

2022 年度夏学期 基礎方程式とその意味を考える (前半パート)

浜口幸一

最終更新日：2022 年 5 月 19 日

目次

§ 0	諸連絡	1
§ 0.1	この講義について	1
§ 0.2	前半パートについて	2
§ 0.3	中間試験について	3
§ 1	はじめに (4/7)	4
§ 1.1	前半パートの目標	4
§ 1.2	古典論の破綻、粒子性と波動性	5
§ 1.3	数学の準備	8
§ 1.4	余談「統一理論」の観点から見た電磁気学、相対論、量子力学	11
§ 2	シュレディンガー方程式 (座標表示) (4/14+4/21+4/28)	13
§ 2.1	波動・振動	13
§ 2.2	シュレディンガー方程式 (座標表示、1次元、自由粒子)	15
§ 2.3	シュレディンガー方程式 (座標表示、1次元、ポテンシャルがある場合)	18
§ 2.4	確率解釈	21
§ 2.5	物理量と演算子	24
§ 2.6	時間に依存しないシュレディンガー方程式、定常状態 (エネルギー固有状態)	28
§ 3	シュレディンガー方程式 (ブラケット表示) (4/28+5/12)	30
§ 3.1	ブラベクトルとケットベクトル	30
§ 3.2	シュレディンガー方程式 (ブラケット表示)	31
§ 3.3	2状態系 (2準位系) の例	32
§ 3.4	(確率解釈についての補足)	35
§ 4	演算子とその固有状態 (5/12+5/19)	38
§ 4.1	ブラケット表示での演算子	38
§ 4.2	座標表示とブラケット表示の関係	41
§ 5	調和振動子 (座標表示とブラケット表示の両方で見てみる) (5/19)	47
§ 5.1	その前にまず古典論	47
§ 5.2	解き方1 : ブラケット表示で。	47
§ 5.3	解き方2 : 座標表示で。	49

講義ノートに間違いや誤字・脱字などを見つけた場合は、是非教えて下さい。
(講義中に指摘してくれてもいいですし、ITC-LMS のメッセージ欄を用いてもいいです。)
自分ではなかなか気づかないので、細かいことでも指摘してもらえるととても助かります。

§ 0 諸連絡

§ 0.1 この講義について

- ▶ 授業の目標、概要：（シラバスより）物理学がもつ「基礎方程式」（基本法則といってもよい）を掘り下げその意味を考える。本講義の前半では、現代物理学の大きな柱である量子力学を扱う。後半では、波動、拡散、熱伝導、電気伝導、流体など、物質・エネルギーの動きや流れを表す基本方程式を扱う。高校までの知識をもとに、それらの基本方程式を導入するとともに、具体的な現象への応用例を通じて、方程式の背後にある物理的な意味の理解を目指す。これらの基礎方程式は、これまでの古典的なイメージと大きくかけ離れたものもあるが、学生の皆さんの新しい知的冒険を始める一助となるものとしたい。
- ▶ 前半パートと後半パートに分かれていて、それぞれ内容と担当教員が異なります。

前半（担当：浜口）

4/7, 4/14, 4/21, 4/28, 5/12, 5/19 + 中間試験 (5/26)

シュレディンガー方程式を中心に、量子力学の基礎的な内容を扱う。

後半（担当：常行）

6/9, 6/16, 6/23, 6/30, 7/7, 7/14 + 期末試験 (7/21 予定)

波動、拡散、熱伝導、電気伝導、流体など、物質・エネルギーの動きや流れを表す基本方程式を扱う。

▶ 講義の形式

- 4/7, 4/14 の2回はオンラインで、Goodnotes を用いた板書形式で行います。
- 前半の残り（4/21～5/19 の4回）は対面の予定で、今のところ Goodnotes で板書+スクリーン、という形式を考えています。（教室の様子を見て決めたいと思います。）（4/22 追記：黒板に板書する形式にしました。）
- 後半（6/9～7/14）も対面の予定で、PPT 資料を用いた講義となる予定です。資料は ITC-LMS でも提供される予定です。

▶ 成績評価について

成績は、中間試験（前半パート分、5/26 に実施）と期末試験（後半パート分、7/21 に実施予定）によって評価します。レポートはありません。（シラバスにはレポートも書いていましたが、やめました。）（出席はとりません。）

§ 0.2 前半パートについて

▶ 担当教員の自己紹介

- 浜口幸一（漢字は「浜」でも「濱」でもどちらでも良いです。）
- 専門は素粒子論、初期宇宙論です。
- ウェブページは[こちら](#)。
- 講義以外のこと（研究に関することや、研究以外のことでも）に関する質問や雑談も大歓迎ですので、講義の前後、ITC-LMS、メール、などなど、いつでも遠慮なくご連絡下さい。また、もし本郷キャンパスに来る機会があれば、居室（理学部 1 号館 916 号室）のドアが開けられていて私が中で暇そうにしていれば、アポ無し突撃訪問も歓迎します*1。

▶ 講義の前半パートのウェブページは[こちら](#)。

（「浜口幸一」で検索 → 「講義のページ」で迎れます。）

▶ 講義の前半パートに関するお知らせがある場合は、ウェブページと ITC-LMS の両方でアナウンスします。（どちらか片方だけ見ていれば大丈夫なはず。）

▶ 特定の教科書や参考書はありません。（色々と見てみましょう。）

（→ 講義後追加：この pdf の最後の参考文献のところに、講義ノートを作る際に参考にした文献をいくつかあげておきます。（後でまた追加するかも。））

▶ 講義中に質問などあれば、いつでもどうぞ。（オンラインの回は、Zoom チャット、マイクオン、手を挙げる、以下に述べる slido、どの方法でも良いです。）

▶ 1 回目と 2 回目の講義は、せっかくオンラインですので、slido（匿名で質問・チャットなどができるツール）も使ってみようと思っています。適当なデバイスで [slido](#) を開いてアクセスコードを入力すればアクセス出来ると思いますので、興味がある方は使ってみて下さい。初回 4/7 のアクセスコードは ITC-LMS に掲載し、講義中にもお伝えします。[画面共有で説明。]

slido には、講義に関する質問・感想・提案など、何でもご自由に書き込んで下さい。オンラインでの講義中は画面シェアして、出来るだけリアルタイムで反応したいと思います。

▶ ITC-LMS の「担当教員へのメッセージ」も使えるようになっていると思います。ぜひ利用下さい。

*1 ドアが閉じているときは、中で昼寝をしているか、まれに大事なミーティングをしている事もあるので、ノックをお願いします。

§ 0.3 中間試験について

5/6 に追記しました。

- ▶ 5/26(木) に中間試験を行います。
- ▶ 場所は講義と同じ駒場 7 号館 721 教室です。
- ▶ 時間は 17:15~18:30 の 75 分を予定しています。
17:10 には着席するようにして下さい。
- ▶ 持ち込みについて
 - 持ち込み可 : ノート (紙媒体)、ノートを印刷したもの、講義ノート (pdf) を印刷したもの、は持ち込み可とします。
 - 持ち込み不可 : 教科書や参考書は持ち込み不可。またタブレットや PC、スマートフォンなどの電子機器も持ち込み不可とします。試験中はカバンなどにしまっておいて下さい。
- ▶ コロナ陽性や濃厚接触、その他の事情により試験に来られない場合は、オンライン試験・追試・レポートなどの方法で対応しますので、ITC-LMS で連絡下さい。

§ 1 はじめに (4/7)

§ 1.1 前半パートの目標

シュレディンガー方程式を中心に量子力学の基礎的内容を理解すること。

「シュレディンガー方程式」って長いので、板書では「S-eq」みたいに省略して書くかも。

おおまかな予定

- ▶ § 2 では座標表示のシュレディンガー方程式を扱う。 (4/14+4/21 の予定)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t). \quad (1)$$

- ▶ § 3 ではブラケット表示のシュレディンガー方程式を扱う。 (4/28 の予定)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle. \quad (2)$$

- ▶ (2) の方が一般的。例えば

§ 5 でやるようなポテンシャル中の粒子の運動は (1) と (2) の両方で扱えるが、

§ 3 で紹介するような二準位系は (2) でしか扱えない。

- ▶ § 5 (5/19 の予定) では、調和振動子 (ポテンシャル $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ 中の粒子) について、座標表示 (1) とブラケット表示 (2) の両方で見つみるつもりです。

コメント

量子力学の導入には色々なやり方があります。

典型的なものでは

(a) 前期量子論 → 座標表示のシュレディンガー方程式の導入

→ (色々計算してみて慣れる)

→ 一般化して、量子論の枠組みとブラケット表示を導入 →...

(b) 量子論の一般的枠組みとブラケット表示の導入

→ ブラケット表示で量子系の一般的性質を扱う

→ 一例として、座標表示のシュレディンガー方程式を導入 →...

最近は「(a) は古い、(b) で教えるべき」という考えも良く聞きますが、僕はどちらでも良いのではないかと思います。人によって理解しやすい順番は違うので、色々試してみるのがいいのではないのでしょうか。この講義 (前半パート) は 6 回しかないので、両方のアプローチを少しずつ「つまみ食い」して、なんとなく様子が分かってもらえればと思っています。

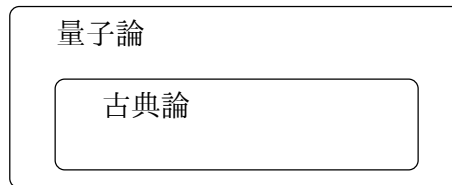
§ 1.2 古典論の破綻、粒子性と波動性

古典物理学：量子論以前の物理学。「古典論」とも言う。

古典論でどうしても説明出来ない現象	1900年代～ 新しい原理や考え方で説明 （「前期量子論」とも呼ばれる）
黒体輻射	← Planck (1900)
光電効果	← Einstein (1905)
Compton 効果	← Compton (1923)
電子回折	← de Broglie (1923) ※予言が先
原子模型、原子スペクトル	← Bohr (1913)
→ 現在では全て、量子力学で説明出来ている。	

いくつかコメント

(i) 古典論から量子論は導けない。



(ii) 別に前期量子論を知らなくても量子力学は学べるし、知っていても量子力学が「導ける」わけではない。「古典物理学じゃダメだ。」「粒子が波のようにふるまう。」という事実を知っていれば十分かと思います。

§ 1.2.1 電子回折

図（後で）

(1) ボールをたくさん投げる。

図（後で）

$$N_{12}(x) = N_1(x) + N_2(x) \quad (3)$$

(2) 水面波。

図（後で）

波の干渉

$$I_{12}(x) \neq I_1(x) + I_2(x) \quad (4)$$

(3) 電子ではどうか？

図（後で）

→ (2) と同じような干渉縞が！！

$$I_{12}(x) \neq I_1(x) + I_2(x) \quad (5)$$

注：たくさんの電子が集まって波のようにふるまうのではなく、
一つ一つの電子が波のようにふるまう。（こちらの日立の外村氏の実験が有名。）

ちょうど $\lambda = \frac{h}{p}$ の波を当てた時と同じ干渉縞になる。（ p は電子の運動量）

$h \simeq 6.6 \times 10^{-34} \text{kg m}^2 \text{s}^{-1}$: プランク定数

§ 1.2.2 光電効果

金属などの物質に光を当てると、表面から電子がとび出す。

- ▶ 電子がとび出すかどうかは（光の強さに依らず）振動数 ν のみに依存。
- ▶ 1つ1つの電子のエネルギーも（光の強さに依らず）振動数 ν のみに依存。

$$E_e = h\nu - W \quad (W \text{ は物質固有の定数}) \quad (6)$$

- ▶ 出てくる電子の数は光の強さに比例。

→ 振動数 ν の光は $E = h\nu$ をもつ粒子（光子）の集まり。

§ 1.2.3 粒子性と波動性

その他「黒体輻射」「原子模型」などありますが、省略します。

(余力があれば是非調べてみましょう。)

	波動性	粒子性
光 (電磁波)	(普通?) § 1.2.1 電子回折 (2)	光子1つのエネルギー = $h\nu$ § 1.2.2 光電効果 黒体輻射 原子模型
電子	波長 $\lambda = h/p$ § 1.2.1 電子回折 (3) 原子模型	(普通?)

§ 2 では、シュレディンガー方程式を通して粒子の波動性をみていく。

(もう一方の、光の粒子性については、電磁場の量子化が必要。この講義ではやらない。)

§ 1.3 数学の準備

§ 1.3.1 復習

▶ 指数関数

$$e^x = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{x}{n}\right)^n. \quad (7)$$

$$\text{性質: } \begin{cases} e^{x+y} = e^x \cdot e^y, \\ e^{xy} = (e^x)^y, \\ \frac{d}{dx}(e^{ax}) = (e^{ax})' = ae^x, \quad \text{など.} \end{cases} \quad (8)$$

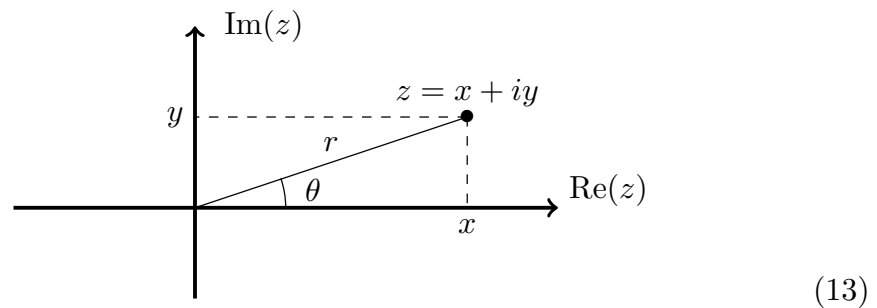
▶ 複素数

$$z = x + iy \quad i = \sqrt{-1} \quad (x, y \text{ は実数}) \quad (9)$$

$$\text{絶対値: } |z| = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (10)$$

$$\text{複素平面と極形式: } z = x + iy = r(\cos \theta + i \sin \theta) \quad (11)$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \cos \theta = \frac{x}{r}, \quad \sin \theta = \frac{y}{r} \quad (12)$$



(以下 4/21 追記:)

この講義では、複素数 z の複素共役を z^* で表します。

$z = x + iy$ のとき、その複素共役は $z^* = x - iy$ です。

またこのとき、 $|z|^2 = x^2 + y^2 = z^*z$ になります。(§ 2.4.2 など使います。)

§ 1.3.2 テイラー展開

関数 $f(x)$ を、 $x = 0$ のまわりで展開して

$$f(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n, \quad (14)$$

と書けたとする。(全ての関数がこう書ける訳ではないが、ここではこう書ける関数を考える。)すると

$$f(0) = c_0. \quad (15)$$

$$f'(x) = c_1 + 2c_2x + 3c_3x^2 + \cdots \quad \therefore f'(0) = c_1. \quad (16)$$

$$f''(x) = 2c_2 + 6c_3x + \cdots \quad \therefore f''(0) = 2c_2. \quad (17)$$

$$f^{(n)}(x) = n!c_n + (n+1)!c_{n+1}x + \cdots \quad \therefore f^{(n)}(0) = n!c_n. \quad (18)$$

よって

$$c_n = \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) \quad (19)$$

これを (14) 式に代入すると

テイラー展開

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) x^n \quad (20)$$

$$= f(0) + f'(0)x + \frac{1}{2}f''(0)x^2 + \frac{1}{3!}f'''(0)x^3 + \cdots \quad (21)$$

例：(21) に $f(x) = e^x, \cos x, \sin x$ を代入すると、

$$e^x = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \cdots \quad (22)$$

$$\cos x = 1 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4!}x^4 - \frac{1}{6!}x^6 + \cdots \quad (23)$$

$$\sin x = x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 - \frac{1}{7!}x^7 + \cdots \quad (24)$$

(是非自分で確認してみましょう)

§ 1.3.3 複素指数関数

指数関数のテイラー展開 (22) を複素数の場合にも拡張し、一般の複素数 z に対して

$$e^z = 1 + z + \frac{1}{2}z^2 + \frac{1}{3!}z^3 + \dots \quad (25)$$

と定義する。(このように実数で定義された関数を複素数に拡張することは、複素関数論で「解析接続」と呼ばれる手続きの一種となっています。物理学科では2年生夏学期の「物理数学 I」で扱います。例えば昨年度の講義は[こちら](#)。)

特に $z = i\theta$ (θ は実数) のとき、

$$e^{i\theta} = 1 + i\theta + \frac{1}{2}(i\theta)^2 + \frac{1}{3!}(i\theta)^3 + \frac{1}{4!}(i\theta)^4 + \dots \quad (26)$$

$$= 1 + i\theta - \frac{1}{2}\theta^2 - \frac{1}{3!}i\theta^3 + \frac{1}{4!}\theta^4 + \dots \quad (27)$$

$$= \left(1 - \frac{1}{2}\theta^2 + \frac{1}{4!}\theta^4 + \dots\right) + i\left(\theta - \frac{1}{3!}\theta^3 + \dots\right) \quad (28)$$

$$= \cos \theta + i \sin \theta \quad (29)$$

オイラーの公式

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta. \quad (30)$$

今後、以下の式をよく使う。 x, y を実数として

$$|e^{ix}| = |\cos x + i \sin x| = \sqrt{\cos^2 x + \sin^2 x} = 1 \quad (31)$$

$$e^{i(x+2\pi)} = \cos(x+2\pi) + i \sin(x+2\pi) \quad (32)$$

$$= \cos x + i \sin x \quad (33)$$

$$= e^{ix} \quad (34)$$

$$e^{x+iy} = e^x e^{iy} = e^x (\cos y + i \sin y) \quad (35)$$

$$\frac{d}{dx} e^{iax} = ia e^{iax} \quad (36)$$

§ 1.3.4 偏微分

微分：

$$\frac{d}{dx}f(x) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{f(x + \epsilon) - f(x)}{\epsilon} \quad (37)$$

偏微分：複数の変数をもつ関数、例えば2変数関数 $f(x, y)$ に対して

$$\frac{\partial}{\partial x}f(x, y) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{f(x + \epsilon, y) - f(x, y)}{\epsilon} \quad (38)$$

$$\frac{\partial}{\partial y}f(x, y) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{f(x, y + \epsilon) - f(x, y)}{\epsilon} \quad (39)$$

例：

$$f(x, y) = x^2 + xy \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x}f(x, y) = 2x + y \\ \frac{\partial}{\partial y}f(x, y) = x \end{array} \right. \quad (40)$$

$$f(x, y) = e^{xy} \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x}f(x, y) = ye^{xy} \\ \frac{\partial}{\partial y}f(x, y) = xe^{xy} \end{array} \right. \quad (41)$$

§ 1.4 余談「統一理論」の観点から見た電磁気学、相対論、量子力学

時間があれば...

→ 時間なかったなので、またの機会に。

4/14

先週 (4/7) のあらすじ

§ 0 諸連絡

§ 1 はじめに

§ 1.1 前半パートの目標

§ 1.2 古典論の破綻、粒子性と波動性

粒子 \longleftrightarrow 波 (電子回折の例) の話とか、

前期量子論はやらなくても量子力学は学べるけどね、という話とか。

§ 1.3 数学の準備

$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ とか。

§ 2 シュレディンガー方程式 (座標表示) ← 今日ココから。

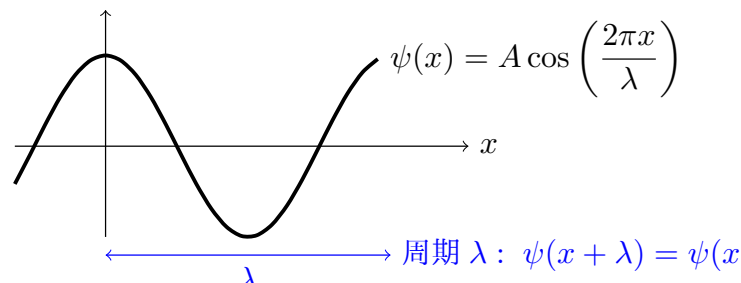
§ 2 シュレディンガー方程式（座標表示） (4/14+4/21+4/28)

この章では、座標表示のシュレディンガー方程式を導入する。決して「導出」ではないので注意！

§ 2.1 波動・振動

まずは波動・振動について基本的な性質をみて行こう。

▶ 波長 λ の波

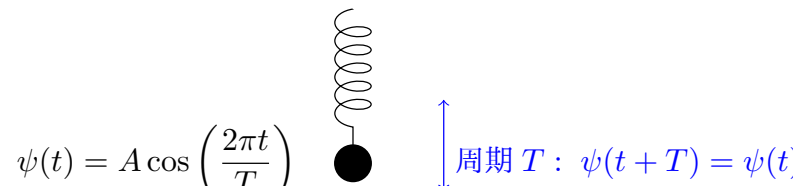


$$\psi(x) = A \cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right)$$

周期 λ : $\psi(x + \lambda) = \psi(x)$

(42)

▶ 周期 T の振動

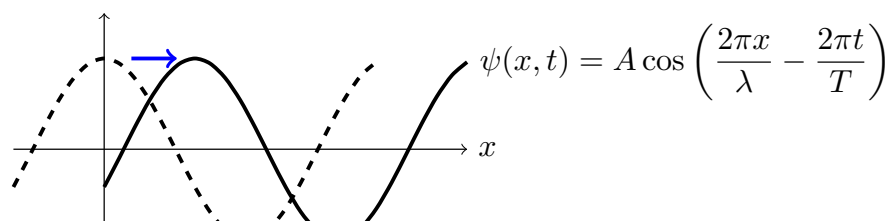


$$\psi(t) = A \cos\left(\frac{2\pi t}{T}\right)$$

周期 T : $\psi(t + T) = \psi(t)$

(43)


▶ 周期 T 、波長 λ で x 方向に進む波




$$\psi(x, t) = A \cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda} - \frac{2\pi t}{T}\right)$$

(44)

時間を止めると（例えば $t = 0$ ）: $\psi(x, 0) = A \cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right)$.



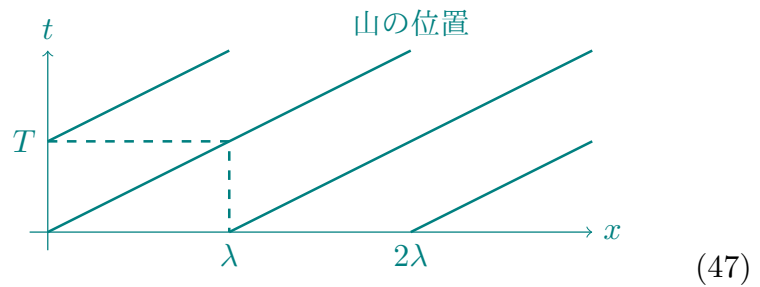
場所を固定すると（例えば $x = 0$ ）: $\psi(0, t) = A \cos\left(-\frac{2\pi t}{T}\right)$.



波の進む速さは？

$$A \cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda} - \frac{2\pi t}{T}\right) = A \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} \underbrace{\left(x - \frac{\lambda}{T}t\right)}_{x-vt}\right) \quad (45)$$

速さ $\boxed{v = \frac{\lambda}{T}}$ (46)



例えば $t = 0$ 、 $x = 0$ にあった波の山は $t = t_1$ のとき $x = (\lambda/T)t_1$ に移動する。

▶ 今後、

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{波長 } \lambda \text{ の代わりに} \\ \text{周期 } T \text{ の代わりに} \end{array} \right. \quad \boxed{\begin{array}{l} \text{波数 } k = \frac{2\pi}{\lambda} \\ \text{振動数 } \nu = \frac{1}{T} \\ \text{または角振動数 } \omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi}{T} \end{array}} \quad (48)$$

をよく用いる。これを用いると、 x 方向に角振動数 ω 、波数 k で進む波は

$$\psi(x, t) = A \cos(kx - \omega t). \quad (49)$$

と書ける。

▶ ところで、、、これは $\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} = A \cos(kx - \omega t) + iA \sin(kx - \omega t)$ の実部である。そこで今後は

$$\boxed{\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}} \quad (50)$$

を考える。

なぜわざわざ複素数を考えるのか？

→ その方が量子力学を考えるとときに便利だから。次の § 2.2 節で。

§ 2.2 シュレディンガー方程式（座標表示、1次元、自由粒子）

以下の話の進め方はちょっと強引です。しつこいですが決してシュレディンガー方程式の「導出」ではないです。

- ▶ x 方向に進む波

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}, \quad (51)$$

これが質量 m の x 方向に進む粒子を表すと考える。

ψ が粒子を表すって何だ?! → 解釈は後ほど § 2.4 で。

- ▶ § 1.2 で触れたように、

$$\text{波} \longleftrightarrow \text{粒子} \quad (52)$$

$$\text{波長 } \lambda \longleftrightarrow \text{運動量 } p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad \left(\because k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \hbar \equiv \frac{h}{2\pi} \right) \quad (53)$$

$$\text{振動数 } \nu \longleftrightarrow \text{エネルギー } E = h\nu = \hbar\omega \quad (\because \omega = 2\pi\nu) \quad (54)$$

- ▶ (非相対論的) 自由粒子のエネルギーは

$$E = \frac{1}{2m}p^2. \quad (55)$$

- ▶ (53), (54), (55) より、 ω と k の関係 (分散関係という)は

$$\hbar\omega = \frac{1}{2m}(\hbar k)^2. \quad (56)$$

- ▶ この関係式を (粒子を表すはずの)

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} \quad (57)$$

を用いて表したい。

$\psi(x, t)$ から k や ω を引っ張り出すため、偏微分してみる。

t 微分

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= -i\omega Ae^{i(kx - \omega t)} \\ &= -i\omega \psi(x, t). \end{aligned} \quad (58)$$

$$\therefore \underline{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = (\hbar\omega) \psi(x, t)}. \quad (59)$$

x 微分

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x, t) &= ikAe^{i(kx-\omega t)} \\ &= ik\psi(x, t).\end{aligned}\tag{60}$$

$$\therefore \underline{-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x, t) = (\hbar k)\psi(x, t)}.\tag{61}$$

もう 1 回微分して

$$\underline{\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\psi(x, t) = (\hbar k)^2\psi(x, t)}.\tag{62}$$

▶ (56), (59), (62) より

シュレディンガー方程式 (座標表示、1次元、自由粒子)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\psi(x, t)\tag{63}$$

$$\text{あるいは } i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, t).\tag{64}$$

もう 1 回しつこく書きますが、以上の議論は「導出」ではありません。

▶ コメント

(i) シュレディンガー方程式の解 $\psi(x, t)$ を波動関数という。

$\psi(x, t)$ は一般には複素数となる。

(ii) シュレディンガー方程式は線形である。(方程式が $\psi(x, t)$ とその微分の一次式で書かれていて、 $\psi(x, t)^2$ などが表れない。)

(ii)' § 2.1 で、 $\psi = A\cos(\dots)$ を $\psi = Ae^{i(\dots)}$ と複素指数関数に書き換えたことについて。

• $\psi(x, t) = A\cos(kx - \omega t)$ のままだと、

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = \omega A\sin(kx - \omega t),\tag{65}$$

となり、 $(\dots) \times \psi$ の形に書けない。

• $\psi(x, t) = Ae^{i(kx-\omega t)} \propto e^{-i\omega t}$ としたおかげで、

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = -i\omega\psi(x, t),\tag{66}$$

となり、方程式が線形に書けた。

(iii) ここまでは $\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$ という解を考えてきたが、これだけがシュレディンガー方程式の解ではない。

シュレディンガー方程式 (64) は線形なので、一般に、 ψ_1 と ψ_2 が (64) の解なら、 $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ も解となる。

$$\text{証明: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_1(x, t). \quad (67)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_2(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_2(x, t). \quad (68)$$

$$\therefore i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{(c_1\psi_1(x, t) + c_2\psi_2(x, t))}_{\psi(x, t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \underbrace{(c_1\psi_1(x, t) + c_2\psi_2(x, t))}_{\psi(x, t)}. \quad (69)$$

- 例えば、波数 k_1, k_2 の2つの解 ($k_1 \neq k_2$)

$$\psi_1(x, t) = A_1 e^{i(k_1 x - \omega_1 t)} \quad \left(\omega_1 = \frac{\hbar}{2m} k_1^2 \right), \quad (70)$$

$$\psi_2(x, t) = A_2 e^{i(k_2 x - \omega_2 t)} \quad \left(\omega_2 = \frac{\hbar}{2m} k_2^2 \right), \quad (71)$$

はそれぞれ (64) の解だが (確認してみよう)、その足し算

$$\psi(x, t) = \psi_1(x, t) + \psi_2(x, t), \quad (72)$$

も解になっている。

- 上の例で、 $A_2 = A_1$ 、 $k_2 = -k_1$ としてみると、 $\omega_2 = \omega_1 = \frac{\hbar}{2m} k_1^2$ となり

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \psi_1(x, t) + \psi_2(x, t) \\ &= A_1 e^{i(k_1 x - \omega_1 t)} + A_1 e^{i(-k_1 x - \omega_1 t)} \\ &= A_1 e^{-i\omega_1 t} (e^{ik_1 x} + e^{-ik_1 x}) \\ &= 2A_1 e^{-i\omega_1 t} \cos(k_1 x). \end{aligned} \quad (73)$$

なんていう解も作れる。

- もっと一般に

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^N A_n e^{i(k_n x - \omega_n t)}, \quad \omega_n = \frac{\hbar}{2m} k_n^2, \quad (74)$$

も (64) の解になっている。波数 k が1つだけの解 $\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$ は平面波と呼ばれる。

- さらに一般には、連続的な k に対して足し合わせた

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk, \quad \omega(k) = \frac{\hbar}{2m} k^2, \quad (75)$$

が (64) の一般解となる。(フーリエ変換を知っていれば、一般解として導けるはず。)

- (再確認) シュレディンガー方程式を「導入」するために、最初は $\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$ という平面波を用いて議論したが、いったんシュレディンガー方程式 (64) を認めてしまえば、 $\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$ はその一つの解に過ぎない。

(iv) シュレディンガー方程式は時間 t に関して 1 階の微分方程式である。

($\frac{\partial^2}{\partial t^2}$ を含まない。)

したがって、ある時刻 $t = t_0$ での全空間での $\psi(x, t)$ が決まれば、その後の時間発展は一意に決まる。

$$\psi(x, t_0 + \Delta t) \simeq \psi(x, t_0) + \Delta t \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t_0)}_{\psi(x, t_0) \text{ で決まる}} + \mathcal{O}(\Delta t)^2 \quad (76)$$

(v) (64) は自由粒子の場合だった。ポテンシャルがある場合は → 次節 § 2.3.

§ 2.3 シュレディンガー方程式 (座標表示、1次元、ポテンシャルがある場合)

- ▶ シュレディンガー方程式 (64)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t),$$

を導入する際に、自由粒子のエネルギーと運動量の関係

$$E = \frac{1}{2m} p^2, \quad (77)$$

を用いた。

- ▶ 粒子の位置に依存したポテンシャルエネルギーがあるときは (例: 調和振動子)

$$E = \frac{1}{2m} p^2 + V(x). \quad (78)$$

§ 2.2 のときと同様に考えていくと... (注: 導出ではないです。しつこい?)

シュレディンガー方程式（座標表示、1次元、ポテンシャルがある場合）

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t). \quad (79)$$

§ 1.1 に書いた一つ目の目標に辿り着いた。

▶ コメント

- (i) (講義後追加) 方程式が線形であるのはポテンシャルがないときと同じ。
→ したがって、解の線形性 (ψ_1 と ψ_2 が解なら $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ も解、という性質) は先ほどと同じ。
- (ii) ポテンシャルがないときのシュレディンガー方程式の解だった $\psi(x, t) \propto e^{i(kx - \omega t)}$ は、(79) の解にはなっていない。
(代入して確認してみましょう。)
- (iii) 一般に、 $V(x)$ の形によって、 $\psi(x, t)$ の形や時間発展は変わる。例えば（後から出てくる）調和振動子のポテンシャル $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ の場合、

$$\psi(x, t) = e^{-iat - bx^2}, \quad (80)$$

という形が解の一つになっている。(a と b は定数。) 他にも解はたくさんある。代入して、上の $\psi(x, t)$ が (79) の解になるように、 a と b を求めてみましょう。(解になる、というのは、代入したときに任意の x と t に対して左辺 = 右辺が成り立つ、という事です。) 来週に答え合わせをします。

- (iv) (79) は1次元の場合だが、3次元の場合は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, z, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)}_{\nabla^2} + V(x, y, z) \right] \psi(x, y, z, t), \quad (81)$$

となる。(講義後修正)

4/21

先週 (4/14) までのあらすじ

§ 0 諸連絡

§ 1 はじめに

§ 1.1 前半パートの目標

§ 1.2 古典論の破綻、粒子性と波動性

§ 1.3 数学の準備

§ 2 シュレディンガー方程式 (座標表示)

§ 2.1 波動・振動

§ 2.2 シュレディンガー方程式 (座標表示、1次元、自由粒子)

§ 2.3 シュレディンガー方程式 (座標表示、1次元、ポテンシャルあり)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t). \quad (82)$$

§ 2.4 確率解釈 ← 今日ココから。

その前に、、、前回の最後に出した問題の答え合わせをしましょう。

$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ の場合のシュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \psi(x, t). \quad (83)$$

の解として $\psi(x, t) = e^{-iat-bx^2}$ の形のものがあるが、このとき定数 a と b は何でしょう? というものでした。代入してみると

$$(\text{左辺}) = i\hbar(-ia)\psi(x, t), \quad (\text{右辺}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (-2b + 4b^2 x^2) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \psi(x, t), \quad (84)$$

ここから、(左辺)=(右辺) が x, t によらずに成り立つには

$$b = \frac{m\omega}{2\hbar}, \quad a = \frac{1}{2}\omega. \quad (85)$$

であることが分かります。よって、上のシュレディンガー方程式の解として

$$\psi(x, t) = \exp\left(-\frac{i}{2}\omega t - \frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right), \quad (86)$$

の解があることが分かりました。後で見るように、これは調和振動子ポテンシャルにおける基底状態 (エネルギーが一番低い状態) を表しています。

§ 2.4 確率解釈

ここまで波動関数 $\psi(x, t)$ の物理的意味については考えてこなかった。

$\psi(x, t)$ が粒子を表すってどういう意味だ？

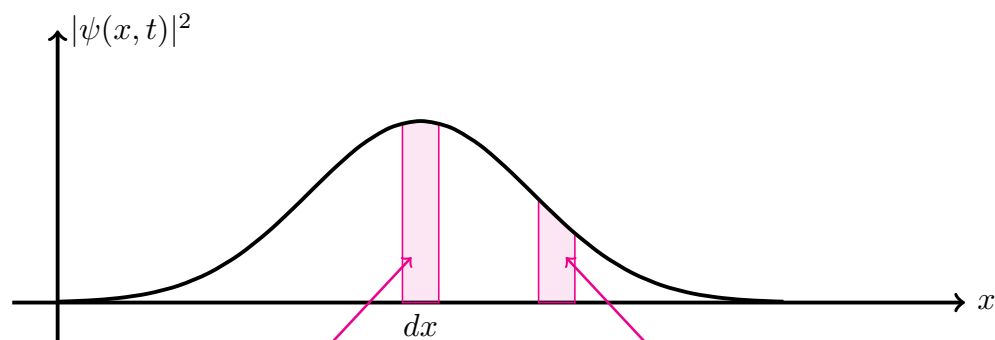
波動関数 $\psi(x, t)$ は、時刻 t における1粒子の物理状態を表す。この状態において粒子の位置を測定すると、確定した値が得られるのではなく、測定値は確率的にばらつく。

ボルの確率解釈

波動関数 $\psi(x, t)$ が1粒子の物理状態を表すとき、時刻 t に測定を行って、微小区間 $[x, x + dx]$ に粒子が見つかる確率は

$$|\psi(x, t)|^2 dx \quad (87)$$

に比例する。

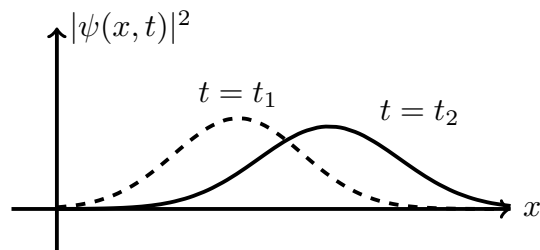


粒子がこの辺に見つかる確率が高い。

低い。

コメント

- (i) $\psi(x, t)$ 全体が1粒子を表す。
- (ii) $\psi(x, t)$ は一般に複素数だが、 $|\psi(x, t)|^2$ は実数で、 $|\psi(x, t)|^2 \geq 0$ 。



- (iii) 一般に $|\psi(x, t)|^2$ は時間とともに変化する。
- (iv) 3次元の場合は、粒子を点 (x, y, z) まわりの微小体積 $dx dy dz$ に見出す確率は $|\psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz$ に比例する。

§ 2.4.1 規格化

比例する、じゃなくて実際の確率は？

- ▶ $[x, x + dx]$ に粒子が見つかる確率を $\rho(x, t)dx$ としよう。 $\rho(x, t) \propto |\psi(x, t)|^2$ だから、比例係数を N として

$$\rho(x, t) = N|\psi(x, t)|^2. \quad (88)$$

N はいくつだろうか？

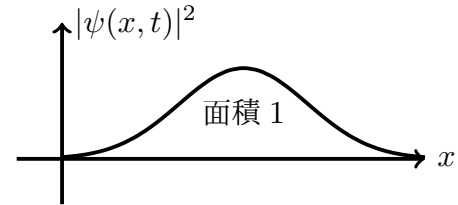
- ▶ 全空間で積分すると、全空間のどこかに粒子が見つかる確率は 1 のはずだから、

$$P_{\text{全空間}} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, t) dx = 1. \quad (89)$$

$$\therefore N \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (90)$$

$$\therefore N = \frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx}. \quad (91)$$

N が求まった。



特に $N = 1$ のとき、 $\psi(x, t)$ を「規格化された波動関数」という。

コメント

- (i) N が時間 t に依存しているように見えるが、、、？ → 次節 § 2.4.2 で。
- (ii) $\rho(x, t)$ を確率密度とも言う。 $\psi(x, t)$ が規格化されていれば $\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ 。
- (iii) $\psi(x, t)$ が規格化されていなくても

$$\tilde{\psi}(x, t) = \sqrt{N}\psi(x, t), \quad (92)$$

とすれば規格化された波動関数 $\tilde{\psi}(x, t)$ を定義することが出来る。

- (iv) 自由粒子のところに出てきた平面波 $\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$ は、 $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 dx = \infty$ なので、規格化できない。
規格化しなくても $|\psi(x, t)|^2$ と $|\psi(x', t)|^2$ ($x \neq x'$) の相対確率はそのまま使える。もし規格化が必要な議論のときは、有限区間で考えるなど工夫する。

§ 2.4.2 確率の保存

- ▶ $\psi(x, t)$ が規格化されているとする。全空間のどこかに粒子が見つかる確率は

$$P_{\text{全空間}} = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx. \quad (93)$$

右辺は時間 t の関数だが、 t に依存しないのか？

- ▶ 右辺を時間で微分してみる。

$$\frac{d}{dt} P_{\text{全空間}} = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx \quad (\psi(x, t) \text{ を省略して } \psi \text{ と書く。}) \quad (94)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) dx \quad (\text{微分と積分の交換は気にしない。}) \quad (95)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} (\dot{\psi}^* \psi + \psi^* \dot{\psi}) dx, \quad \left(\dot{\psi} = \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \right) \quad (96)$$

(講義後追加： ψ^* は ψ の複素共役を表します。§ 1.3 にも追記しておきました。) (質問してくれた学生さんありがとうございました。)

- ▶ 一方、シュレディンガー方程式より

$$i\hbar \dot{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + V\psi \quad (V(x) \text{ の } x \text{ も省略。}) \quad (97)$$

$$\therefore -i\hbar \dot{\psi}^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* + V\psi^* \quad (98)$$

- ▶ (96) に代入して整理すると (各自やってみよう)

$$\frac{d}{dt} P_{\text{全空間}} = \frac{-i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* - \psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \right) dx \quad (99)$$

(右辺をさらに変形して)

$$= \frac{-i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) dx \quad (100)$$

$$= \frac{-i\hbar}{2m} \left[\psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi \right]_{x=-\infty}^{x=\infty}. \quad (101)$$

$\psi(x, t)$ が規格化されていれば $\psi(x, t) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0$ なので、右辺はゼロ。よって

$$\frac{d}{dt} P_{\text{全空間}} = 0, \quad (102)$$

$$P_{\text{全空間}} = 1 = (\text{一定}). \quad (103)$$

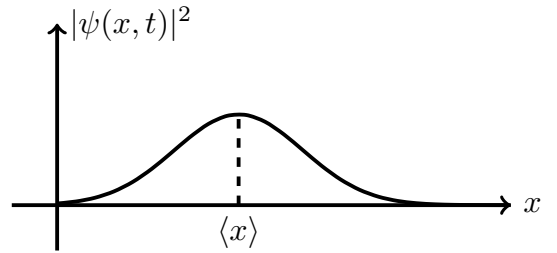
確率の保存が示せた。

§ 2.5 物理量と演算子

以下、1粒子の波動関数 $\psi(x, t)$ を考える。 $\psi(x, t)$ は規格化されているとする。

$$\int |\psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (104)$$

§ 2.5.1 位置の期待値



まず、粒子が見つかる位置 x の平均値を求めてみよう。

$[x, x + dx]$ に粒子が見つかる確率が $\rho(x, t)dx = |\psi(x, t)|^2 dx$ なのだから、

$$[\text{粒子が見つかる位置の平均値}] = [\text{位置 } x \text{ の期待値}] \quad (105)$$

$$= \langle x \rangle \quad (\langle \cdot \rangle \text{ で期待値を表す。}) \quad (106)$$

$$= \int x \rho(x, t) dx \quad (107)$$

$$= \int x |\psi(x, t)|^2 dx. \quad (108)$$

では運動量やエネルギーのような、その他の物理量は？

§ 2.5.2 物理量、演算子、期待値 — 量子力学の考え方

(では運動量やエネルギーのような、その他の物理量は?)

量子力学では、以下のように考える。

(以下は位置表示の場合。ブラケット表示の場合は § 3 で。)

1. 物理状態は、波動関数 $\psi(x, t)$ で表される。
2. 物理量は、波動関数に作用する演算子で表される。

物理量	演算子
位置 x	$\hat{x} = x$
運動量 p	$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
エネルギー E	$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$

(109)

3. 波動関数 $\psi(x, t)$ で与えられる物理状態に対して、物理量 A (例えば位置 x) の測定を行うと、一般にその測定値は測定のたびにばらつく。(測定値は確率的にしか分からない。)
4. 物理量 A を測定したときに得られる測定値の平均値 (期待値) は、 A に対応する演算子 \hat{A} を用いて

$$\langle A \rangle(t) = \int dx \psi(x, t)^* \hat{A} \psi(x, t), \quad (110)$$

で与えられる。

(おそらく初めて見た人は「ちょっと何言っているか分からない」という感じだと思います。しかしこうした量子力学の枠組みで様々な物理現象が矛盾なく説明出来ているというのが事実です。まずは具体例を見ながら少しずつ慣れていってもらえればと思います。)

コメント

- (i) 位置 x の期待値は

$$\langle x \rangle = \int dx \psi(x, t)^* \hat{x} \psi(x, t), \quad (111)$$

$$= \int dx \psi(x, t)^* x \psi(x, t). \quad (112)$$

これは前節で見た通り。

(ii) 運動量 p の期待値は

$$\langle p \rangle = \int dx \psi(x, t)^* \hat{p} \psi(x, t), \quad (113)$$

$$= \int dx \psi(x, t)^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t). \quad (114)$$

となる。(講義後修正、 $\psi \rightarrow \psi^*$.) (講義後指摘してくれた学生さんありがとうございました。)

(iii) 古典論では p と x の間には

$$p = mv = m \frac{dx}{dt}, \quad (115)$$

という関係があった。量子論でどうなるかやってみよう。

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = m \frac{d}{dt} \int dx \psi^*(x, t) x \psi(x, t) \quad (116)$$

$$= m \int dx \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} x \psi + \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial t} \right). \quad (117)$$

右辺にシュレディンガー方程式を代入して整理すると (各自やってみよう)

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = -\frac{i}{2} \hbar \int dx \left(\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} x \psi - \psi^* x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right). \quad (118)$$

(講義後修正：かっこの中で $+ \rightarrow -$) (各自やってみよう、などと言いながら自分でミスってました。講義後指摘してくれた学生さん達、ありがとうございました。) $\frac{\partial}{\partial x} f = f'$ と書くとき

$$\psi^{*''} x \psi - \psi^* x \psi'' = (\psi^{*'} x \psi - \psi^* x \psi' - \psi^* \psi)' + 2\psi^* \psi', \quad (119)$$

と書けるので

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = -\frac{i}{2} \hbar \underbrace{[\psi^{*'} x \psi - \psi^* x \psi' - \psi^* \psi]_{x=-\infty}^{x=\infty}}_{\rightarrow 0} + \int dx \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi \quad (120)$$

$$= \int dx \psi(x, t) \hat{p} \psi(x, t) \quad (121)$$

$$= \langle p \rangle. \quad (122)$$

量子論の $\langle x \rangle$ と $\langle p \rangle$ にも同じ関係が成り立つことが分かった。

4/21 はココまで。ココから先は次回やります。

4/28 ココから。

先週 (4/21) までのあらすじ

§ 0 諸連絡

§ 1 はじめに

§ 2 シュレディンガー方程式 (座標表示)

§ 2.1 波動・振動

$$\text{§ 2.2} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t).$$

$$\text{§ 2.3} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t).$$

§ 2.4 確率解釈

§ 2.5 物理量と演算子

§ 2.5.1 $\langle x \rangle$

§ 2.5.2 物理量、演算子、期待値

コメント

(i) $\langle x \rangle$

(ii) $\langle p \rangle$

$$\text{(iii)} \quad \langle p \rangle = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle$$

(iv) ← 今日ココから

(iv) 古典論で成り立つ関係式がいつも量子論でも成り立つとは限らない。

例えば古典論では $p^2 = \left(m \frac{dx}{dt} \right)^2$ だが、一般には $\langle p^2 \rangle \neq m^2 \left(\frac{d\langle x \rangle}{dt} \right)^2$ 。

(v) ハミルトニアン について

エネルギーに対応する演算子 $\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ をハミルトニアンと言う。ハミルトニアンを用いるとシュレディンガー方程式は

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t).} \quad (123)$$

と書ける。(これは § 3 で見るブラケット表示のシュレディンガー方程式と同じ形。)

つまり、ハミルトニアンはエネルギーに対応する演算子であると同時に、物理状態の時間発展を決める演算子でもある。

(vi) 演算子の非可換性についてはもう少し後でやることにしました。(→ 非可換性は (時間切れで) 省略することにしました...。)

§ 2.6 時間に依存しないシュレディンガー方程式、定常状態 (エネルギー固有状態)

- ▶ ハミルトニアン \hat{H} を用いた、次のような x だけの微分方程式を考える。

$$\boxed{\hat{H}\varphi(x) = E\varphi(x)}, \quad \left(\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right). \quad (124)$$

これを満たす一組の E と $\varphi(x)$ が見つかったとしよう。

(一般に、任意の E に対して解 $\varphi(x)$ が見つかるとは限らない。§ 5 も参照。)

- ▶ このとき

$$\psi(x, t) = e^{-i(E/\hbar)t} \varphi(x), \quad (125)$$

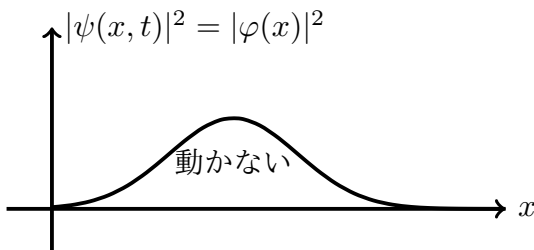
とすると、これがシュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H}\psi(x, t), \quad (126)$$

の解になっている。(代入すると (左辺) = $E\psi(x, t)$ = (右辺) となります。)

- ▶ この解の確率密度は時間に依存しない。

$$|\psi(x, t)|^2 = |e^{-iEt/\hbar} \varphi(x)|^2 = |\varphi(x)|^2. \quad (127)$$

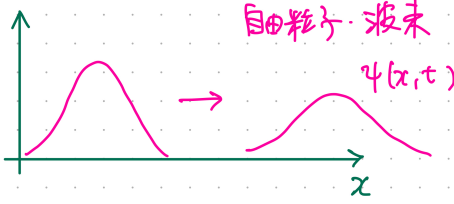
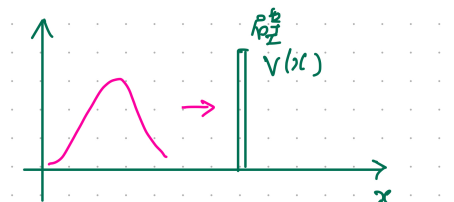
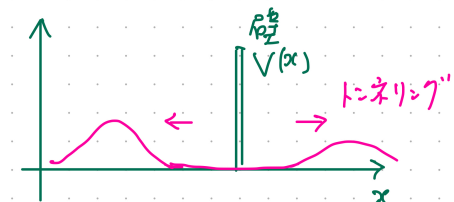
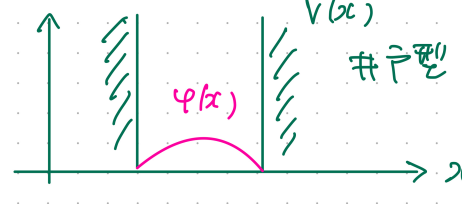
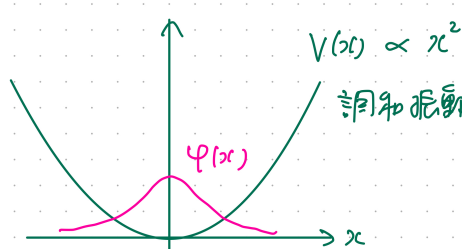
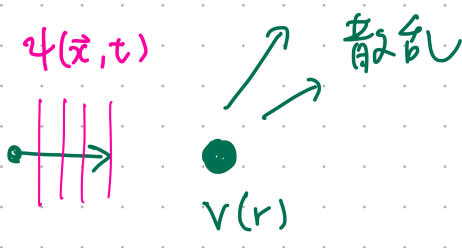
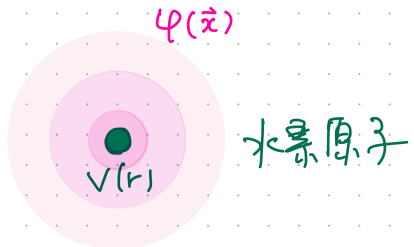


- ▶ (124) を「時間に依存しないシュレディンガー方程式」と言い、その解について $\varphi(x)$ を「エネルギー固有状態」「定常状態」、 E を「エネルギー固有値」などと言う。
- ▶ 例：自由粒子のとき § 2.2 で例に出てきた解 (73) $\psi \sim e^{-i\omega t} \cos(kx)$ や、4/14 の最後～4/21 の冒頭でやった、調和振動子の場合の解の 1 つ (86) $\psi \sim e^{-i\omega t/2 - m\omega x^2/2\hbar}$ は実はこの形の解だった。
- ▶ 3次元では (124) は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z) \right) \varphi(x, y, z) = E\varphi(x, y, z), \quad (128)$$

となる。(水素原子の波動関数やエネルギースペクトラムはこれを解いて求める。物理学科だと 3 年生夏学期の「量子力学 II」で扱います。)

座標表示のシュレディンガー方程式を用いる典型的な例

	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi$	$\hat{H} \varphi = E \varphi$
1次元	<p style="text-align: center;">自由粒子・波束 $\psi(x,t)$</p>  <p style="text-align: center;">(この講義では略)</p>   <p style="text-align: center;">(この講義では略。検索するとシュレディンガー方程式を解いた GIF アニメとかも出てくるとおもいます。)</p>	<p style="text-align: center;">$V(x)$ 井戸型</p>  <p style="text-align: center;">(この講義では略)</p>  <p style="text-align: center;">§ 5 で扱います。</p>
3次元	 <p style="text-align: center;">(物理学科だと 3 年秋の「量子力学 III」)</p>	 <p style="text-align: center;">(物理学科だと 3 年夏の「量子力学 II」)</p>

§ 3 シュレディンガー方程式（ブラケット表示） (4/28+5/12)

§ 3.1 ブラベクトルとケットベクトル

まずはブラケットの約束事、性質のうち重要なものを並べてしまおう。

一般のブラケット	2成分ベクトルの例
<div style="border: 1px solid black; padding: 2px; display: inline-block;">ケット（ケットベクトル）$A\rangle$</div> 線型結合もケットベクトル $ C\rangle = \alpha A\rangle + \beta B\rangle$, α, β は複素数	$ A\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$, a_1, a_2 は複素数。 $\underbrace{\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}}_{ C\rangle} = \alpha \underbrace{\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}}_{ A\rangle} + \beta \underbrace{\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}}_{ B\rangle}$
<div style="border: 1px solid black; padding: 2px; display: inline-block;">ブラ（ブラベクトル）$\langle A$</div> 「 $ A\rangle$ に共役なブラベクトル」とも言う 上の $ C\rangle$ に共役なブラベクトルは $\langle C = \alpha^* \langle A + \beta^* \langle B $ （係数が複素共役になることに注意）	$\langle A = (a_1^*, a_2^*)$. $\underbrace{\langle c_1^*, c_2^* \rangle}_{\langle C } = \alpha^* \underbrace{\langle a_1^*, a_2^* \rangle}_{\langle A } + \beta^* \underbrace{\langle b_1^*, b_2^* \rangle}_{\langle B }$
<div style="border: 1px solid black; padding: 2px; display: inline-block;">内積 $\langle A B\rangle$. 複素数を与える。</div> $\langle B A\rangle = \langle A B\rangle^*$. 特に $\langle A A\rangle$ は実数で、 $\langle A A\rangle \geq 0$. <div style="border: 1px solid black; padding: 2px; display: inline-block;">ノルム：$\ A\rangle \ = \sqrt{\langle A A\rangle}$.</div> （ベクトルの大きさ）	$\langle A B\rangle = \underbrace{(a_1^*, a_2^*)}_{\text{(この表記は既習?)}} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = a_1^* b_1 + a_2^* b_2.$ $\langle B A\rangle = (b_1^*, b_2^*) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = b_1^* a_1 + b_2^* a_2 = \langle A B\rangle^*$ $\langle A A\rangle = (a_1^*, a_2^*) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = a_1 ^2 + a_2 ^2 \geq 0.$ $\ A\rangle \ = \sqrt{\langle A A\rangle} = \sqrt{ a_1 ^2 + a_2 ^2}.$

- ▶ 上の性質を満たすベクトルの集合で「完備性」を満たすものを「ヒルベルト空間」という。(この講義ではこれ以上掘り下げない。)(講義後追加:もう少し厳密には和の定義とか結合則とかから定義すべきだったかも?)

- ▶ 量子力学では、一般にヒルベルト空間上のベクトル $|\psi\rangle$ が物理状態を表すと考える。 $|\psi\rangle$ を「状態ベクトル」とも言う。

▶ 規格化

$\| |\psi\rangle \| = 1 \iff \langle \psi | \psi \rangle = 1$ のとき、状態 $|\psi\rangle$ は規格化されているという。

▶ 確率解釈

$|A\rangle$ という状態があったとき、観測の結果 $|B\rangle$ という状態が得られる ($|B\rangle$ という状態だということが分かる) 確率 P_{AB} は

$$P_{AB} = |\langle B | A \rangle|^2, \quad (129)$$

で与えられる。ただし $|A\rangle$ と $|B\rangle$ は規格化されているとした。

確率なのだから $0 \leq P_{AB} \leq 1$ のはずだが、常にそうなるか?これは

コーシー・シュワルツの不等式 $|\langle B | A \rangle|^2 \leq \langle A | A \rangle \cdot \langle B | B \rangle$

によって保証されている。(証明略、各自調べてみよう。)

§ 3.2 シュレディンガー方程式 (ブラケット表示)

- ▶ ブラケット表示での物理状態 $|\psi(t)\rangle$ の時間発展は、シュレディンガー方程式

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle}, \quad (130)$$

で与えられる。ただし \hat{H} はハミルトニアン演算子であり、以下の性質をみます。

- (i) $|\psi\rangle$ が状態ベクトルであるとき、 $\hat{H} |\psi\rangle$ も状態ベクトルとなる。
- (ii) 線形性: $\hat{H} (\alpha |A\rangle + \beta |B\rangle) = \alpha \hat{H} |A\rangle + \beta \hat{H} |B\rangle$.
- (iii) エルミート性 (後述)。

- ▶ ベクトル $|A\rangle$ が

$$\hat{H} |A\rangle = E_A |A\rangle, \quad (131)$$

をみますとき、 $|A\rangle$ をエネルギー固有状態、 E_A をエネルギー固有値、という。

行列を習っていれば、 \hat{H} を行列とみなして、固有ベクトルと固有値の式

$$\begin{pmatrix} \hat{H} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \end{pmatrix} = E_A \begin{pmatrix} A \end{pmatrix} \text{ と同じ形をしていることが分かると思います。}$$

§ 3.3 2 状態系 (2 準位系) の例

何はともあれ、ブラケット表示に慣れるために、一番単純な 2 状態系 (2 準位系) の例でシュレディンガー方程式を解いてみよう。

- ▶ ハミルトニアン \hat{H} と、そのエネルギー固有状態が 2 つあるとする。

$$\begin{cases} |1\rangle : & \hat{H} |1\rangle = E_1 |1\rangle, \\ |2\rangle : & \hat{H} |2\rangle = E_2 |2\rangle, \end{cases} \quad E_1 \neq E_2. \quad (132)$$

規格化 : $\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1$ 。またこのとき $\langle 1|2\rangle = 0$ も示せる (後述)。

- ▶ この 2 つの状態の線形結合で表される状態

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t) |1\rangle + c_2(t) |2\rangle = \sum_{k=1,2} c_k(t) |k\rangle \quad (133)$$

を考えて、シュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle. \quad (134)$$

による時間発展を追ってみよう。(133) を (134) に代入すると

$$|\text{左辺}\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_k c_k(t) |k\rangle = i\hbar \sum_k \dot{c}_k |k\rangle, \quad \left(\dot{c}_k = \frac{d}{dt} c_k(t) \right) \quad (135)$$

$$|\text{右辺}\rangle = \hat{H} \sum_k c_k(t) |k\rangle = \sum_k c_k(t) \hat{H} |k\rangle \quad (\because \hat{H} \text{ の線形性}) \quad (136)$$

$$= \sum_k c_k(t) E_k |k\rangle. \quad \because (132) \quad (137)$$

両辺と $\langle 1|$ との内積をとると

$$\langle 1| \text{左辺} \rangle = \langle 1| \text{右辺} \rangle. \quad (138)$$

$$\therefore i\hbar \dot{c}_1(t) = E_1 c_1(t). \quad (\because \langle 1|1\rangle = 1, \langle 1|2\rangle = 0) \quad (139)$$

$$\therefore \frac{d}{dt} c_1(t) = -i \frac{E_1}{\hbar} c_1(t). \quad (140)$$

$$\therefore c_1(t) = C_1 e^{-i(E_1/\hbar)t}. \quad (141)$$

同様にして $\langle 2|$ との内積から

$$c_2(t) = C_2 e^{-i(E_2/\hbar)t}. \quad (142)$$

▶ よって、再び (133) に代入して

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{k=1,2} C_k e^{-i(E_k/\hbar)t} |k\rangle \quad (143)$$

$$= C_1 e^{-i(E_1/\hbar)t} |1\rangle + C_2 e^{-i(E_2/\hbar)t} |2\rangle \quad (144)$$

が 2 状態系のシュレディンガー方程式の一般解となる。 (解けた!)

4/28 はココまで。ココから先は次回やります。

5/12 ココから。 **中間試験について § 0.3 に書いておきました。**

前回 (4/28) までのあらすじ

§ 1 はじめに

§ 2 シュレディンガー方程式 (座標表示)

§ 2.1 → § 2.2 → § 2.3

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

§ 2.4 確率解釈

§ 2.5 物理量と演算子— \hat{x} , \hat{p} , \hat{H} , $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$.

§ 2.6 時間依存しないシュレディンガー方程式、定常状態 (= エネルギー固有状態)

§ 3 シュレディンガー方程式 (ブラケット表示)

§ 3.1 ブラベクトルとケットベクトル

§ 3.2 シュレディンガー方程式 (ブラケット表示)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle,$$

§ 3.3 2 状態系 (2 準位系) の例

$$\text{解: } |\psi(t)\rangle = C_1 e^{-i(E_1/\hbar)t} |1\rangle + C_2 e^{-i(E_2/\hbar)t} |2\rangle.$$

今日ココから。

▶ 規格化の確認

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \left(C_1^* e^{+i(E_1/\hbar)t} \langle 1| + C_2^* e^{+i(E_2/\hbar)t} \langle 2| \right) \left(C_1 e^{-i(E_1/\hbar)t} |1\rangle + C_2 e^{-i(E_2/\hbar)t} |2\rangle \right) \quad (145)$$

∴ (§ 3.1)

$$= |C_1|^2 + |C_2|^2. \quad (\because \langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 0, \langle 1|2\rangle = 0). \quad (146)$$

よって $|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$ としておけば、時間によらずに常に $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$.

▶ 具体例として、

$$\boxed{\begin{cases} C_1 = \cos \theta \\ C_2 = \sin \theta \end{cases}, |\psi(t=0)\rangle = \cos \theta |1\rangle + \sin \theta |2\rangle \equiv |\alpha\rangle} \quad (147)$$

という初期状態を考えてみよう。時刻 t での状態は、シュレディンガー方程式の解 (144) より

$$|\psi(t)\rangle = \cos \theta \underbrace{e^{-i(E_1/\hbar)t}}_{e^{-i\omega_1 t}} |1\rangle + \sin \theta \underbrace{e^{-i(E_2/\hbar)t}}_{e^{-i\omega_2 t}} |2\rangle \quad (148)$$

▶ 時刻 t で測定を行って、元の状態 $|\alpha\rangle$ が観測される確率*2は § 3.1 の確率解釈より

$$P(\alpha \rightarrow \alpha; t) = |\langle \alpha | \psi(t) \rangle|^2 \quad (149)$$

$$= |(\cos \theta \langle 1| + \sin \theta \langle 2|) (\cos \theta e^{-i\omega_1 t} |1\rangle + \sin \theta e^{-i\omega_2 t} |2\rangle)|^2 \quad (150)$$

$$= \left| \cos^2 \theta \underbrace{e^{-i\omega_1 t} \langle 1|1\rangle}_{=1} + \sin^2 \theta \underbrace{e^{-i\omega_2 t} \langle 2|2\rangle}_{=1} \right|^2 \quad (151)$$

$$= \text{計算すると... } \boxed{\text{ここから板書省略}} \quad (152)$$

$$= \left| \underbrace{e^{-i\omega_2 t}}_{|\dots|=1} \left(\cos^2 \theta \underbrace{e^{i(\omega_2 - \omega_1)t}}_{\equiv e^{i\omega_{21}t}} + \sin^2 \theta \right) \right|^2 \quad (\text{講義後修正}) \quad (153)$$

$= \cos \omega_{21}t + i \sin \omega_{21}t$

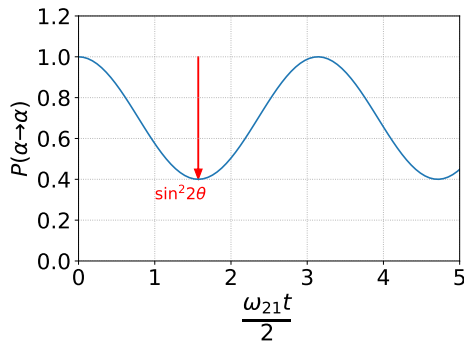
$$= \left| \cos^2 \theta \cos \omega_{21}t + \sin^2 \theta + i \cos^2 \theta \sin \omega_{21}t \right|^2 \quad (154)$$

$$= (\cos^2 \theta \cos \omega_{21}t + \sin^2 \theta)^2 + (\cos^2 \theta \sin \omega_{21}t)^2 \quad (155)$$

$$= \dots \boxed{\text{ここまで}} \quad (156)$$

$$= 1 - \sin^2 2\theta \sin^2 \left(\frac{\omega_{21}}{2} t \right). \quad (157)$$

*2 「 $|\alpha\rangle$ という状態が観測される」という意味が分かりにくいかもしれませんが、例えば以下のニュートリノ振動の例では $|\alpha\rangle$ は「フレーバー固有状態」と呼ばれ、検出器による観測によって「 $|\alpha\rangle$ という状態が観測される」ということが実際に可能です。



▶ 例えば、ニュートリノ振動はこの式で表されています*3。

例えばこちらの梶田さんの解説記事の図3に、振動の様子を表した図があります。

§ 3.4 (確率解釈についての補足)

§ 3.1 や § 3.3 で出てきた確率解釈

$$P_{AB} = |\langle B|A \rangle|^2, \quad P(\alpha \rightarrow \alpha; t) = |\langle \alpha | \psi(t) \rangle|^2, \quad (158)$$

について、もう少し説明しておこう。

▶ (いま考えている) 全てのベクトルがベクトル $|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \dots, |\chi_n\rangle$ の線型結合

$$|\psi\rangle = c_1 |\chi_1\rangle + c_2 |\chi_2\rangle + \dots + c_n |\chi_n\rangle, \quad (159)$$

で表されていて、 $|\chi_1\rangle, \dots, |\chi_n\rangle$ が

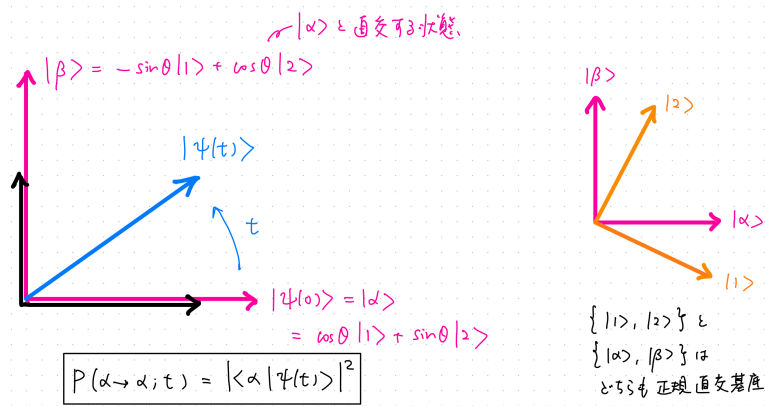
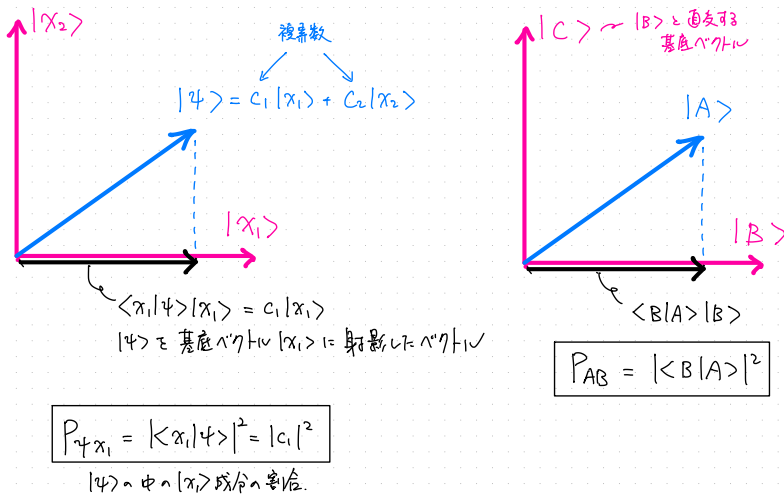
$$\langle \chi_i | \chi_j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}, \quad (160)$$

を満たすとき、 $\{|\chi_1\rangle, \dots, |\chi_n\rangle\}$ (そのヒルベルト空間の)「(完全) 正規直交基底」という。2成分の例だと $|\chi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|\chi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ が正規直交基底の1つ。

*3 ニュートリノ振動の具体的な式に興味のある人は例えばこちらの参考文献 (Particle Data Group のレビュー) を見てみましょう。この文献の式 (14.43): $P_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} - 2(\delta_{\alpha\beta} - 1) \sin^2 2\theta \sin^2 X$ が「ニュートリノ $|\alpha\rangle$ が振動してニュートリノ $|\beta\rangle$ に変化する確率」を表しています。 α や β はフレーバーと言って、 $\alpha, \beta = e$ (電子), μ (ミューオン), τ (タウ) といった状態を取ります。この式で $\alpha = \beta$ とすると $P_{\alpha\alpha} = 1 - \sin^2 2\theta \sin^2 X$ となり、上の式 (157) と同じ形になります。 X は同じ文献の (14.40) に載っていて、時間 t の代わりに距離 L で書いてありますが、ニュートリノはほぼ光速で L が $L \simeq ct$ (c は光速) なので近似的には同じ式です。係数まで含めて上の式 (157) と一致することは、文献の式 (14.38) を用いると示せます。(さらにこの 14.38 式はそれ自体、面白くて難しい内容を含んでいるのですが、脱線の脱線になってしまうので、これ以上は深入りしません...)

▶ 例えば § 3.3 に出てきた $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ は $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$ ($i, j = 1, 2$) なので正規直交基底。

▶ 確率解釈に出てくる $|\langle B|A\rangle|^2$ は「状態ベクトル $|A\rangle$ を基底ベクトル $|B\rangle$ に射影したときのベクトルの長さの二乗」になっている。



上の状態 $|\psi(t)\rangle$ では、「観測して $|\alpha\rangle$ と分かる確率」 = $|\langle \alpha|\psi(t)\rangle|^2$ 、「 $|\beta\rangle$ と分かる確率」 = $|\langle \beta|\psi(t)\rangle|^2$ となる。

▶ PDF 講義ノートにもう少し補足説明あり（講義では省略） → 次ページ。

§ 3.4.1 補足の補足

ここからしばらく講義では省略 → 線形代数の復習？予習？です…。

▶ ゼロベクトル：次の性質

- 全ての $|x\rangle$ に対して $|x\rangle + |\psi\rangle = |x\rangle$.
- ノルムがゼロ： $\| |\psi\rangle \|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = 0$.

を満たすベクトル $|\psi\rangle$ を「ゼロベクトル」「ヌル (null) ベクトル」と言い、 $|\psi\rangle = 0$ と書く。2成分の例だと $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ がゼロベクトル。

▶ 線型独立：ベクトル $|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \dots, |\chi_n\rangle$ が

$$c_1 |\chi_1\rangle + c_2 |\chi_2\rangle + \dots + c_n |\chi_n\rangle = 0 \iff c_1 = c_2 = \dots = c_n = 0. \quad (161)$$

を満たすとき $\{|\chi_1\rangle, \dots, |\chi_n\rangle\}$ は「線型独立」という。

2成分の例だと

$$|\chi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ と } |\chi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |\chi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ と } |\chi_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$
$$|\chi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ と } |\chi_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1+i \end{pmatrix}$$

などの組は全て線型独立。

2成分の場合、 $|\chi_2\rangle = c|\chi_1\rangle$ (c は複素数) だと線型独立でない。例えば

$$|\chi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ と } |\chi_2\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad |\chi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \text{ と } |\chi_2\rangle = \begin{pmatrix} i \\ -1 \end{pmatrix}$$

などの組は線型独立ではない。

▶ 基底：(いま考えているベクトル空間の) 全てのベクトルが線型独立なベクトル $|\chi_1\rangle, |\chi_2\rangle, \dots, |\chi_n\rangle$ の線型結合

$$|\psi\rangle = c_1 |\chi_1\rangle + c_2 |\chi_2\rangle + \dots + c_n |\chi_n\rangle, \quad (162)$$

で表されるとき、 $\{|\chi_1\rangle, \dots, |\chi_n\rangle\}$ を (そのベクトル空間の) 「基底」という。また n をその空間の「次元」という。(量子力学では無限次元のベクトル空間も扱う。)

▶ 特に、基底 $\{|\chi_1\rangle, \dots, |\chi_n\rangle\}$ が

$$\langle \chi_i | \chi_j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}, \quad (163)$$

を満たすとき、 $\{|\chi_1\rangle, \dots, |\chi_n\rangle\}$ (その空間の) 「正規直交基底」という。

← ここまで

§ 4 演算子とその固有状態 (5/12+5/19)

ブラケット表示での演算子とその固有状態について、重要なことをいくつかまとめておきます*4。

§ 4.1 ブラケット表示での演算子

ブラケット表示でも、物理量は演算子で表される。ただし、ブラケット表示では演算子は（座標表示のときのような微分演算子ではなく）状態ベクトルに作用する。

- ▶ $|\psi\rangle$ が状態ベクトルなら演算子 \hat{A} をかけた $\hat{A}|\psi\rangle$ も状態ベクトル。これを

$$\hat{A}|\psi\rangle = |A\psi\rangle, \quad (164)$$

と書くこともある。

- ▶ 演算子は線形に作用する。

$$\hat{A}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\hat{A}|\psi_1\rangle + c_2\hat{A}|\psi_2\rangle. \quad (165)$$

- ▶ $|A\psi\rangle$ にさらに別の演算子 \hat{B} をかけたものを

$$\hat{B}|A\psi\rangle = \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle, \quad (166)$$

と左から演算子をかけていって表す。

行列を習っていれば、、、 $\begin{pmatrix} & \\ & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} & \\ & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \\ \psi \end{pmatrix}$ に対応。

- ▶ 演算子 \hat{A} に対して

$$\hat{A}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad (167)$$

を満たす $|\alpha\rangle$ を \hat{A} の固有ベクトル（固有状態）、 α を固有値という。一般に固有ベクトルは複数ある。

$$\hat{A}|\alpha_k\rangle = \alpha_k|\alpha_k\rangle, \quad (k = 1, 2, \dots, n) \quad (168)$$

(n はベクトル空間の次元.)

*4 この章で「波束の収縮」「非可換な演算子／物理量」などについても取り上げるつもりでしたが時間がなかったので省略します。例えば教科書 [2] の 7 章に具体例での解説があって分かりやすいと思います。全体のノートが完成しつつある状態で改めて見直すと、もうちょっと章立ての構成を工夫出来たような気がしますね...。もし来年度も担当することになったら改善策を考えてみます。(例えば 2 状態系／ニュートリノ振動の例を一番最初に持ってきて良かったかも。)
「こういう順番の方が分かりやすいのでは？」みたいなコメントも大歓迎ですので、講義後や ITC-LMS など是非お願いします。

§ 4.1.1 エルミート演算子

- ▶ 任意のベクトル $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ に対して

$$\langle\alpha|\hat{A}\beta\rangle = \langle\hat{A}\alpha|\beta\rangle \quad (= \langle\beta|\hat{A}\alpha\rangle^*), \quad (169)$$

が成り立つとき、 \hat{A} を「エルミート演算子（自己共役演算子）」という。

- ▶ エルミート演算子の固有値は全て実数になる。

(証明) α をエルミート演算子 \hat{A} の固有値とすると、

$$\hat{A}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \quad (170)$$

エルミート性より

$$\langle\alpha|\hat{A}\alpha\rangle = \langle\hat{A}\alpha|\alpha\rangle \quad (171)$$

$$\text{左辺} = \alpha\langle\alpha|\alpha\rangle. \quad (172)$$

$$\text{右辺} = \langle\alpha|\hat{A}\alpha\rangle^* = \alpha^*\langle\alpha|\alpha\rangle. \quad (173)$$

$$\therefore \alpha = \alpha^* \quad \blacksquare \quad (174)$$

- ▶ エルミート演算子 \hat{A} に対して、異なる固有値の固有ベクトルは直交する。

$$\text{(証明)} \quad \begin{cases} \hat{A}|\alpha_1\rangle = \alpha_1|\alpha_1\rangle \\ \hat{A}|\alpha_2\rangle = \alpha_2|\alpha_2\rangle \end{cases} \quad (\alpha_1 \neq \alpha_2) \text{ とする。} \quad (175)$$

$$\langle\alpha_1|\hat{A}\alpha_2\rangle \underset{\text{エルミート}}{=} \langle\alpha_2|\hat{A}\alpha_1\rangle^* \quad (176)$$

$$\text{左辺} = \alpha_2\langle\alpha_1|\alpha_2\rangle. \quad (177)$$

$$\text{右辺} = (\alpha_1\langle\alpha_2|\alpha_1\rangle)^* = \alpha_1\langle\alpha_1|\alpha_2\rangle \quad (178)$$

$$\therefore (\alpha_2 - \alpha_1)\langle\alpha_1|\alpha_2\rangle = 0. \quad \therefore \langle\alpha_1|\alpha_2\rangle = 0. \quad \blacksquare \quad (179)$$

この直交性は § 3.3 で $\langle 1|2\rangle = 0$ とするときに使った。(ただしハミルトニアンはエルミート性を仮定していた。)

- ▶ エルミート演算子の固有ベクトルのセット $\{|\alpha_1\rangle, \dots, |\alpha_n\rangle\}$ は正規直交基底に取れる。

(証明) 簡単のため固有値 $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ は全て異なる (固有値に縮退はない) とする。(縮退がある場合の証明は略。) すると上の性質より $\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = 0$ ($i \neq j$)。

一方 $\langle\alpha_i|\alpha_i\rangle = \|\alpha_i\| > 0$ なので、あらためて $|\alpha_i\rangle / \sqrt{\|\alpha_i\|}$ を $|\alpha_i\rangle$ と定義しなおせば、 $\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \delta_{ij}$ となり正規直交基底となる。■

さらに固有ベクトルは「完全系」をなす。(任意のベクトル $|\psi\rangle$ が $|\alpha_k\rangle$ の線型結合で書ける。) (説明/証明は省略...)

§ 4.1.2 物理量の測定値、期待値

このページ、時間がなければ (残り 30 分を切ったら?) 講義では省略 →

- ▶ エルミート演算子 \hat{A} の固有ベクトルのセット $\{|\alpha_1\rangle, \dots, |\alpha_n\rangle\}$ があるとする。簡単のため固有値 $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ は全て異なる (固有値に縮退はない) とする。

§ 4.1.1 より、 $\{|\alpha_1\rangle, \dots, |\alpha_n\rangle\}$ は正規直交基底にとることが出来る

$$\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij}. \quad (180)$$

- ▶ さて、ある状態 $|\psi\rangle$ がエルミート演算子 \hat{A} の固有ベクトル $|\alpha_k\rangle$ の線型結合状態

$$|\psi\rangle = c_1 |\alpha_1\rangle + \dots + c_n |\alpha_n\rangle, \quad (181)$$

で書かれているとする。 $\langle \alpha_k |$ をかけると $\langle \alpha_k | \psi \rangle = c_k$ 。さらに $|\psi\rangle$ も規格化されているとしよう。すると $1 = \|\psi\|^2 = \langle \psi | \psi \rangle = \dots = \sum_k |c_k|^2 = \sum_k |\langle \alpha_k | \psi \rangle|^2$ 。

この状態 $|\psi\rangle$ に対して、 \hat{A} に対応する物理量の測定を行うと、測定値として固有値 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ のいずれかが得られる。その確率は

$$P(\alpha_k) = \left(\begin{array}{l} \text{状態 } |\psi\rangle \text{ に対して } \hat{A} \text{ を測定して} \\ \text{測定値 } \alpha_k \text{ が得られる確率} \end{array} \right) = |\langle \alpha_k | \psi \rangle|^2 = |c_k|^2. \quad (182)$$

で得られる。

(これもボルンの確率規則/確率解釈/確率公式、などと呼ばれる。)

和を取るとちゃんと $\sum_k P(\alpha_k) = 1$ になっている。

- ▶ $|\psi\rangle$ が \hat{A} の固有状態でその固有値が α なら、測定値は確率 100% でその α となる。

$$\hat{A} |\psi\rangle = \alpha |\psi\rangle \text{ なら、 } P(\alpha) = |\langle \alpha | \psi \rangle|^2 = 1. \quad (183)$$

- ▶ 一般に、状態 $|\psi\rangle$ に対して \hat{A} の期待値は $\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ で得られる。

$$\text{(証明)} \quad \hat{A} |\psi\rangle = \hat{A} \sum_k c_k |\alpha_k\rangle = \sum_k c_k \alpha_k |\alpha_k\rangle. \quad (184)$$

$$\therefore \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_k c_k \alpha_k \langle \psi | \alpha_k \rangle = \sum_k c_k \alpha_k c_k^* = \sum_k \alpha_k |c_k|^2 \quad (185)$$

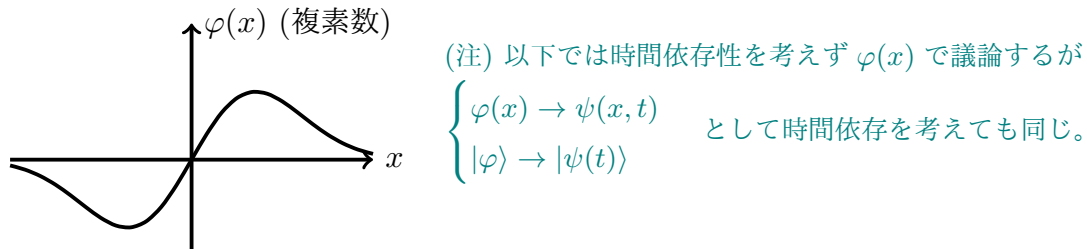
$$= \sum_k \alpha_k P(\alpha_k) = \langle A \rangle \quad \blacksquare \quad (186)$$

← ここまで

§ 4.2 座標表示とブラケット表示の関係

この節の内容は独立した章にしても良かったですね。この節の内容については教科書 [3] の最初の章が丁寧に分かりやすいかと思います。

座標表示では、1 粒子状態が波動関数 $\varphi(x)$ で表されていた。



この状態をブラケット表示で $|\varphi\rangle$ と書こう。... $|\varphi\rangle$ と $\varphi(x)$ の関係は?

§ 4.2.1 ブラケット表示での位置演算子 \hat{X} と $|x\rangle$ 、および $|\varphi\rangle$ と $\varphi(x)$

▶ ブラケット表示で「位置 x 」に対応する演算子 \hat{X} とその固有状態 $|x\rangle$ を考えよう。

$$\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle, \quad (|x\rangle \text{ 中の } x \text{ は固有値を表す単なるラベル}) \quad (187)$$

$$\hat{X}|a\rangle = a|a\rangle. \quad (188)$$

\hat{X} の固有値は連続な値を取る。

▶ 確率解釈 $P_{AB} = |\langle B|A\rangle|^2$ を思い出すと、

$$P \left(\begin{array}{l} |\varphi\rangle \text{ 状態で粒子を} \\ x \text{ に見つける確率} \end{array} \right) \propto |\langle x|\varphi\rangle|^2. \quad (189)$$

みたいになって欲しい。 x は連続なので幅を持たせて

$$P \left(\begin{array}{l} |\varphi\rangle \text{ 状態で粒子を} \\ x \sim x + dx \text{ に見つける確率} \end{array} \right) = \rho(x)dx = |\langle x|\varphi\rangle|^2 dx. \quad (190)$$

とする。全領域のどこかにいる確率は 1 なので、

$$P \left(\begin{array}{l} |\varphi\rangle \text{ 状態で粒子を} \\ \text{どこかに見つける確率} \end{array} \right) = \int \rho(x)dx = \int |\langle x|\varphi\rangle|^2 dx = 1. \quad (191)$$

▶ (この形、前も見ましたね...!) そこで $\langle x|\varphi\rangle = \varphi(x)$ と定義すれば良い。

▶ コメント : $|x\rangle$ は以下をみたすとする。

- 完全性 : $\int dx |x\rangle \langle x| = \mathbb{1}$ 、恒等演算子 ——— (★).
- 直交性 : $\langle x|y\rangle = \delta(x-y)$ ——— (★★) ($\delta(x)$ はデルタ関数.)

いくつかチェックすると、まず (★) より

$$|\varphi\rangle = \mathbb{1} |\varphi\rangle = \int dx |x\rangle \underbrace{\langle x|\varphi\rangle}_{\varphi(x)} = \int dx \varphi(x) |x\rangle \quad (192)$$

$$\therefore \langle \varphi|\varphi\rangle = \langle \varphi| \int dx \varphi(x) |x\rangle = \int dx \varphi(x) \underbrace{\langle \varphi|x\rangle}_{\varphi^*(x)} = \int dx |\varphi(x)|^2. \quad (193)$$

よって $\langle \varphi|\varphi\rangle = 1 \iff \int dx |\varphi(x)|^2 = 1.$... OK

さらに $\langle y|\varphi\rangle \stackrel{(192)}{=} \int dx \varphi(x) \langle y|x\rangle \stackrel{(★★)}{=} \int dx \varphi(x) \delta(x-y) = \varphi(y).$... OK.

(他にも (★), (★★) を用いて色々チェック出来ます。やってみましょう。)

▶ $\langle x|\hat{X}|\varphi\rangle = x\varphi(x)$ である。

$$\text{(証明)} \quad \langle x|\hat{X}|\varphi\rangle = \int dy \underbrace{\langle x|\hat{X}|y\rangle}_{\substack{=y\langle x|y\rangle \\ =y\delta(x-y)}} \underbrace{\langle y|\varphi\rangle}_{\varphi(y)} = x\varphi(x) \quad \blacksquare \quad (194)$$

▶ \hat{X} はエルミートである。

(証明) 任意の $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ に対して

$$\langle \alpha|\hat{X}|\beta\rangle = \int dy \langle \alpha|\hat{X}|y\rangle \langle y|\beta\rangle = \int dy y \langle \alpha|y\rangle \langle y|\beta\rangle. \quad (195)$$

$$\begin{aligned} \langle \beta|\hat{X}|\alpha\rangle^* &= (\text{上の式で } \alpha \leftrightarrow \beta)^* \\ &= \left(\int dy y \langle \beta|y\rangle \langle y|\alpha\rangle \right)^* = \int dy y \langle y|\beta\rangle \langle \alpha|y\rangle. \end{aligned} \quad (196)$$

$$\therefore \langle \alpha|\hat{X}|\beta\rangle = \langle \beta|\hat{X}|\alpha\rangle^* = \langle \hat{X}\alpha|\beta\rangle. \blacksquare \quad (197)$$

5/12 ここまで。

5/19 ここから。 来週 5/26 の中間試験について § 0.3 に書いてあります。

前回 (5/12) までのあらすじ

§ 1 はじめに § 2 シュレディンガー方程式 (座標表示)

§ 3 シュレディンガー方程式 (ブラケット表示)

§ 4 演算子とその固有状態

§ 4.1 ブラケット表示での演算子

§ 4.1.1 エルミート演算子 § 4.1.2 物理量の測定値、期待値

§ 4.2 座標表示とブラケット表示の関係

§ 4.2.1 \hat{X} と $|x\rangle$ 、 $|\varphi\rangle$ と $\varphi(x)$ § 4.2.2 今日ココから

§ 4.2.2 運動量演算子 \hat{P}

▶ 座標表示では運動量の演算子は波動関数 $\varphi(x)$ に対して

$$\hat{p}_{\text{座標表示}} \underbrace{\varphi(x)}_{\langle x|\varphi\rangle} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \underbrace{\varphi(x)}_{\langle x|\varphi\rangle} \quad (x \text{ に関する微分演算子}), \quad (198)$$

と作用した。そこでブラケット表示での運動量演算子 \hat{P} を $|\varphi\rangle$ への作用

$$\langle x|\hat{P}|\varphi\rangle = \hat{p}_{\text{座標表示}} \langle x|\varphi\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x|\varphi\rangle \quad (199)$$

によって定義する。

▶ 演算子 \hat{P} は以下の関係式をみたす。

$$\text{エルミート性} : \langle \alpha|\hat{P}\beta\rangle = \langle \hat{P}\alpha|\beta\rangle \quad (200)$$

$$\begin{aligned} \text{並進} : |x+\epsilon\rangle &= \left(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar}\hat{P}\right)|x\rangle + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\ \longleftrightarrow \langle x+\epsilon| &= \langle x|\left(1 + \frac{i\epsilon}{\hbar}\hat{P}\right) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (201)$$

(ただし $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ は ϵ の 2 次以上の項を表す。)

$$\text{交換関係} : [\hat{X}, \hat{P}] = \hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X} = i\hbar. \quad (202)$$

最後の式は \hat{X} と \hat{P} の正準交換関係と言い、座標表示の演算子でも同じ関係式が成立している。

$$[\hat{x}, \hat{p}]_{\text{座標表示}} = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}|_{\text{座標表示}} = i\hbar. \quad (203)$$

非常に重要だがこの講義ではこれ以上掘り下げない。

(203) の証明：任意の $\varphi(x)$ に対して

$$[\hat{x}, \hat{p}]_{\text{座標表示}} \varphi(x) = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}|_{\text{座標表示}} \varphi(x) \quad (204)$$

$$= x(-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x) - (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} (x\varphi(x)) \quad (205)$$

$$= i\hbar \varphi(x). \quad (206)$$

$$\therefore [\hat{x}, \hat{p}]_{\text{座標表示}} = i\hbar. \quad \blacksquare \quad (207)$$

- ▶ (200), (201), (202) の証明は（時間の都合上）講義では省略する。時間切れですいません…。pdf の講義ノートを見ておいて下さい。)

ここからしばらく講義では省略 →

- ▶ まずエルミート性 (200) の証明。

$$\langle \hat{P}\alpha | \beta \rangle = \langle \beta | \hat{P}\alpha \rangle^* = \left(\int dx \langle \beta | x \rangle \langle x | \hat{P}\alpha \rangle \right)^* \quad (208)$$

$$= \left(\int dx \langle \beta | x \rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \langle x | \alpha \rangle \right)^* \quad (209)$$

$$= \int dx \langle x | \beta \rangle \left(+i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle \alpha | x \rangle \right) \quad (210)$$

$$= \int dx \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x | \beta \rangle \right) \langle \alpha | x \rangle \quad (211)$$

(\because 部分積分, $\alpha(x) = \langle x | \alpha \rangle, \beta(x) = \langle x | \beta \rangle \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$ を仮定)

$$= \int dx \langle x | \hat{P}\beta \rangle \langle \alpha | x \rangle \quad (212)$$

$$= \int dx \langle \alpha | x \rangle \langle x | \hat{P}\beta \rangle = \langle \alpha | \hat{P}\beta \rangle \quad \blacksquare \quad (213)$$

- ▶ 次に (201) の証明。まず座標表示の微分演算子に関して

$$\varphi'(x) = \frac{i}{\hbar} \hat{p}_{\text{座標表示}} \varphi(x). \quad (214)$$

なので、 $\varphi(x)$ のテイラー展開より

$$\varphi(x + \epsilon) = \varphi(x) + \epsilon \varphi'(x) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (215)$$

$$= \varphi(x) + \epsilon \left(\frac{i}{\hbar} \hat{p}_{\text{座標表示}} \right) \varphi(x) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (216)$$

$$= \left(1 + \frac{i\epsilon}{\hbar} \hat{p}_{\text{座標表示}} \right) \varphi(x) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad \blacksquare \quad (217)$$

よって

$$\langle x + \epsilon | \varphi \rangle = \left(1 + \frac{i\epsilon}{\hbar} \hat{P}_{\text{座標表示}} \right) \langle x | \varphi \rangle + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (218)$$

$$= \left(\langle x | \varphi \rangle + \frac{i\epsilon}{\hbar} \langle x | \hat{P} | \varphi \rangle \right) + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (219)$$

$$= \langle x | \left(1 + \frac{i\epsilon}{\hbar} \hat{P} \right) | \varphi \rangle + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (220)$$

両辺の複素共役をとって、(\hat{P} のエルミート性より)

$$\langle \varphi | x + \epsilon \rangle = \langle \varphi | \left(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} \hat{P} \right) | x \rangle + \mathcal{O}(\epsilon^2) \quad (221)$$

これらの式が任意の φ について成立するので

$$\langle x + \epsilon | = \langle x | \left(1 + \frac{i\epsilon}{\hbar} \hat{P} \right) + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (222)$$

$$| x + \epsilon \rangle = \left(1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} \hat{P} \right) | x \rangle + \mathcal{O}(\epsilon^2). \quad \blacksquare \quad (223)$$

▶ 最後に交換関係 (202) について。任意のベクトル $|\alpha\rangle$ と $|\beta\rangle$ に対して

$$\langle \alpha | [\hat{X}, \hat{P}] | \beta \rangle = \langle \alpha | (\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X}) | \beta \rangle \quad (224)$$

$$= \int dy \langle \alpha | \hat{X} | y \rangle \langle y | \hat{P} | \beta \rangle - \int dy \underbrace{\langle \alpha | \hat{P} | y \rangle}_{\langle y | \hat{P} | \alpha \rangle^*} \langle y | \hat{X} | \beta \rangle \quad (225)$$

$$= \int dy y \langle \alpha | y \rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \langle y | \beta \rangle \right) - \int dy \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \langle y | \alpha \rangle \right)^* y \langle y | \beta \rangle$$

$$= \int dy \left(+i\hbar \frac{\partial}{\partial y} (y \langle \alpha | y \rangle) \right) \langle y | \beta \rangle - \int dy \left(+i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \langle \alpha | y \rangle \right) y \langle y | \beta \rangle$$

$$\text{(第一項は部分積分, } \frac{y \rightarrow \pm\infty}{\rightarrow} 0 \text{ を仮定.)} \quad (226)$$

$$= i\hbar \int dy \langle \alpha | y \rangle \langle y | \beta \rangle = i\hbar \langle \alpha | \beta \rangle. \quad (227)$$

これが任意の $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ で成立するので

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar \quad \blacksquare \quad (228)$$

← ここまで。

§ 4.2.3 ハミルトニアン演算子 \hat{H} と、座標表示シュレディンガー方程式の再導出。

- ▶ ポテンシャル $V(x)$ が与えられたとき、ブラケット表示でのハミルトニアン演算子 \hat{H} を

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{P}^2 + V(\hat{X}), \quad (229)$$

で定義する。 \hat{P} と \hat{X} のエルミート性から、 \hat{H} もエルミートとなる。(証明略。各自やってみましょう。)

- ▶ この \hat{H} の固有状態 $|\varphi\rangle$ と固有値 (固有エネルギー) E が与えられたとする。

$$\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle. \quad (230)$$

両辺の左から $\langle x|$ をかけると

$$\langle x| \left(\frac{1}{2m} \hat{P}^2 + V(\hat{X}) \right) |\varphi\rangle = E \langle x|\varphi\rangle. \quad (231)$$

ここで § 4.2.1、§ 4.2.2 より

$$\langle x|\varphi\rangle = \varphi(x), \quad (232)$$

$$\langle x|\hat{X}|\varphi\rangle = x\varphi(x), \quad (233)$$

$$\langle x|\hat{P}|\varphi\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x), \quad (234)$$

を用いると

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \varphi(x) = E\varphi(x). \quad (235)$$

時間によらないシュレディンガー方程式 (座標表示) が再導出できた!

- ▶ 同様にブラケット表示の $|\psi(t)\rangle$ が (時間依存する) シュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle = \left(\frac{1}{2m} \hat{P}^2 + V(\hat{X}) \right) |\psi(t)\rangle \quad (236)$$

をみたしているとする、左から $\langle x|$ をかけて、 $\psi(x, t) = \langle x|\psi(t)\rangle$ を用いて

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, t). \quad (237)$$

と座標表示のシュレディンガー方程式が得られる。

§ 5 調和振動子（座標表示とブラケット表示の両方で見ている） (5/19)

ポテンシャルが $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ のとき（調和振動子）の、時間依存しないシュレディンガー方程式 $\hat{H}\varphi = E\varphi$ を座標表示とブラケット表示の両方で解いてみよう。

§ 5.1 その前にまず古典論

▶ その前にまず古典論ではどうなるか思い出すと、...

$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ なので、運動方程式は

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = F(x) = -V'(x) = -m\omega^2 x(t). \quad (-V'(x) \text{ を追加 [5/19]}) \quad (238)$$

$$\therefore x(t) = c_1 \cos \omega t + c_2 \sin \omega t. \quad (\text{単振動}) \quad (239)$$

$$\begin{aligned} \text{エネルギー } E &= \frac{1}{2}m\dot{x}'(t)^2 + V(x(t)) \\ &= \dots = \frac{1}{2}(c_1^2 + c_2^2)m\omega^2. \end{aligned} \quad (240)$$

- エネルギー E は積分定数 c_1, c_2 で決まり、連続な値を取る。
- 特に最低エネルギー状態は $E = 0$ 。 ($c_1 = c_2 = 0$ で $x(t) = 0$ のとき)

▶ では量子論ではどうなるか？

§ 5.2 解き方 1 : ブラケット表示で。

▶ シュレディンガー方程式

$$\hat{H}|\varphi\rangle = \left(\frac{1}{2m}\hat{P}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2 \right) |\varphi\rangle = E|\varphi\rangle. \quad (241)$$

を解きたい。以下の演算子を定義する。

$$\text{消滅演算子 : } \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{X} + i\hat{P}). \quad (242)$$

$$\text{生成演算子 : } \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{X} - i\hat{P}). \quad (243)$$

これらは以下の関係式を満たす。(計算略。各自やってみよう!)

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \quad (244)$$

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \hat{a}^\dagger \hat{a} \right). \quad (245)$$

$$[\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar\omega \hat{a}. \quad (246)$$

$$[\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega \hat{a}^\dagger. \quad (247)$$

▶ \hat{H} のエネルギー固有値 $|\varphi_E\rangle$ があつたとする。

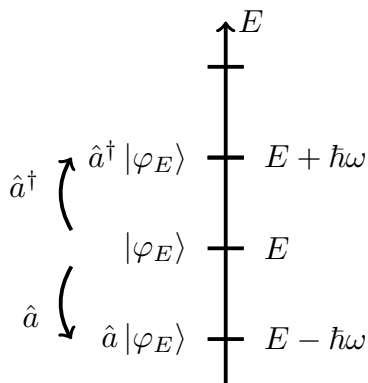
$$\hat{H} |\varphi_E\rangle = E |\varphi_E\rangle. \quad (248)$$

すると

$$\hat{H} (\hat{a} |\varphi_E\rangle) = \left(\underbrace{[\hat{H}, \hat{a}]}_{-\hbar\omega \hat{a}} + \hat{a} \underbrace{\hat{H}}_{\rightarrow E} \right) |\varphi_E\rangle = (E - \hbar\omega) (\hat{a} |\varphi_E\rangle). \quad (249)$$

$$\hat{H} (\hat{a}^\dagger |\varphi_E\rangle) = \left(\underbrace{[\hat{H}, \hat{a}^\dagger]}_{\hbar\omega \hat{a}^\dagger} + \hat{a}^\dagger \underbrace{\hat{H}}_{\rightarrow E} \right) |\varphi_E\rangle = (E + \hbar\omega) (\hat{a}^\dagger |\varphi_E\rangle). \quad (250)$$

より、 $\hat{a} |\varphi_E\rangle$ と $\hat{a}^\dagger |\varphi_E\rangle$ もそれぞれ \hat{H} の固有状態になる。



▶ \hat{a} を作用させると、どんどん低いエネルギーの固有状態が出来る。そこで一番低いエネルギーの状態(基底状態)が一つだけ存在すると仮定して、それを $|0\rangle$ と書こう。それ以上エネルギーの低い状態はないはずなので、

$$\hat{a} |0\rangle = 0. \quad (251)$$

この状態のエネルギーは、(5/19 修正、 $|0\rangle$ が抜けてました。)

$$\hat{H} |0\rangle = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \hat{a}^\dagger \hat{a} \right) |0\rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega |0\rangle. \quad \therefore E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega. \quad (252)$$

他の状態はこの状態に \hat{a}^\dagger を何回も作用させれば作れて、(5/19 修正、 $|n\rangle$ が抜けてました。)

$$|n\rangle = c_n (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle. \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (253)$$

$$\hat{H}|n\rangle = \left(\frac{1}{2} + n\right) \hbar\omega |n\rangle. \quad \therefore E_n = \left(\frac{1}{2} + n\right) \hbar\omega. \quad (254)$$

(規格化 c_n は省略する。) 解けた!

- エネルギー E はとびとびの値をとり、 $E_n = \left(\frac{1}{2} + n\right) \hbar\omega$ ($n = 0, 1, 2, \dots$).
- 最低エネルギー状態は $E = \frac{1}{2} \hbar\omega$ ($\neq 0$).

§ 5.3 解き方 2 : 座標表示で。

▶ シュレディンガー方程式 (微分方程式)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right) \varphi(x) = E\varphi(x). \quad (255)$$

を解きたい。

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} y, \quad (256)$$

として整理すると

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2 + \frac{2E}{\hbar\omega}\right) \varphi(y) = 0. \quad (257)$$

▶ $y \rightarrow \pm\infty$ では右辺の E が無視できて

$$\frac{d^2}{dy^2} \varphi(y) \sim y^2 \varphi(y), \quad (x \rightarrow \pm\infty). \quad (258)$$

となるので、

$$\varphi(y) = e^{-y^2/2} f(y), \quad (259)$$

という形を仮定して代入、整理すると

$(\varphi(y) \sim e^{+y^2/2}$ だと $\varphi(y) \xrightarrow{y \rightarrow \pm\infty} \infty$ で規格化できない。

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - 2y \frac{d}{dy} + 2\nu\right) f(y) = 0, \quad \nu = \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}. \quad (260)$$

- ▶ (260) は「エルミート微分方程式」と呼ばれる。(例えば物理学科では「物理数学 II」で扱う。) 詳細は省くが、これが $y \rightarrow \pm\infty$ で規格化可能な解を持つためには

$$\nu = n = 0, 1, 2, \dots \quad (261)$$

でないといけないことが知られている。これは (260) を見ると (5/19 追加)

$$E = E_n = \left(\frac{1}{2} + n\right) \hbar\omega, \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \quad (262)$$

に相当する。 全く違う解き方で同じ解が得られた！

(この解法では、とびとびのエネルギーは波動関数の規格化条件から得られる。)

- ▶ $n = 0, 1, 2, \dots$ のときの $f(y)$ の解は「エルミート多項式」という多項式で与えられる。

$$f_0(y) = 1, \quad (263)$$

$$f_1(y) = 2y, \quad (264)$$

$$f_2(y) = 4y^2 - 2, \quad (265)$$

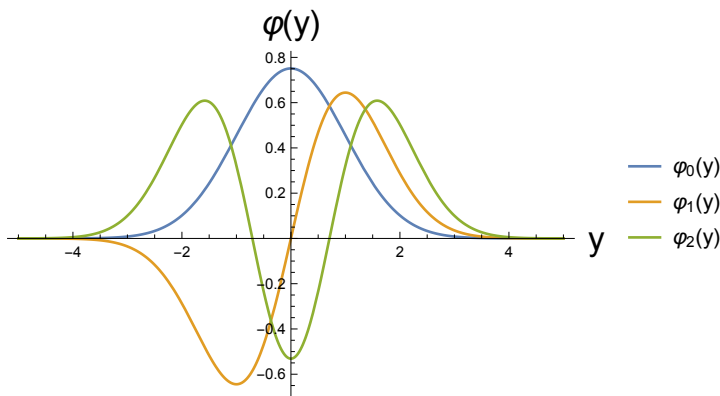
$$\dots \quad (266)$$

$$f_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}. \quad (267)$$

波動関数は

$$\varphi_n(x) = c_n e^{-y^2/2} f_n(y), \quad y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad (268)$$

で与えられる。(規格化 c_n は省略。)



講義ノートは以上です。お疲れ様でした！

参考文献

- [1] 「新版 量子論の基礎」 清水明、サイエンス社.
- [2] 「量子力学 10 講」 谷村省吾、名古屋大学出版会.
- [3] “Modern Quantum Mechanics,” J. J. Sakurai, Addison Wesley.