April 2, 2025

量子力学１講義ノート

諸井健夫

1 Introduction

1.1 古典論の復習

古典論における粒子

- 数が数えられる（「1粒子状態」が存在）
- 位置と運動量が確定（軌道を議論できる）
- エネルギーは離散的（$E = mc^2$）

古典論における波

- 干渉、回折がおきる
- 振動数、波長、振幅で特徴づけられる
- 振動数一定の波のエネルギーは振幅の2乗に比例
- エネルギーは連続値を取り得る

古典力学の「常識」: 粒子と波は別もの

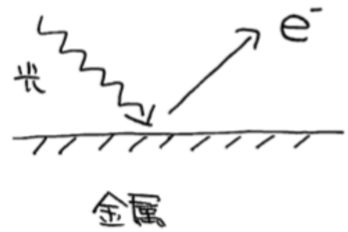
$\Rightarrow$ 19世紀終わりころから、この「常識」に反する実験事実結果が現れ始める

  - 黒体輻射（光の粒子性）
  - 光電効果（光の粒子性）
  - 電子回折（電子の波動性）
  - 原子模型

1.2 光電効果

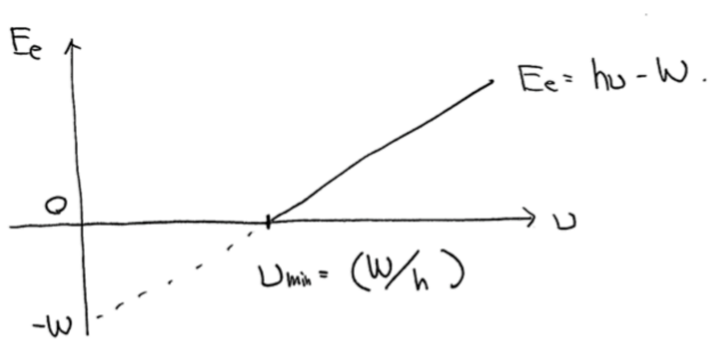
固体表面に光を当てると電子が飛び出す現象

光電効果



- 電子が飛び出すかどうかは、光の振動数 ν で決まる
- 光電子のエネルギーは光の振動数の１次関数
- 光電子の数は光の intensity（単位時間単位面積に照射する光のエネルギー）に比例

光電効果で出てくる e^- の energy



$\Rightarrow$ $E_e = h\nu - W$（W は金属固有の定数）

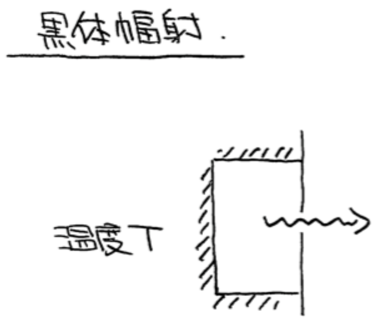
プランク定数：$h \simeq 6.625 \times 10^{-34}$ J sec

$\Rightarrow$ 今後よく出てくる量：$\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$

1.3 黒体輻射

黒体輻射：熱平衡状態にある輻射（電磁波）

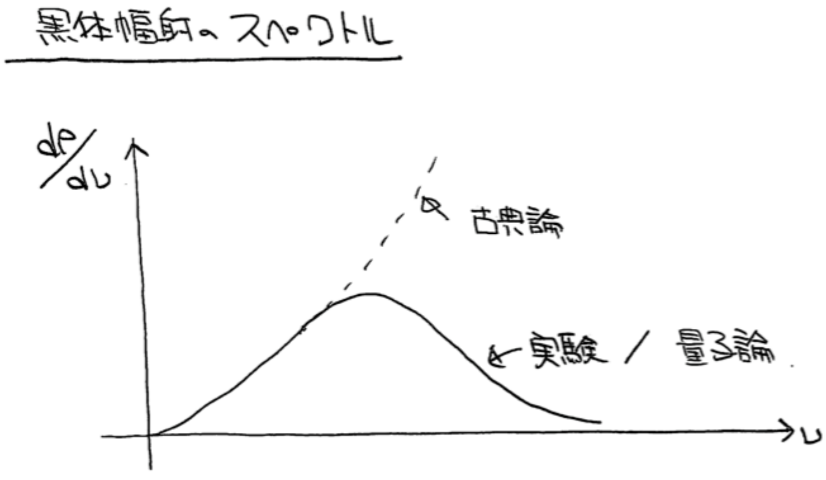
⇒ そのスペクトルは統計力学で計算できるはず



電磁波：様々な振動数のモードが存在

- 各モードは独立な自由度として振る舞う
- 熱平衡にある系では、それぞれの独立な自由度は（可能であれば）だいたい k_BT 程度のエネルギーを持つ
- 電磁波であれば、全ての振動数のモード（$\nu \to \infty$ も含めて）がその程度のエネルギーを持つはず

黒体輻射のエネルギースペクトルは、そのような振る舞いは見られない（特に振動数の大きいモード）



光が粒子性を持つと（光のエネルギーが量子化されていると）、光電効果や黒体輻射スペクトルはうまく説明できる

$\Rightarrow\ E = \hbar\omega$

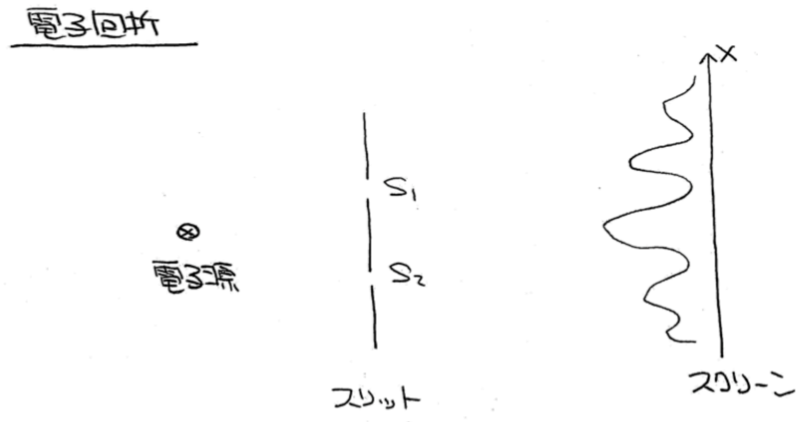
1.4　de Broglie の仮説と電子回折

de Broglie の仮説：物質粒子も波動性を持つ

物質波の波長（de Broglie 波長）：$\lambda = \dfrac{h}{p}$（光と同じ関係式）

p は運動量

de Broglie の仮説の検証：電子回折



電子でも干渉縞が見られる

- S_1 のみが開いている時のパターン：$N_1(x)$
- S_2 のみが開いている時のパターン：$N_2(x)$
- S_1 と S_2 両方が開いている時のパターン：$N_{1+2}(x)$

  $\Rightarrow\ N_{1+2}(x) \neq N_1(x) + N_2(x)$

1.5 Bohr の電子模型

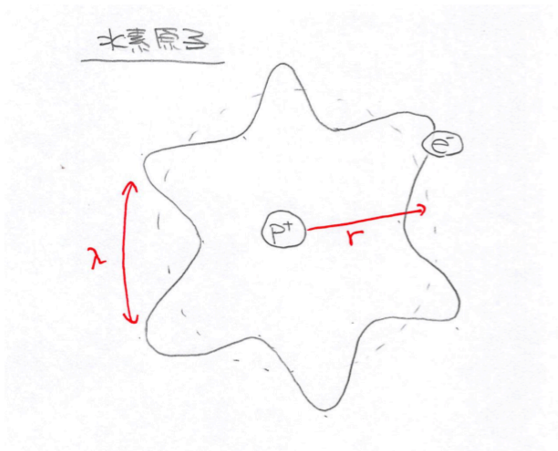
原子：電荷プラスの粒子（陽子 or 原子核）と電荷マイナスの粒子（電子）からなる

$\Rightarrow$ 原子内の電子は離散的なエネルギーを持つ理由が謎（原子から放射される光のエネルギーが離散的）

Bohr のアイデア（水素原子について）

$\Rightarrow$ 電子は陽子の周りを運動

$\Rightarrow$ 電子波が定常波を作る周回軌道のみが許される



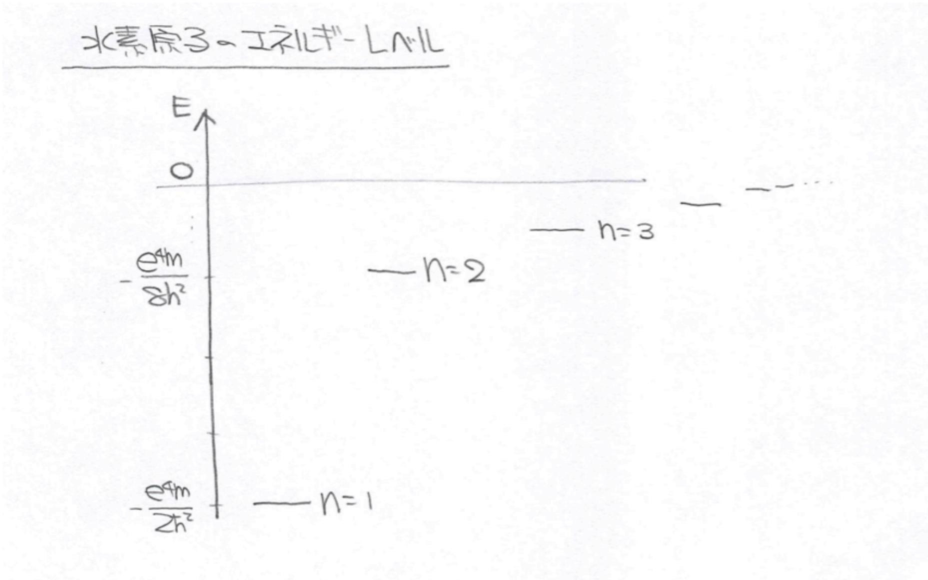
- $n\lambda = 2\pi r$（r は軌道半径、n は自然数）
- $\lambda = \dfrac{h}{p} = \dfrac{h}{mv}$（de Broglie 波長）

$\Rightarrow\ mvr = n\hbar$

そして遠心力と電磁気力の釣り合いを使う：$\dfrac{e^2}{r^2} = \dfrac{mv^2}{r}$

- $v = \dfrac{e^2}{n\hbar}$
- $r = \dfrac{n^2\hbar^2}{e^2 m}$

許されるエネルギー：$E_n = \dfrac{1}{2}mv^2 - \dfrac{e^2}{r} = -\dfrac{e^4 m}{2\hbar^2}\dfrac{1}{n^2}$



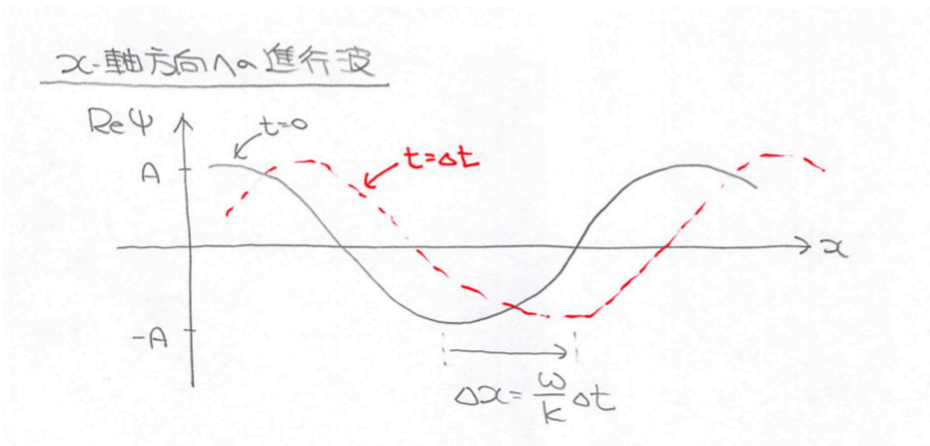
レベル間の遷移で $h\nu = \Delta E$ を満たす振動数の光が放出されるとすると実験事実をうまく説明できる

2　シュレディンガー方程式

2.1　余談：平面波について

波数 k、角振動数 ω を持つ、x 軸方向に進む波を考える：

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



波の性質は k と ω の関係（分散関係）で決まる

- 光 or 物質波の関係式
  - $E = \hbar\omega$
  - $p = \hbar k$
- 非相対論的運動エネルギー
  - $E = \dfrac{p^2}{2m}$
- 上の関係式から、自由な非相対論的粒子の分散関係として以下を採用（してみる）
  - $\hbar\omega = \dfrac{(\hbar k)^2}{2m}$

$\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ に対して：

- $i\dfrac{\partial\psi}{\partial t} = \omega\psi$: $E \leftrightarrow i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$
- $-i\dfrac{\partial\psi}{\partial x} = k\psi$: $p \leftrightarrow -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$

$\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ の満たす偏微分方程式

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

2.2 Schrödinger 方程式

波動関数を使った量子力学の定式化：仮定

- ポテンシャル V 中を運動する粒子の「状態」は「波動関数」$\psi(\vec{x},t)$ で記述される
- 波動関数 $\psi(\vec{x},t)$ は一般には複素数である
- 波動関数 $\psi(\vec{x},t)$ の時間発展は Schrödinger 方程式で決定される

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

  - H：ハミルトニアン演算子
  - H は微分を含む演算子
- Schrödinger 方程式：時間微分は 1 次のみ、線型の方程式

H: 古典論（解析力学）からの類推を用いて作る

- 古典論のハミルトニアン

  $$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)\text{：1 次元}$$

  $$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})\text{：3 次元}$$

- 量子論への移行：$p_x \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$、$\cdots$
- 量子論

  $$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\text{：1 次元}$$

  $$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{x})\text{：3 次元}$$

  $\vec{\nabla}^2 = \partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2$：ラプラシアン

（当面使用する）Schrödinger 方程式（波動方程式）

- １次元の場合

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

- ３次元の場合

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t)&=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2+V(\vec{x})\right]\psi(\vec{x},t)\\&=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(\vec{x})\right]\psi(\vec{x},t)\end{aligned}$$

波動方程式は線形の方程式

$\Rightarrow$ ψ_1 と ψ_2 が波動方程式の解なら、$\psi=\psi_1+\psi_2$ も波動方程式の解

$\Rightarrow$ 重ね合わせの原理（波の干渉に対応した現象が生じる）

以下、当面１次元の場合を例に扱う

2.3 確率解釈

Born's proposal

- $\rho(x,t)\equiv|\psi(x,t)|^2$：確率密度
- $\rho(x,t)dx=|\psi(x,t)|^2dx$ は、時刻 t に座標 x から $x+dx$ の間に粒子を見つける確率

  ３次元の場合は $\rho(\vec{x},t)\equiv|\psi(\vec{x},t)|^2$ が確率密度、$\rho(x,t)d^3x=|\psi(x,t)|^2dxdydz$ は体積要素 d^3x の中に粒子を見つける確率

波動関数の規格化：粒子は全空間に１個、という場合

- $\int dx|\psi|^2=1$
- $|\psi|^2$ の全空間積分が有限（２乗可積分）であれば、規格化可能（そうでない場合の説明は後ほど）

  $$\int dx|\psi|^2=N\quad\Rightarrow\quad\psi_{\text{normalized}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\psi$$

確率の保存：$\int dx\rho$ は時間に依らないのか？

以下、確率密度の全空間積分が時間に依存しないための条件を求める。

$$\frac{d}{dt}\int dx|\psi|^2 \stackrel{?}{=} 0$$

出発点：Schrödinger 方程式（簡単のため１次元）

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + V(x,t)\psi(x,t), \tag{2.1}$$

$$\Downarrow \text{ Complex conjugate}$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*(x,t) + V^*(x,t)\psi^*(x,t) \tag{2.2}$$

$(2.1)\times\psi^* - (2.2)\times\psi$

$$\begin{aligned} i\hbar\left[\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right] &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\psi\right] + (V - V^*)\psi^*\psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left[\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right] + (V - V^*)\psi^*\psi \qquad (2.3) \end{aligned}$$

以下の量を定義：

- 確率密度：$\rho(x,t) \equiv |\psi(x,t)|^2$
- 確率の流れ：$J(x,t) \equiv -i\dfrac{\hbar}{2m}\left[\psi^*\dfrac{\partial\psi}{\partial x} - \dfrac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right]$

すると、(2.3) は以下の形に書ける：

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = \frac{1}{i\hbar}(V - V^*)\rho$$

確率の保存

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\text{Probability}) &= \frac{\partial}{\partial t}\int dx\rho \\ &= -\int dx\frac{\partial J}{\partial x} + \frac{1}{i\hbar}\int dx(V - V^*)\rho \\ &= -\left[J(x=\infty) - J(x=-\infty)\right] + \frac{1}{i\hbar}\int dx(V - V^*)\rho \end{aligned}$$

確率保存の条件

- 無限遠に粒子はない：$J(x=\pm\infty)=0$
- ポテンシャルは real

したがって、確率の保存には $V^*=V$ が必要
３次元の場合（各自チェックしてもらう）

- 確率密度：$\rho(\vec{x},t)\equiv|\psi(\vec{x},t)|^2$
- 確率の流れ（３次元ベクトル）：$\vec{J}(x,t)\equiv -i\dfrac{\hbar}{2m}\left[\psi^*\vec{\nabla}\psi-(\vec{\nabla}\psi^*)\psi\right]$
- $\dot{\rho}+\vec{\nabla}\vec{J}=\dfrac{1}{i\hbar}(V-V^*)\rho$

2.4　位置、運動量、エネルギーの期待値

量子力学では、ひとつの状態に対して様々な物理量の値は確定しているとは限らない。

$\Rightarrow$ 期待値が重要

期待値：無限回（現実的にはたくさんの回数）測定を行った結果の平均値

$\Rightarrow$ A という物理量の測定結果は a_i（$i=1,2,\cdots$）のいずれかとすると：

$$(A\text{ の期待値})=\sum_i a_i\times(\text{測定結果が }a_i\text{ となる確率})$$

期待値を表す記号

$$\langle(\text{物理量})\rangle$$

位置の期待値

以下、波動関数は規格化されているとする：

$$\int dx\rho(x,t)=\int dx|\psi|^2=1$$

すると、位置の期待値は：

$$\langle x\rangle=\int dx\rho(x,t)x=\int dx\psi^*x\psi$$

一般の x の関数に関しては

$$\langle f(x)\rangle=\int dx\psi^*f(x)\psi$$

運動量の期待値

運動量の期待値は古典論との類推で決定（とりあえず）

$$\text{古典論} : p = mv = m\frac{dx}{dt}$$

同じ関係式が期待値に対して成り立つと仮定：

$$\begin{aligned}\langle p\rangle &= m\frac{d}{dt}\langle x\rangle \\ &= m\int dx\left[\dot{\psi}^* x\psi + \psi^* x\dot{\psi}\right]\end{aligned}$$

⇓ Schrödinger 方程式を使って変形

$$= \frac{\hbar}{2i}\int dx\left[\left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\right)x\psi - \psi^* x\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)\right]$$

以下、$\prime \equiv (\partial/\partial x)$ として

$$\begin{aligned}(\psi^*)'' x\psi &= [(\psi^*)' x\psi]' - (\psi^*)'\psi - (\psi^*)' x\psi' \\ &= [(\psi^*)' x\psi]' - [(\psi^*\psi)' - (\psi^*)\psi'] - [(\psi^* x\psi')' - (\psi^*)\psi' - (\psi^*)x\psi''] \\ &= [(\psi^*)' x\psi - \psi^*\psi - \psi^* x\psi']' + 2\psi^*\psi' + (\psi^*)x\psi''\end{aligned}$$

全微分項は空間積分の後、表面項となって消えるので効かない（とする）

$$\langle p\rangle = \int dx\psi^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t)$$

運動量は、波動関数に作用する微分演算子として表現される：

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad \Rightarrow \quad \hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$$

ˆ：演算子を表す記号

エネルギーの期待値

エネルギーの固有値は Hamiltonian を用いて計算

$$\langle E\rangle = \int dx\psi^*(x,t)\hat{H}\psi(x,t) = \int dx\psi^*\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right]\psi$$

位置や運動量の期待値は実数

例えば運動量：

$$
\begin{aligned}
\langle p\rangle^* &= \int dx\psi\left(+i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi^* \\
&= \int dx\left[i\hbar(\psi\psi^*)' - i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\psi^*\right] \\
&\quad \Downarrow \text{ 積分すると全微分は表面項となって消える} \\
&= \langle p\rangle
\end{aligned}
$$

演算子に関する注意

演算子：

- 状態（波動関数）に作用して、別の状態を作る
- 線形代数の対応物
  - 波動関数 $\Leftrightarrow$ ベクトル
  - 演算子 $\Leftrightarrow$ 行列

演算子の順序は（一般には）勝手に入れ替えてはいけない

- 例：$x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right) \neq -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi(x)) \quad \Leftrightarrow \quad \hat{x}\hat{p} \neq \hat{p}\hat{x}$
- ふたつの演算子は一般には可換ではない

  演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が可換 $\Leftrightarrow$ $[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$

2.5 不確定性関係

量子力学的状態は、全ての物理量を確定させることができない。
出発点：交換関係

$$
\left.\begin{aligned}
\hat{x} &= x \\
\hat{p} &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}
\end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad [\hat{x},\hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar
$$

$[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$:　交換子（Commutator）

上の式の意味：$[\cdots]$ は全体として波動関数に作用すると理解する

$$[\hat{x},\hat{p}]\psi = x\left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) - \left(-i\hbar\frac{\partial(x\psi)}{\partial x}\right) = i\hbar\psi$$

上の交換関係の帰結：位置（$\hat{x}$）と運動量（$\hat{p}$）が共に確定値を持つ波動関数は存在しない（ひとつの）の証明：

1. 波動関数 ψ が（ある時刻に）$\langle x\rangle = \bar{x}$、$\langle p\rangle = \bar{p}$ という状態を表すとする：
$$\bar{x} = \int dx\psi^* x\psi$$
$$\bar{p} = -i\hbar\int dx\psi^*\psi' \quad\Rightarrow\quad \frac{i}{\hbar}\bar{p} = \int dx\psi^*\psi'$$

2. 次の不等式が任意の α（ここでは実数にとる）に対して成り立つことを用いる：
$$\int\left|\alpha(x-\bar{x})\psi + \left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{i\bar{p}}{\hbar}\right)\psi\right|^2 \geq 0$$

3. 展開各項について：
$$\int dx\,|\alpha(x-\bar{x})\psi|^2 = \int dx(x-\bar{x})^2\psi^*\psi = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 \equiv (\Delta x)^2$$
$$\begin{aligned}\int dx\left|\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{i\bar{p}}{\hbar}\right)\psi\right|^2 &= \int dx\left[(\psi^*)'\psi' + \frac{\bar{p}^2}{\hbar^2}\psi^*\psi - i\frac{\bar{p}}{\hbar}\{(\psi^*)'\psi - \psi^*\psi'\}\right] \\ &= \int dx\left[-\psi^*\psi'' + \frac{\bar{p}^2}{\hbar^2}\psi^*\psi + 2i\frac{\bar{p}}{\hbar}\psi^*\psi' + (\text{全微分})\right]\end{aligned}$$

$\Downarrow$ 表面項は落とす

$$= \int dx\left[\psi^*\frac{\hat{p}^2}{\hbar^2}\psi + \frac{\bar{p}^2}{\hbar^2}\psi^*\psi - 2\frac{\bar{p}}{\hbar}\psi^*\frac{\hat{p}}{\hbar}\psi\right]$$

$\Downarrow$ 波動関数は規格化されている

$$= \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2 \equiv (\Delta p)^2$$

$$\begin{aligned}\int dx\left[(x-\bar{x})\psi^*\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{i\bar{p}}{\hbar}\right)\psi + \text{c.c.}\right] &= \int dx(x-\bar{x})\left[(\psi^*)'\psi + \psi^*\psi'\right] \\ &= \int dx(x-\bar{x})\,(\psi^*\psi)' \\ &= -\int dx(x-\bar{x})'\,(\psi^*\psi) = -1\end{aligned}$$

4. まとめると、以下の式が任意の α について成立することがわかる：

$$(\text{不等式の左辺}) = \alpha^2(\Delta x)^2 - \alpha + \left(\frac{\Delta p}{\hbar}\right)^2 \geq 0 \quad \text{for} \quad \forall\alpha$$

すなわち、(左辺) $= 0$ という 2 次方程式は二つの独立な実根を持たない

5. 上式左辺＝0 の 2 次方程式が二つの実根を持たない条件：

$$(\text{判別式}) = 1 - 4(\Delta x)^2\left(\frac{\Delta p}{\hbar}\right)^2 \geq 0 \quad \Rightarrow \quad \Delta x\Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar$$

x と p の不確定さの積は $\hbar$ 程度かそれ以上

3 次元の場合：$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar$

- 各々の方向について、位置と運動量を完全に決めることはできない
- 独立な方向については、位置と運動量を決めることは可能、例えば x と p_y など。

$\Delta x\Delta p = \hbar/2$ となる波動関数の形

$\Delta x\Delta p = \hbar/2$ だと、上の判別式はゼロとなる

$$\Rightarrow \alpha^2(\Delta x)^2 - \alpha + \left(\frac{\Delta p}{\hbar}\right)^2 = 0 \text{ は重根を持つ}$$

$$\alpha = \frac{1}{2(\Delta x)^2}\left[1 \pm \sqrt{1 - 4\left(\frac{\Delta x\Delta p}{\hbar}\right)^2}\right] = \frac{1}{2(\Delta x)^2}$$

この α に対して不等式の左辺はゼロとなる

$$\alpha(x - \bar{x})\psi + \left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{i\bar{p}}{\hbar}\right)\psi = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial}{\partial x}\psi = \left[-\frac{1}{2(\Delta x)^2}(x - \bar{x}) + \frac{i\bar{p}}{\hbar}\right]\psi$$

上の微分方程式を満たす関数（の例）

$$\psi = N\exp\left[-\frac{1}{4(\Delta x)^2}(x - \bar{x})^2 + \frac{i\bar{p}}{\hbar}x\right]$$

N: 規格化定数

水素原子に関する定性的考察

水素原子の基底状態（エネルギーが最低の状態）のエネルギーは、不確定性関係から大雑把な見積もりが可能

水素原子：

- 陽子（電荷 $+e$）の周りを電子（電荷 $-e$）が運動
- 簡単のため、陽子で作られた電場（外場として扱う）の中を電子が運動していると近似
- 陽子に比べて電子はとても軽いので、良い近似

ハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) - \frac{e^2}{\hat{r}} \quad \text{with} \quad \hat{r} \equiv \sqrt{\hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2}$$

m: 電子質量

$\alpha \equiv e^2/\hbar c \simeq 1/137$: fine structure constant

古典論ではどこまでもエネルギーを下げられる（$E_{\min} \to -\infty$）

- $r \to 0$
- $p \to 0$

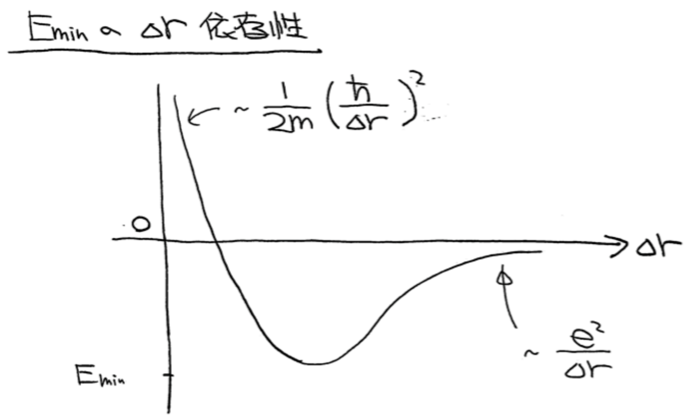
水素原子の基底状態が以下の条件を満たすとする：

- だいたい $r \sim \Delta r$ の領域内に電子が束縛されている
- 電子の運動量は $p \sim \Delta p$ 程度

基底状態のエネルギーの見積もり：$\Delta p \gtrsim \hbar/\Delta r$ を用いる

$$E_{\min} \sim \frac{1}{2m}(\Delta p)^2 - \frac{e^2}{\Delta r} \gtrsim \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{\Delta r}\right)^2 - \frac{e^2}{\Delta r}$$

不等式は不確定性関係の帰結



$E_{\min}$ には下限が存在

- $E_{\min}$ を最小にするには：

  $\Delta r \sim \dfrac{\hbar^2}{e^2 m} \sim \dfrac{\hbar}{\alpha m c}$
- $E_{\min}$ の見積もり：

  $E_{\min} \sim -\alpha^2 m c^2$
- きちんと Schrödinger 方程式を解くと：

  $E_{\min} = -\dfrac{1}{2}\alpha^2 m c^2$

2.6 定常状態の波動関数：変数分離法

以下、ポテンシャルが以下の性質を満たす場合を考える

- V は実関数
- V は時間に依らない

Schr$\ddot{}$dinger 方程式：

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

波動関数を次のように書いてみる：$\psi(\vec{x},t) = u(\vec{x})T(t)$

- $u(\vec{x})$: 座標変数のみの関数
- $T(t)$: 時間のみの関数

Schr̈dinger 方程式に代入すると

$$i\hbar \dot{T} u = -\frac{\hbar^2}{2m} T(\vec{\nabla}^2 u) + VTu$$

両辺を uT で割ると

$$i\hbar \frac{1}{T}\dot{T} = \frac{1}{u}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla}^2 u) + Vu\right]$$

すると

- 左辺：時間のみの関数（$\vec{x}$ には依存しない）
- 右辺：空間座標のみの関数（t には依存しない）

したがって左辺と右辺は共に同一の定数、それを E と置く

- $i\hbar \dfrac{\partial T}{\partial t} = ET$
- $\left[-\dfrac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V\right] u = Eu$

T に関する微分方程式は簡単に解ける

$$T(t) = (\text{定数}) e^{-iEt/\hbar}$$

u に関する微分方程式：

$$\hat{H} u_E = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V\right] u_E = E u_E$$

u_E と固有値を明示

これは、ハミルトニアンの固有値を求める方程式

- E: ハミルトニアンの固有値
- u_E: ハミルトニアンの固有関数

許される固有値（と対応する固有関数）は、系を記述するハミルトニアンによって異なる

一般の状態：

$$\psi(\vec{x},t) = \sum_E C_E u_E(\vec{x},t) e^{-iEt/\hbar}$$

C_E: 定数係数

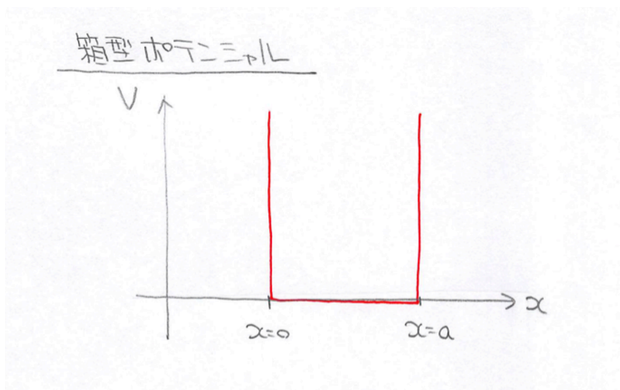
- 一般の状態はハミルトニアンの固有状態の重ね合わせで得られる
- 一般の状態はエネルギーが決まった状態ではないことに注意

3　１次元の束縛状態

3.1　１次元の箱に閉じ込められた粒子

ポテンシャルが以下の形をしている場合を考える

$$V(x) = \begin{cases} 0 & : \quad 0 < x < a \\ \infty & : \quad \text{otherwise} \end{cases}$$



Schrödinger 方程式：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x) = \begin{cases} (-V_0 + E)u(x) \quad \text{with } V_0 \to \infty & : \quad x < 0, x > a \\ Eu(x) & : \quad 0 < x < a \end{cases}$$

まず、$x < 0$ の領域について：

$$u(x) = C_1 e^{\sqrt{2m(V_0-E)}x/\hbar} + C_2 e^{-\sqrt{2m(V_0-E)}x/\hbar}$$

要請：

$u(x)$ は 2 乗可積分 $\Rightarrow C_2 = 0$

C_1 に比例する項は $V_0 \to \infty$ で 0

したがって $x < 0$ で $u(x) = 0$、同様に $x > a$ でも $u(x) = 0$
以下、波動関数の連続性（連続性の詳細は後ほど）を用いてエネルギー固有値と固有関数を決める

$\Leftrightarrow$ $u(x)$ の連続性を $x = 0$、$x = a$ でも要請

$\Leftrightarrow\ u(0) = u(a) = 0$

$0 < x < a$ の領域

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}u(x)$$

もしも $E < 0$ だとすると、$u(x) = C_1' e^{\sqrt{2m|E|)}x/\hbar} + C_2' e^{-\sqrt{2m|E|}x/\hbar}$

$\Rightarrow\ u(0) = u(a) = 0$ を満たすには $C_1' = C_2' = 0$

$\Rightarrow$ 全ての点で波動関数がゼロ

$\Rightarrow\ E < 0$ の状態は許されない

$E > 0$ のとき：

$$\frac{d^2}{dx^2}u(x) = -k^2 u(x) \quad \text{with} \quad k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

したがって

$$u(x) = A\sin kx + B\cos kx$$

境界条件の要請：

- $u(0) = 0 \ \Rightarrow\ B = 0$
- $u(a) = 0 \ \Rightarrow\ \sin ka = 0 \ \Rightarrow\ k = \dfrac{n\pi}{a}$ with $n = 1, 2, 3, \cdots$

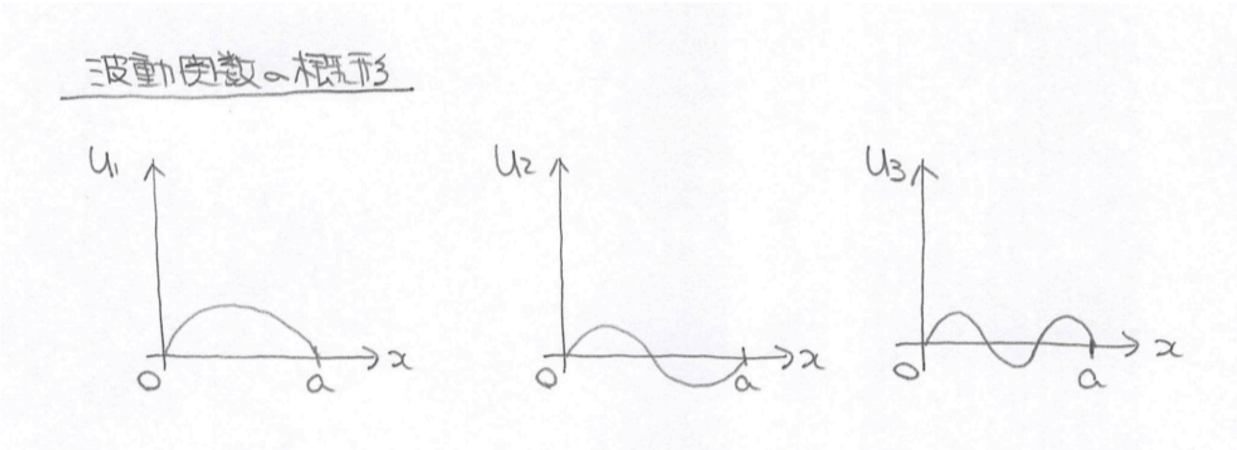
まとめると、n 番目のエネルギー固有状態に対し

- 可能なエネルギー固有値：

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2$$

- 波動関数：

$$u_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}x & : \quad 0 < x < a \\ 0 & : \quad \text{otherwise} \end{cases}$$



Remark 1: $\{u_n\}$ は正規直交系をなす

$$\int dx u_n^*(x) u_m(x) = \int_0^a dx \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) = \delta_{nm}$$

Remark 2: エネルギー 0 の状態は存在しない：$E_1 = \dfrac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$

$\Leftrightarrow$ 古典論ではゼロエネルギー状態が最低エネルギー

波動関数の一般形

波動関数の一般形は、エネルギー固有状態の重ね合わせ

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin k_n x e^{-iE_n t/\hbar}$$

$\sum_n |C_n|^2 = 1$

系が $t=0$ に $\psi(x, t=0) = f(x)$ という波動関数であったとする（初期条件）

境界条件の要請：$f(0) = f(a) = 0$

係数 C_n はエネルギー固有関数の正規直交性からもとまる：

$$f(x) = \sum_n C_n u_n(x) \ \Rightarrow \ \int dx u_m^*(x) f(x) = \int dx u_m^*(x) \sum_n C_n u_n(x) = C_m$$

したがって波動関数の時間発展は以下の式で与えられる：

$$\psi(x,t) = \frac{2}{a}\sum_{n=1}^{\infty}\left[\int_0^a dx' \sin\left(\frac{n\pi}{a}x'\right) f(x')\right] \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-iE_n t/\hbar}$$

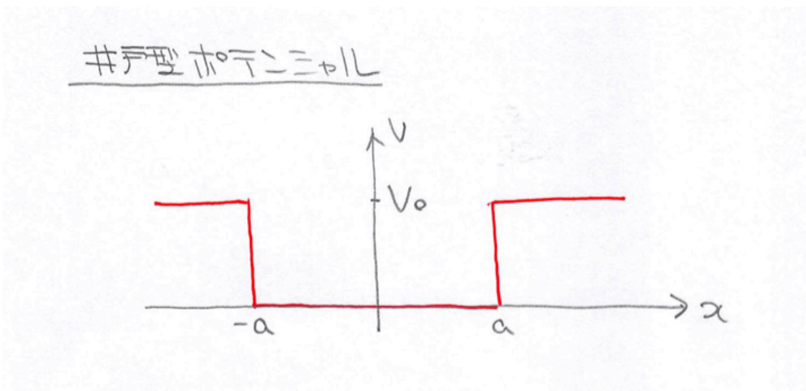
エネルギーの期待値（レポート）

$$\langle H \rangle = \sum_n |C_n|^2 E_n$$

3.2　井戸型ポテンシャル

ポテンシャルが以下の形をしている場合を考える

$$V(x) = \begin{cases} 0 & : \quad -a < x < a \\ V_0 > 0 & : \quad \text{otherwise} \end{cases}$$



この、井戸型ポテンシャルに閉じ込められた粒子の性質を考える

変数分離法を用いて：$\psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}u(x)$

Schrödinger 方程式：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x) = \begin{cases} (E - V_0)u(x) \quad \text{with } V_0 \to \infty & : \quad x < 0, x > a \\ Eu(x) & : \quad 0 < x < a \end{cases}$$

$|x| > a$ における波動関数の振る舞い：

$$u''(x) = \rho^2 u(x) \quad \text{with} \quad \rho \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} > 0$$

これを解いて：

$$u(x) = \begin{cases} C_1 e^{\rho x} & : \ x < -a \\ C_2 e^{-\rho x} & : \ x > a \end{cases}$$

注：例えば $x > a$ では $e^{\rho x}$ も解ではある

$\Rightarrow$ この解は $x \to \infty$ で発散し、規格化できない

$\Rightarrow$ この解は採用しない

$|x| < a$ における波動関数の振る舞い：

$$u''(x) = -k^2 u(x) \quad \text{with} \quad k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

これを解いて：

$$u(x) = A\cos kx + B\sin kx$$

以下、波動関数の連続性を要求することで未知数を決めていく

- 未知数：A、B、C_1、C_2、E
- 使える条件：$x = \pm a$ での u と u' の連続性と規格化条件

u' の連続性

$$u'(a+\epsilon) - u'(a-\epsilon) = \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx u''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx (E - V)u(x) \xrightarrow{\epsilon \to 0} 0$$

したがって、$x = \pm a$ における u と u' の連続性から、以下の式を得る：

$$C_1 e^{-\rho a} = A\cos ka - B\sin ka \quad : \quad u \text{ at } x = -a \tag{3.1}$$
$$\rho C_1 e^{-\rho a} = kA\sin ka + kB\cos ka \quad : \quad u' \text{ at } x = -a \tag{3.2}$$
$$C_2 e^{-\rho a} = A\cos ka + B\sin ka \quad : \quad u \text{ at } x = a \tag{3.3}$$
$$-\rho C_2 e^{-\rho a} = -kA\sin ka + kB\cos ka \quad : \quad u' \text{ at } x = -a \tag{3.4}$$

適当に比を取って：

$$\begin{aligned} \rho &= k\frac{A\sin ka + B\cos ka}{A\cos ka - B\sin ka} \qquad : \quad \frac{(3.2)}{(3.1)} \\ &= k\frac{A\sin ka - B\cos ka}{A\cos ka + B\sin ka} \qquad : \quad \frac{(3.4)}{(3.3)} \end{aligned}$$

さらに：

$$(A\sin ka + B\cos ka)(A\cos ka + B\sin ka) = (A\sin ka - B\cos ka)(A\cos ka - B\sin ka)$$

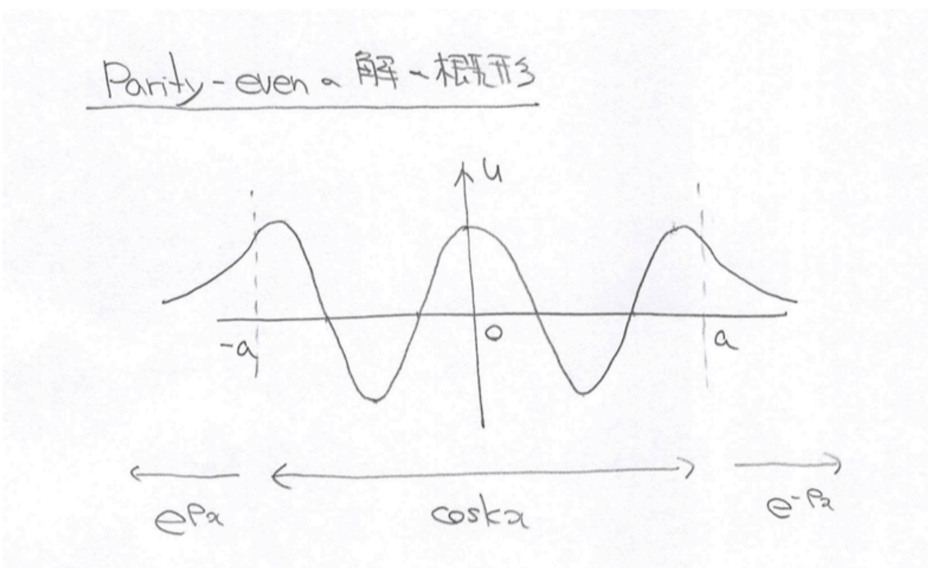
そして整理すると結果として：

$$AB = 0$$

したがって、Schrd̈inger 方程式の解は偶関数 or 奇関数

$B = 0$ **の解：**$u(x) = u(-x)$

- $u(x) = \begin{cases} A\cos kx & : \ |x| < a \\ C_+ e^{-\rho|x|} & : \ |x| > a \end{cases}$
- $C_+ = Ae^{\rho a}\cos ka$



エネルギー固有値が満たすべき関係式：(3.1) – (3.4) の比の式より

$$\rho = k\tan ka$$

あるいは元のパラメータで書くと

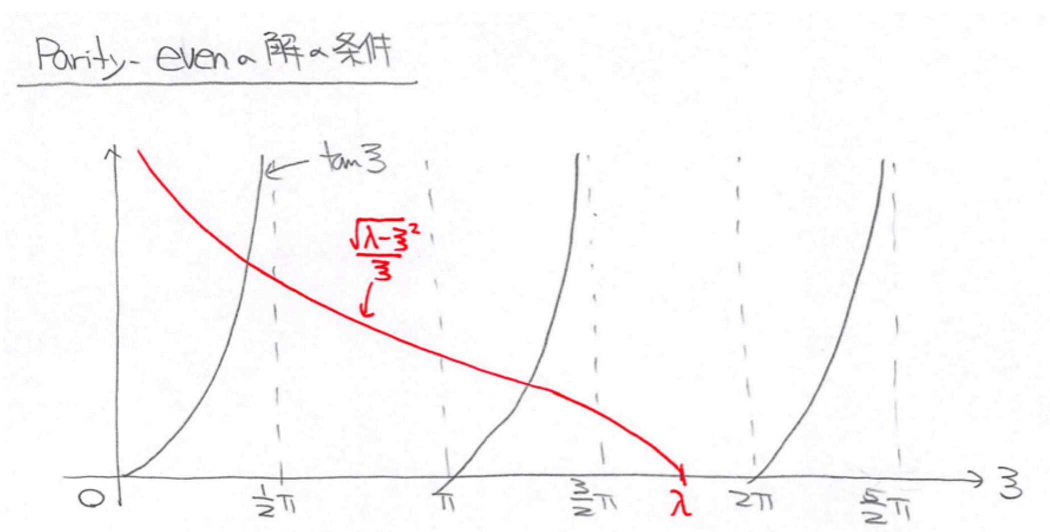
$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\tan\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}a$$

この関係式を満たす E のみが許される
式を簡単にするため、以下の量を定義：

- $\lambda = \dfrac{2mV_0a^2}{\hbar^2}$: V_0 の大きさに対応したパラメータ
- $\xi = ka = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}a$: E の大きさに対応したパラメータ

すると解くべき式は：

$$\frac{\sqrt{\lambda - \xi^2}}{\xi} = \tan \xi$$



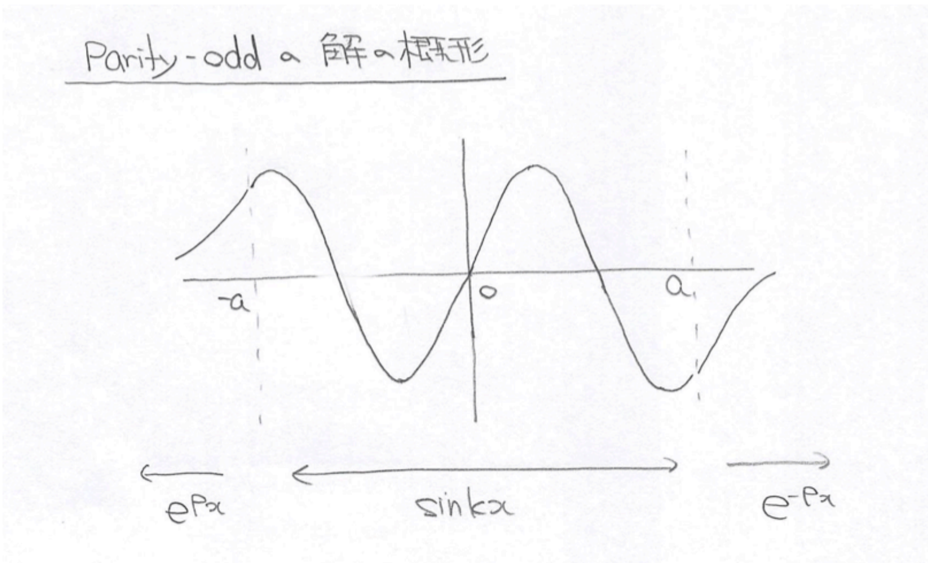
束縛状態の数（固有値の数）は λ で決まる
$\lambda \to \infty$（i.e., $V_0 \to \infty$）の時：

$$E_{\text{even}} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left[\left(n + \frac{1}{2}\right)\pi\right]^2$$

$A = 0$ **の解：**$u(x) = -u(-x)$

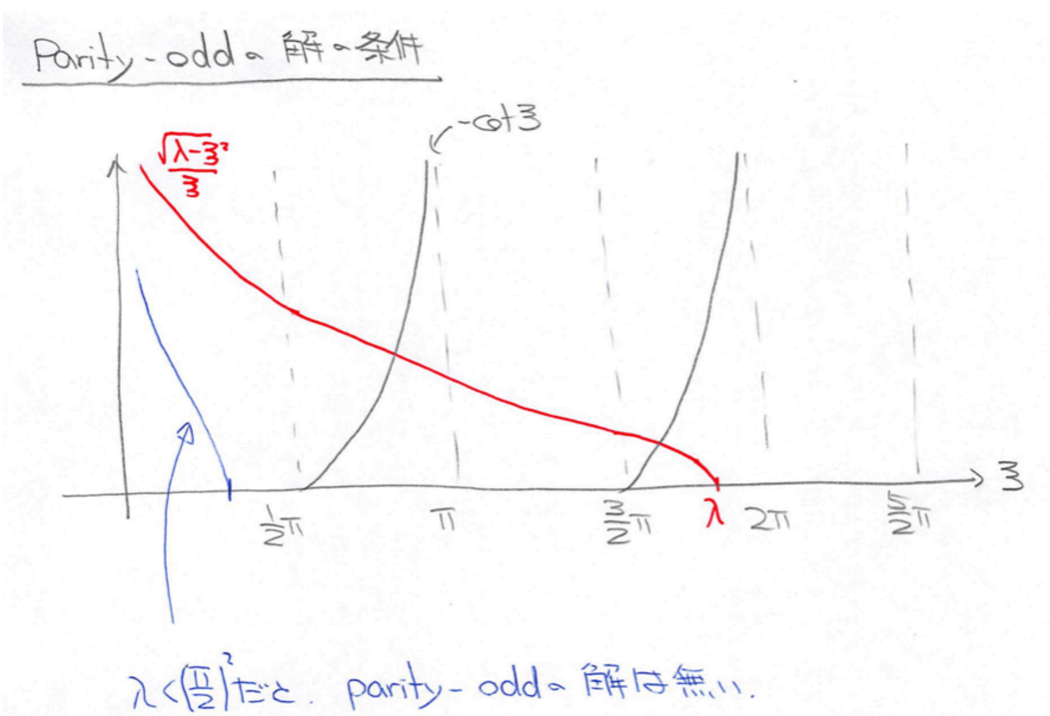
- $u(x) = \begin{cases} -C\_e^{\rho x} & : \ x < -a \\ B \sin kx & : \ |x| < a \\ C\_e^{-\rho x} & : \ x > a \end{cases}$

- $C_- = Be^{\rho a} \sin ka$



Even modes と同様にして E を求める式を導くと

$$\frac{\sqrt{\lambda - \xi^2}}{\xi} = -\cot \xi$$



- $\lambda < \dfrac{1}{4}\pi^2$ のとき、odd mode は存在しない
- $V_0 \to \infty$ のとき $E_{\text{odd}} = \dfrac{\hbar^2}{2ma^2}(n\pi)^2$

  ⇒ Even と odd を合わせると箱の中の粒子の振る舞いを再現（前回は箱の幅 a）
  $E = \dfrac{\hbar^2}{8ma^2}(\ell\pi)^2 \ (\ell = 1,\, 2,\, \cdots)$

4　１次元の散乱

4.1　自由粒子の波動関数

自由粒子：エネルギー E の粒子が一定のポテンシャル（$V < E$）の領域を運動

⇒ ２乗可積分でない波動関数を考える必要がある

$V = 0$ の領域を運動するエネルギー E の粒子

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u''(x) = Eu(x)$$

ひとつの解：

$$u(x) = Ce^{+ikx} \quad \text{with} \quad k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

⇒ $\psi(x,t) = Ce^{+ikx-iEt/\hbar}$：$x$-軸正の方向に進む波
⇒ $u(x) \propto e^{-ikx}$ とすれば x-軸負の方向に進む波

上の $u(x)$ は無限遠までゼロにならない

⇒ これまでの規格化はできない

$\psi(x,t) = Ce^{+ikx-iEt/\hbar}$ について、確率密度と確率の流れ：

$$\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = |C|^2$$
$$J(x,t) = -i\frac{\hbar}{2m}\left[\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\psi\right] = \frac{\hbar k}{m}|C|^2$$

⇒ 粒子密度 $|C|^2$、速度 $v = \hbar k/m$ の流れ（と見える）

⇒ 定常的な粒子の流れと解釈

Box normalization

理論を十分大きな１辺 L の箱の中で定義する：

$$-\frac{1}{2}L < x < \frac{1}{2}L$$

確率密度の満たす式：

$$\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0$$

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

全確率の保存

$$\frac{\partial}{\partial t}(\text{Total Probability}) = \frac{\partial}{\partial t}\int dx|\psi|^2 = -\left[J(x = L/2) - J(x = -L/2)\right]$$

任意の状態に対して全確率が保存するよう、波動関数には周期的境界条件を課す

$$\psi(x,t) = \psi(x+L,t) \quad \Rightarrow \quad J(x = L/2) = J(x = -L/2)$$

自由粒子の波動関数として許されるのは：

$$\varphi_n(x) = Ce^{+ik_n x} \quad \text{with} \quad k_n \equiv \frac{2n\pi}{L} \ (n = \text{integer})$$

規格化条件：

$$\int_{-L/2}^{L/2} dx \varphi_n^*(x)\varphi_{n'}(x) = \delta_{nn'} \quad \Rightarrow \quad C = \frac{1}{\sqrt{L}}$$

運動量演算子の固有関数（１次元）

$$\varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{+ipx/\hbar} \quad \text{with} \quad p = \frac{2\pi\hbar}{L}n$$

$$\hat{p}\varphi_p = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\varphi_{\vec{p}} = p\varphi_p$$

状態の数え上げ：実際の計算では、計算の最後に $L \to \infty$ と取る

$$\sum_p = \frac{L}{2\pi\hbar}\sum_n \frac{2\pi\hbar}{L} \to \frac{L}{2\pi\hbar}\int d^3p$$

３次元なら $\displaystyle\sum_p = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \to \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \int d^3p$

δ-function normalization

初めから空間体積を無限大とする方法：

$$\varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{+ipx/\hbar}$$

あるいは３次元なら $\varphi_{\vec{p}}(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{+i\vec{p}\vec{x}/\hbar}$

規格化条件

$$\int dx \varphi_p^*(x)\varphi_{p'}(x) = \delta(p-p') = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dx e^{i(p'-p)x}$$

$\delta(x)$：以下の条件を満たす関数

- $\delta(x) = 0 \quad \text{for} \quad x \neq 0$
- $\int dx f(x)\delta(x-a) = f(a)$

δ-関数の例

- $\delta(x) = \lim_{L\to 0} \begin{cases} 1/L & : |x| < L/2 \\ 0 & : |x| > L/2 \end{cases}$
- $\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx}$ ：「性質の良い」関数のフーリエ変換可能性の帰結

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx' f(x') e^{-ikx'} \right] e^{ikx} = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ik(x-x')} \right] f(x')$$

δ-関数は次元を持つ

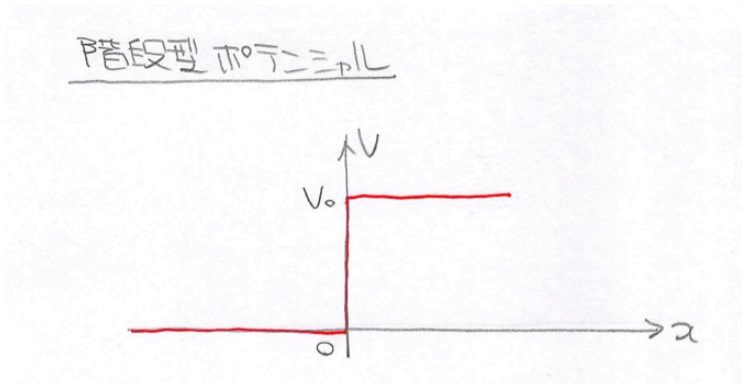
- $[\delta(x)] = [x^{-1}]$

  [変数]: 変数の次元

4.2 １次元の散乱：階段型ポテンシャル

以下のポテンシャルを考える：

$$V(x) = \begin{cases} 0 & : \quad x < 0 \\ V_0 > 0 & : \quad x > 0 \end{cases}$$



Schrödinger 方程式：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x) = \begin{cases} Eu(x) & : \quad x < 0 \\ (E - V_0)u(x) & : \quad x > 0 \end{cases}$$

まず $E > V_0$ の場合：$x < 0$ および $x > 0$ での波数をそれぞれ k_1、k_2 とすると

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x) = \begin{cases} k_1^2 u(x) & : \quad x < 0 \\ k_2^2 u(x) & : \quad x > 0 \end{cases}$$

$$k_1 \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$$

$$k_2 \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}$$

$x < 0$ での一般解：

$$u(x) = A_+ e^{+ik_1 x} + A_- e^{-ik_1 x}$$

$x > 0$ での一般解：

$$u(x) = B_+ e^{+ik_2 x} + B_- e^{-ik_2 x}$$

この解に対する flux（単位時間にある点を正の方向に通過する粒子の数と解釈）

$$J = -i\frac{\hbar}{2m}(u^* u' - \text{c.c.}) = \begin{cases} \dfrac{\hbar k_1}{m}(|A_+|^2 - |A_-|^2) & : \quad x < 0 \\ \dfrac{\hbar k_2}{m}(|B_+|^2 - |B_-|^2) & : \quad x > 0 \end{cases}$$

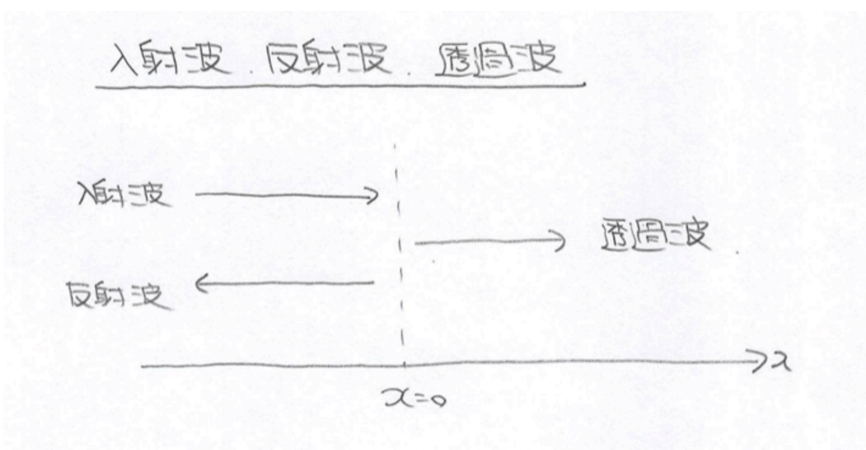
注：

- A_+ と B_+：正の方向に進む波
- A_- と B_-：負の方向に進む波

以上の状況で、$x = -\infty$ から正の方向に粒子を入射する場合を考える：

$\Rightarrow$ $x > 0$ の領域で負の方向に進む粒子はいない

$\Rightarrow$ $B_- = 0$



欲しい解の形：

$$u(x) = \begin{cases} A_+ e^{+ik_1 x} + A_- e^{-ik_1 x} & : \quad x < 0 \\ B_+ e^{+ik_2 x} & : \quad x > 0 \end{cases}$$

この解に対して：

- 未知数：A_+、A_-、B_+（任意の E に対して解は存在）
- 使える条件：$x = 0$ での u と u' の連続性

連続性の要請：

- $u(0)$：$A_+ + A_- = B_+$
- $u'(0)$：$k_1(A_+ - A_-) = k_2 B_+$

これを解いて

$$A_- = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A_+$$

$$B_+ = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A_+$$

A_+ は決まらない（規格化条件を指定していない）

興味のある量：

- 反射率：入射した粒子のうち、$x = 0$ で跳ね返る粒子の割合
- 透過率：入射した粒子のうち、$x > 0$ の領域へ透過していく粒子の割合

計算してみる：

$$(\text{反射率}) = \frac{(\text{反射 flux})}{(\text{入射 flux})} = \frac{|A_-|^2}{|A_+|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$$

$$(\text{透過率}) = \frac{(\text{透過 flux})}{(\text{入射 flux})} = \frac{k_2}{k_1}\frac{|B_+|^2}{|A_+|^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

注：確率の保存

$$(\text{反射率}) + (\text{透過率}) = 1$$

$E < V_0$ の場合（$E > V_0$ の解について、k_2 を純虚数とすることで解が得られる）

$x > 0$ での解

$$u(x) = B_+ e^{+ik_2 x} \quad \text{with} \quad k_2^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) < 0$$

採用する解：

- $\rho \equiv \sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$ として $k_2 = +i\rho$

- $u(x) = B_+ e^{-\rho x}$

  $k_2 = -i\rho$ に対しては $u(x>0) \propto e^{+\rho x}$：波動関数が遠方で発散するので採用しない

したがって

$$u(x) = \begin{cases} A_+ e^{+ik_1 x} + A_- e^{-ik_1 x} & : \quad x < 0 \\ B_+ e^{-\rho x} & : \quad x > 0 \end{cases}$$

with

$$A_- = \frac{k_1 - i\rho}{k_1 + i\rho} A_+$$

$$B_+ = \frac{2k_1}{k_1 + i\rho} A_+$$

上の結果より

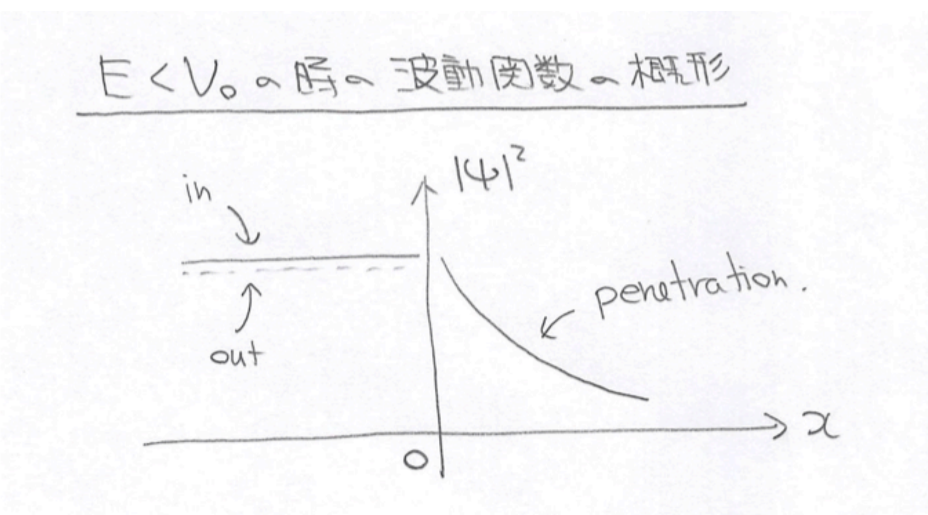
$$(\text{反射率}) = \frac{|A_-|^2}{|A_+|^2} = 1 \quad : \quad \text{全反射}$$

$x > 0$ で $J = 0$ であることを確認せよ（宿題）

$\Rightarrow$ (透過率) $= 0$

注：古典論ではエネルギー的に許されない領域 $x > 0$ にも粒子が存在し得る

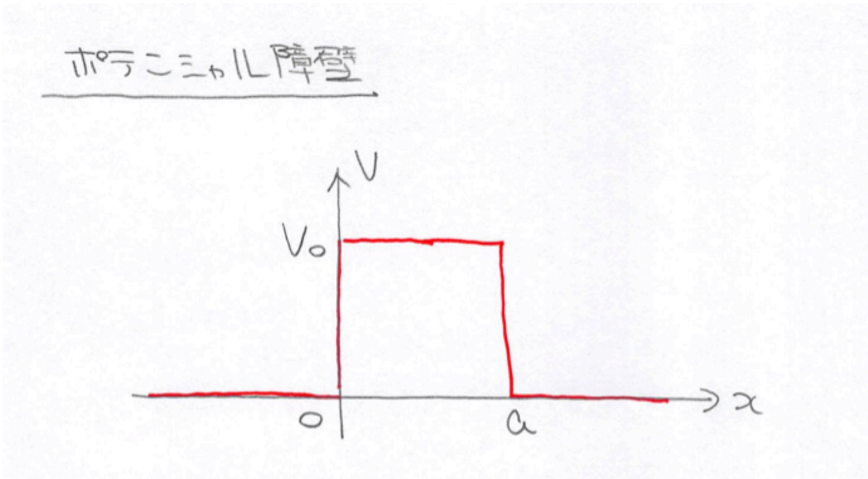
$\Leftrightarrow$ $u(x > 0) \neq 0$



4.3 １次元の散乱：ポテンシャル障壁とトンネル効果

考えるポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & : \quad x < 0,\ x > a \\ V_0 > 0 & : \quad 0 < x < a \end{cases}$$



特に $E < V_0$ の場合を考えると

$$u(x) = \begin{cases} A_+ e^{+ikx} + A_- e^{-ikx} & : \quad x < 0 \\ B_+ e^{\rho x} + B_- e^{-\rho x} & : \quad 0 < x < a \\ C_+ e^{+ikx} + C_- e^{-ikx} & : \quad x > a \end{cases}$$

$$k \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$

$$\rho \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}$$

以下、$x = -\infty$ から正の方向に粒子を入射した場合を考える

$\Rightarrow \ C_- = 0$

$x = 0$ での連続性：

- $u(0)$：$A_+ + A_- = B_+ + B_-$
- $u'(0)$：$ik(A_+ - A_-) = \rho(B_+ - B_-)$

$x=a$ での連続性：

- $u(a)$：$B_+e^{\rho a}+B_-e^{-\rho a}=C_+e^{ika}\equiv C'_+$
- $u'(a)$：$\rho(B_+e^{\rho a}-B_-e^{-\rho a})=ikC_+e^{ika}=ikC'_+$

  $C'_+=C_+e^{ika} \quad \Rightarrow \quad |C'_+|^2=|C_+|^2$

$x=a$ での連続性から：

$$B_+e^{\rho a}=\frac{(\rho+ik)}{2\rho}C'_+$$

$$B_-e^{-\rho a}=\frac{(\rho-ik)}{2\rho}C'_+$$

$x=0$ での連続性から：

$$A_+=\frac{ik(B_++B_-)+\rho(B_+-B_-)}{2ik}=\frac{[(k^2-\rho^2)(e^{\rho a}-e^{-\rho a})+2ik\rho(e^{\rho a}+e^{-\rho a})]C'_+}{4ik\rho}$$

$$A_-=\frac{ik(B_++B_-)-\rho(B_+-B_-)}{2ik}=\frac{(k^2+\rho^2)(e^{\rho a}-e^{-\rho a})C'_+}{4ik\rho}$$

透過率：

$$\begin{aligned}T&\equiv\frac{|C_+|^2}{|A_+|^2}\\&=\frac{16k^2\rho^2}{(k^2-\rho^2)^2(e^{\rho a}-e^{-\rho a})^2+4k^2\rho^2(e^{\rho a}+e^{-\rho a})^2}\\&=\frac{4k^2\rho^2}{4k^2\rho^2+(k^2+\rho^2)^2\sinh^2\rho a}\\&=\frac{4E(V_0-E)}{4E(V_0-E)+V_0^2\sinh^2(\sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2}a)}\end{aligned}$$

したがって、古典的には透過できないようなバリアを量子論では透過することがある

$\Rightarrow$ トンネル効果

極限１：$E\sim V_0$ のとき：$E=V_0(1-\epsilon)$

$$T=\frac{1}{1+(mV_0/2\hbar^2)a^2}+O(\epsilon)$$

したがって、$E \to V_0$ でも１より小さい

極限２：$E \ll V_0$ のとき

$$T \simeq \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \exp\left[-\frac{2\sqrt{2m(V_0 - e)}a}{\hbar}\right]$$

この場合は透過率は指数関数的に小さくなる

5　量子力学の基本的な性質：波動関数の方法

5.1　これまでのまとめ

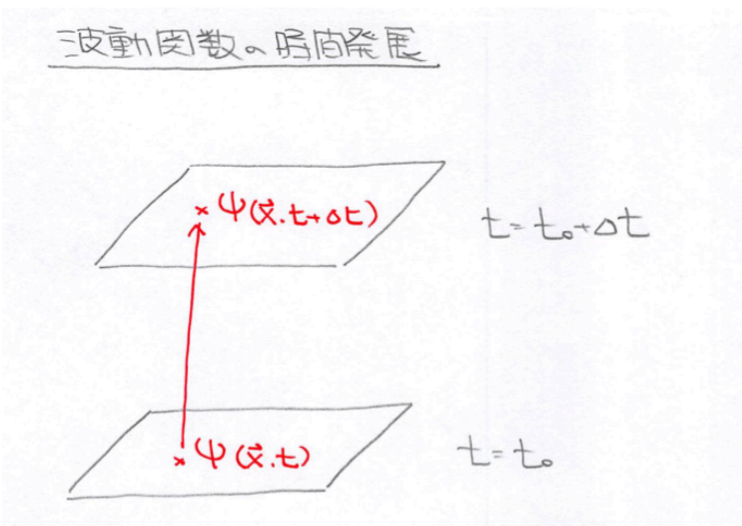
波動関数を用いた量子力学の定式化：

- 量子力学において状態は「波動関数」で指定される
- 波動関数の時間発展は Schrödinger 方程式で決定される

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

Schrödinger 方程式は時間に関して１次の方程式

⇒ ある時刻における（全ての点での）波動関数の値がわかっていれば解が決まる



$$\Rightarrow \psi(\vec{x}, t + \delta t) = \psi(\vec{x}, t) + \frac{1}{i\hbar}H\psi(\vec{x}, t)\delta t + \cdots$$

物理量（力学変数）に対応して、量子力学では演算子（operator）が存在

- 力学変数 $A \Leftrightarrow$ 演算子 $\hat{A}$
- 演算子は波動関数に作用して（一般には）その形を変える

これまでに出てきた演算子：

- 位置演算子：$\hat{x} = x$
- 運動量演算子：$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}$
- ハミルトニアン演算子（エネルギー）：$\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(x)$

物理量の期待値：

$$\langle A(t)\rangle = \int d^3x \psi^*(\vec{x},t)\hat{A}\psi(\vec{x},t) \equiv \int d^3x \psi^*(\vec{x},t)\left[\hat{A}\psi(\vec{x},t)\right]$$

その時間微分（演算子 $\hat{A}$ は時間に依らないとして）：

$$\begin{aligned}\frac{d\langle A(t)\rangle}{dt} &= \int d^3x\left(\psi^*\hat{A}\dot{\psi} + \dot{\psi}^*\hat{A}\psi\right)\\ &= \frac{1}{i\hbar}\int d^3x\psi^*\left(\hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A}\right)\psi\\ &= \frac{1}{i\hbar}\int d^3x\psi^*\left[\hat{A},\hat{H}\right]\psi\end{aligned}$$

$\hat{A}$ の期待値の時間微分は、$\hat{A}$ とハミルトニアンの交換子の $(1/i\hbar)$ 倍の期待値で与えられる

5.2　エルミート演算子

演算子 $\hat{A}$ が以下の性質を満たすとき、$\hat{A}$ はエルミート演算子と呼ばれる

$$\int d^3x\psi_2^*(\vec{x})\left[\hat{A}\psi_1(\vec{x})\right] = \int d^3x\left[\hat{A}\psi_2(\vec{x})\right]^*\psi_1(\vec{x})$$

- ψ_1 と ψ_2 は任意の関数
- 無限遠の効果（表面項）は（多くの場合）無視して良い（以下無視する）

位置、運動量、ハミルトニアン演算子は全てエルミートである（各自チェックせよ）

- 例：運動量

簡単のため、１次元の場合：部分積分をつかって

$$\int dx \psi_2^*(x) \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_1(x) \right] = \int dx \left[+i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_2^*(x) \right] \psi_1(x) + (\text{表面項})$$
$$= \int dx \left[-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi_2(x) \right]^* \psi_1(x) + (\text{表面項})$$

固有値と固有関数

演算子 $\hat{A}$ に対して、以下の条件を満たす数 a と関数 $\varphi_a(\vec{x})$ が存在するとする：

$$\hat{A}\varphi_a(\vec{x}) = a\varphi_a(\vec{x})$$

このとき：

- a：演算子 $\hat{A}$ の固有値
- φ_a：演算子 $\hat{A}$ の固有関数

と呼ぶ

エルミートな演算子 $\hat{A}$ に対して：

$$\int d^3x \varphi_a^*(\vec{x}) \left[\hat{A}\varphi_b(\vec{x}) \right] = b \int d^3x \varphi_a^*(\vec{x})\varphi_b(\vec{x})$$
$$= \int d^3x \left[\hat{A}\varphi_a(\vec{x}) \right]^* \varphi_b(\vec{x}) = a^* \int d^3x \varphi_a^*(\vec{x})\varphi_b(\vec{x})$$

ただし、$\int d^3x \varphi_a^*(\vec{x})\varphi_b(\vec{x})$ は定義可能とする：

２乗可積分 or δ-function 規格化 or Box 規格化 or ...

演算子 $\hat{A}$ がエルミートな演算子であるとき、その固有値は実数である

$\Rightarrow$ $a = b$ なら $a = b^*$

エルミートな演算子の固有関数は直交する：

$\Rightarrow$ $a \neq b$ なら $\int d^3x \varphi_a^*(\vec{x})\varphi_b(\vec{x}) = 0$

演算子 $\hat{A}$ の固有関数 $\varphi_a(\vec{x})$ が２乗可積分であるとき、固有値 a は離散的である

$\Leftrightarrow$ $[a - \lambda, a + \lambda]$ の範囲にある固有値は a のみとなるような正の実数 λ が存在する

証明

固有値が連続的な値を取り得るとして、矛盾を示す。$\varphi_a(\vec{x})$ が a についても連続関数とすると

$$\varphi_{a+\delta a}(\vec{x}) = \varphi_a(\vec{x}) + \delta\varphi_a(\vec{x}) \quad \text{with} \quad \lim_{\delta a \to 0} \delta\varphi_a(\vec{x}) = 0$$

これを固有値方程式に代入すると

$$\begin{aligned} \hat{A}\varphi_{a+\delta a} &= (a+\delta a)\varphi_{a+\delta a} = (a+\delta a)\left(\varphi_a + \delta\varphi_a\right) \\ &= \hat{A}\left(\varphi_a + \delta\varphi_a\right) = a\varphi_a + \hat{A}\delta\varphi_a \end{aligned}$$

十分小さな δa に対して変分の１次の項のみが効くとして

$$\hat{A}\delta\varphi_a = \delta a\varphi_a + a\delta\varphi_a$$

両辺に φ_a^* をかけて空間積分すると（$\hat{A}$ がエルミートであることを用いて）

$$\begin{aligned} &\int d^3x \varphi_a^* \hat{A}\delta\varphi_a = \int d^3x \left[\hat{A}\varphi_a\right]^* \delta\varphi_a = a\int d^3x \varphi_a^* \delta\varphi_a \\ &= \int d^3x \varphi_a^* \left[\delta a\varphi_a + a\delta\varphi_a\right] \end{aligned}$$

よって

$$\delta a \int d^3x \varphi_a^* \varphi_a = 0$$

したがって

$$\delta a = 0$$

これは、a 近傍に他の固有値が固有値がないことを意味するので、初めの仮定に矛盾

注：

例えば運動量演算子の固有値は連続値を取り得る。上の証明のどこが破綻するか？

上の証明は変分の１次の項のみ残したが、２乗可積分でない固有関数に対しては、おそらくそれは許されない（$x \to \pm\infty$ で $e^{ipx/\hbar}$ と $e^{i(p+\Delta p)x/\hbar}$ の差には Δp の高次の項が効いてくる）

補足：エルミート共役な演算子

- 演算子 $\hat{A}$ に対して以下の性質を満たす演算子を $\hat{A}$ のエルミート共役な演算子と呼び、$\hat{A}^\dagger$ で表す：

$$\int dx \psi_2^*(x) \left[\hat{A}^\dagger \psi_1(x)\right] = \int dx \left[\hat{A}\psi_2(x)\right]^* \psi_1(x)$$

- 演算子 $\hat{A}$ がエルミートなら $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$

5.3　物理量の測定値と期待値

エルミート演算子がなぜ重要か：物理量に対応する演算子はエルミートである

$\Rightarrow$ 物理量の測定値（及び期待値）は実数

物理量 A を（１回）測定した結果得られる値は、$\hat{A}$ の固有値のいずれかである

$\Rightarrow$ 任意の状態は $\hat{A}$ の固有関数の線型和（重ね合わせ）で与えられる

$\Rightarrow$ 任意の関数（ただし適当な境界条件を課したもの）は $\hat{A}$ の固有関数で一意に展開可能である（エルミート演算子の固有関数の完全性）

以下

- $\hat{A}$ の i 番目の固有値：a_i
- 対応する固有関数：$\varphi_i(\vec{x})$

$$\int d^3x \varphi_i^* \varphi_j = 0 \quad \text{for} \quad a_i \neq a_j$$

すると、とりあえず i が離散的なとき、任意の波動関数は以下のように展開できる

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_i c_i(t) \varphi_i(\vec{x})$$

$c_i(t)$ は c-number

$$\int d^3x \varphi_i^* \varphi_j = \delta_{ij} \text{：規格化条件}$$

A の期待値：

$$\begin{aligned}
\langle A \rangle &= \int d^3x \left[\sum_i c_i^*(t) \varphi_i^*(\vec{x}) \right] \left[\hat{A} \sum_j c_j(t) \varphi_j(\vec{x}) \right] \\
&= \int d^3x \left[\sum_i c_i^*(t) \varphi_i^*(\vec{x}) \right] \left[\sum_j a_j c_j(t) \varphi_j(\vec{x}) \right] \\
&\Downarrow \quad \int d^3x \varphi_i^* \varphi_j = \delta_{ij} \\
&= \sum_i |c_i|^2 a_i
\end{aligned}$$

上の式の解釈：

- 可能な観測値：a_i（$i = 1,\, 2,\, \cdots$）
- a_i を観測する確率：$|c_i|^2$

Observable（観測可能量）：以下の条件を満たす演算子

- 固有値が実（エルミート）
- 固有関数が完全系をなす（状態を表す波動関数が固有関数の線型和に展開可能）

縮退した固有値

同一の固有値に対して線形独立な固有関数が複数あるとき、その固有値は縮退しているという

- $\hat{A}\phi_a^{(I)} = a\phi_a^{(I)} \quad \text{with} \quad I = 1, 2, \cdots, N$（$N$：縮退度）
- $\phi_a^{(I)}$ の線型結合も $\hat{A}$ の固有関数

  $\hat{A}(c_1\phi_a^{(1)} + c_2\phi_a^{(2)} + \cdots) = a(c_1\phi_a^{(1)} + c_2\phi_a^{(2)} + \cdots)$

$\phi_a^{(I)}$ は互いに直交しないような選び方も可能

1. まず $\phi^{(1)}$ を規格化する

$$\varphi_a^{(1)} = N_1\phi^{(1)} \quad \text{with} \quad N_1^{-2} = \int d^3x|\phi^{(1)}|^2$$

2. 続いて $\varphi_a^{(1)}$ と $\phi^{(2)}$ から $\varphi_a^{(1)}$ と直交する規格化された関数をつくる

$$\varphi_a^{(2)} = N_2(c_{2,1}\varphi_a^{(1)} + \phi^{(2)}) \quad \text{with} \quad \begin{cases} c_{2,1} = -\displaystyle\int d^3x\varphi_a^{(1)*}\phi^{(2)} \\ N_2 = \displaystyle\int d^3x|c_{2,1}\varphi_a^{(1)} + \phi^{(2)}|^2 \end{cases}$$

3. この操作を順次繰り返す

$$\varphi_a^{(I)} = N_\ell(c_{I,1}\varphi_a^{(1)} + \cdots + c_{I,I-1}\varphi_a^{(I-1)} + \phi^{(I)})$$

4. すると $\{\varphi_a^{(I)}\}$ は規格直交基底をなす

$$\int d^3x\varphi_a^{(I)*}\varphi_a^{(J)}) = \delta_{IJ}$$

5. 一般には、上記の $\varphi_a^{(I)}$ をさらに（任意の）ユニタリー行列で回転させた基底をとっても良い

宿題：$N=2$ の場合、具体的にやってみる

この講義では、特に注意しない限り：

- 波動関数の完全系 $\{\varphi_i\}$ は、縮退した固有値に付随した全ての固有関数を規格直交化された形で含むものとする
- 固有値を数えるときは縮退した固有値は縮退度の分だけ独立にカウント

任意の波動関数は $\{\varphi_i\}$ の線形結合で表すことができる（$\{\varphi_i\}$ の完全性）

$$\Rightarrow\ \psi(\vec{x},t)=\sum_i c_i(t)\varphi_i(\vec{x})\quad\text{with}\quad c_i(t)=\int d^3x'\varphi_i^*(\vec{x}')\psi(\vec{x}',t)$$

$$\Rightarrow\ \psi(\vec{x},t)=\int d^3x'\left[\sum_i \varphi_i^*(\vec{x}')\varphi_i(\vec{x})\right]\psi(\vec{x}',t)$$

上の関係式が任意の ψ に対して成り立つには

$$\sum_i \varphi_i^*(\vec{x})\varphi_i(\vec{x}')=\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}')$$

注意：δ-関数が作用できる関数の満たすべき条件

多くの場合、波動関数（および固有関数）には境界条件（周期性、端点での振る舞いなど）が課されるので、上の完全性の関係式はその境界条件を満たす関数に対してのみ成立

例：長さ a の箱に閉じ込められた粒子（既出）

- 波動関数は $x=0$ と $x=a$ でゼロとなる

$$\psi(x=0)=\psi(x=L)=0$$

- ハミルトニアンの固有関数

$$\varphi_n(x)=\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

- 完全性の条件

$$\delta(x-x')=\frac{2}{a}\sum_{n=1}^{\infty}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n\pi}{a}x'\right)$$

上の δ-関数は、$x=0$ と $x=a$ でゼロとなる関数にしか作用させてはいけない

5.4　波動関数の空間

任意の状態を表す波動関数は、エルミート演算子の固有関数で展開可能：

$$\psi(\vec{x}) = \sum_i c_i(t)\varphi_i(\vec{x})$$

i は離散的、φ_i は 2 乗可積分とする

$$\int d^3x \varphi_i^*(\vec{x})\varphi_j(\vec{x}) = \delta_{ij}$$

ここで

$$c_i = \int d^3x \varphi_i^* \psi$$

波動関数の作る空間：複素ベクトルの空間と基本的に同じ

- 波動関数（ベクトル）の組に対し、内積が定義されている

  $$(\text{波動関数の組の内積}) \equiv \int d^3x \psi^*(\vec{x})\psi(\vec{x}) \quad \Leftrightarrow \quad (\text{複素ベクトルの内積}) \equiv \sum_\alpha v_\alpha^* v_\alpha$$

- 波動関数（ベクトル）の和、及び定数倍はやはり波動関数（ベクトル）となる

  （2 乗可積分な関数の和は、やはり 2 乗可積分であることに注意）

  – 波動関数は規格化するので、最終的には自己との定数倍された波動関数は全て同じ状態に対応

  – ゼロとなる波動関数は特別考えない

- 空間内の波動関数（ベクトル）はエルミートな演算子（行列）の固有関数（ベクトル）で展開できる

  $$\psi(\vec{x}) = \sum_i c_i\varphi_i(\vec{x}) \quad \Leftrightarrow \quad v_\alpha = \sum_i b_i e_\alpha^{(i)} \quad \text{with} \quad b_i = \sum_\alpha e_\alpha^{(i)*} v_\alpha$$

  $\{e_\alpha^{(i)}\}$: 正規直交系をなす単位ベクトルの組

  任意のエルミート行列の固有ベクトルを $\{e_\alpha^{(i)}\}$ とできる

したがって、波動関数のなす空間は、無限次元の複素ベクトル空間をつくる

$\Rightarrow$ 波動関数 ψ はこの空間内のベクトルとみなせる

固有値が連続な場合について

例：運動量演算子（とりあえず１次元）

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \;\Rightarrow\; \text{固有関数：}\varphi_{\hbar k}(x) \propto e^{ikx}$$

固有値が連続な場合の波動関数の展開：

$$\psi(\vec{x}, t) = \int da c_a(t)\varphi_a(\vec{x})$$

固有関数については以下の規格化を採用

$$\int d^3x \varphi_a^*(\vec{x})\varphi_b(\vec{x}) = \delta(a-b)$$

A の期待値

$$\int d^3\psi^*\hat{A}\psi = \int da\, a|c_a|^2$$

上の式の解釈：

- 可能な観測値：a（連続量）
- $[a, a+da]$ 内に観測値がある確率：$|c_a|^2 da$

5.5　ひとつの状態で複数の物理量が決まった値を取り得る条件

完全系をなす関数がいつでも $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の同時固有関数となる条件を考える

- $\hat{A}\varphi_{a_i,b_i} = a_i\varphi_{a_i,b_i}$
- $\hat{B}\varphi_{a_i,b_i} = b_i\varphi_{a_i,b_i}$

$\hat{A}$(第２式) $-$ $\hat{B}$(第１式)：

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\varphi_{a_i,b_i} = 0$$

上式は、$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$ を任意の関数に作用するといつでもゼロということを意味する

$$\Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] \equiv (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = 0$$

$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$ は交換子（commutator）と呼ばれる

$\Rightarrow$ ふたつの物理量 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が同時に決まった値を取り得るためには、演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ は可換である必要がある

例：位置と運動量（既出）

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p_x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad \Rightarrow \quad [\hat{x}, \hat{p_x}] = i\hbar$$

6　量子力学の体系

6.1　Dirac's notation

Framework

物理系の状態（無限次元複素ベクトル空間の要素）を $|\psi\rangle$ と表す

- $|\psi\rangle$ は「ケットベクトル」と呼ばれる
- ψ は状態を指定する量子数（あるいは名前）
- $\langle\psi|$（「ブラベクトル」と呼ばれる）：$|\psi\rangle$ の複素共役

  $\Rightarrow\ \langle\psi| = (|\psi\rangle)^\dagger$

Bra および ket は、線型演算子が作用するベクトルの役割
状態の重ね合わせは別の状態になる

- $|\varphi_i\rangle \to c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle + \cdots$

Bra と ket から内積 $\langle\psi|\psi'\rangle$ が定義される

- $\langle\psi|\psi'\rangle$ は c-number（複素数）
- $\langle\psi|\psi'\rangle = \displaystyle\int d^3x\psi^*(\vec{x})\psi'(\vec{x})$
- $\langle\psi|\psi'\rangle = \langle\psi'|\psi\rangle^*$
- 任意の状態に対し $\langle\psi|\psi\rangle > 0$ を要請

線型演算子 $\hat{A}$ は bra と ket に作用

- $\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$
- $\hat{A}(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle + \cdots) = c_1\hat{A}|\psi_1\rangle + c_2\hat{A}|\psi_2\rangle + \cdots$

  c_i は c-number

エルミート演算子（$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$）は任意の状態に対して以下の関係式が成り立つ

- $\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle = \left[\hat{A}|\psi_1\rangle\right]^\dagger |\psi_2\rangle = \left[\langle\psi_2|\hat{A}|\psi_1\rangle\right]^*$

任意のエルミート演算子 $\hat{A}$ には固有値と固有状態が存在

- $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$

  a_i：固有値（実数）

  $|a_i\rangle$：固有状態
- 異なる固有値に対応した状態は直交

  $$\langle a_i|a_j\rangle = 0 \quad \text{for} \quad a_i \neq a_j$$
- $\{|a_i\rangle\}$ は完全系を成す

  $\Rightarrow$ 任意の状態は $\{|a_i\rangle\}$ の線型結合で表すことができる

演算子の「行列要素（matrix element）」：

- $\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle \equiv \langle\psi_1| \left[\hat{A}|\psi_2\rangle\right]$
- 演算子は、すべての行列要素がわかれば決まる。

Physical interpretation

物理量（観測可能量）A には対応する演算子 $\hat{A}$ が存在する

物理量は実数　$\Rightarrow$　物理量に対応した演算子はエルミート

Posturate 1：

- Physical state に対応した ket ベクトルは任意のエルミート演算子の固有状態の線型和で表される

  $$\sum_i |a_i\rangle\langle a_i| = 1 \quad \Rightarrow \quad |\psi\rangle = \sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\psi\rangle$$

$\Leftrightarrow$ エルミート演算子の固有状態は完全系をなす

Posturate 2：

- A の観測結果は $\hat{A}$ の固有値のいずれかとなる

Posturate 3:

- 状態 $|\psi\rangle$ について A を測定して a_i を得る確率は $|\langle a_i|\psi\rangle|^2$

  期待値：$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_i |\langle a_i|\psi\rangle|^2 a_i$

演算子の作用のしかた（交換関係）は古典論からの類推で決める

6.2 正準量子化

古典論（解析力学）の復習

- Lagrangian を正準座標 x_i（通常 q_i と書かれるもの）とその時間に関する 1 階微分で表す
  - $L(x_i, \dot{x}_i)$
- 正準運動量とハミルトニアンを定義
  - 正準運動量：$p_i \equiv \dfrac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}$
  - ハミルトニアン：$H = \sum_i p_i \dot{x}_i - L$
- x_i と p_i に依存する量の時間微分はハミルトニアンとの Poisson bracket で与えられる
  - $\dfrac{dA(x,p)}{dt} = \{A, H\}_{\mathrm{P}}$

    $\{A, B\}_{\mathrm{P}} \equiv \sum_i \left[\dfrac{\partial A}{\partial x_i}\dfrac{\partial B}{\partial p_i} - \dfrac{\partial B}{\partial x_i}\dfrac{\partial A}{\partial p_i}\right]$：Poisson bracket

    $\{x_i, p_j\}_{\mathrm{P}} = \delta_{ij}$
- 簡単な場合（1 自由度）：$H = \dfrac{p^2}{2m} + V(x)$

  $\Rightarrow\ \dot{x} = \dfrac{p}{m}, \quad \dot{p} = -\dfrac{\partial V}{\partial x}$

正準量子化：

1. 正準変数と正準運動量に対応した演算子を導入

$$\hat{x}_i, \quad \hat{p}_i$$

2. 演算子は、対応する Poisson bracket を commutator の $(1/i\hbar)$ 倍したもので置き換えた交換関係を満たすものとする：

$$\{A, B\}_{\mathrm{P}} \to \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \frac{1}{i\hbar}\left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right)$$

$$\{x_i, p_j\}_{\mathrm{P}} = \delta_{ij} \quad \Rightarrow \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

Heisenberg 表示と Schrödinger 表示

演算子の時間依存性：古典論との対応から

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\}_{\mathrm{P}} \quad \Rightarrow \quad i\hbar\frac{d\hat{A}_{\mathrm{H}}}{dt} = [\hat{A}_{\mathrm{H}}, \hat{H}]$$

添字 H：Heisenberg 表示

Heisenberg 表示では、物理的状態に対応する bra と ket は時間に依らないものとする：

$$\frac{d}{dt}|\psi\rangle_{\mathrm{H}} = 0$$

注：Heisenberg 演算子は時間に依存するので、その固有ベクトルも時間による。
Heisenberg 表示における物理量の期待値：$\langle A\rangle = {}_{\mathrm{H}}\langle\psi|\hat{A}_{\mathrm{H}}|\psi\rangle_{\mathrm{H}}$

$$i\hbar\frac{d\langle A\rangle}{dt} = {}_{\mathrm{H}}\langle\psi|[\hat{A}_{\mathrm{H}}, \hat{H}]|\psi\rangle_{\mathrm{H}}$$

Heisenberg 表示の演算子は、時間に依存しない演算子 $\hat{A}_{\mathrm{S}}$ を用いて以下の形に表せる：

$$\hat{A}_{\mathrm{H}}(t) = e^{-\hat{H}t/i\hbar}\hat{A}_{\mathrm{S}}e^{+\hat{H}t/i\hbar} \quad \Rightarrow \quad \hat{A}_{\mathrm{S}} = e^{+\hat{H}t/i\hbar}\hat{A}_{\mathrm{H}}(t)e^{-\hat{H}t/i\hbar}$$

<u>証明</u>：$\hat{H}$ と $e^{\pm\hat{H}t/i\hbar}$ が可換であることに注意して

$$\frac{d}{dt}\left(e^{-\hat{H}t/i\hbar}\hat{A}_{\mathrm{S}}e^{+\hat{H}t/i\hbar}\right) = \frac{1}{i\hbar}e^{-\hat{H}t/i\hbar}\left(\hat{A}_{\mathrm{S}}\hat{H} - \hat{H}\hat{A}_{\mathrm{S}}\right)e^{+\hat{H}t/i\hbar} = [\hat{A}_{\mathrm{H}}, \hat{H}]$$

$$e^{\hat{H}t/i\hbar}e^{-\hat{H}t/i\hbar} = 1$$

時間依存性を状態に押しつけた表示：Schrödinger 表示（添字 S）

- $|\psi\rangle_{\mathrm{S}} \equiv e^{+\hat{H}t/i\hbar}|\psi\rangle_{\mathrm{H}}$
- $\hat{A}_{\mathrm{S}} = e^{+\hat{H}t/i\hbar}\hat{A}_{\mathrm{H}}e^{-\hat{H}t/i\hbar}$

物理量の期待値は表示によらない：

$$\langle A\rangle = {}_{\mathrm{S}}\langle\psi|\hat{A}_{\mathrm{S}}|\psi\rangle_{\mathrm{S}} = {}_{\mathrm{H}}\langle\psi|\hat{A}_{\mathrm{H}}|\psi\rangle_{\mathrm{H}}$$

注：ハミルトニアンは Heisenberg 表示でも Schrödinger 表示でも同じ：

$$\hat{H} = e^{+\hat{H}t/i\hbar}\hat{H}e^{-\hat{H}t/i\hbar}$$

位置演算子の固有状態（簡単のため１次元で考察）

位置演算子はエルミート

$\Rightarrow$ 固有状態が存在：$|x\rangle$ と表す

$\Rightarrow$ $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$（$x$ は c-number）

$\Rightarrow$ 規格化：$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$

この状態に対する運動量演算子の作用を考える：$\hat{p}|x\rangle = |?\rangle$

$\Rightarrow$ $\hat{x}$ の固有関数は完全系をなすので、$\hat{p}|x\rangle$ も $|x\rangle$ （$-\infty < x < \infty$）の線形結合で書けるはず

つぎの状態を考えてみる

$$|x\rangle' \equiv \left(1 + \frac{1}{i\hbar}\epsilon\hat{p}\right)|x\rangle$$

交換関係を用いると

$$\begin{aligned}
\hat{x}|x\rangle' &= \hat{x}\left(1 + \frac{1}{i\hbar}\epsilon\hat{p}\right)|x\rangle \\
&= x|x\rangle + \frac{1}{i\hbar}\epsilon\left(\hat{p}\hat{x} + i\hbar\right)|x\rangle \\
&= x|x\rangle + \frac{1}{i\hbar}\epsilon\left(x\hat{p} + i\hbar\right)|x\rangle \\
&= (x+\epsilon)\left(1 + \frac{1}{i\hbar}\epsilon\hat{p}\right)|x\rangle + O(\epsilon^2) \\
&= (x+\epsilon)|x\rangle' + O(\epsilon^2)
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$ $|x\rangle'$ は、ほぼ位置演算子の固有状態（固有値 $x+\epsilon$）

厳密な式：微小ではない a に対して

$$|x+a\rangle = \exp\left(\frac{a\hat{p}}{i\hbar}\right)|x\rangle \equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{a\hat{p}}{i\hbar}\right)^n|x\rangle$$

宿題：

$$\hat{x}\left[\exp\left(\frac{a\hat{p}}{i\hbar}\right)|x\rangle\right] = (x+a)\left[\exp\left(\frac{a\hat{p}}{i\hbar}\right)|x\rangle\right] \text{ を示せ}$$

ヒント：まず $[\hat{x},\hat{p}^n] = i\hbar n\hat{p}^{n-1}$ を示すと良い

運動量演算子 $\hat{p}_x$ は、x-軸方向への並進を引き起こす演算子

$$|x+\epsilon\rangle = |x\rangle + \frac{1}{i\hbar}\epsilon\hat{p}|x\rangle + O(\epsilon^2)$$

$$\Rightarrow\ \hat{p}|x\rangle = i\hbar\lim_{\epsilon\to 0}\frac{|x+\epsilon\rangle - |x\rangle}{\epsilon} = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}|x\rangle$$

$$\Rightarrow\ \langle x|\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|$$

波動関数と bra や ket の関係

（これまで使っていた）波動関数：

$$\psi(x,t) = \langle x|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}} \quad \text{with} \quad \hat{x}_{\mathrm{S}}|x\rangle = x|x\rangle$$

$\langle x|$ は Schrödinger 表示の位置演算子 $\hat{x}$ の固有状態

$\Rightarrow$ この $\langle x|$ は時間に依らない

上の状態に対する位置演算子、運動量演算子の作用：

$$\langle x|\hat{x}_{\mathrm{S}}^n|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}} = x^n\langle x|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}}$$

$$\langle x|\hat{p}_{\mathrm{S}}^n|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}} = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^n\langle x|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}}$$

以上を用いて、$\psi(x,t) = \langle x|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}}$ が（微分方程式で表された）Schrödinger 方程式を満たすことが示される：

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) &= \langle x| \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}} \right] \\
&= \langle x|\hat{H}|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}} \\
&= \langle x| \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right] |\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}} \\
&= \left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + V(x) \right] \langle x|\psi(t)\rangle_{\mathrm{S}} \\
&= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x,t)
\end{aligned}
$$

エルミート演算子の固有関数：演算子の固有状態に対応した波動関数

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \quad \Rightarrow \quad \varphi_a(x) = \langle x|a\rangle$$

エルミート演算子の固有状態が完全系を成す条件：$\displaystyle\sum_a |a\rangle\langle a| = 1$

$$\Rightarrow\ \delta(x-x') = \langle x|x'\rangle = \langle x| \left[\sum_a |a\rangle\langle a| \right] |x'\rangle = \sum_a \varphi_a(x)\varphi_a^*(x')$$

補足：位置演算子の固有状態の波動関数

- $|x_0\rangle$：位置演算子の固有状態とする

  $\Rightarrow\ \hat{x}|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle$

- 位置演算子の固有関数

  $\Rightarrow\ \varphi_{x_0}(x) = \langle x|x_0\rangle = \delta(x-x_0)$

7　調和振動子

7.1　調和振動子の古典論：復習

調和振動子：2 次ポテンシャルを持つ系

$\Rightarrow$ 原点に戻ろうとする力が変移に比例

ハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

k：バネ定数

ω：角振動数

運動方程式とその解

$$m\ddot{x} = -m\omega^2 x \quad \Rightarrow \quad x = A\sin(\omega t + \alpha)$$

A：振幅（任意の実数を取り得る）

系のエネルギーは連続的な値を取り得る

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$$

7.2　調和振動子の量子論的扱い：演算子法

ハミルトニアン：

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

交換関係：$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

以下の演算子を定義：

$$\hat{a} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left[\sqrt{m\omega}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right]$$

$$\hat{a}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left[\sqrt{m\omega}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right]$$

次元（宿題）：

- $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ は無次元の演算子
- $\hbar\omega$ はエネルギーの次元

位置演算子、運動量演算子を $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ で表すと

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$$

交換関係：

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2\hbar}\left[\sqrt{m\omega}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}, \sqrt{m\omega}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{m\omega}}\hat{p}\right] = \frac{1}{2\hbar}\left(-i[\hat{x}, \hat{p}] + i[\hat{p}, \hat{x}]\right) = 1$$

ハミルトニアンを $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ で表すと

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2m}\left[-i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)\right]^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\left[\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)\right]^2 \\
&= \frac{1}{4}\hbar\omega\left[-(\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 + (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2\right] \\
&= \frac{1}{2}(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})\hbar\omega \\
&\qquad \Downarrow \quad \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1 \\
&= \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega
\end{aligned}$$

ハミルトニアンと $\hat{a}$、$\hat{a}^\dagger$ の交換関係

$$[\hat{H}, \hat{a}] = \left[\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \hat{a}\right] = [(\hat{a}^\dagger\hat{a}), \hat{a}]\hbar\omega = (\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a})\hbar\omega = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a}\hbar\omega = -\hbar\omega\hat{a}$$

$$[\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega\hat{a}^\dagger$$

$\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ は、それぞれエネルギー固有値を $\pm\hbar\omega$ ずらす演算子

$|E\rangle$ をハミルトニアンの固有状態とする：$\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$

$$\Rightarrow \ \hat{H}(\hat{a}|E\rangle) = \hat{a}(\hat{H} - \hbar\omega)|E\rangle = (E - \hbar\omega)(\hat{a}|E\rangle)$$

$$\Rightarrow\ \hat{H}(\hat{a}^\dagger|E\rangle) = (E+\hbar\omega)(\hat{a}|E\rangle)$$

$\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ は消滅演算子、生成演算子と呼ばれる

- $\hat{a}$: lowering operantor, annihilation operator（消滅演算子）
- $\hat{a}^\dagger$: raising operantor, creation operator（生成演算子）

あるエネルギー固有状態が与えられれば、それに $\hat{a}$ や $\hat{a}^\dagger$ を作用して他のエネルギー固有状態に対応した状態を作れる

許されるエネルギー固有値

調和振動子の系には、最低エネルギー状態が存在する

$$\begin{aligned}\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle &= \frac{1}{2m}\langle\psi|\hat{p}^2|\psi\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2\langle\psi|\hat{x}^2|\psi\rangle \\ &= \frac{1}{2m}\int dp\langle\psi|\hat{p}|p\rangle\langle p|\hat{p}|\psi\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2\int dx\langle\psi|\hat{x}|x\rangle\langle x|\hat{x}|\psi\rangle \\ &= \frac{1}{2m}\int dp\big|\langle p|\hat{p}|\psi\rangle\big|^2 + \frac{1}{2}m\omega^2\int dx\big|\langle x|\hat{x}|\psi\rangle\big|^2 \geq 0\end{aligned}$$

したがって $\hat{a}$ を作用したら 0 となる状態（最低エネルギー状態、基底状態、真空）が存在

それを $|0\rangle$ と表し、$\langle 0|0\rangle = 1$ と規格化

$\Rightarrow\ \hat{a}|0\rangle = 0$

$|0\rangle$ を 0 と混同しないこと！

基底状態のエネルギー（E_0 と書く）

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

$\Rightarrow$ 基底状態のエネルギーはゼロにならない（ゼロ点振動のエネルギー）

励起状態は基底状態に $\hat{a}^\dagger$ を作用することで得られる：

$$|n\rangle \equiv C_n(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \quad\Rightarrow\quad \hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle$$

C_n：規格化因子

$\Rightarrow$ $E_n = \left(n + \dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega$：$n$ 番目の励起状態のエネルギー

$\Rightarrow$ 量子力学では、調和振動子のエネルギーは離散化する

規格化された状態（宿題）：

$$|n\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle n|n'\rangle = \delta_{n,n'}$$

7.3 調和振動子の量子論的扱い：波動関数

基底状態、励起状態を波動関数を求めてみる

- 直接 Schödinger 方程式を解く

  $\Rightarrow$ 波動関数の 2 乗可積分性からエネルギーの量子化条件が出る

- 演算子法で得た知識を使う（今回はこちら）

n 番目の状態の波動関数：$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$

$$\psi_n(x) = e^{-E_n t/\hbar}u_n(x)$$

基底状態：$\hat{a}|0\rangle = 0$

$$0 = \langle x|\hat{a}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\langle x|\left(m\omega\hat{x} + i\hat{p}\right)|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(m\omega x + \hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\langle x|0\rangle$$

基底状態の波動関数の満たす微分方程式とその解：

$$\frac{du_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar}xu_0 \quad \Rightarrow \quad u_0(x) \propto \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

$\Rightarrow$ 宿題：ガウス積分を用いて基底状態の波動関数を規格化

続いて励起状態：$|n\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}^\dagger|n-1\rangle$ を用いる

$$\langle x|n\rangle \propto \langle x|\hat{a}^\dagger|n-1\rangle \propto \left(m\omega x - \hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\langle x|n-1\rangle$$

次元ゼロの変数を用いる：$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$

$$u_n \propto \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right) u_{n-1} \tag{7.1}$$

$$u_0 \propto e^{-\xi^2/2}$$

波動関数は ξ という変数の組み合わせで x に依存
式 (7.1) を順次使っていくことで、励起状態の波動関数は求まる

$$u_n \propto \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right)^n u_0 \propto \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right)\left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right)\cdots\left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right) e^{-\xi^2/2}$$

u_n はある n 次の多項式 $H_n(\xi)$ を用いて、以下の形に表される

$$u_n \propto H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

すると

$$\begin{aligned}
H_n \propto & e^{\xi^2/2}\left(\frac{\partial}{\partial \xi} - \xi\right)(H_{n-1}e^{-\xi^2/2}) \\
& \Downarrow \quad e^{\xi^2/2}\frac{d}{d\xi}[e^{-\xi^2/2}f(\xi)] = \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right) f \ \ \& \ \ f(\xi) \to H_n(\xi)e^{-\xi^2/2} \\
= & e^{\xi^2}\frac{d}{d\xi}(e^{-\xi^2}H_{n-1}(\xi)) \\
\propto & e^{\xi^2}\frac{d}{d\xi}\left[e^{-\xi^2}\left\{e^{\xi^2}\frac{d}{d\xi}(e^{-\xi^2}H_{n-2})\right\}\right] \\
= & e^{\xi^2}\frac{d^2}{d\xi^2}(e^{-\xi^2}H_{n-2}) \\
\propto & \cdots \propto e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}(e^{-\xi^2}H_0) \propto e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2}
\end{aligned}$$

注：H_0 は定数（ゼロ次の多項式）

次の多項式は Hermite 多項式と呼ばれる：$H_n(\xi) \equiv (-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2}$

- H_n は n 次の多項式
- n が偶数のとき H_n は偶関数、n が奇数のときは奇関数

- H_n は以下の関係式を満たす（$'$ は引数による微分）
  - $H_{n+1} = 2\xi H_n' - 2nH_{-1}$
  - $H_n' = 2nH_{n-1}$
  - $H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0$
- H_n は実軸上に n 個のゼロ点を持つ
  - $\dfrac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2}$ は実軸上に n 個のゼロ点を持つ、かつ $e^{-\xi^2}$ は無限遠でゼロになる
  - ゼロ点とゼロ点の間、あるいはゼロ点と無限遠点の間で、$\dfrac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2}$ は極値を持つ、それが $\dfrac{d^{n+1}}{d\xi^{n+1}}e^{-\xi^2}$ のゼロ点

調和振動子のエネルギー固有状態の波動関数は、Hermite 多項式を用いて次の形に表せる

- $\psi(x,t) = N_n e^{-iE_n t/\hbar} H_n(\sqrt{m\omega/\hbar}x)\exp\left(-\dfrac{m\omega}{\hbar}x^2\right)$

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

  N_n：規格化定数
- $\psi(x \to \pm\infty, t) = 0$

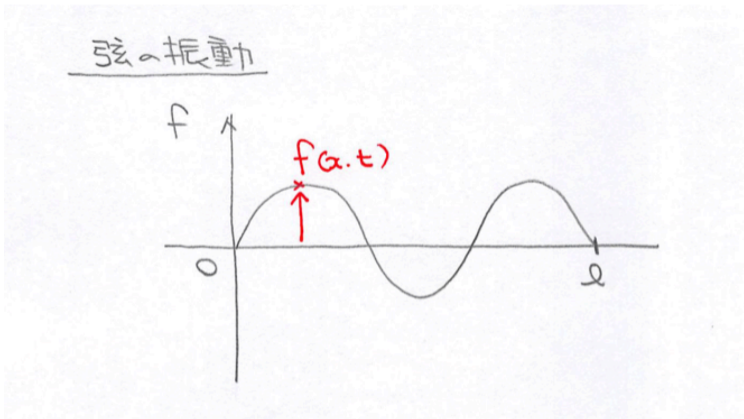
7.4 弦の量子化

調和振動子の議論の応用：弦を伝播する波の量子化

$\Leftrightarrow$ 弦：無限個の調和振動子の集まり

x-軸方向にのびた固定端を持つ弦を考える

- 弦の変移：$f(x,t)$
- 長さは ℓ で固定端の弦
- 張力：T
- 線密度：ρ
- 弦の変移は 1 方向のみ（例えば y-軸方向）かつ微小とする



注：

- f：正準変数（力学的自由度）
- x：無限個の正準変数を区別するための index

弦の傾き：

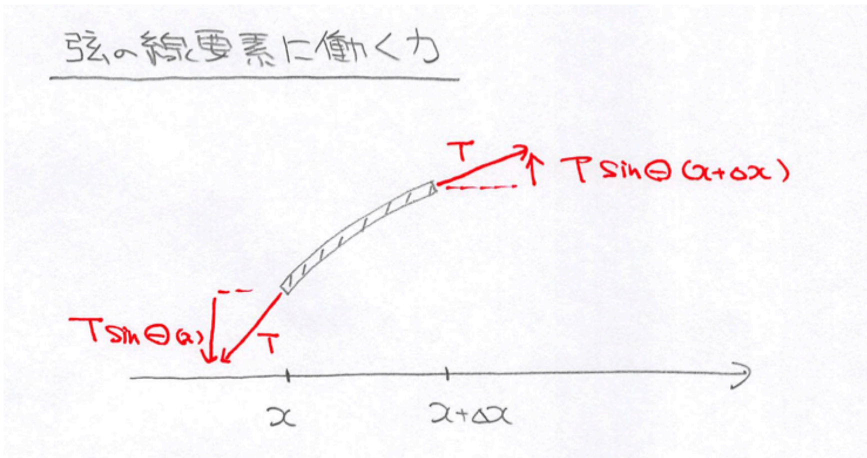
$$\tan\theta(x,t) = \frac{\partial f(x,t)}{\partial x}$$

振動が微小のとき：$\theta \ll 1$

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial x} = \tan\theta(x,t) \simeq \sin\theta(x,t) \simeq \theta(x,t)$$

弦の線要素（$[x, \Delta x]$）

- 質量：$m = \rho\Delta x$
- 加速度：$a = \ddot{f}$
- 線要素に働く力（振動方向）：$F = T\sin\theta(x+\Delta x, t) - T\sin\theta(x,t) \simeq T\dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2}\Delta x$



$f(x,t)$ の従う方程式：$F = ma$

$$\rho \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} - T \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 0$$

上の運動方程式を出す作用（Lagrangian の時間積分）：

$$S = \int dt L = \int dt \int_0^\ell dx \frac{1}{2} \left[\rho \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)^2 - T \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^2 \right]$$

運動方程式：

$$0 = \frac{\delta S}{\delta f} \equiv \lim_{\epsilon \to 0} \frac{S[f(x,t) + \epsilon \delta(x - x')\delta(t - t')] - S[f(x,t)]}{\epsilon}$$

$f(x,t)$ は以下のような周期 2ℓ の関数の、$0 \leq x \leq \ell$ 部分とみなせる：

$$F(x,t) = \begin{cases} f(x,t) & : \quad 0 \leq x \leq \ell \\ -f(-x,t) & : \quad -\ell < x < 0 \\ F(x \pm 2\ell, t) & \end{cases}$$

$f(x)$ は周期 2ℓ の奇関数のある区間部分なので、Fourier 級数を用いて以下のように表せる：

$$f(x,t) = \frac{2}{\sqrt{\ell \rho}} \sum_{n=1}^{\infty} Q_n(t) \sin k_n x \quad \text{with} \quad k_n = \frac{\pi}{\ell} n$$

したがって、$f(x,t)$ の代わりに $\{Q_n(t)\}$ を力学的自由度とすることもできる

$\Leftrightarrow$ $\{Q_n(t)\}$ を適当に選ぶことによって、任意の $f(x,t)$ を実現できる

$\Leftrightarrow$ $\{Q_n(t)\}$ と $f(x,t)$ は 1:1 対応

$$Q_n(t) = \sqrt{\frac{\rho}{\ell}} \int_0^\ell dx f(x,t) \sin k_n x$$

Lagrangian を $\{Q_n(t)\}$ で表すと：

$$L = \frac{1}{2} \sum_n \left[\dot{Q}_n^2 - \omega_n^2 Q_n^2 \right] \quad \text{with} \quad \omega_n \equiv \sqrt{\frac{T}{\rho}} k_n = \sqrt{\frac{T}{\rho}} \frac{\pi}{\ell} n$$

したがって、弦は様々な振動数を持つ調和振動子からなる系と等価

$\Leftrightarrow$ （今採用している Lagrangian では）それぞれのモードは独立に運動

正準変数：$\{Q_n(t)\}$

- 正準運動量：$P_n \equiv \dfrac{\partial L}{\partial \dot{Q}_n} = \dot{Q}_n$
- Hamiltonian：$H = \displaystyle\sum_n \dot{Q}_n P_n - L = \frac{1}{2} \sum_n \left[P_n^2 + \omega_n^2 Q_n^2 \right]$
- Poisson 括弧：$\{A(Q_n, P_n), B(Q_n, P_n)\}_{\mathrm{P}} \equiv \displaystyle\sum_n \left[\frac{\partial A}{\partial Q_n} \frac{\partial B}{\partial P_n} - \frac{\partial B}{\partial Q_n} \frac{\partial A}{\partial P_n} \right]$

  $\Rightarrow$ $\{Q_n, P_{n'}\}_{\mathrm{P}} = \delta_{nn'}$

古典論における運動方程式：

$$\dot{Q}_n = \{Q_n, H\}_{\mathrm{P}} = P_n$$
$$\dot{P}_n = \{P_n, H\}_{\mathrm{P}} = -\omega_n^2 Q_n$$

古典解：

$$Q_n = A_n \sin(\omega_n t + \alpha_n)$$

正準量子化：

- Q_n と P_n を演算子とする：$\hat{Q}_n$ と $\hat{P}_n$
- 正準交換関係を設定

$$[\hat{Q}_n, \hat{P}_{n'}] = i\hbar\delta_{nn'}$$

ハミルトニアンは古典論と同様の形を採用：

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\sum_n \left[\hat{P}_n^2 + \omega_n^2 \hat{Q}_n^2\right]$$

この後の作業は調和振動子の扱いと同じ

$\Rightarrow$ それぞれのモードに対して生成消滅演算子を導入

$$\hat{a}_n \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_n}}\left(\omega_n \hat{Q}_n + i\hat{P}_n\right)$$

$$\hat{a}_n^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_n}}\left(\omega_n \hat{Q}_n - i\hat{P}_n\right)$$

$\Rightarrow$ ハミルトニアン

$$\hat{H} = \sum_n \left(\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_n$$

交換関係：

$$[\hat{a}_n, \hat{a}_{n'}^\dagger] = \delta_{nn'}$$

$[\hat{H}, \hat{a}_n] = -\hbar\omega_n \hat{a}_n$ ：$\hat{a}_n$ はエネルギーを $\hbar\omega_n$ だけ減らす演算子

$[\hat{H}, \hat{a}_n^\dagger] = +\hbar\omega_n \hat{a}_n^\dagger$ ：$\hat{a}_n^\dagger$ はエネルギーを $\hbar\omega_n$ だけ増やす演算子

真空（基底状態）：$|0\rangle$

- $\hat{a}_n|0\rangle = 0 \quad \text{for} \quad \forall n$
- $\hat{H}|0\rangle = \sum_n \frac{1}{2}\omega_n \to \infty$

通常エネルギーの原点をどこに取るかは重要ではないので、$\sum_n \frac{1}{2}\omega_n$ を除いて $\hat{H}$ を再定義

$$\hat{H}_{\text{new}} = \sum_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n \hbar\omega_n \quad \Rightarrow \hat{H}_{\text{new}}|0\rangle = 0$$

$\Rightarrow$ 基底状態のエネルギーの「くりこみ」

一般のエネルギー固有状態：

$$|\{N_n\}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N_1!N_2!\cdots N_n!\cdots}}(\hat{a}_1^\dagger)^{N_1}(\hat{a}_2^\dagger)^{N_2}\cdots(\hat{a}_n^\dagger)^{N_n}\cdots|0\rangle = \left[\prod_{n=1}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{N_n!}}(\hat{a}_n^\dagger)^{N_n}\right]|0\rangle$$

N_n は非負の整数（n 番目のモードの励起された量子の数）

エネルギー固有値

$$\hat{H}_{\rm new}|\{N_n\}\rangle = \left[\sum_n N_n\hbar\omega_n\right]|\{N_n\}\rangle$$

各振動数モードは、$\hbar\omega_n$ の整数倍の値しかエネルギーに寄与しない（エネルギーの量子化）

$\Rightarrow$ 「波」の粒子性（光子、phonon、など）