

2023 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：2023 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
§ 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	12
§ 2	シュレディンガー方程式（座標表示）	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）	19
§ 2.4	確率解釈	21
§ 2.5	物理量と演算子	25
§ 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）	29
§ 2.7	調和振動子の例	32
§ 3	シュレディンガー方程式（ブラケット表示）	35
§ 3.1	ブラベクトルとケットベクトル	36
§ 3.2	シュレディンガー方程式（ブラケット表示）	39
§ 3.3	2状態系（2準位系）の例	40
§ 3.A	（補足）演算子とその固有状態	43

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。本講義では現代物理学の大きな柱として、相対論と量子力学を扱う。高校までの知識をもとに、それらの基本方程式を導くとともに、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であるが、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 量子論 (担当:浜口) 4/6, 4/13, 4/20, 4/27, 5/11, 5/18, 5/25(中間試験)
後半 相対論 (担当:浅井) 6/8, 6/15, 6/22, 6/29, 7/6, 7/13

- ▶ 講義の形式
 - 初回 4/6 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（4/13～5/18 の 5 回）は対面で、黒板に板書する形式の予定です。
 - 後半（6/8～7/13）も対面の予定です。
- ▶ 成績評価について

成績は、中間試験（前半パート分、5/25 に実施）とレポート（後半パート分、詳細は追って連絡する）によって評価します。

§ 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。

▶ 講義の前半パートに関するお知らせがある場合は、ITC-LMS でアナウンスします。ITC-LMS がトラブルなどで見られないときは[こちら](#)のウェブページにアナウンスを載せることにします。

▶ 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。）（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。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

- ▶ 5/25(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。

§ 1 はじめに

§ 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。

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

- ▶ § 3 以降は未定ですが、ブラケット表示のシュレディンガー方程式を扱うと思います。

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

昨年度の講義と重複する内容が多いかと思いますが、少し変更したり追加したりするかもしれません。

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「(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。

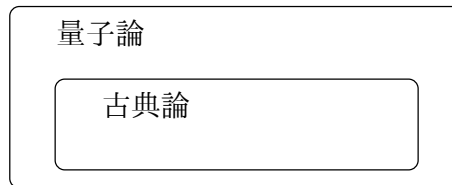
§ 1.2 古典論の破綻、粒子性と波動性

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

(1) ボールをたくさん投げる。 図を描く

$$\begin{cases} N_1(x) : \text{穴 1 だけ開ける} \\ N_2(x) : \text{穴 2 だけ開ける} \\ N_{12}(x) : \text{穴 1 と穴 2 を両方開ける} \end{cases} \implies N_{12}(x) = N_1(x) + N_2(x) \quad (3)$$

(2) 波。 図を描く

波の干渉

$$\begin{cases} I_1(x) : \text{スリット 1 だけ開ける} \\ I_2(x) : \text{スリット 2 だけ開ける} \\ I_{12}(x) : \text{スリット 1 とスリット 2 を両方開ける} \end{cases} \implies I_{12}(x) \neq I_1(x) + I_2(x) \quad (4)$$

(3) 電子ではどうか？ 図を描く

→ (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 エネルギー $E = h\nu$ 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

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

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

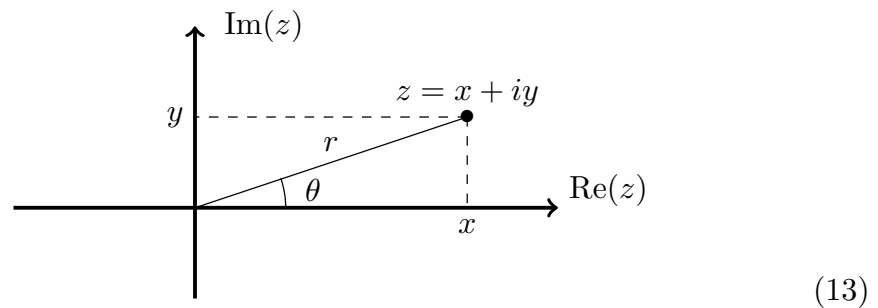
▶ 複素数

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

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

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

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



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。

§ 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年生秋学期の「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

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

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

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

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

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

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

先週 (4/6) 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

指数関数、複素数、テイラー展開、複素指数関数、 $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$

偏微分 ← 今日ココから。

§ 2 シュレディンガー方程式 (座標表示)

§ 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

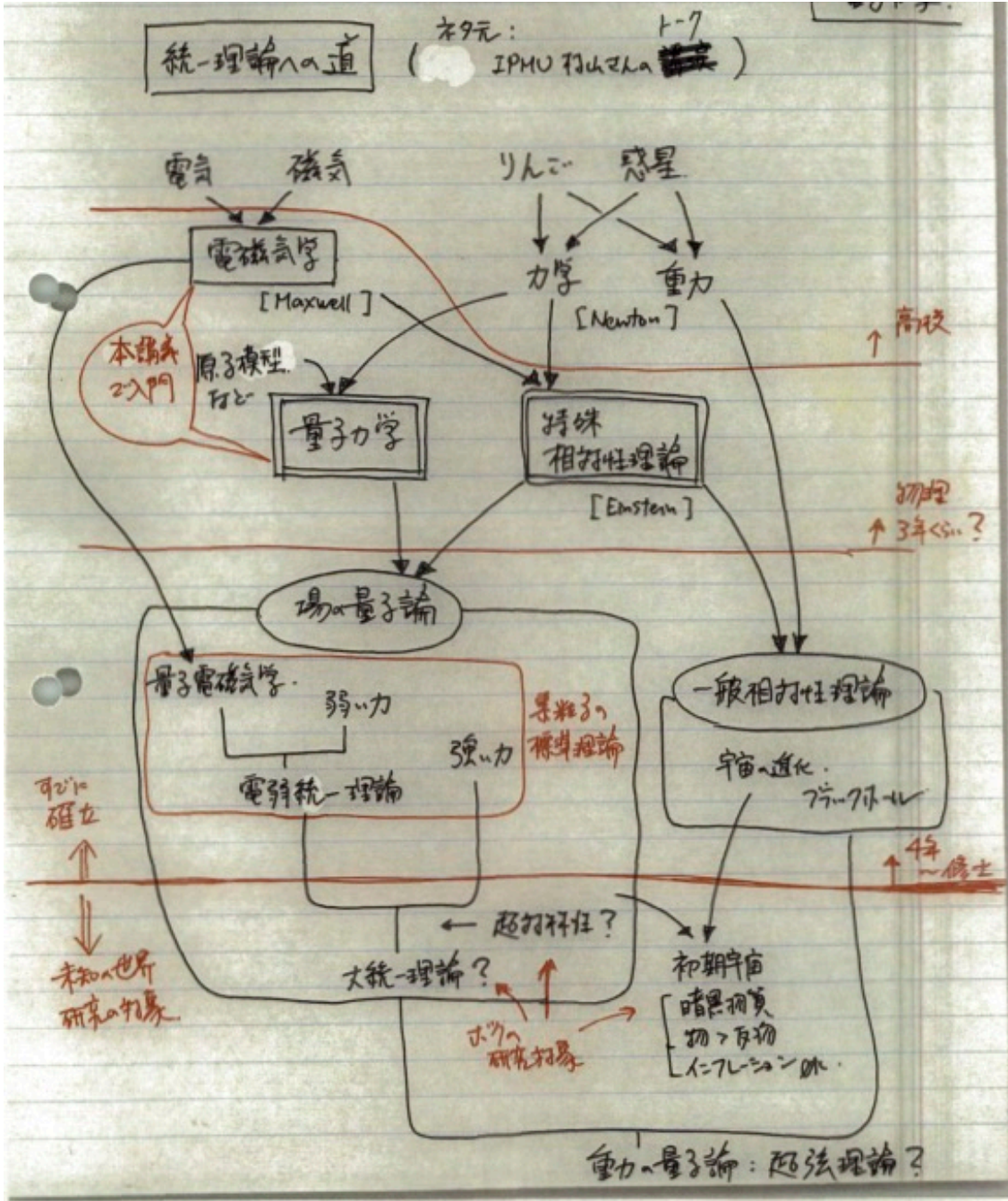
$$\frac{\partial}{\partial x} f(x, y) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{f(x + \epsilon, y) - f(x, y)}{\epsilon} \quad (38)$$

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

例 :

$$f(x, y) = x^2 + xy \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} f(x, y) = 2x + y \\ \frac{\partial}{\partial y} f(x, y) = x \end{cases} \quad f(x, y) = e^{xy} \quad \begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} f(x, y) = ye^{xy} \\ \frac{\partial}{\partial y} f(x, y) = xe^{xy} \end{cases} \quad (40)$$

§ 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



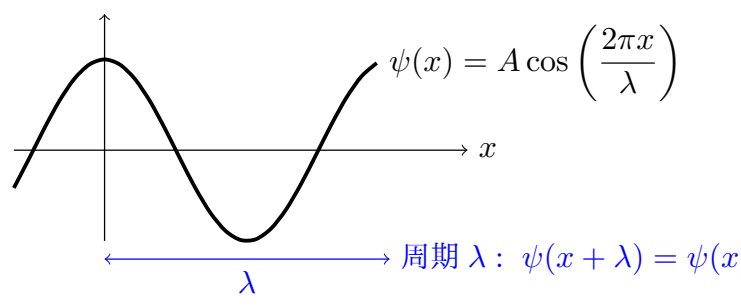
§ 2 シュレディンガー方程式（座標表示）

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

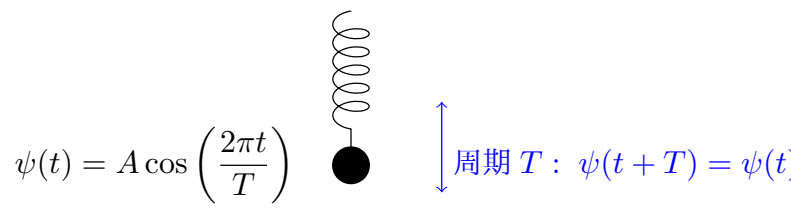


$$\psi(x) = A \cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right)$$

周期 λ : $\psi(x + \lambda) = \psi(x)$

(41)

▶ 周期 T の振動

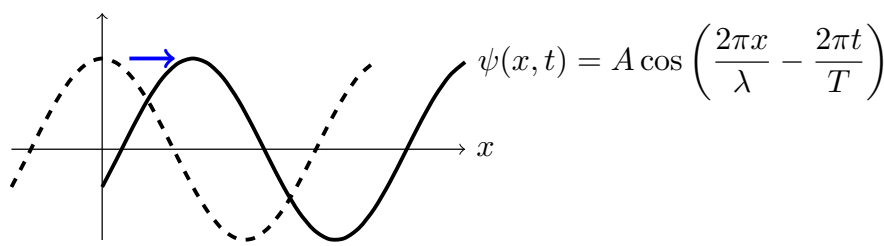


$$\psi(t) = A \cos\left(\frac{2\pi t}{T}\right)$$

周期 T : $\psi(t + T) = \psi(t)$


(42)

▶ 周期 T 、波長 λ で x 方向に進む波

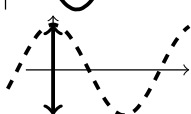


$$\psi(x, t) = A \cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda} - \frac{2\pi t}{T}\right)$$
(43)

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



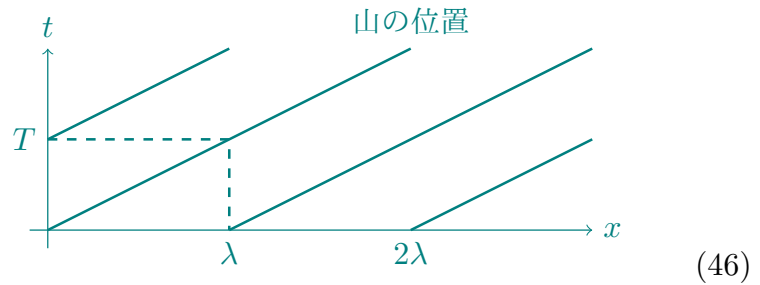
場所を固定すると（例えば $x = 0$ ）: $\psi(0, t) = A \cos\left(-\frac{2\pi t}{T}\right)$.



波の進む速さは？

$$A \cos\left(\frac{2\pi x}{\lambda} - \frac{2\pi t}{T}\right) = A \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda} \underbrace{\left(x - \frac{\lambda}{T}t\right)}_{x-vt}\right) \quad (44)$$

速さ $\boxed{v = \frac{\lambda}{T}}$ (45)



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、

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{波長 } \lambda \text{ の代わりに} \\ \text{周期 } T \text{ の代わりに} \end{array} \right. \quad \boxed{\begin{array}{l} \text{波数 } k = \frac{2\pi}{\lambda} \\ \text{振動数 } \nu = \frac{1}{T} \\ \text{または角振動数 } \omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi}{T} \end{array}} \quad (47)$$

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

$$\psi(x, t) = A \cos(kx - \omega t). \quad (48)$$

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

$$\boxed{\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}} \quad (49)$$

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

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

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、

$$\text{波} \longleftrightarrow \text{粒子} \quad (51)$$

$$\text{波長 } \lambda \longleftrightarrow \text{運動量 } p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad \left(\because k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \hbar \equiv \frac{h}{2\pi} \right) \quad (52)$$

$$\text{振動数 } \nu \longleftrightarrow \text{エネルギー } E = h\nu = \hbar\omega \quad (\because \omega = 2\pi\nu) \quad (53)$$

- ▶ (非相対論的) 自由粒子のエネルギーは

$$E = \frac{1}{2m}p^2. \quad (54)$$

- ▶ (52), (53), (54) より、 ω と k の関係 (分散関係という)は

$$\hbar\omega = \frac{1}{2m}(\hbar k)^2. \quad (55)$$

- ▶ この関係式を (粒子を表すはずの)

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} \quad (56)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= -i\omega Ae^{i(kx - \omega t)} \\ &= -i\omega \psi(x, t). \end{aligned} \quad (57)$$

$$\therefore \underline{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = (\hbar\omega) \psi(x, t)}. \quad (58)$$

x 微分

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x, t) &= ikAe^{i(kx-\omega t)} \\ &= ik\psi(x, t).\end{aligned}\tag{59}$$

$$\therefore \underline{-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x, t) = (\hbar k)\psi(x, t)}.\tag{60}$$

もう 1 回微分して

$$\underline{\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\psi(x, t) = (\hbar k)^2\psi(x, t)}.\tag{61}$$

▶ (55), (58), (61) より

シュレディンガー方程式 (座標表示、1次元、自由粒子)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\psi(x, t)\tag{62}$$

$$\text{あるいは } i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, t).\tag{63}$$

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、

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = \omega A\sin(kx - \omega t),\tag{64}$$

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、

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

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 (63) は線形なので、一般に、 ψ_1 と ψ_2 が (63) の解なら、 $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ も解となる。

$$\text{証明: } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_1(x, t). \quad (66)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_2(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_2(x, t). \quad (67)$$

$$\therefore i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{(c_1\psi_1(x, t) + c_2\psi_2(x, t))}_{\psi(x, t)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \underbrace{(c_1\psi_1(x, t) + c_2\psi_2(x, t))}_{\psi(x, t)}. \quad (68)$$

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

$$\psi_1(x, t) = A_1 e^{i(k_1 x - \omega_1 t)} \quad \left(\omega_1 = \frac{\hbar}{2m} k_1^2 \right), \quad (69)$$

$$\psi_2(x, t) = A_2 e^{i(k_2 x - \omega_2 t)} \quad \left(\omega_2 = \frac{\hbar}{2m} k_2^2 \right), \quad (70)$$

はそれぞれ (63) の解だが (確認してみよう)、その足し算

$$\psi(x, t) = \psi_1(x, t) + \psi_2(x, t), \quad (71)$$

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

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \psi_1(x, t) + \psi_2(x, t) \\ &= A_1 e^{i(k_1 x - \omega_1 t)} + A_1 e^{i(-k_1 x - \omega_1 t)} \\ &= A_1 e^{-i\omega_1 t} (e^{ik_1 x} + e^{-ik_1 x}) \\ &= 2A_1 e^{-i\omega_1 t} \cos(k_1 x). \end{aligned} \quad (72)$$

なんていう解も作れる。

- もっと一般に

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^N A_n e^{i(k_n x - \omega_n t)}, \quad \omega_n = \frac{\hbar}{2m} k_n^2, \quad (73)$$

も (63) 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

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk, \quad \omega(k) = \frac{\hbar}{2m} k^2, \quad (74)$$

が (63) 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 (63) 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。

$$\psi(x, t_0 + \Delta t) \simeq \psi(x, t_0) + \Delta t \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t_0)}_{\psi(x, t_0) \text{ で決まる}} + \mathcal{O}(\Delta t)^2 \quad (75)$$

(v) (63) 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.

4/20

先週 (4/13) 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)

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

§ 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)

↖ 今日ココから。

§ 2.4 確率解釈

§ 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 (63)

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

を導入する際に、自由粒子のエネルギーと運動量の関係

$$E = \frac{1}{2m} p^2, \quad (76)$$

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

$$E = \frac{1}{2m} p^2 + V(x). \quad (77)$$

そこで、§ 2.2 で $E = \frac{1}{2m} p^2 \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ としていたところを $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ と置き換えると... (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）

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x, t). \quad (78)$$

§ 1.1 に書いた一つ目の目標に辿り着いた。

- ▶ コメント

(i) 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、(78) 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「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、

$$\psi(x, t) = e^{-iat - bx^2}, \quad (79)$$

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 (78) 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するかも。

(iv) (78) は 1 次元の場合だが、 3 次元の場合は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, y, z, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)}_{\nabla^2} + V(x, y, z) \right] \psi(x, y, z, t), \quad (80)$$

となる。

§ 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？

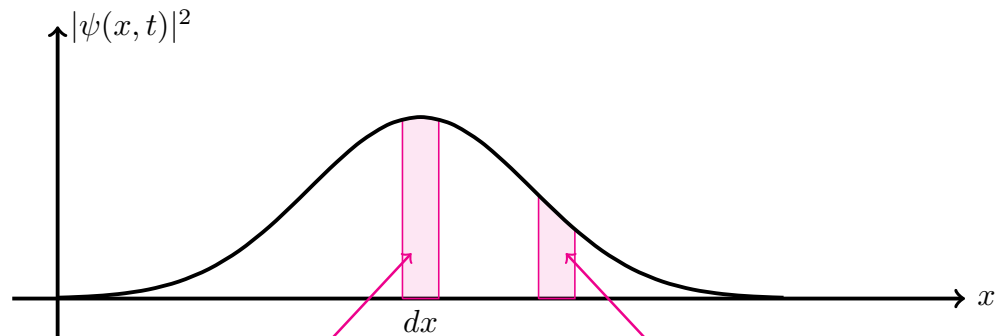
波動関数 $\psi(x, t)$ は、時刻 t における1粒子の物理状態を表す。この状態において粒子の位置を測定すると、確定した値が得られるのではなく、測定値は確率的にばらつく。

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

$$|\psi(x, t)|^2 dx \quad (81)$$

に比例する。

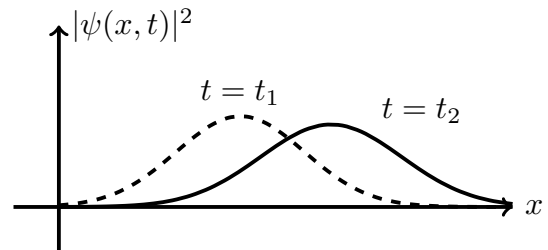


粒子がこの辺に見つかる確率が高い。

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

$$\rho(x, t) = N|\psi(x, t)|^2. \quad (82)$$

N はいくつだろうか？

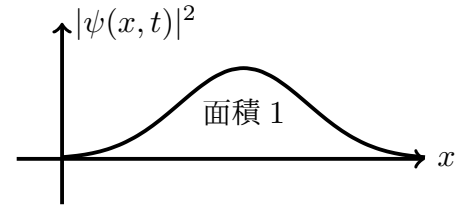
- ▶ 全空間で積分すると、全空間のどこかに粒子が見つかる確率は 1 のはずだから、

$$P_{\text{全空間}} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, t) dx = 1. \quad (83)$$

$$\therefore N \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (84)$$

$$\therefore N = \frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx}. \quad (85)$$

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

$$\tilde{\psi}(x, t) = \sqrt{N}\psi(x, t), \quad (86)$$

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

$$P_{\text{全空間}} = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx. \quad (87)$$

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。

$$\frac{d}{dt} P_{\text{全空間}} = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx \quad (\psi(x, t) \text{ を省略して } \psi \text{ と書く。}) \quad (88)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) dx \quad (\text{微分と積分の交換は気にしない。}) \quad (89)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} (\dot{\psi}^* \psi + \psi^* \dot{\psi}) dx, \quad \left(\dot{\psi} = \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \right) \quad (90)$$

- ▶ 一方、シュレディンガー方程式より

$$i\hbar \dot{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + V\psi \quad (V(x) \text{ の } x \text{ も省略。}) \quad (91)$$

$$\therefore -i\hbar \dot{\psi}^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* + V\psi^* \quad (92)$$

- ▶ (90) に代入して整理すると (各自やってみよう)

$$\frac{d}{dt} P_{\text{全空間}} = \frac{-i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* - \psi^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi \right) dx \quad (93)$$

(右辺をさらに変形して)

$$= \frac{-i\hbar}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) dx \quad (94)$$

$$= \frac{-i\hbar}{2m} \left[\psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi \right]_{x=-\infty}^{x=\infty}. \quad (95)$$

$\psi(x, t)$ 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

$$\frac{d}{dt} P_{\text{全空間}} = 0, \quad (96)$$

$$P_{\text{全空間}} = 1 = (\text{一定}). \quad (97)$$

確率の保存が示せた。

4/27

先週 (4/20) 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)

§ 2.4 確率解釈

§ 2.5 物理量と演算子

↖ 今日ココから。

その前に、、、前回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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \psi(x, t). \quad (98)$$

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

$$(\text{左辺}) = i\hbar(-ia)\psi(x, t), \quad (\text{右辺}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} (-2b + 4b^2 x^2) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \psi(x, t), \quad (99)$$

ここから、(左辺)=(右辺) が x, t によらずに成り立つには

$$b = \frac{m\omega}{2\hbar}, \quad a = \frac{1}{2}\omega. \quad (100)$$

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

$$\psi(x, t) = \exp\left(-\frac{i}{2}\omega t - \frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right), \quad (101)$$

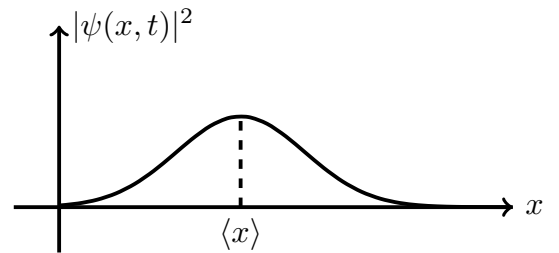
の解があることが分かりました。後で見るように、これは調和振動子ポテンシャルにおける基底状態 (エネルギーが一番低い状態) を表しています。

§ 2.5 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。

$$\int |\psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (102)$$

§ 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、

$$[\text{粒子が見つかる位置の平均値}] = [\text{位置 } x \text{ の期待値}] \quad (103)$$

$$= \langle x \rangle \quad (\langle \cdot \rangle \text{ で期待値を表す。}) \quad (104)$$

$$= \int x \rho(x, t) dx \quad (105)$$

$$= \int x |\psi(x, t)|^2 dx. \quad (106)$$

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	$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$

(107)

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

$$\langle A \rangle(t) = \int dx \psi(x, t)^* \hat{A} \psi(x, t), \quad (108)$$

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

$$\langle x \rangle = \int dx \psi(x, t)^* \hat{x} \psi(x, t), \quad (109)$$

$$= \int dx \psi(x, t)^* x \psi(x, t). \quad (110)$$

これは前節で見た通り。

(ii) 運動量 p の期待値は

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

$$= \int dx \psi(x, t)^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t). \quad (112)$$

となる。

(iii) 古典論では p と x の間には

$$p = mv = m \frac{dx}{dt}, \quad (113)$$

という関係があった。量子論でどうなるかやってみよう。

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = m \frac{d}{dt} \int dx \psi^*(x, t) x \psi(x, t) \quad (114)$$

$$= m \int dx \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} x \psi + \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial t} \right). \quad (115)$$

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)

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = -\frac{i}{2} \hbar \int dx \left(\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} x \psi - \psi^* x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right). \quad (116)$$

$\frac{\partial}{\partial x} f = f'$ と書くとカッコの中は

$$\psi^{*''} x \psi - \psi^* x \psi'' = (\psi^{*'} x \psi - \psi^* x \psi' - \psi^* \psi)' + 2\psi^* \psi', \quad (117)$$

と書けるので

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = -\frac{i}{2} \hbar \underbrace{[\psi^{*'} x \psi - \psi^* x \psi' - \psi^* \psi]_{x=-\infty}^{x=\infty}}_{\rightarrow 0} + \int dx \psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi \quad (118)$$

$$= \int dx \psi(x, t)^* \hat{p} \psi(x, t) \quad (119)$$

$$= \langle p \rangle. \quad (120)$$

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。

(iv) 古典論の運動方程式

$$ma = F \quad (121)$$

$$\text{あるいは} \quad m \frac{d^2}{dt^2} x = - \frac{dV}{dx} \quad (122)$$

を量子論に拡張した式

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = \left\langle - \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle, \quad (123)$$

も成立する。(講義後修正 (左辺に m を追加)) ただし右辺は

$$\left\langle - \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t)^* \left(- \frac{\partial V}{\partial x} \right) \psi(x, t) dx, \quad (124)$$

で定義する。式 (123) はエーレンフェストの定理と呼ばれている。
証明はココでは省略。

→ [昨年度の中間試験の解答例](#)に証明があるので見てみて下さい。

(v) 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 $\langle p^2 \rangle \neq m^2 \left(\frac{d\langle x \rangle}{dt} \right)^2$ 。

(vi) 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

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t).} \quad (125)$$

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。

§ 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。

$$\boxed{\hat{H}\varphi(x) = E\varphi(x)}, \quad \left(\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right). \quad (126)$$

これを満たす一組の E と $\varphi(x)$ が見つかったする。 (一般に、任意の E に対して、物理的に適切な解 (境界条件を満たし規格化された解) $\varphi(x)$ が見つかるとは限らない。 § 2.7 も参照。 (← 講義後微修正))

- ▶ このとき

$$\psi(x, t) = e^{-i(E/\hbar)t} \varphi(x), \quad (127)$$

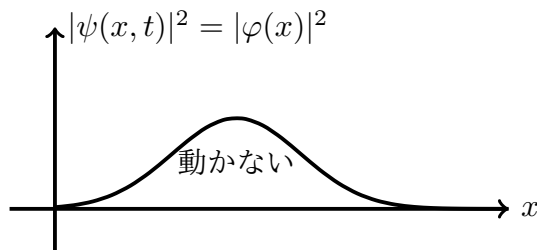
とすると、これがシュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H}\psi(x, t), \quad (128)$$

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。

$$|\psi(x, t)|^2 = |e^{-iEt/\hbar} \varphi(x)|^2 = |\varphi(x)|^2. \quad (129)$$

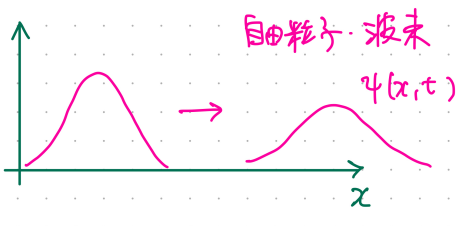
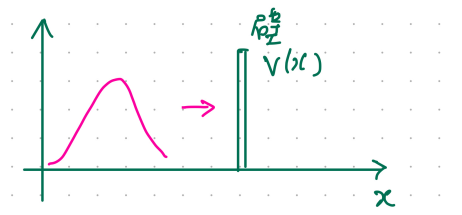
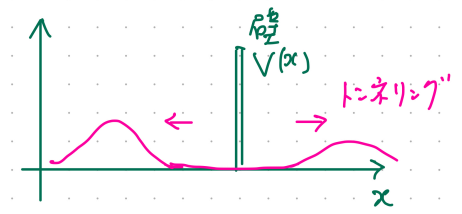
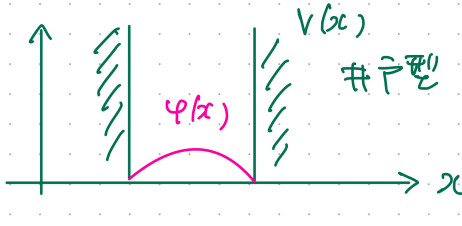

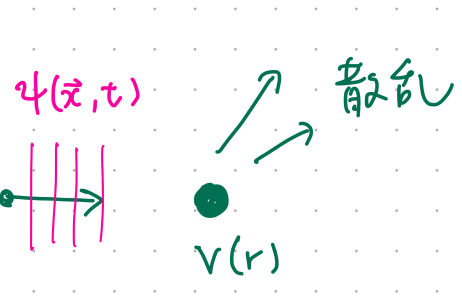
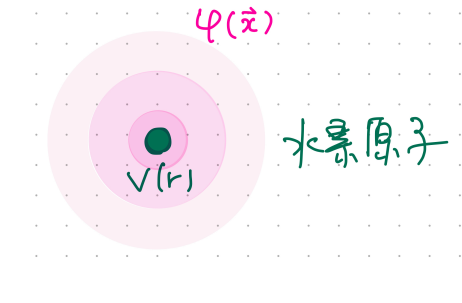


- ▶ (126) を「時間に依存しないシュレディンガー方程式」と言い、その解について $\varphi(x)$ を「エネルギー固有状態」「定常状態」、 E を「エネルギー固有値」などと言う。
- ▶ 例：自由粒子のとき § 2.2 で例に出てきた解 (72) $\psi \sim e^{-i\omega t} \cos(kx)$ や、4/14 の最後～4/21 の冒頭でやった、調和振動子の場合の解の 1 つ (101) $\psi \sim e^{-i\omega t/2 - m\omega x^2/2\hbar}$ は実はこの形の解だった。
- ▶ 3次元では (126) は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z) \right) \varphi(x, y, z) = E\varphi(x, y, z), \quad (130)$$

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	<div style="text-align: center;">  <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> </div>	<div style="text-align: center;">  <p style="text-align: center;">(この講義では略)</p>  <p style="text-align: center;">§ 2.7 で扱います。</p> </div>
3次元	<div style="text-align: center;">  <p style="text-align: center;">(物理学科だと 3 年秋の「量子力学 III」)</p> </div>	<div style="text-align: center;">  <p style="text-align: center;">(物理学科だと 3 年夏の「量子力学 II」)</p> </div>

5/11

前回 (4/27) 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)

§ 2.4 確率解釈

§ 2.5 物理量と演算子

§ 2.6 時間に依存しないシュレディンガー方程式 $\hat{H}\varphi(x) = E\varphi(x)$

定常状態 (エネルギー固有状態)

§ 2.7 調和振動子の例 ← 今日ココから。

§ 2.7 調和振動子の例

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 $\hat{H}\varphi = E\varphi$ を解いてみよう。

§ 2.7.1 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

$$m \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = F(x) = -V'(x) = -m\omega^2 x(t). \quad (131)$$

$$\therefore x(t) = c_1 \cos \omega t + c_2 \sin \omega t. \quad (\text{単振動}) \quad (132)$$

$$\begin{aligned} \text{エネルギー } E &= \frac{1}{2} m x'(t)^2 + V(x(t)) \\ &= \dots = \frac{1}{2} (c_1^2 + c_2^2) m \omega^2. \end{aligned} \quad (133)$$

- 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？

§ 2.7.2 調和振動子のシュレディンガー方程式の解

▶ シュレディンガー方程式（微分方程式）

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \varphi(x) = E \varphi(x). \quad (134)$$

を解きたい。

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} y, \quad (135)$$

として整理すると

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - y^2 + \frac{2E}{\hbar\omega} \right) \varphi(y) = 0. \quad (136)$$

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

$$\frac{d^2}{dy^2}\varphi(y) \sim y^2\varphi(y), \quad (x \rightarrow \pm\infty). \quad (137)$$

となるので、

$$\varphi(y) = e^{-y^2/2}f(y), \quad (138)$$

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。

$$\left(\frac{d^2}{dy^2} - 2y\frac{d}{dy} + 2\nu\right)f(y) = 0, \quad \nu = \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}. \quad (139)$$

▶ (139) 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、この微分方程式が $y \rightarrow \pm\infty$ で規格化可能な解を持つためには

$$\nu = n = 0, 1, 2, \dots. \quad (140)$$

でないといけないことが知られている。これは (139) を見ると

$$E = E_n = \left(\frac{1}{2} + n\right)\hbar\omega, \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \quad (141)$$

に相当する。

- 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 $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$ ($\neq 0$)。

(同じ結論は「昇降演算子」を用いた全然違う方法でも得られる。昨年度の講義ノート参照。)

▶ $n = 0, 1, 2, \dots$ 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。

$$f_0(y) = 1, \quad (142)$$

$$f_1(y) = 2y, \quad (143)$$

$$f_2(y) = 4y^2 - 2, \quad (144)$$

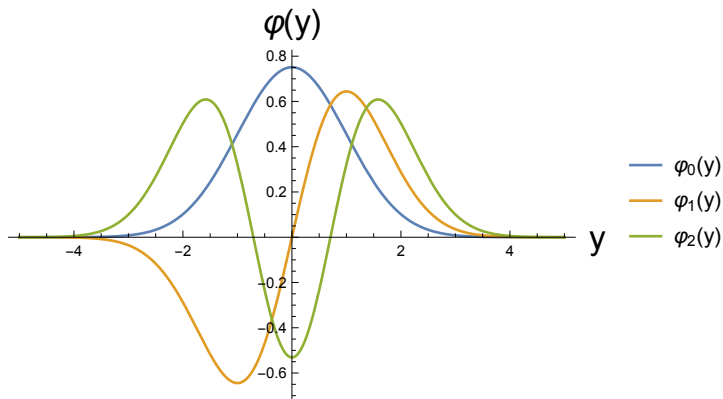
$$\dots \quad (145)$$

$$f_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}. \quad (146)$$

波動関数は

$$\varphi_n(x) = c_n e^{-y^2/2} f_n(y), \quad y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad (147)$$

で与えられる。(規格化 c_n は省略。)



§ 3 シュレディンガー方程式（ブラケット表示）

§ 2 で見てきた座標表示の量子力学では

- ▶ 物理状態を表す 波動関数 $\psi(x, t)$ や $\varphi(x)$ は位置 x の関数。
- ▶ ハミルトニアン \hat{H} は 波動関数 $\psi(x, t)$ や $\varphi(x)$ に作用する演算子

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (148)$$

- ▶ シュレディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t) \quad (\text{時間依存}) \quad (149)$$

$$\hat{H} \varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x) \quad (\text{時間依存しない}) \quad (150)$$

$$\left(\rightarrow \psi(x, t) = e^{-iE_n t/\hbar} \varphi_n(x) \text{ は (149) の解。} \right) \quad (151)$$

だった。

より一般には、量子力学では、

- ▶ 物理状態は状態ベクトル（ケットベクトル） $|\psi(t)\rangle, |\varphi_n\rangle, \dots$ で表される。
- ▶ ハミルトニアン \hat{H} は状態ベクトルに作用するエルミート演算子
- ▶ シュレディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (\text{時間依存}) \quad (152)$$

$$\hat{H} |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle \quad (\text{時間依存しない}) \quad (153)$$

$$\left(\rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle \text{ は (152) の解。} \right) \quad (154)$$

残りの時間で、このブラケット表示でのシュレディンガー方程式・量子力学の入門的な内容について、一部を紹介する。

§ 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	座標表示の波動関数
<div style="border: 1px solid black; padding: 2px; display: inline-block;">ケットベクトル $A\rangle$</div>	$ A\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$ <p style="text-align: center;">a_1, a_2 は複素数</p>	$ A\rangle = \psi_A(x)$
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	$\underbrace{\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}}_{ C\rangle} = \alpha \underbrace{\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}}_{ A\rangle} + \beta \underbrace{\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}}_{ B\rangle}$	$\underbrace{\psi_C(x)}_{ C\rangle} = \alpha \underbrace{\psi_A(x)}_{ A\rangle} + \beta \underbrace{\psi_B(x)}_{ B\rangle}$
<div style="border: 1px solid black; padding: 2px; display: inline-block;">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	$\langle A = (a_1^*, a_2^*)$	$\langle A = \psi_A^*(x)$
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	$\underbrace{\langle c_1^*, c_2^* \rangle}_{\langle C } = \alpha^* \underbrace{\langle a_1^*, a_2^* \rangle}_{\langle A } + \beta^* \underbrace{\langle b_1^*, b_2^* \rangle}_{\langle B }$	$\underbrace{\psi_C^*(x)}_{\langle C } = \alpha^* \underbrace{\psi_A^*(x)}_{\langle A } + \beta^* \underbrace{\psi_B^*(x)}_{\langle B }$
<div style="border: 1px solid black; padding: 2px; display: inline-block;">内積 $\langle A B\rangle$</div> 複素数を与える	$\langle A B\rangle = \underbrace{(a_1^*, a_2^*)}_{\langle A } \underbrace{\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}}_{ B\rangle}$ <p style="text-align: center;">(この表記は既習?)</p> $= a_1^* b_1 + a_2^* b_2$	$\langle A B\rangle = \int \psi_A^*(x) \psi_B(x) dx$
$\langle B A\rangle = \langle A B\rangle^*$	$\langle B A\rangle = (b_1^*, b_2^*) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$ $= b_1^* a_1 + b_2^* a_2$ $= \langle A B\rangle^*$	$\langle B A\rangle = \int \psi_B^*(x) \psi_A(x) dx$ $= \langle A B\rangle^*$
特に $\langle A A\rangle$ は実数で、 $\langle A A\rangle \geq 0$	$\langle A A\rangle = (a_1^*, a_2^*) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$ $= a_1 ^2 + a_2 ^2 \geq 0$	$\langle A A\rangle = \int \psi_A^*(x) \psi_A(x) dx$ $= \int \psi_A(x) ^2 dx \geq 0$
<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)		

- ▶ 上のような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。)
- ▶ 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。

5/18

前回 (5/11) までのあらすじ

§...

§ 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)

§ 3.1 ブラベクトルとケットベクトル

↖ 今日この続きから

§ 3.2 シュレディンガー方程式 (ブラケット表示)

§ 3.3 2 状態系 (2 準位系) の例

§ 3.A 演算子とその固有状態

↖ すみません、§ 3.A は時間切れで講義出来なさそうです。§ 3.2 と § 3.3 で説明仕切れなかった点をいくつか書いておいたので、興味があれば後でパラパラと眺めてみて下さい。(→ § 3.A の内容に関する質問なども大歓迎ですので、ITC-LMS やメールなどでいつでもどうぞ。) § 3.A の内容は試験範囲外とします。

中間試験について (§ 0.3 より再掲)

- 来週 5/25(木) に中間試験を行います。
- 場所は講義と同じ 721 教室、時間は 17:15~18:30 の 75 分の予定。
- 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。

▶ 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

$$P_{AB} = |\langle B|A\rangle|^2, \quad (155)$$

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。

コメント

- (i) 「 $|B\rangle$ という状態だと分かる」...ってなんだ? → § 3.A 参照。
- (ii) 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。

(証明は昨年度の中間試験の解答例にあるので見てみて下さい。)

§ 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

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle}, \quad (156)$$

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、以下の性質をみたす。

- (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 (→ § 3.A 参照)。

▶ ベクトル $|A\rangle$ が

$$\hat{H} |A\rangle = E_A |A\rangle, \quad (157)$$

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

(ハミルトニアンのエルミート性から固有値 E_A は必ず実数になる。→ § 3.A 参照。)

このとき

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_A t/\hbar} |A\rangle \quad (158)$$

はシュレディンガー方程式 (156) の解となる。(確かめてみよう)

▶ 座標表示の場合の例は § 2.6 や § 2.7 で見たとおり。

▶ 2成分ベクトルの場合の例 :

状態ベクトルが $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$ で表される時、例えばハミルトニアン演算子を

$$\hat{H} |\psi\rangle = \underbrace{\begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}}_{\hat{H}} \underbrace{\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}}_{|\psi\rangle} = \begin{pmatrix} E_1 a_1 \\ E_2 a_2 \end{pmatrix} \quad (E_1, E_2 \text{ は実数}) \quad (159)$$

で定義すると、この \hat{H} は上の条件 (i)~(iii) を満たしている。また、このハミルトニアンの固有値と固有状態は以下のようになる。(確かめてみよう)

$$\begin{array}{ll} \text{固有値} & \text{固有状態} \\ E_1 & |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \hat{H} |1\rangle = E_1 |1\rangle \\ E_2 & |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \hat{H} |2\rangle = E_2 |2\rangle \end{array} \quad (160)$$

§ 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。

- ▶ 前節で見た 2 成分ベクトルの例のように、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。

$$\begin{cases} |1\rangle : & \hat{H} |1\rangle = E_1 |1\rangle, \\ |2\rangle : & \hat{H} |2\rangle = E_2 |2\rangle, \end{cases} \quad E_1 \neq E_2. \quad (161)$$

$|1\rangle$ 、 $|2\rangle$ は規格化されているとする ($\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1$)。

また、 $\langle 1|2\rangle = 0$ も示せる。→ これも § 3.A 参照。

- ▶ このとき、前節で見たように

$$|\psi_1(t)\rangle = e^{-iE_1 t/\hbar} |1\rangle, \quad (162)$$

$$|\psi_2(t)\rangle = e^{-iE_2 t/\hbar} |2\rangle, \quad (163)$$

はそれぞれシュレディンガー方程式の解になっている。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(t)\rangle = \hat{H} |\psi_n(t)\rangle \quad (n = 1, 2). \quad (164)$$

- ▶ したがってこれらの線型結合

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= C_1 |\psi_1(t)\rangle + C_2 |\psi_2(t)\rangle \\ &= C_1 e^{-i(E_1/\hbar)t} |1\rangle + C_2 e^{-i(E_2/\hbar)t} |2\rangle \end{aligned} \quad (165)$$

もシュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (166)$$

を満たす。

実はこの (165) が 2 状態系のシュレディンガー方程式の一般解になっている。

→ 昨年度の講義ノートも参照。

▶ 規格化の確認

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \left(C_1^* e^{+i(E_1/\hbar)t} \langle 1| + C_2^* e^{+i(E_2/\hbar)t} \langle 2| \right) \left(C_1 e^{-i(E_1/\hbar)t} |1\rangle + C_2 e^{-i(E_2/\hbar)t} |2\rangle \right) \quad (\S 3.1) \quad (167)$$

$$= |C_1|^2 + |C_2|^2. \quad (\because \langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1, \langle 1|2\rangle = 0). \quad (168)$$

($\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1$ のところ、講義後修正しました。) 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 $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$.

座標表示のときも $\int |\psi(x,t)|^2 dx$ が時間依存しない、というのを見ましたね。→ § 2.4.2 節。

▶ 具体例として、

$$\boxed{\begin{cases} C_1 = \cos \theta \\ C_2 = \sin \theta \end{cases}, |\psi(t=0)\rangle = \underbrace{\cos \theta |1\rangle + \sin \theta |2\rangle}_{\equiv |\alpha\rangle}} \quad (169)$$

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 (165) より

$$|\psi(t)\rangle = \underbrace{\cos \theta e^{-i(E_1/\hbar)t}}_{e^{-i\omega_1 t}} |1\rangle + \underbrace{\sin \theta e^{-i(E_2/\hbar)t}}_{e^{-i\omega_2 t}} |2\rangle \quad (170)$$

▶ 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

$$P(\alpha \rightarrow \alpha; t) = |\langle \alpha | \psi(t) \rangle|^2 \quad (171)$$

$$= |(\cos \theta \langle 1| + \sin \theta \langle 2|) (\cos \theta e^{-i\omega_1 t} |1\rangle + \sin \theta e^{-i\omega_2 t} |2\rangle)|^2 \quad (172)$$

$$= \left| \cos^2 \theta e^{-i\omega_1 t} \underbrace{\langle 1|1\rangle}_{=1} + \sin^2 \theta e^{-i\omega_2 t} \underbrace{\langle 2|2\rangle}_{=1} \right|^2 \quad (173)$$

$$= \left| \underbrace{e^{-i\omega_2 t}}_{|\dots|=1} \left(\cos^2 \theta \underbrace{e^{i(\omega_2 - \omega_1)t}}_{\equiv e^{i\omega_{21}t}} + \sin^2 \theta \right) \right|^2 \quad (174)$$

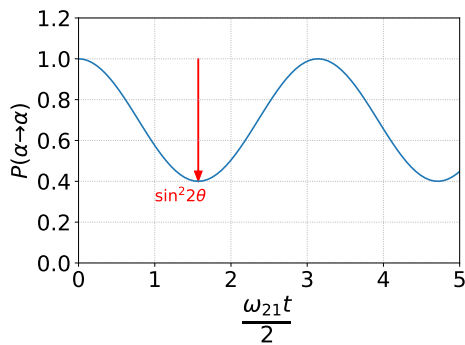
$= \cos \omega_{21}t + i \sin \omega_{21}t$

$$= |\cos^2 \theta \cos \omega_{21}t + \sin^2 \theta + i \cos^2 \theta \sin \omega_{21}t|^2 \quad (175)$$

$$= (\cos^2 \theta \cos \omega_{21}t + \sin^2 \theta)^2 + (\cos^2 \theta \sin \omega_{21}t)^2 \quad (176)$$

$$= 1 - \sin^2 2\theta \sin^2 \left(\frac{\omega_{21}}{2} t \right). \quad (177)$$

*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。

講義は以上です。お疲れ様でした！

講義時間中や講義時間後にたくさん質問が出て、とてもやりやすい講義でした。

特に講義時間後に黒板の前でワイワイと話している時間が毎週とても楽しかったです。

講義の期間が終わっても質問大歓迎ですので、(講義に関係あることでも、ないことでも) ITC-LMS やメールなどで是非いつでもご連絡下さい。

それではまたどこかでお会いしましょう。

*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 (177) 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 (177) 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...)

§ 3.A (補足) 演算子とその固有状態

この節では、§ 3.2 と § 3.3 で触れた内容のうち、時間切れで講義中に説明出来なかった点について、いくつか書いておきます。興味があれば講義が終わった後にでもパラパラと眺めてみて下さい。(この節の内容に関する質問なども大歓迎ですので、ITC-LMS やメールなどでいつでもどうぞ。)

この § 3.A の内容は試験範囲外です。

§ 3.A.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。

▶ $|\psi\rangle$ 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

$$\hat{A}|\psi\rangle = |A\psi\rangle, \quad (178)$$

と書くこともある。

例 1 座標表示：

状態ベクトル $|\varphi\rangle = \varphi(x)$ 、演算子 $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ に対して

$$\hat{p}|\varphi\rangle = \underbrace{-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x)}_{=|\hat{p}\varphi\rangle} \quad (179)$$

も状態ベクトル。

例 2 2成分ベクトル：

状態ベクトル $|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$ 、演算子 $\hat{s}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ に対して

$$\hat{s}_2|\varphi\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} -ia_2/2 \\ a_1/2 \end{pmatrix}}_{|\hat{s}_2\varphi\rangle} \quad (180)$$

も状態ベクトル。

▶ 演算子は線形に作用する。

$$\hat{A}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1\hat{A}|\psi_1\rangle + c_2\hat{A}|\psi_2\rangle. \quad (181)$$

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

$$\hat{B}|A\psi\rangle = \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle, \quad (182)$$

と左から演算子をかけて行って表す。

例 1 座標表示：

状態ベクトル $|\varphi\rangle = \varphi(x)$ 、演算子 $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ 、演算子 $\hat{x} = x$ に対して

$$\hat{p}\hat{x}|\varphi\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\varphi(x)) \quad (183)$$

$$\hat{x}\hat{p}|\varphi\rangle = x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi(x)\right) \quad (184)$$

も状態ベクトル。(→ ここから $[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$ も導けます。)

例 2 2 成分ベクトル：

状態ベクトル $|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$ 、演算子 $\hat{s}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix}$ 、 $\hat{s}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i/2 \\ i/2 & 0 \end{pmatrix}$ に対して

$$\hat{s}_1\hat{s}_2|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i/2 \\ i/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad (185)$$

も状態ベクトル。

▶ 演算子 \hat{A} に対して

$$\hat{A}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad (186)$$

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。

$$\hat{A}|\alpha_k\rangle = \alpha_k|\alpha_k\rangle, \quad (k = 1, 2, \dots, n) \quad (187)$$

(n はベクトル空間の次元。)

例 1 座標表示：

§ 2.7.2 節の調和振動子のところでやった $|\varphi_n\rangle = \varphi_n(x)$ はハミルトニアン演算子 \hat{H} の固有状態になっている。

$$\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (188)$$

例 2 2 成分ベクトル：

演算子 $\hat{s}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix}$ の固有ベクトルは

$$\begin{aligned} |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} &\longrightarrow \hat{s}_1|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}|1\rangle \quad (\text{固有値 } \frac{1}{2}) \\ |2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} &\longrightarrow \hat{s}_1|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}|2\rangle \quad (\text{固有値 } -\frac{1}{2}) \end{aligned} \quad (189)$$

§ 3.A.2 エルミート演算子

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

$$\langle\alpha|\hat{A}\beta\rangle = \langle\hat{A}\alpha|\beta\rangle \quad \left(= \langle\beta|\hat{A}\alpha\rangle^* \right), \quad (190)$$

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。

例 1 座標表示:

ハミルトニアン演算子

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (191)$$

はエルミート演算子である。確認してみると...

$$\begin{aligned} \langle\alpha|\hat{H}\beta\rangle &= \int \psi_\alpha^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi_\beta(x) dx \\ &= (\text{部分積分を 2 回やって、}\psi_{\alpha,\beta}(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0 \text{ を用いて...}) \\ &= \int \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi_\alpha^*(x) \right] \psi_\beta(x) dx \\ &= \int \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi_\alpha(x) \right]^* \psi_\beta(x) dx = \langle\hat{H}\alpha|\beta\rangle \end{aligned} \quad (192)$$

例 2 2 成分ベクトル:

演算子 $\hat{s}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i/2 \\ i/2 & 0 \end{pmatrix}$ はエルミート。

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}, \quad |\beta\rangle = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} \quad (193)$$

に対して

$$\langle\alpha|\hat{s}_2\beta\rangle = (\alpha_1^*, \alpha_2^*) \begin{pmatrix} -i\beta_2/2 \\ i\beta_1/2 \end{pmatrix} = (-i/2)(\alpha_1^*\beta_2 - \alpha_2^*\beta_1). \quad (194)$$

$$\langle\hat{s}_2\alpha|\beta\rangle = (-i\alpha_2/2, i\alpha_1/2)^* \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = (i/2)(\alpha_2^*\beta_1 - \alpha_1^*\beta_2) = \langle\alpha|\hat{s}_2\beta\rangle. \quad (195)$$

▶ 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、

$$\hat{A}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \quad (196)$$

エルミート性より

$$\langle\alpha|\hat{A}\alpha\rangle = \langle\hat{A}\alpha|\alpha\rangle \quad (197)$$

$$\text{左辺} = \alpha\langle\alpha|\alpha\rangle. \quad (198)$$

$$\text{右辺} = \langle\alpha|\hat{A}\alpha\rangle^* = \alpha^*\langle\alpha|\alpha\rangle. \quad (199)$$

$$\therefore \alpha = \alpha^* \quad \blacksquare \quad (200)$$

▶ 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。

$$\text{(証明)} \quad \begin{cases} \hat{A}|\alpha_1\rangle = \alpha_1|\alpha_1\rangle \\ \hat{A}|\alpha_2\rangle = \alpha_2|\alpha_2\rangle \end{cases} \quad (\alpha_1 \neq \alpha_2) \text{ とする。} \quad (201)$$

$$\langle \alpha_1 | \hat{A} | \alpha_2 \rangle \stackrel{\text{エルミート}}{=} \langle \alpha_2 | \hat{A} | \alpha_1 \rangle^* \quad (202)$$

$$\text{左辺} = \alpha_2 \langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle. \quad (203)$$

$$\text{右辺} = (\alpha_1 \langle \alpha_2 | \alpha_1 \rangle)^* = \alpha_1 \langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle \quad (204)$$

$$\therefore (\alpha_2 - \alpha_1) \langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle = 0. \quad \therefore \langle \alpha_1 | \alpha_2 \rangle = 0. \quad \blacksquare \quad (205)$$

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。——(★)

正規直交基底とは

(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

$$|\psi\rangle = c_1 |\chi_1\rangle + c_2 |\chi_2\rangle + \dots + c_n |\chi_n\rangle, \quad (206)$$

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

$$\langle \chi_i | \chi_j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}, \quad (207)$$

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。

(★) の証明

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...)

§ 3.A.3 物理量の測定値、確率解釈、期待値

- ▶ 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。

§ 3.A.2 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

$$\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle = \delta_{ij}. \quad (208)$$

- ▶ 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

$$|\psi\rangle = c_1 |\alpha_1\rangle + \dots + c_n |\alpha_n\rangle, \quad (209)$$

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 $1 = \|\psi\| = \langle \psi | \psi \rangle = \dots = \sum_k |c_k|^2 = \sum_k |\langle \alpha_k | \psi \rangle|^2$ 。

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

$$P(\alpha_k) = \left(\begin{array}{l} \text{状態 } |\psi\rangle \text{ に対して } \hat{A} \text{ を測定して} \\ \text{測定値 } \alpha_k \text{ が得られる確率} \end{array} \right) = |\langle \alpha_k | \psi \rangle|^2 = |c_k|^2. \quad (210)$$

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。

$$\hat{A}|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle \text{ なら、 } P(\alpha) = |\langle \alpha | \psi \rangle|^2 = 1. \quad (211)$$

- ▶ 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。

$$\text{(証明)} \quad \hat{A}|\psi\rangle = \hat{A} \sum_k c_k |\alpha_k\rangle = \sum_k c_k \alpha_k |\alpha_k\rangle. \quad (212)$$

$$\therefore \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_k c_k \alpha_k \langle \psi | \alpha_k \rangle = \sum_k c_k \alpha_k c_k^* = \sum_k \alpha_k |c_k|^2 \quad (213)$$

$$= \sum_k \alpha_k P(\alpha_k) = \langle A \rangle \quad \blacksquare \quad (214)$$

短い補足にするつもりが、§ 3.A だけで 5 ページになってしまいました…。今度こそ、この講義ノートはここでおしまいです。

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.