東北大天文学専攻H15年、物理問題[1]

update: 2017 July 13, author: Sho K. NAKAMURA

[1] エーレンフェストの定理

(a)

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \int\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}x\psi + \psi^* x\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)dx \tag{1}$$

シュレディンガー方程式より

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U\right)\psi \implies -i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U\right)\psi^* \tag{2}$$

を代入する。

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \int\left[-\frac{1}{i\hbar}\left\{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U\right)\psi^*\right\}x\psi + \psi^* x\frac{1}{i\hbar}\left\{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U\right)\psi\right\}\right]dx = \frac{\hbar}{2im}\int\left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}x\psi - \psi^* x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)dx \tag{3}$$

ここで第一項を部分積分する。無限遠では波動関数とその導関数は 0 であることを用いて整理すると

$$\int\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}x\psi dx = \underbrace{\left[\frac{\partial\psi^*}{\partial x}x\psi\right]_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \int\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)dx = -\underbrace{\left[\psi^*\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\right]_{-\infty}^{\infty}}_{=0} + \int\psi^*\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x\psi)dx = \int\left(2\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}+\psi^* x\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)dx \tag{4}$$

これより

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{\hbar}{im}\int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}dx \tag{5}$$

さらに両辺に時間微分を施す。

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dt^2}\langle x\rangle &= \frac{\hbar}{im}\int\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\frac{\partial\psi}{\partial x}+\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)dx \\ &= \frac{\hbar}{im}\int\left[-\frac{1}{i\hbar}\left\{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U\right)\psi^*\right\}\frac{\partial\psi}{\partial x}+\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{i\hbar}\left\{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U\right)\psi\right\}\right]dx\end{aligned} \tag{6}$$

ここでまたしても第一項の部分積分を行う。

$$\int\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\psi}{\partial x}dx = \underbrace{\left[\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right]_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \int\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}dx = -\underbrace{\left[\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right]_{-\infty}^{\infty}}_{=0} + \int\psi^*\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3}dx \tag{7}$$

よって

$$\therefore \frac{d^2}{dt^2}\langle x\rangle = \frac{1}{m}\int \psi^* \left(-\frac{\partial U}{\partial x}\right)\psi dx = -\frac{1}{m}\left\langle\frac{\partial U}{\partial x}\right\rangle \implies m\frac{d^2}{dt^2}\langle x\rangle = -\left\langle\frac{\partial U}{\partial x}\right\rangle \tag{8}$$

という、古典力学に似た式、エーレンフェストの定理を得る。

(b) 初期状態において粒子の波動関数があまり広がっておらず (すなわち、位置がほぼ定まっている)、ポテンシャルの変化がその広がりに対して十分に穏やかであれば、古典力学の質点の力学系と同等になるはずである。

[2] 不確定性関係

$$\Delta p = mv,\ \Delta x = r \tag{9}$$

と考える。そして運動方程式より

$$m\frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \implies r = \Delta x = \frac{e^2}{v\Delta p} \implies v \simeq \frac{e^2}{\hbar} \tag{10}$$

元の式に戻って

$$r = \frac{e^2}{mv^2} \simeq \frac{\hbar^2}{me^2} \tag{11}$$

これが水素原子に束縛された電子の広がりである。エネルギーは

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{r} \simeq \frac{me^4}{2\hbar^2} - \frac{me^4}{\hbar^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \tag{12}$$

[3] 時間に依存する波動関数

(a)

$$|\psi\rangle = C_a|\psi_a\rangle + C_b|\psi_b\rangle \tag{13}$$

$$\langle\psi_a|\psi\rangle = C_a\langle\psi_a|\psi_a\rangle + C_b\underbrace{\langle\psi_a|\psi_b\rangle}_{=0} = C_a \tag{14}$$

$$\langle\psi_b|\psi\rangle = C_a\underbrace{\langle\psi_b|\psi_a\rangle}_{=0} + C_b\langle\psi_b|\psi_b\rangle = C_b \tag{15}$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = |C_a|^2\langle\psi_a|\psi_a\rangle + C_a^*C_b\underbrace{\langle\psi_a|\psi_b\rangle}_{=0} + C_b^*C_a\underbrace{\langle\psi_b|\psi_a\rangle}_{=0} + |C_b|^2\langle\psi_b|\psi_b\rangle = |C_a|^2 + |C_b|^2 = 1 \tag{16}$$

(b) 系のハミルトニアンより

$$H|\psi\rangle = C_a H|\psi_a\rangle + C_b H|\psi_b\rangle = C_a(E-A)|\psi_a\rangle + C_b(-A+E)|\psi_b\rangle \tag{17}$$

一方、シュレディンガー方程式より

$$H|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial C_a}{\partial t}|\psi_a\rangle + i\hbar\frac{\partial C_b}{\partial t}|\psi_b\rangle \tag{18}$$

$|\psi_a\rangle, |\psi_b\rangle$ は直交しているので、係数は独立に求めることができる。

$$i\hbar\frac{\partial C_a}{\partial t} = (E-A)C_a \implies C_a = C_1 e^{i(E-A)t/\hbar} \tag{19}$$

$$i\hbar\frac{\partial C_b}{\partial t} = (E-A)C_b \implies C_b = C_2 e^{i(E-A)t/\hbar} \tag{20}$$

$t=0$ で $C_a=1, C_b=0$ より $C_1=1, C_2=0$。よって時刻 t に系が状態 b にある確率は 0 である。