

1次元系における量子力学の基礎概念

目次

- § 1 自由粒子と平面波
- § 2 デルタ関数
- § 3 無限量子井戸
- § 4 有限量子井戸
- § 5 ベクトルの内積
- § 6 関数の内積、直交性、規格性
- § 7 位置座標演算子の期待値
- § 8 運動量演算子の期待値
- § 9 ハミルトニアン期待値
- § 10 位置と運動量の不確定性関係

made by R. Okamoto (Emeritus Prof., Kyushu Institute of Technology)

Filename=quantum--basic-concept-1dim-summary20190507.ppt

§ 1 自由粒子と平面波

自由粒子: 他から力(相互作用)が働かない粒子



1次元の平面波とその表現

正弦波 $\Psi_k(x, t) = A \sin(kx - \omega t)$

余弦波 $\Psi_k(x, t) = A \cos(kx - \omega t)$

A : 振幅、

$k = 2\pi/\lambda$: 波数、

λ : 波長、

$\omega = 2\pi f$: 角振動数、

f : 振動数

複素数表現

$$\Psi_k(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} \equiv A \exp[i(kx - \omega t)]$$

オイラーの公式 $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$

平面波を規格化する二つの方法

他から力が全く働かない粒子は不自然

平面波は単純には規格化できない→波動関数の確率解釈ができない？！

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k^*(x, t) \Psi_k(x, t) dx = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \rightarrow \infty$$



波動関数を変数分離型に表す

(1) デルタ関数を用いる規格化

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k^*(x) \psi_{k'}(x) dx = \delta(k - k') \leftarrow \delta(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dx$$

$$\Psi_k(x, t) = \psi_k(x) e^{-iEt/\hbar},$$

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2\omega^2}{2m}$$

$$\rightarrow \psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

波数、エネルギーは連続的に変化する

(2) 箱型規格化(周期的境界条件)

$$\psi_k(x) = \psi_k(x + L) \rightarrow k = \left(\frac{2\pi}{L}\right)n \equiv k_n, (n = 0, 1, \dots, \infty)$$

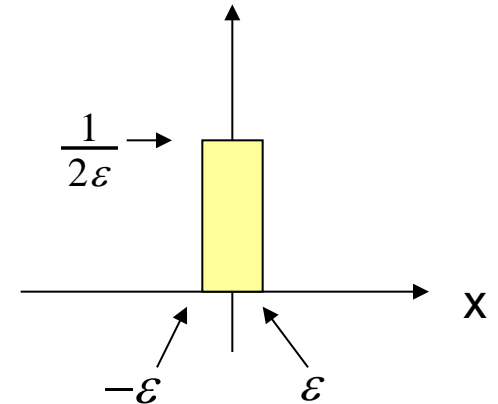
$$\rightarrow \psi_{k_n}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_n x}, E_n \equiv \left(\frac{2\pi^2\hbar^2}{mL^2}\right)n^2, (n = 0, 1, \dots, \infty)$$

波数、エネルギーは離散的に変化する

§ 2 デルタ関数

モデル関数による表現

$$\delta(x) \equiv \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \delta_\varepsilon(x), \quad \delta_\varepsilon(x) \equiv \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon} & (-\varepsilon \leq x \leq \varepsilon) \\ 0 & (|x| > \varepsilon) \end{cases}$$



ヘビーサイドの階段関数 $\theta(x)$ の広い意味の微分

$$\delta(x) = \frac{d\theta(x)}{dx} \leftarrow \theta(x) \equiv \begin{cases} 1 & (x \geq 0) \\ 0 & (x < 0) \end{cases}$$

デルタ関数 $\delta(x)$ とは、点 $x=0$ に面積1が集中した関数である。

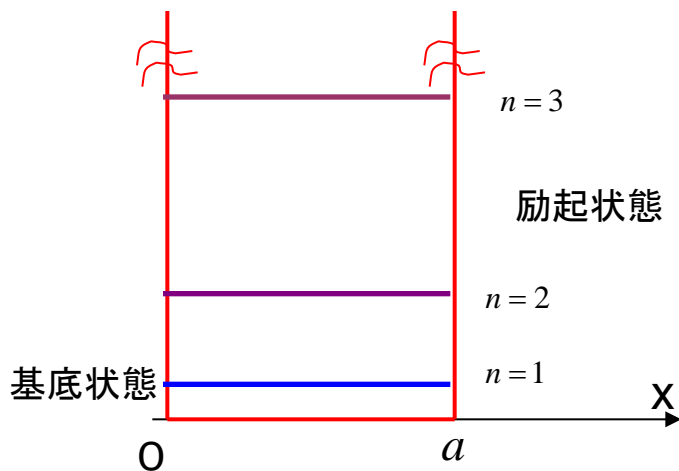
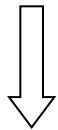
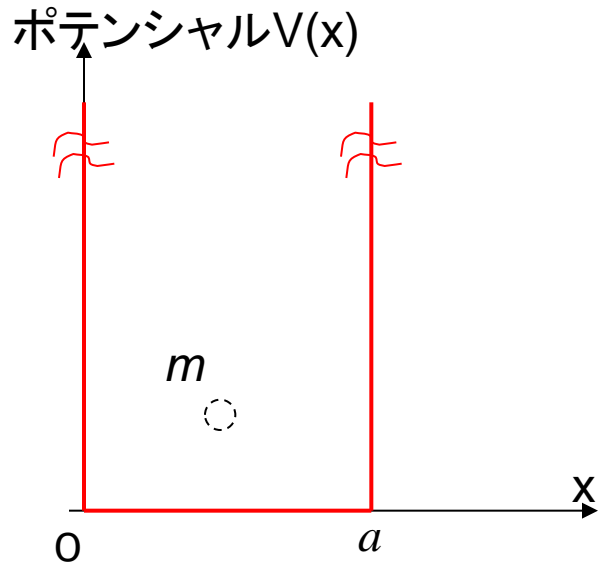
$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1, \quad \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x) dx = 1 \quad (\varepsilon : \text{任意正数})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0), \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x-a) dx = f(a)$$

デルタ関数の有用な表現

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk \quad \delta(x) = \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{\sin(ax)}{\pi x}$$

§ 3 無限量子井戸



シュレディンガー方程式

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

$$\rightarrow \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x)$$

$$= -k^2 \psi(x), \quad k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

一般解

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

(A, B: 積分定数)

特殊解

$$\psi(x) = A \sin(kx)$$

境界条件

$$\psi(0) = \psi(a) = 0$$

波数、エネルギーの
量子化

離散的エネルギー
をもつ束縛状態:
無限個!

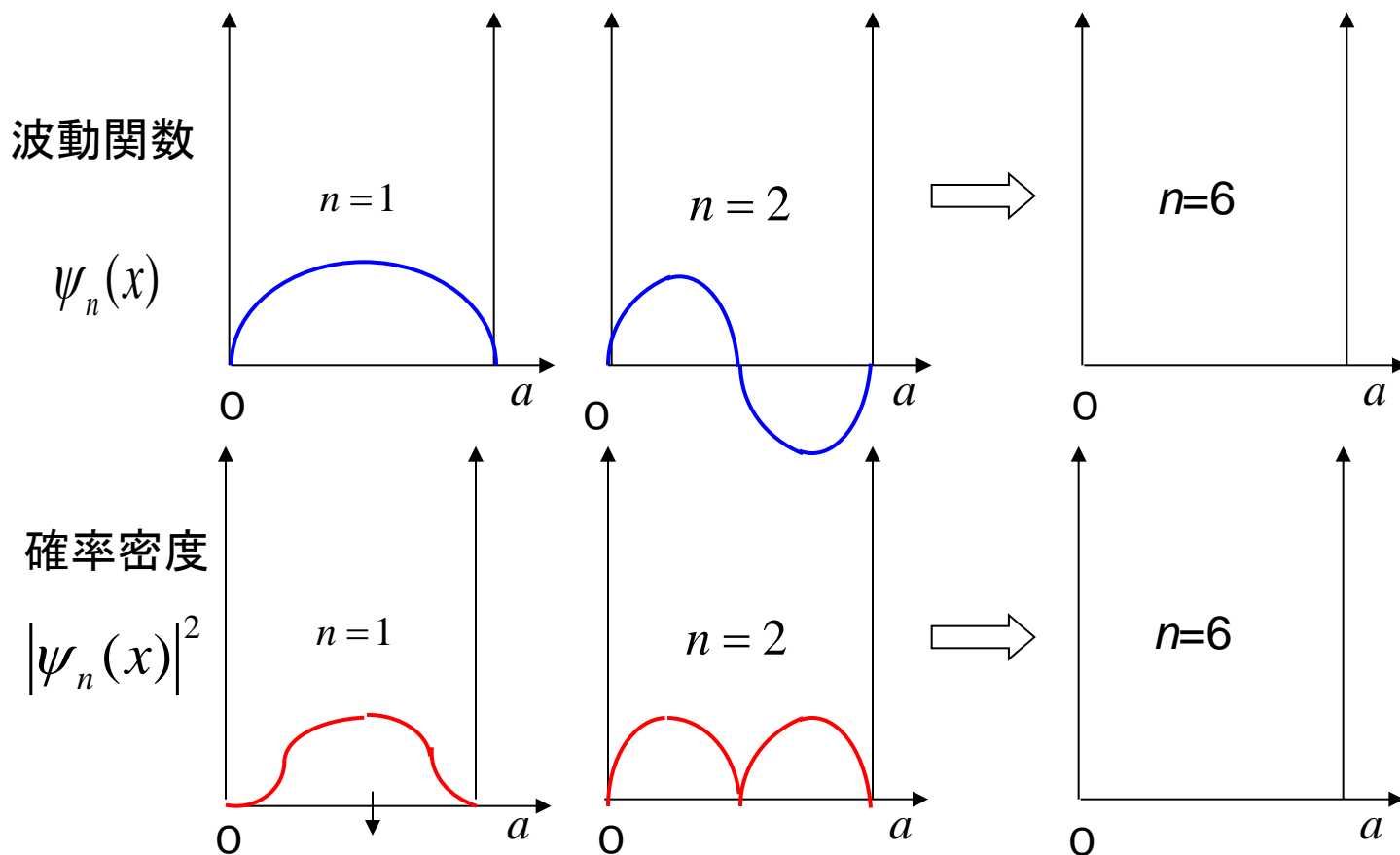
$$k = \left(\frac{\pi}{a}\right)n \equiv k_n, \quad (n = 1, 2, \dots, \infty)$$

$$E_n \equiv \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}\right)n^2.$$

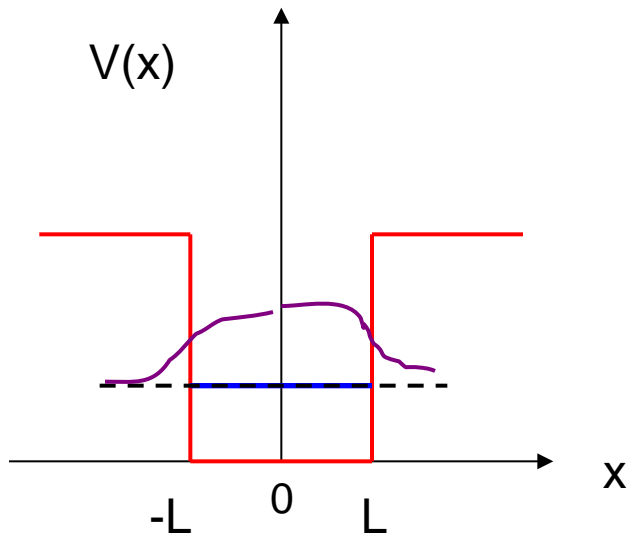
無限量子井戸：波動関数、量子論の確率、古典の確率

規格化 $\int_0^a \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx = 1 \rightarrow \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$

直交性 $\int_0^a \psi_n^*(x)\psi_{n'}(x)dx = 0 \quad (n \neq n')$



§ 4 有限量子井戸



離散的エネルギーをもつ束縛状態：
1本以上有限個

束縛状態：ポテンシャルの壁の中に
浸透する確率がある！

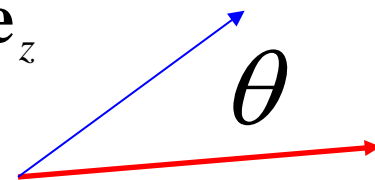
§ 5 ベクトルの内積—2つの表現—

ベクトルと成分、基本ベクトルを用いたその表現

$$\mathbf{A} \equiv \vec{A} \equiv (A_x, A_y, A_z) = A_x \mathbf{e}_x + A_y \mathbf{e}_y + A_z \mathbf{e}_z$$

$$\mathbf{B} \equiv \vec{B} \equiv (B_x, B_y, B_z) = B_x \mathbf{e}_x + B_y \mathbf{e}_y + B_z \mathbf{e}_z$$

内積(スカラー積)



$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \equiv AB \cos \theta \quad (\theta: \mathbf{A} \text{ と } \mathbf{B} \text{ のなす角度})$$

$$\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_x = 1 \cdot 1 \cdot \cos 0 = 1, \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{e}_y = \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_z = 1$$

$$\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_y = 1 \cdot 1 \cdot \cos\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0, \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{e}_x = \mathbf{e}_x \cdot \mathbf{e}_z = \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_x = \mathbf{e}_y \cdot \mathbf{e}_z = \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_y = 1$$

$$\langle \mathbf{A} | \mathbf{B} \rangle \equiv A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z$$

ベクトルの成分が複素数であるように、
2つのベクトルの内積の定義を拡張すると

$$\langle \mathbf{A} | \mathbf{B} \rangle \equiv A_x^* B_x + A_y^* B_y + A_z^* B_z,$$

$$\langle \mathbf{A} | \mathbf{B} \rangle^* = A_x B_x^* + A_y B_y^* + A_z B_z^* = B_x^* A_x + B_y^* A_y + B_z^* A_z$$

$$\rightarrow \langle \mathbf{A} | \mathbf{B} \rangle^* = \langle \mathbf{B} | \mathbf{A} \rangle$$

$$\rightarrow \langle \mathbf{A} | \mathbf{A} \rangle = |A_x|^2 + |A_y|^2 + |A_z|^2$$

§ 6 関数の内積、直交性、規格性

積分領域($x=a \rightarrow x=b$)で定義される2つの関数の次の積分を関数の内積と定義する。

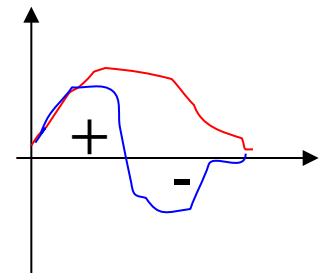
$$\text{関数 } \psi(x), \phi(x) \text{ の内積: } \int_a^b \psi^*(x) \phi(x) dx$$

上付き添え字(星印): 複素共役 (complex conjugate)

関数の規格性(正規性)

$$\int_a^b \psi^*(x) \psi(x) dx = 1 \quad \int_a^b \phi^*(x) \phi(x) dx = 1$$

関数の直交性 $\int_a^b \psi^*(x) \phi(x) dx = 0$



直交規格関数系

$$\phi_1(x), \phi_2(x), \dots, \phi_n(x) \equiv \{\phi_k(x); k = 1, 2, \dots, n\}$$

$$\int_a^b \phi_k^*(x) \phi_{k'}(x) dx = \delta_{kk'}$$

Kroneckerの δ 記号 : $\delta_{kk'} \equiv \begin{cases} 1 (k = k') \\ 0 (k \neq k') \end{cases}$

完全直交規格関数系による任意の関数の展開

$$\psi(x) = c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x) + \cdots \equiv \sum_{k=1}^n c_k\phi_k(x)$$

展開係数の求め方

$$\int \phi_1^*(x)\psi(x)dx = \int \phi_1^*(x)c_1\phi_1(x)dx = c_1 \int \phi_1^*(x)\phi_1(x)dx = c_1$$

$$\rightarrow c_k = \int \phi_k^*(x)\psi(x)dx$$

しかし、これで万々歳か？係数cを展開式に代入すれば、もとの関数と等しいはず

$$\psi(x) = \sum_{k=1}^n \left[\int \phi_k^*(x')\psi(x')dx' \right] \phi_k(x) = \int \left[\sum_{k=1}^n \phi_k^*(x')\phi_k(x) \right] \psi(x')dx'$$

⇒
$$\sum_{k=1}^n \phi_k^*(x')\phi_k(x) = \delta(x-x')$$
完全性(完備性)

完全直交規格関数系の実例

(1) フーリエ級数展開

(2) 区間 $x=0 \rightarrow x=a$ の間の無限量子井戸に閉じ込められた粒子の
波動関数(固有状態)

$$\left\{ \phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right); n = 1, 2, \dots \right\}$$

規格直交性

$$\int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n'\pi x}{a}\right) dx = \delta_{nn'}$$

完全性

$$\sum_n \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi x'}{a}\right) = \delta(x - x')$$

$$\text{sum} \equiv \sum_n \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi x'}{a}\right) \text{ の数値計算例}$$

nmax= 100000000, a=1.0の場合

x= 1.0000000000	x'= 0.9000000000	→ sum=	3.65235
x= 1.0000000000	x'= 0.9900000000	→ sum=	-33.57476
x= 1.0000000000	x'= 0.9990000000	→ sum=	-360.48495
x= 1.0000000000	x'= 0.9999000000	→ sum=	416.26826
x= 1.0000000000	x'= 0.9999900000	→ sum=	-31868.66346
x= 1.0000000000	x'= 0.9999990000	→ sum=	-50201.51458
x= 1.0000000000	x'= 0.9999999000	→ sum=	-50406.16195
x= 1.0000000000	x'= 0.9999999900	→ sum=	50407.33862
x= 1.0000000000	x'= 0.9999999990	→ sum=	98365120.67781
x= 1.0000000000	x'= 0.9999999999	→ sum=	99983882.32352

§ 7 位置座標演算子の期待値と2乗揺らぎ

例：区間 $x=0 \rightarrow x=a$ の間の無限量子井戸に閉じ込められた粒子の波動関数(固有状態)について

基底状態における座標(演算子)の期待値 基底状態における座標2乗(演算子)の期待値

$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | \hat{x} | \phi_1 \rangle &\equiv \int_0^a \phi_1^*(x) \cdot x \cdot \phi_1(x) dx \\ &= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \cdot x \cdot \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \\ &= \frac{a}{2} \quad \text{波動関数が } x=a/2 \text{ を中心とした左右対称} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | \hat{x}^2 | \phi_1 \rangle &\equiv \int_0^a \phi_1^*(x) \cdot x^2 \cdot \phi_1(x) dx \\ &= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \cdot x^2 \cdot \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \\ &= \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2\pi^2}. \end{aligned}$$

座標の2乗ゆらぎ 一実験誤差ではなく、**量子的揺らぎ**

$$\begin{aligned} (\Delta x)_1^2 &\equiv \langle \phi_1 | \left(\hat{x} - \langle \phi_1 | \hat{x} | \phi_1 \rangle \right)^2 | \phi_1 \rangle \\ &= \langle \phi_1 | \hat{x}^2 | \phi_1 \rangle - \langle \phi_1 | \hat{x} | \phi_1 \rangle^2 \\ &= \frac{a^2}{12} - \frac{a^2}{2\pi^2} \end{aligned}$$

§ 8 運動量演算子の期待値と2乗揺らぎ

例：区間 $x=0 \rightarrow x=a$ の間の無限量子井戸に閉じ込められた粒子の波動関数(固有状態)について

基底状態における運動量(演算子)の期待値

基底状態における運動量2乗の期待値

$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | \hat{p}_x | \phi_1 \rangle &\equiv \int_0^a \phi_1^*(x) \cdot \hat{p}_x \cdot \phi_1(x) dx \\ &= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \cdot \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \\ &= 0 \end{aligned}$$

波動関数が $x=a/2$ を中心とした左右対称だから、右向きと左向きが等確率で、相殺

$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | \hat{p}_x^2 | \phi_1 \rangle &\equiv \int_0^a \phi_1^*(x) \cdot \hat{p}_x^2 \cdot \phi_1(x) dx \\ &= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \cdot (-\hbar^2) \frac{d^2}{dx^2} \cdot \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \\ &= \left(\frac{\pi \hbar}{a}\right)^2 \end{aligned}$$

運動量の2乗ゆらぎ 一実験誤差ではなく、**量子的揺らぎ**

$$\begin{aligned} (\Delta p_x)_1^2 &\equiv \langle \phi_1 | (\hat{p}_x^2 - \langle \phi_1 | \hat{p}_x | \phi_1 \rangle)^2 | \phi_1 \rangle \\ &= \langle \phi_1 | \hat{p}_x^2 | \phi_1 \rangle - \langle \phi_1 | \hat{p}_x | \phi_1 \rangle^2 \\ &= \left(\frac{\pi \hbar}{a}\right)^2 \end{aligned}$$

§ 9 ハミルトニアン の期待値

例: 区間 $x=0 \rightarrow x=a$ の間の無限量子井戸に閉じ込められた粒子の波動関数(固有状態)について

基底状態におけるハミルトニアン(演算子)の期待値

$$\langle \phi_1 | \hat{H} | \phi_1 \rangle \equiv \int_0^a \phi_1^*(x) \cdot \hat{H} \phi_1(x) dx$$

ところが, シュレーディンガー方程式より

$$\hat{H} \phi_1(x) = E_1 \phi_1(x)$$

従って

$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | \hat{H} | \phi_1 \rangle &= \int_0^a \phi_1^*(x) \cdot E_1 \phi_1(x) dx \\ &= E_1 \end{aligned}$$

同様に

$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | \hat{H}^2 | \phi_1 \rangle &= \int_0^a \phi_1^*(x) \cdot (E_1)^2 \phi_1(x) dx \\ &= (E_1)^2 \end{aligned}$$

故に

$$\begin{aligned} (\Delta H)_1^2 &\equiv \langle \phi_1 | \left(\hat{H} - \langle \phi_1 | \hat{H} | \phi_1 \rangle \right)^2 | \phi_1 \rangle \\ &= \langle \phi_1 | \hat{H}^2 | \phi_1 \rangle - \langle \phi_1 | \hat{H} | \phi_1 \rangle^2 = 0 \end{aligned}$$

ハミルトニアンの固有状態において,
ハミルトニアンの量子的揺らぎはないこと

§ 10 位置と運動量の不確定性関係

例: 区間 $x=0 \rightarrow x=a$ の間の無限量子井戸に閉じ込められた粒子の波動関数(固有状態)について

$$\begin{aligned}(\Delta x)_1(\Delta p_x)_1 &= \sqrt{\left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}\right)} \cdot a \frac{\pi\hbar}{a} \\ &= \sqrt{\left(\frac{\pi^2}{3} - 2\right)} \cdot \frac{\hbar}{2} > \frac{\hbar}{2}\end{aligned}$$

$\Delta x \rightarrow 0$ にすれば, $\Delta p_x \rightarrow \infty$.
逆に, $\Delta p_x \rightarrow 0$ にすれば, $\Delta x \rightarrow \infty$

位置または運動量を別々には厳密に測定出来るが,
両方同時には厳密な測定はできないこと

波動関数の確率解釈, 運動量演算子が座標の微分であること, 不確定性関係は相互に整合的である:

量子井戸の幅 a が小さくなる(= Δx が小さくなる)と, 存在確率の保存のためには波動関数の傾きは増加する. すると, 運動量は増加する(= Δp_x は増加)

一般に, 正準交換関係

$$\left[\hat{x}, \hat{p}_x \right] = i\hbar$$

を満たせば

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (\text{理論的に導ける!})$$