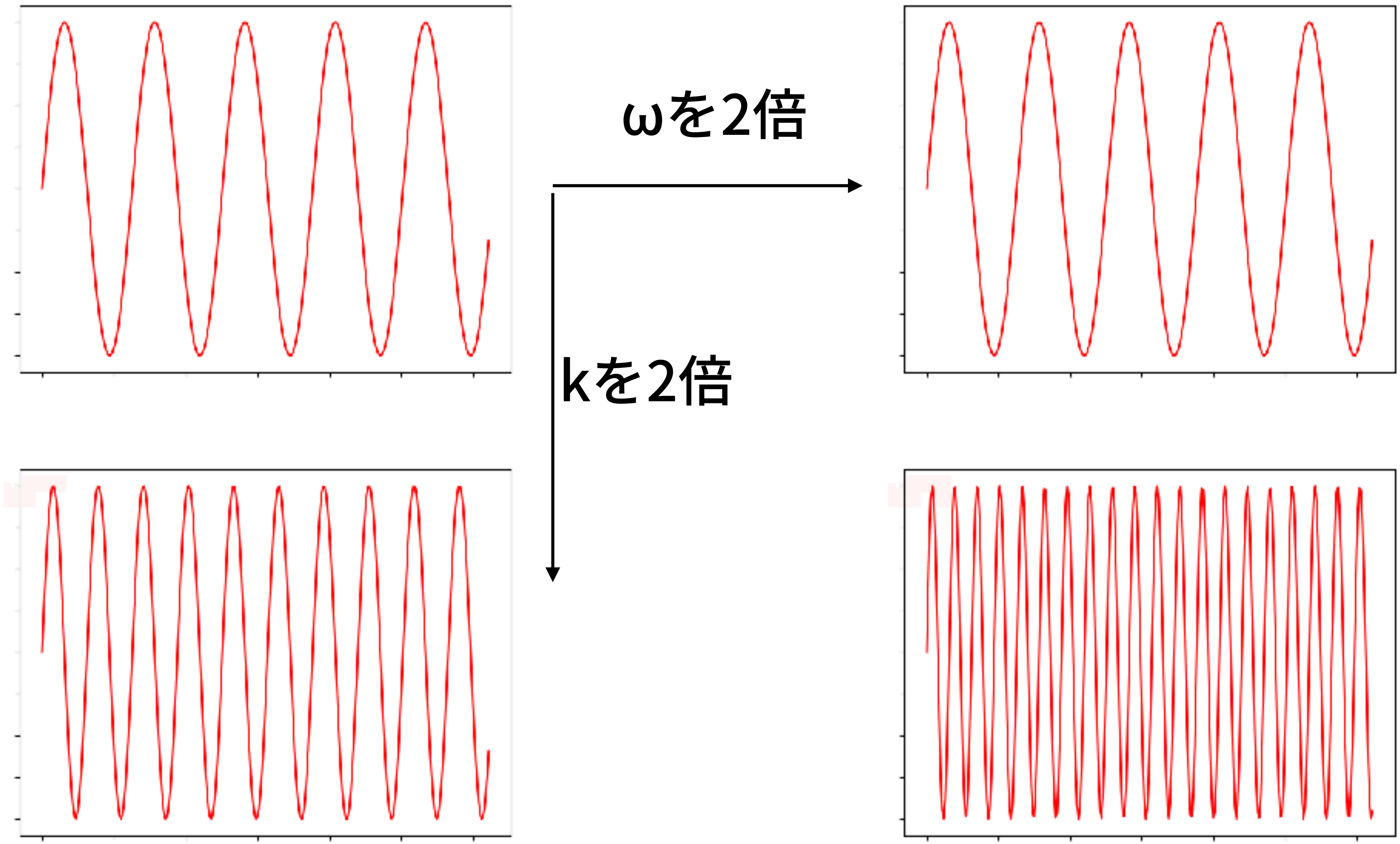
よって，$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz = \sqrt{\pi}$ より

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

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

波の速度に関する復習

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



波の速度に関する復習

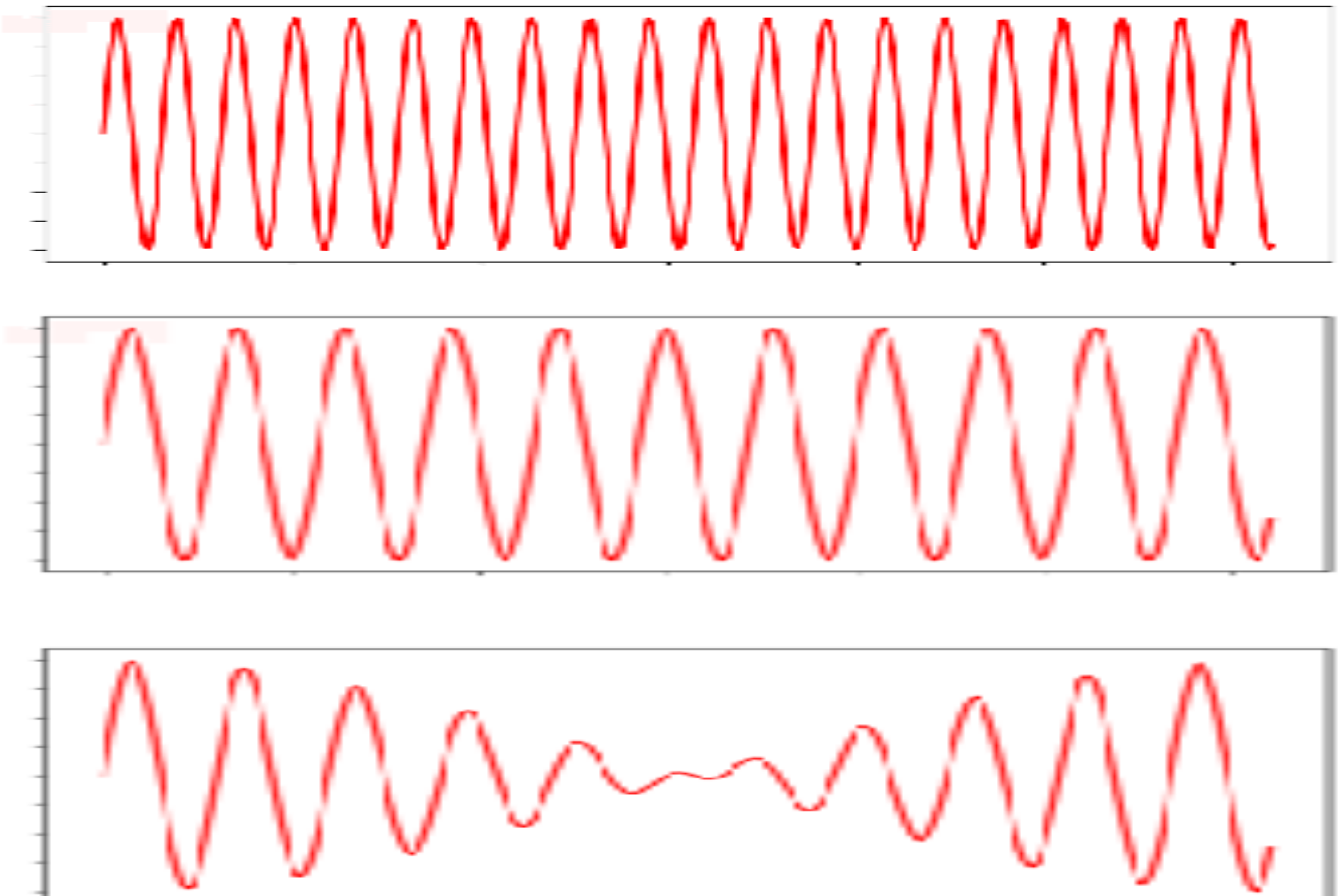
⭐ kが大きいと波がつまる

⭐ 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： $v_g=\dfrac{\Delta\omega}{\Delta k}$

物質波の速度

$$\psi(x,t) = Ae^{i(k_0x-\omega(k_0)t)}\sqrt{\frac{1}{1+\frac{2i\xi}{\Delta^2}t}}\exp\left[-\frac{(x-v_gt)^2}{2\Delta^2\left(1+\frac{2i\xi}{\Delta^2}t\right)}\right]$$

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

波束の群速度を表す

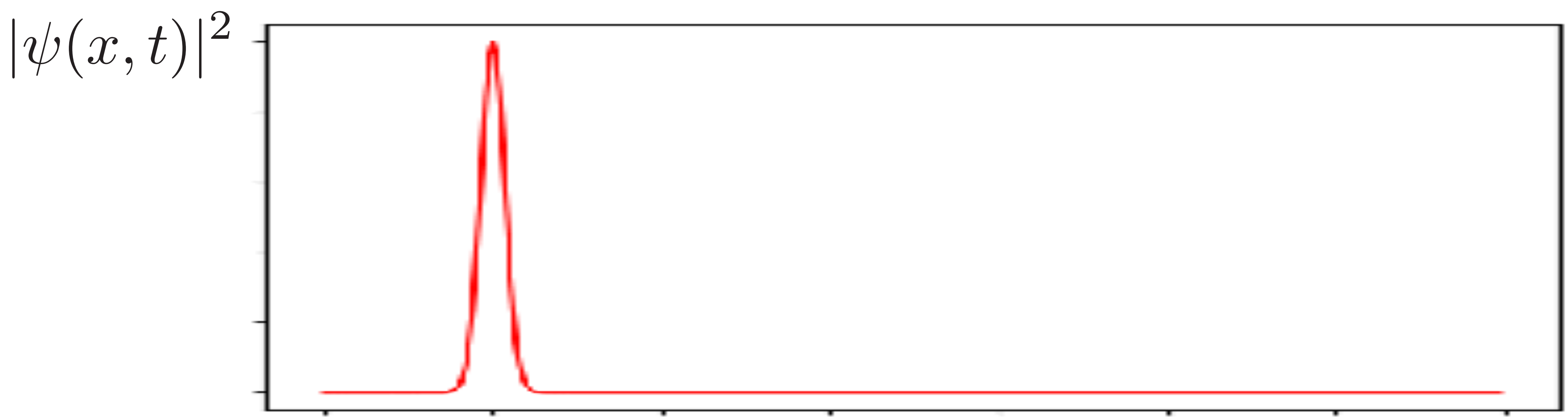
$\downarrow$

古典粒子の速度に対応

物質波の速度

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

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



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， $\boxed{\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}}$: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

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

$$\downarrow$$

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

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

$$\updownarrow$$

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

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

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

$E = \frac{p^2}{2m}$ より

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

シュレディンガー方程式

シュレディンガー方程式

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

- ☆ ψ(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　$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$　　$p \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

対応関係と交換関係

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \qquad p \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

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

$$\downarrow$$

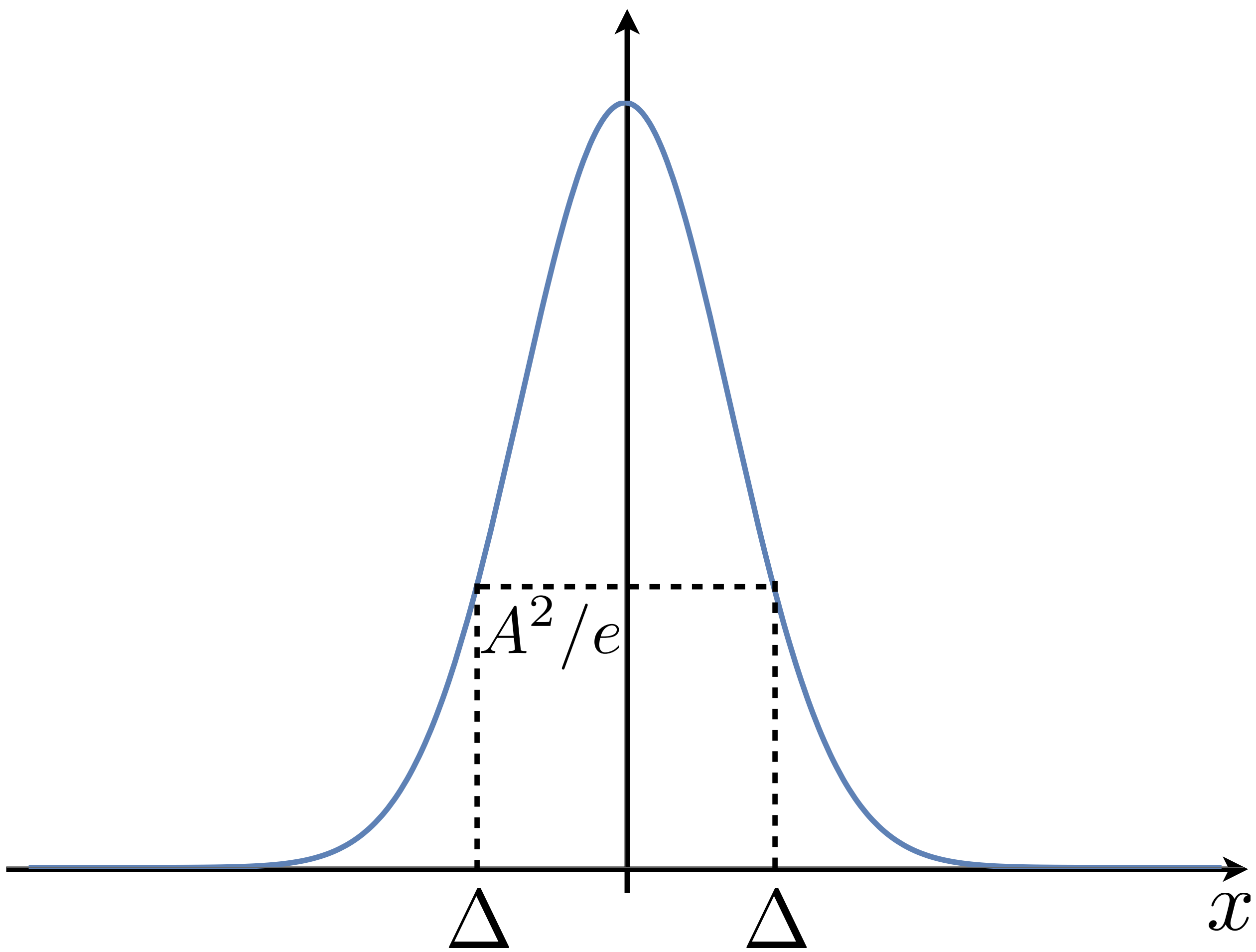
$$px\psi \to -i\hbar\psi + xp\psi$$

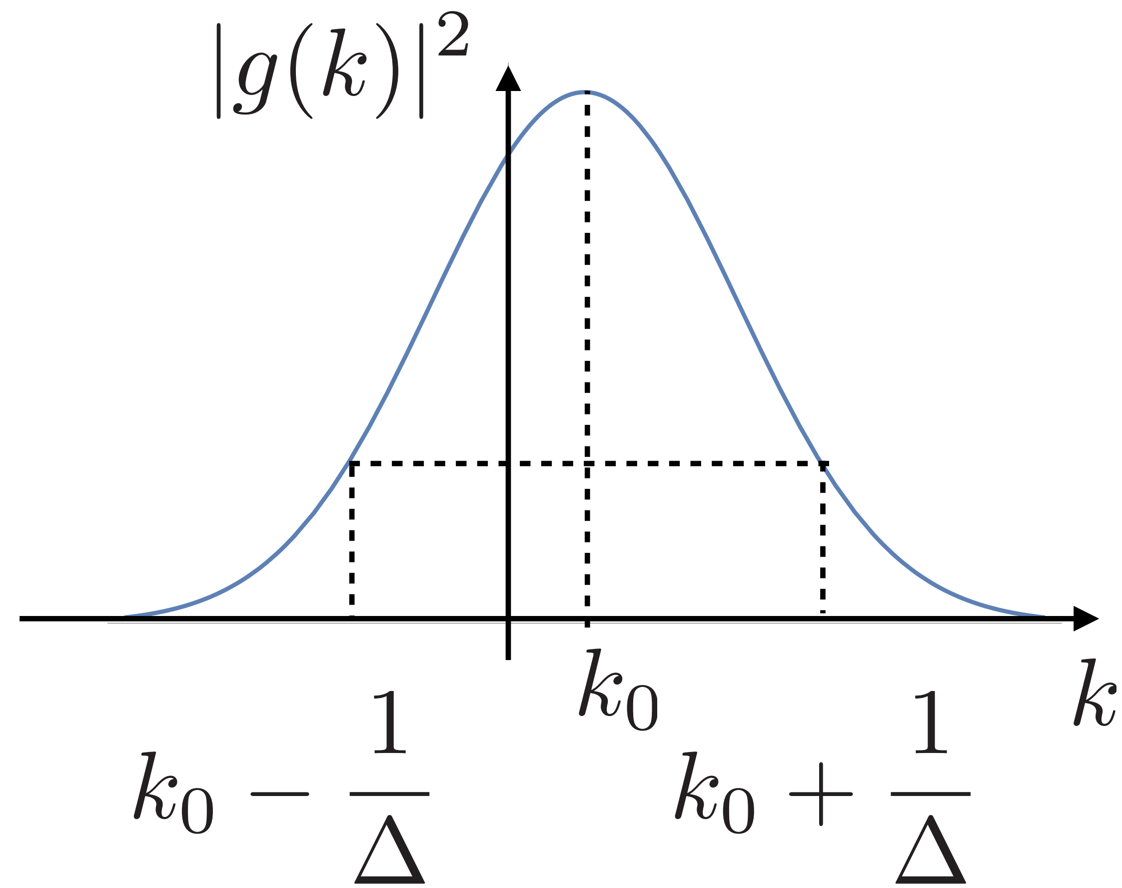
$$[x,p] \equiv xp - px = i\hbar$$

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





$$\Delta x \cdot \Delta k \simeq \Delta \cdot \frac{1}{\Delta} = 1 \xrightarrow[p = \hbar k]{} \Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar$$

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：

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

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

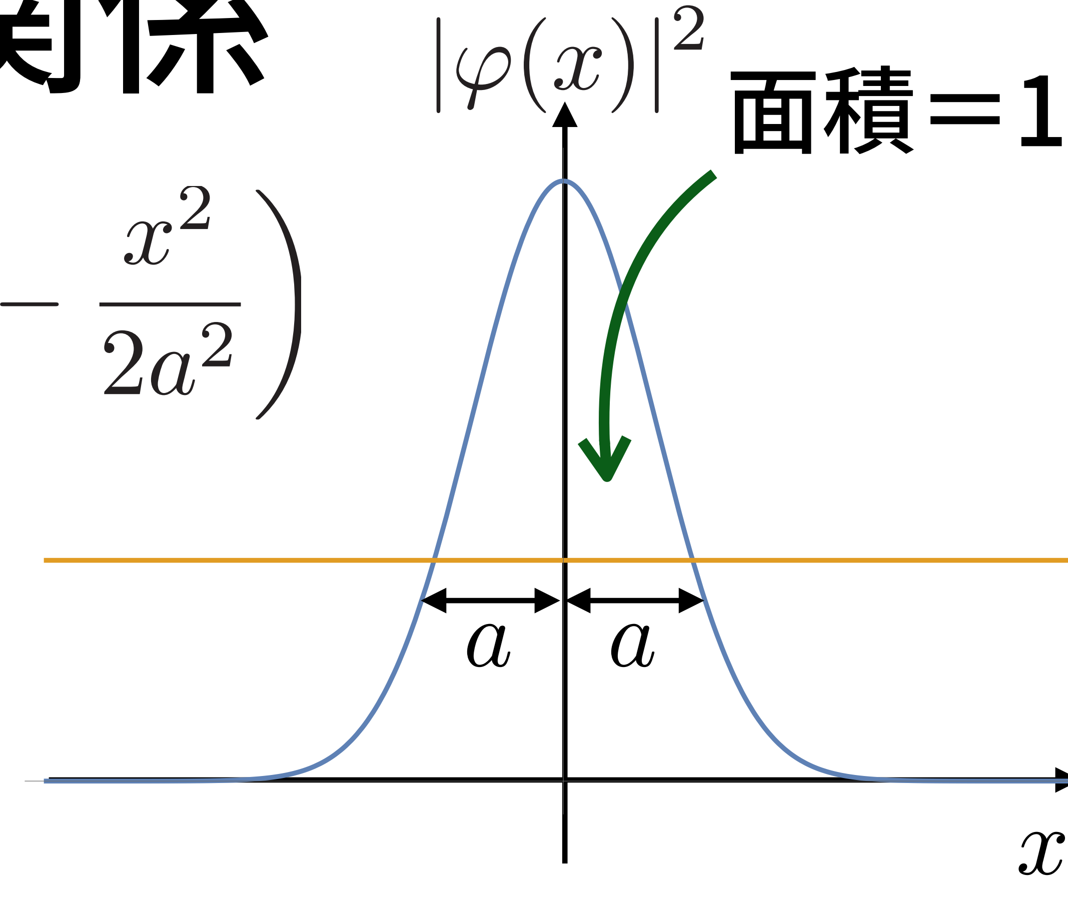
$$\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi(x)|^2dx=|C|^2\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right)dx=a|C|^2\sqrt{\pi}=1$$

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

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

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。

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

$$\langle p^n \rangle = \frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} p^n \exp\left(-\frac{a^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2\right) dp$$ 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（ΔpΔx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，<E>の最小値を求めると，$\frac{d\langle E \rangle}{dr_0} = 0$

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

不確定性関係と調和振動子

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

（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 $|x||p| \geq \frac{\hbar}{2}$

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

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

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

シュレディンガー方程式は

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

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

古典論との対応関係は次で与えられる。

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \qquad \vec{p} \to -i\hbar\vec{\nabla}$$