

Date 26/7/16

pp. 45 ~ 54

波動関数の物理的な意味

シュレーディンガー方程式を解いてエネルギー E を求めると同時に波動関数 $\psi(x, t)$ も求める

↑これの意味は?

仮にこれが電子のエネルギーと波だとしたと、 $\psi(x, t)$ が本当に波だと、連続量 x に従って分布する連続な物理量ということになってしまい、電子は電子1個より細かく分割できないことと矛盾してしまう

↓
コペンハーゲン解釈: $|\psi|^2$ は (x, t) において粒子が見出される確率 (ボルンによる)

ところで確率という概念の定義上、考える範囲の x で粒子を見出される確率を全て足し合わせると1になる。すなわち

$$\int_{\mathbb{R}} |\psi|^2 dx = \int_{\mathbb{R}} \psi \psi^* dx = 1 \quad (\text{規格化条件})$$

を満たすことも必要になる。これも組み合わせることによって ψ の形を確定でき、 $|\psi|^2$ が確率密度そのものとなる。

物理量の期待値

演算子は物理量を、波動関数は確率を表す $\Rightarrow$ 組み合わせると期待値
物理量 A に対する期待値 $\langle A \rangle$ は、 A の演算子 $\hat{A}$ と波動関数 $\psi(x, t)$ で

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi dx$$

で与えられる

ところで量子力学において A のような物理量は確率的なので、標準偏差 ΔA を $\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$ で定義しておく、
(ΔA は統計での標準偏差を連続量として書き直したもの。)

具体例

以下のような1次元の波動関数を考える。

$$\psi(x, t) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} e^{-i\omega t} & (-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}) \\ 0 & (x < -\frac{a}{2}, x > \frac{a}{2}) \end{cases} \Rightarrow |\psi(x, t)|^2 = \begin{cases} \frac{2}{a} \cos^2 \frac{\pi x}{a} & (-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}) \\ 0 & (x < -\frac{a}{2}, x > \frac{a}{2}) \end{cases}$$

$$\text{規格化条件は } \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \frac{2}{a} \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx = 1$$

$$\langle x \rangle = \frac{2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} (1 - \sin^2 \frac{\pi x}{a}) dx = \frac{2}{a} [x]_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} - \frac{2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \sin^2 \frac{\pi x}{a} dx = \frac{2}{a} (\frac{a}{2} + \frac{a}{2}) - \frac{2}{a} \int_{-1}^1 \frac{1}{2} (1 - \cos 2\theta) d\theta$$

$$\cos \frac{\pi x}{a} = 1 \text{ だけ} \quad \frac{d}{dx} = -\sin \frac{\pi}{a} x \cdot \frac{a}{x}$$

また、位置 x の期待値は

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{x} \psi dx = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \frac{2x}{a} \cdot \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx = \int_0^{\frac{a}{2}} \frac{2x}{a} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sin^2 x} dx = 0$$

$$\text{同様に } \langle x^2 \rangle = \frac{\pi^2 - 6}{12\pi^2} a^2 \text{ なので、 } \Delta x = \sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{12\pi^2}} a$$

$$\int e^{x^2} dx \quad x^2 = t \Rightarrow \frac{dx}{dt} = \frac{1}{2x} = \frac{1}{2\sqrt{t}}$$

○不確定性原理

粒子の位置と運動量を(同時に)確定できない。

1次元の空間中の粒子に、位置の標準偏差を Δx 、運動量の標準偏差を Δp_x とすると、
 $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$ (不確定性関係) が成立する。

(例) $\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} e^{i(kx - \omega t)}$ と仮定する。

$e^{i(kx - \omega t)}$ の部分が複素平面での回転を示すので、その前の部分

$f_L(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$ が包絡線になる。

つまり $|\psi|^2 = f_L(x)^2$ であるので、

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x f_L(x)^2 dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} dx = x_0$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 f_L(x)^2 dx = x_0^2 + \frac{\sigma^2}{2}$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{x_0^2 + \frac{\sigma^2}{2} - x_0^2} = \frac{\sigma}{\sqrt{2}}$$

同様に、 $\langle p_x \rangle = \hbar k$ 、 $\langle p_x^2 \rangle = \hbar^2 k^2 + \frac{\hbar^2}{2\sigma^2} \rightarrow \Delta p_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\sigma}$

すると、 $\Delta x \Delta p_x = \frac{\sigma}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{2}\sigma} = \frac{\hbar}{2}$ 、この場合不確定性関係は等号で成立する。

$f_L(x)$ は正規分布を表す関数 $\Rightarrow$ 正規分布するような波動関数は分散の大きさに
 関わらず等号で成立する。

○交換関係と不確定性原理

演算子の交換関係

ただの四則演算と違い、演算子は計算順を任意で交換できない

A, B という演算子が AB の順のものと BA の順のものの結果の差を

$[A, B] = AB - BA$ と書き、交換関係と呼ぶ。

いま、 $[\hat{A}, \hat{B}]$ をそのまま演算子として作用させるのと同じふるまいをする新しい演算子 $i\hat{C}$ を考える。 $i\hat{C} = [\hat{A}, \hat{B}]$ 。

$\langle A \rangle$ と $\hat{A}$ 、 $\langle B \rangle$ と $\hat{B}$ の差を求めるための演算子は、

$\delta\hat{A} = \hat{A} - \langle A \rangle$ 、 $\delta\hat{B} = \hat{B} - \langle B \rangle$ で求まるが、さらにこれの交換関係は

$$[\delta\hat{A}, \delta\hat{B}] = \delta\hat{A}\delta\hat{B} - \delta\hat{B}\delta\hat{A} = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} - \langle A \rangle\langle B \rangle + \langle B \rangle\langle A \rangle$$

$$\times \langle A \rangle\langle B \rangle = \langle B \rangle\langle A \rangle = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hat{C} \quad \Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = [\delta\hat{A}, \delta\hat{B}]$$

さらに $\delta\hat{A} + i\lambda\delta\hat{B}$ (λ は実数) という演算子を考えたとき、この期待値の2乗は

$$\langle (\delta\hat{A} + i\lambda\delta\hat{B})^2 \rangle = \langle (\delta\hat{A} + i\lambda\delta\hat{B})(\delta\hat{A} - i\lambda\delta\hat{B}) \rangle = \langle \delta\hat{A}^2 + i\lambda[\delta\hat{A}, \delta\hat{B}] + \lambda^2\delta\hat{B}^2 \rangle$$

$$= (\Delta A)^2 - \lambda\langle \hat{C} \rangle + \lambda^2(\Delta B)^2$$

上記は2乗他の期待値なので、負の値をとりはならない。

$\Rightarrow \lambda$ についての2次方程式の判別式が ≤ 0 である必要がある。

$$D = \langle \hat{C} \rangle^2 - 4(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \leq 0 \quad \Rightarrow \Delta A \Delta B \geq \frac{|\langle \hat{C} \rangle|}{2}$$

不確定性関係と同等の関係が得られた

実際、 $\hat{A} = \hat{x}$ 、 $\hat{B} = \hat{p}_x$ としたとき

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = x \cdot \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) - \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)x \quad \leftarrow \text{ここ、14冊は「xを微分して」という扱いをしていいの？で「xは」上でも同じだ！}$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x]\psi = -x i\hbar \frac{d\psi}{dx} + i\hbar \frac{d}{dx}(x\psi) = -x i\hbar \frac{d\psi}{dx} + i\hbar\psi + i\hbar x \frac{d\psi}{dx} = i\hbar\psi$$

であることから、 $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$ が求められる。

逆に言えば、こうやっても不確定性関係が求められる

$\Rightarrow x$ と p_x が無条件で交換できない ($[x, p_x] \neq 0$) であることが不確定性関係の条件ともなる。