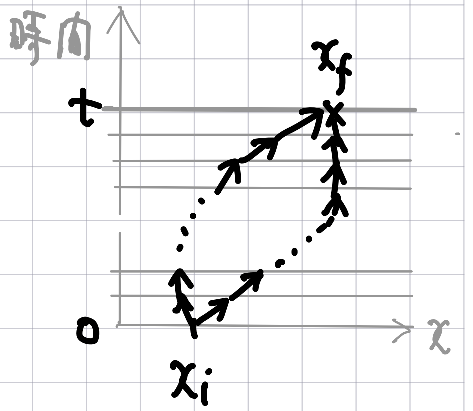
例2.23 (経路積分)

'21 10/25

- $|x_i\rangle \underset{t=0}{} \xrightarrow{\text{時間発展}} |x_f\rangle \underset{\text{時刻}t}{}$ となる確率 Z を求めたい。



$$Z = \langle x_f| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H t} |x_i\rangle$$

$\|$ $\Delta t = \frac{t}{N}$ (N等分) とする

$$\langle x_f| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H\Delta t} \underset{\uparrow\, x_{N-1}}{\cdot} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H\Delta t} \underset{\uparrow\, x_{N-2}\cdots}{\cdot} \cdots \underset{\uparrow\, x_1}{\cdot} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H\Delta t} |x_i\rangle$$

x_{N-1}　$x_{N-2}\cdots x_1$ の完全系

$\|$

$$\int dx_1\cdots dx_{N-1}\ \langle x_f| \underset{\uparrow\, p_{N-1}}{} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H\Delta t}|x_{N-1}\rangle\langle x_{N-1}| \underset{\uparrow\, p_{N-2}}{} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H\Delta t}|x_{N-2}\rangle\cdots\langle x_1| \underset{\uparrow\, p_0}{} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H\Delta t}|x_i\rangle$$

p_{N-1}　p_{N-2}　$\cdots$　p_0 の完全系

$\|$

$$\int dx_1\cdots dx_{N-1}dp_0\cdots dp_{N-1}\ \underbrace{\langle x_f|p_{N-1}\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}p_{N-1}x_f}}\underbrace{\langle p_{N-1}|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H\Delta t}|x_{N-1}\rangle}_{\langle p_{N-1}|x_{N-1}\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}H(x_{N-1},p_{N-1})\Delta t}}\underbrace{\langle x_{N-1}|p_{N-2}\rangle}\underbrace{\langle p_{N-2}|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H\Delta t}}\cdots$$

$$\cdots|x_1\rangle\underbrace{\langle x_1|p_0\rangle}\underbrace{\langle p_0|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H\Delta t}|x_i\rangle}$$

$$\underbrace{\langle p_{N-1}|x_{N-1}\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}p_{N-1}x_{N-1}}}$$

$$\overbrace{H(x,p)}^{\langle p|x\rangle} = \langle \overset{p}{p}|\hat H(\hat{\overset{x}{x}},\hat p)|x\rangle$$

宿題1
N=3として
この式まで
導け

$\|$

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^N}\int dx_1\cdots dx_{N-1}dp_0\cdots dp_{N-1}\ e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=0}^{N-1}\left\{p_j(x_{j+1}-x_j)-H(x_j,p_j)\Delta t\right\}} \quad \begin{pmatrix} x_0 := x_i \\ x_N := x_f\end{pmatrix}$$

$\downarrow N\to\infty$

$L(x,\dot x)$: ラグランジアン!　　$S := \int_0^t L\,dt$ (作用積分)

$$\int \mathcal{D}x\mathcal{D}p\ e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t \overbrace{(p\dot x - H(x,p))}^{L(x,\dot x)}dt} = \underbrace{\int \mathcal{D}x\mathcal{D}p}\ e^{\frac{i}{\hbar}S}$$

dot = 時間微分

「経路積分」
$\|$
すべての経路についての和

§3 シュレーディンガー方程式の解法

3.1 一般的事項

Sch. eq. $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \underbrace{\hat{H}(\hat{x},\hat{p})}_{\frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{x})}|\psi(t)\rangle$

$\frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \underbrace{V(\hat{x})}_{\text{ポテンシャル}}$: エルミートとする

左から $\langle x|$ をかける

$\psi(x,t) := \langle x|\psi(t)\rangle$

x 表示での Sch. eq. $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H\left(x, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t)$

$$= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \underbrace{V(x)}_{\mathbb{R}\text{値}}\right)\psi(x,t) \quad \cdots (*)$$

変数分離を考える:

$\psi(x,t) = f(t)\varphi(x)$

※物理で登場する関数は、断りがなければすべて C^∞ 級

$(*) \Rightarrow \underbrace{\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{df(t)}{dt}}_{t\text{のみ}} = \underbrace{\frac{H\varphi(x)}{\varphi(x)}}_{x\text{のみ}} = E$ (定数)

$$\therefore \begin{cases} f(t) = a e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\varphi(x) = \underset{\mathbb{R}}{E}\,\varphi(x) \end{cases}$$

$E \in \mathbb{R}$ ← この固有値問題を解きたい

このとき $|\psi(x,t)|^2 = |a|^2|\varphi(x)|^2$: 時間変化しない (定常状態)

<u>定義3.1</u> $\varphi(x)$ が2乗可積分のとき、システムは束縛状態であるという。

〃 そうではない 〃 散乱状態 〃

k: 波数
ω: 角振動数

定義3.2 $\psi(x,t) = Ae^{i(kx\mp\omega t)}$ を平面波解という

例3.3 $V = V_0$ (定数) の場合

宿題2 $f(x-vt)$ の形の関数は、x の正の向きに速さ v で進む「波」を表すことを説明せよ

x微分

$$\varphi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\varphi = 0$$

(i) $E > V_0$ のとき $\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ $\quad k := \dfrac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$ … ①

(ii) $E < V_0$ のとき $\varphi(x) = Ce^{\rho x} + De^{-\rho x}$ $\quad \rho := \dfrac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$ … ②

※ (i) は $f(t)$ と合わせれば平面波

$\because$ $E = \hbar\omega$ として $\psi(x,t) = \underbrace{A'e^{i(kx-\omega t)}}_{x\text{の正方向}} + \underbrace{B'e^{-i(kx+\omega t)}}_{\text{負方向に進む波}}$

また、$p := \hbar k$ として、$V_0 = 0$ とすると、$p \overset{①}{=} \sqrt{2mE} \Leftrightarrow E = \dfrac{p^2}{2m}$

自由粒子の運動エネルギー

命題3.4 $\varphi(x)$: 有界とする。

ポテンシャル $V(x)$ が $x = a$ で不連続かつその近傍で有界のとき

$\varphi(x)$ および $\varphi'(x)$ は $x = a$ で連続

$\because$
$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \frac{d^2\varphi}{dt^2}dx = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}(E-V(x))\varphi(x)dx$$

$$\therefore \left|\frac{d\varphi}{dt}(x=a+\varepsilon) - \frac{d\varphi}{dt}(x=a-\varepsilon)\right| \leqslant \frac{2m}{\hbar^2}\sup_{x\in(a-\varepsilon,a+\varepsilon)}\left(|E-V_0||\varphi(x)|\right)\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}dx$$

$$= 2\varepsilon \times (\text{有限}) \xrightarrow{\varepsilon\to 0} 0$$

同様に $|\varphi(a+\varepsilon) - \varphi(a-\varepsilon)| \leqslant 2\varepsilon \sup|\varphi'(x)| \xrightarrow{\,''\,} 0$ ■

命題3.5　1次元システムの束縛状態$\varphi(x)$の零点が高々有限個であり、かつ
$|\varphi'(x)| \xrightarrow{x \to \pm\infty} 0$ とする。このとき

縮退がある $\overset{\text{def}}{\Leftrightarrow}$ 同一固有値をもつ固有関数が2つ以上ある。

(i) エネルギー固有値Eに関して縮退がない

(ii) $V(x) = V(-x)$ 偶 $\Rightarrow$ $\varphi(-x) = \pm\varphi(x)$ 偶か奇

(iii) $\varphi(x)$は実関数にとれる。

☺ レポート