

時間依存のシュレディンガー方程式を満たす波動関数 $\Psi(x, t)$ とその複素共役から存在確率密度 $P \equiv \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$ を定義する。存在確率の保存則 (連続の方程式)

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial J_x}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

を満たす確率流れ密度 (probability current density) ベクトルの x 成分 J_x の式を求めよ。

(解答例) まず、ポテンシャル $U(x)$ の値は実数であるとして時間依存のシュレディンガー方程式とその複素共役を考える。

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x, t)\Psi \right], \quad (2)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + U(x, t)\Psi^* \right]. \quad (3)$$

存在確率密度 $P \equiv \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$ を時間 t で微分して、式 (2,3) とその複素共役を代入すると

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial P}{\partial t} &= \left(i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \Psi^* i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) \\ &= -\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + U(x, t)\Psi^* \right] \Psi + \Psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x, t)\Psi \right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right] \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] \end{aligned} \quad (4)$$

が得られる。式 (4) の最終式の両辺における定数 \hbar のべき乗の差に注意して、式 (1) と (4) を比較すると、確率流れ密度ベクトルの x 成分 J_x は次のように得られる。

$$\begin{aligned} J_x &\equiv \frac{i\hbar}{2m} \left[\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi - \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] = \frac{\hbar}{2mi} \left[\frac{\partial \Psi}{\partial x} \Psi^* - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right] \\ &= \operatorname{Re} \left[\Psi^* \frac{\hbar}{im} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] = \operatorname{Re} \left[\Psi^* \frac{\hat{p}_x}{m} \Psi \right], \quad (\hat{p}_x \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}). \end{aligned} \quad (5)$$

ここで、 $\operatorname{Re} Z$ は複素数 Z の実数部分 (real part)、すなわち、 $(Z + Z^*)/2$ の意味である。