規格化の時間依存性

June 28, 2020 4:27pm the current file is:規格化の時間依存性.tex

波動関数 $\psi(x,t)$ の規格化は時間依存性を示さないことを証明しよう。規格化の積分を $i\hbar$ を乗じて時間で微分する。

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(i\hbar\int\psi^*\psi\mathrm{d}x\right)=i\hbar\int\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)\mathrm{d}x \tag{1}$$

時間依存の schrödinger 方程式は

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi(x,t) \tag{2}$$

であり，両辺の複素共役をとってマイナス符号をつけると

$$i\hbar\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial t}=-\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi^*(x,t) \tag{3}$$

上の式に代入すると

$$\begin{aligned}
& i\hbar\int\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)\mathrm{d}x && (4)\\
= & \int\left\{-\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi^*(x,t)\right\}\psi+\psi^*\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi(x,t) && (5)\\
= & \frac{\hbar^2}{2m}\int\left[\frac{\partial^2\psi^*(x,t)}{\partial x^2}\psi-\psi^*\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}\right]\mathrm{d}x && (6)
\end{aligned}$$

最初の項に対して部分積分を 2 回行うと，

$$\begin{aligned}
(fg)' &= f'g+fg', \quad \int f'g\mathrm{d}x=fg-\int fg'\mathrm{d}x && (7)\\
\int\frac{\partial^2\psi^*(x,t)}{\partial x^2}\psi\mathrm{d}x &= \underbrace{\left[\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial x}\psi\right]}_{=0}-\int\frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial x}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x && (8)\\
&= -\underbrace{\left[\psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\right]}_{=0}+\int\psi^*(x,t)\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}\mathrm{d}x && (9)
\end{aligned}$$

となり，後の項と消し合って

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(i\hbar\int\psi^*\psi\mathrm{d}x\right)=0 \tag{10}$$

となる。これは規格化条件は時間によらず常に成立することを意味する。

上の導入では，$x=\pm\infty$ で波動関数およびその微分がゼロであることを用いた。境界条件が，必ずしもそうでない場合がある。その場合，確率流密度 (probability current density) $J(x,t)$ を以下のように定義すると便利なことがある。

$$J(x,t)\equiv\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,t)-\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\right) \tag{11}$$

同じく確率密度 $\rho(x,t)$ を

$$\rho(x,t) = \psi^*(x,t)\psi(x,t) \tag{12}$$

とおくと，いわゆる連続の式が成立する。

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} J(x,t) = 0 \tag{13}$$

第 2 項を計算すると，

$$\begin{aligned}
\frac{\partial J(x,t)}{\partial x} &= \frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x}\frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial x} + \psi(x,t)\frac{\partial^2 \psi^*(x,t)}{\partial x^2}\right. && (14)\\
&\quad \left. - \frac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial x}\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} - \psi^*(x,t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)\right) && (15)\\
&= \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi(x,t)\frac{\partial^2 \psi^*(x,t)}{\partial x^2} - \psi^*(x,t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)\right) && (16)
\end{aligned}$$

この式に $i\hbar$ を乗じて移行すると，(6) 式となり連続の式が成立する。

確率流密度 (probability current density) $J(x,t)$ は，19 章で用いる。