量子力学の定式化 II

Schrödinger 方程式

量子力学における物理量

状態関数：$\psi(q)=\sum_j c_j e^{iS_j/\hbar}=\sum_j c_j e^{ip_j q/\hbar}$

☆ 1つの項 $\psi(q)=e^{ipq/\hbar}$ をとれば，

$$\left(\frac{\partial}{\partial q}\right)\psi=\frac{\partial\left(e^{ipq/\hbar}\right)}{\partial q}=e^{ipq/\hbar}\frac{ip}{\hbar}=\left(\frac{i}{\hbar}p\right)\psi$$

⇨ 演算子として $\boxed{\hat{p}=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial q}\quad\text{：物理量の量子化}}$

運動量 p は次式で与えられる.

$$\hat{p}\psi=p\psi$$

☆ q, pとは別の物理量で作用量を構成する組合せ

$S=A\cdot B$ （A, B は共役な物理量）

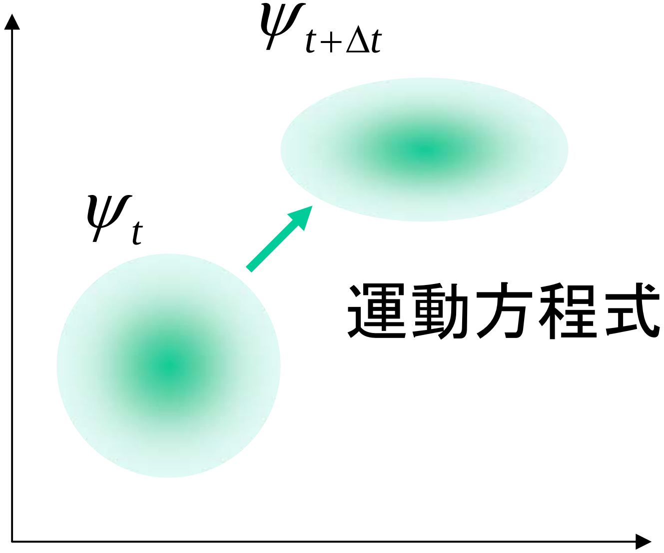
$$\Rightarrow\quad \hat{B}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial A}$$

量子力学における運動方程式

（解析力学）

運動 ＝ 位相空間(q, p)において

$t \to t + \Delta t$ の状態の変換



Hamilton-Jacobiの運動方程式

$$H\left(q_j, \frac{\partial S}{\partial q_j}\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

$$\frac{\partial^2}{\partial q^2}\psi = \frac{\partial}{\partial q}\left(\frac{\partial \psi}{\partial q}\right) = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial}{\partial q}\left(\psi \frac{\partial S}{\partial q}\right) = -\frac{\psi}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2 + \frac{i\psi}{\hbar}\frac{\partial^2 S}{\partial q^2} = -\frac{\psi}{\hbar^2}\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2$$

$$\Rightarrow \quad \left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{\psi}\frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} = \frac{1}{\psi}\hat{p}^2\psi$$

また，

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{\psi}\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{\psi}\hat{E}\psi$$

Hamilton-Jacobiの運動方程式

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) = -\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2 - U(q)$$

に代入

$$\frac{1}{\psi}\hat{E}\psi = \frac{1}{\psi}\frac{\hat{p}^2}{2m}\psi + U(q) \longrightarrow \hat{E}\psi = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi + U(q)\psi$$

$\Rightarrow$ 量子力学における運動方程式＝Schrödinger方程式

$$\boxed{\hat{H}\psi = \hat{E}\psi}$$

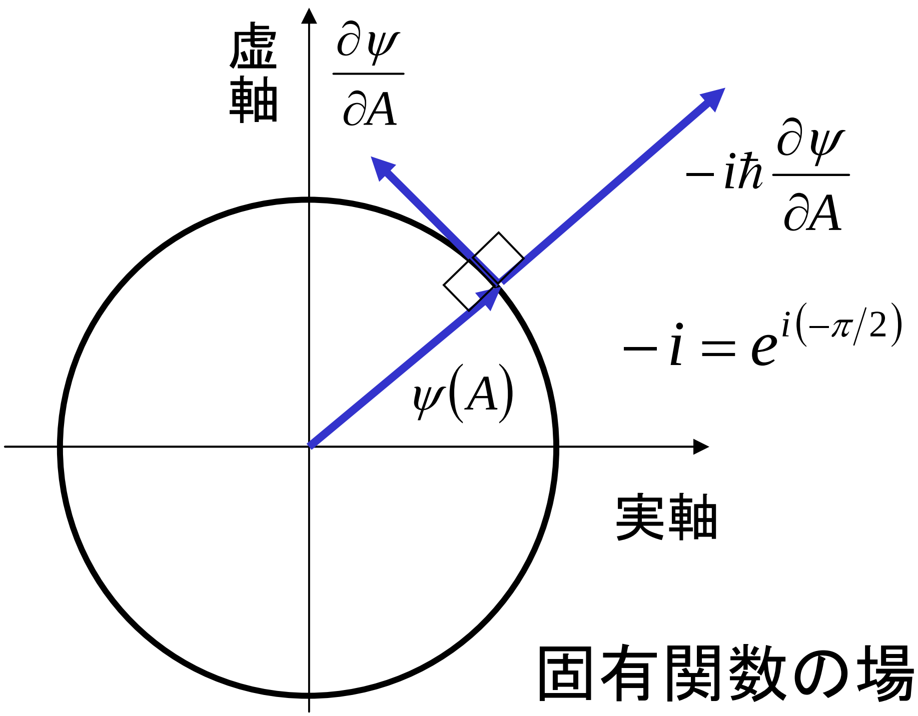
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(q)$$

ある状態で物理量一定

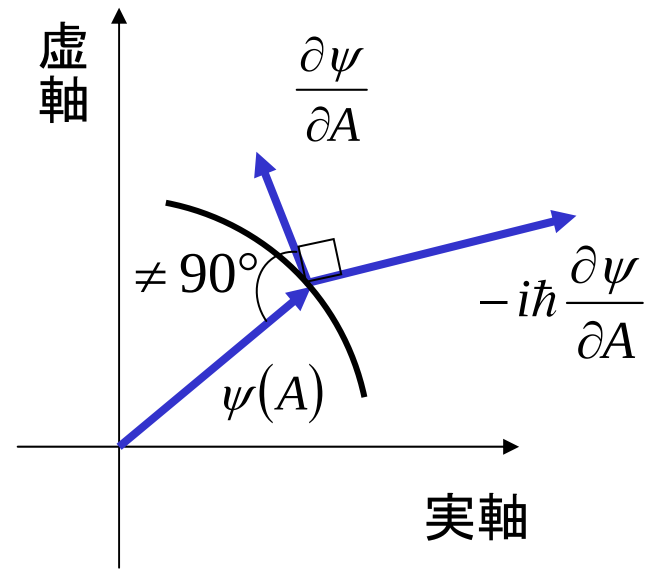
⇨ その物理量の値 ＝ 固有値（実数）
その状態 ＝ 固有関数

共役な物理量 A, B

$$\hat{B}\psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial A}\psi = B\psi$$



固有関数の場合



固有関数でない場合

定式化の過程

ハイゼンベルグの不確定性原理　　$\Delta p \cdot \Delta q \geq \hbar$

⇒　状態関数 ＝ 作用を指数とする複素関数の重ね合せ

$$\psi(q) = \sum_j c_j e^{iS_j/\hbar} = \sum_j c_j e^{ip_j \cdot q/\hbar}$$

⇒　量子力学における物理量 ＝ 演算子　　$\hat{p} = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial q}$

= “**qー数**”　quantum number

(⇔　古典力学における物理量＝“**cー数**” classical number)

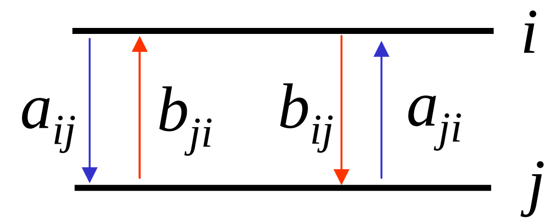
量子力学における運動方程式 ＝ Schrödinger方程式

$$\hat{H}\psi = \hat{E}\psi$$

[Heisenberg の量子条件]

行列:　$\mathbf{A}, \mathbf{B}$ ⇒ $\mathbf{A}\cdot\mathbf{B}-\mathbf{B}\cdot\mathbf{A}=i\hbar\mathbf{I}$

$$a_{ij}b_{ji}-b_{ij}a_{ji}=i\hbar$$



$\mathbf{A}, \mathbf{B}$ は交換不可能（非可換）

[Dirac の括弧式]

$$\left[\hat{A},\ \hat{B}\right]=\hat{A}\,\hat{B}-\hat{B}\,\hat{A}$$

$$\left[\hat{A},\ \hat{B}\right]f\left(A\right)=-Ai\hbar\frac{\partial}{\partial A}f\left(A\right)-\left\{-i\hbar\frac{\partial}{\partial A}Af\left(A\right)\right\}=i\hbar f\left(A\right)$$

$$\left[\hat{A},\ \hat{B}\right]=i\hbar$$

一次元のシュレーディンガー方程式

エネルギーの固有関数

$$\hat{H}\psi = \hat{E}\psi = E\psi$$

$$\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + U(x)\right]\psi(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + U(x)\right]\psi(x) = E\psi(x)$$

調和振動子型ポテンシャル

調和振動子の固有値問題：　電磁モード，格子振動の量子的取扱い，
RLCタンク回路，量子光学，ゆらぎ理論，雑音

調和振動子型ポテンシャル

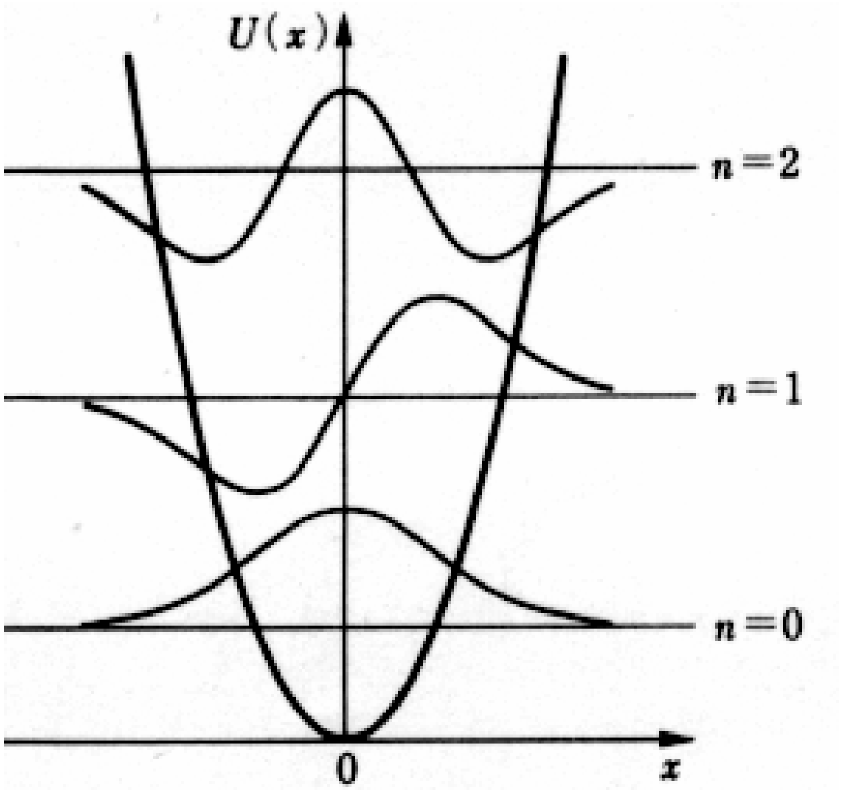
$$U(x)=\frac{1}{2}Cx^2=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

１次元シュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}-a^2\xi^2\psi=-\frac{2E}{m\omega^2}\psi$$

$$\psi=\psi(\xi),\quad \xi=\frac{x}{a},\quad a=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$



大きなξ:　$\dfrac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx a^2\xi^2\psi \longrightarrow \psi(\xi) \propto e^{-\xi^2/2}$

全ての ξ:　$\psi(\xi) = u(\xi)e^{-\xi^2/2}$

シュレーディンガー方程式に代入

$$u'' - 2\xi u' + (\varepsilon - 1)u = 0, \quad \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

最低準位:　$u(\xi) = c_0 \longrightarrow \varepsilon = 1$　　第2準位:　$u(\xi) = c_1\xi \longrightarrow \varepsilon = 3$

第3準位:　$u(\xi) = c_0 + c_2\xi^2 \longrightarrow 2c_2 + (\varepsilon - 1)c_0 + (\varepsilon - 5)c_2\xi^2 = 0$

$\longrightarrow \varepsilon = 5, \quad c_2 = 2c_0$

第4準位:　$u(\xi) = c_1\xi + c_3\xi^3 \longrightarrow \{6c_3 - c_1(\varepsilon - 1)\}\xi + (\varepsilon - 7)\xi^3 = 0$

$\longrightarrow \varepsilon = 7, \quad c_3 = c_1$

第4準位:　$u(\xi) = c_0 + c_2\xi^2 + c_4\xi^4$

$\longrightarrow 2c_2 + (\varepsilon - 1)c_0 + \{12c_4 + (\varepsilon - 5)c_2\}\xi^2 + (\varepsilon - 9)c_2\xi^2 = 0$

$\longrightarrow \varepsilon = 9, \quad c_4 = (4/3)c_0, \quad c_2 = 4c_0$

一般に,　$$u(\xi)=c_0+c_1\xi+c_2\xi^2+\cdots+c_n\xi^n+\cdots$$

$\longrightarrow$

$$2c_2+(\varepsilon-1)c_0+[6c_3-(\varepsilon-3)c_1]\xi+\cdots+[(n+1)(n+2)c_{n+2}-(2n+1-\varepsilon)c_n]\xi^n+\cdots=0$$

$\longrightarrow$

$$c_{n+2}=\frac{2n+1-\varepsilon}{(n+1)(n+2)}c_n$$

状態関数＝　偶数冪のみ　または　奇数冪のみ

☆　離散化したエネルギー固有値

項打切り条件　$\longrightarrow$　$\varepsilon=2n+1$

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)=h\nu\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

最低エネルギー：　$E_0=\dfrac{1}{2}\hbar\omega=\dfrac{1}{2}h\nu$

零点エネルギー　←　不確定性により

係数 c_0, c_1 を規格化条件により決定

$$\psi_n(\xi) = \sqrt{\frac{1}{n!2^n a\sqrt{\pi}}}\, H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

$$= \sqrt{\frac{1}{a\sqrt{\pi}}}\, e^{-\xi^2/2} \cdot \sqrt{\frac{1}{n!2^n}}\, H_n(\xi)$$

$H_n(\xi)$: エルミート多項式

物理量の期待値

ある物理量の演算子　固有関数　固有値×固有関数

一方,

（状態関数）^{2} ⟶ 確率

物理量の期待値

物理量:B,　固有値: b,　固有関数: ϕ

$$\hat{B}\phi = b\phi$$

$$\phi^* \hat{B}\phi = \phi^* b\phi = b\phi^*\phi = b\cdot \mathrm{P} = [B]$$

Bの期待値

b =スカラー数

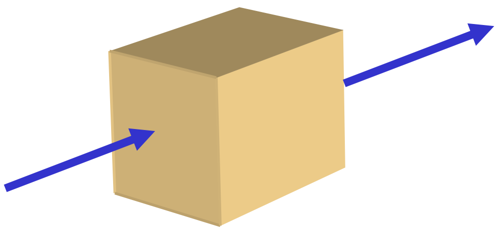
確率

確率の流れ

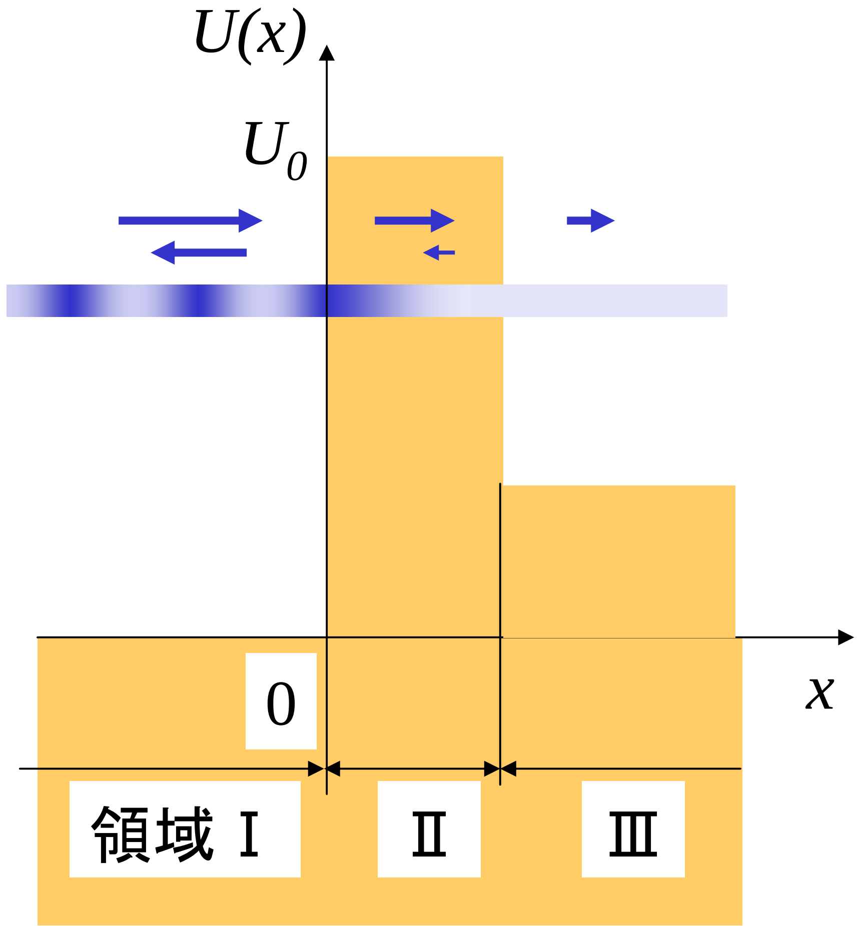
$$J(x,t) = \frac{1}{2}\left(\psi^* \hat{v}_x \psi + \psi \hat{v}_x^* \psi^*\right) = \frac{1}{2}\left(\psi^* \frac{\hat{p}_x}{m}\psi + \psi \frac{\hat{p}_x^*}{m}\psi^*\right) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\int_{x_1}^{x_2} |\psi|^2 dx\right] = \int_{x_1}^{x_2}\left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t}\right]dx = \frac{i\hbar}{2m}\left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\right]_{x_1}^{x_2}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial t}\left[\int_{x_1}^{x_2} |\psi|^2 dx\right] = J(x_2,t) - J(x_1,t)$$



障壁の通過
（トンネル現象，α崩壊）



連続条件

貫通率（透過係数）