量子力学 I のまとめ

<u>**波動・粒子の二重性**</u> ミクロな対象のもつ一般的性質として、電磁波と物質粒子は波動と粒子の二重性をもつ。光子（または物質粒子）のエネルギーと運動量の大きさは、電磁波（または物質波）の波長 λ、振動数 ν と

$$E = h\nu, \quad p = \frac{h}{\lambda} \tag{1}$$

という関係がある。この関係式は、電磁波（または物質波）の波数を k、角振動数を ω とすると、$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k$ のようになる。

<u>**Schrödinger の波動方程式**</u>　一般にハミルトニアン $H(p,x)$ で記述される系の Schrödinger 方程式は

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

で与えられる。特に、ポテンシャル $V(x)$ の中におかれた質量 m の粒子に対する方程式は

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi(x,t) \tag{3}$$

となる。

<u>**波動関数の確率解釈**</u>　波動関数 $\psi(x,t)$ で表される状態において、時刻 t に粒子が位置 x という場所に存在する確率密度は

$$\rho(x,t) = \psi^*(x,t)\psi(x,t) = |\psi(x,t)|^2 \tag{4}$$

に比例する。

<u>**確率の保存**</u>　Schrödinger の波動方程式から確率の保存が導かれる。

$$\frac{\partial\rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}j(x,t) = 0 \tag{5}$$

ここで、ρ は確率密度であり、j は確率の流れの密度である。

$$j(x,t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right) \tag{6}$$

<u>**物理量・演算子・交換関係**</u>　ある物理量 A に対して線形演算子 $\hat{A}$ が対応する。位置 x、運動量 p に対する演算子は

$$\hat{x} = x, \qquad \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \tag{7}$$

であり、全エネルギーに対する演算子はハミルトニアン

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \tag{8}$$

である。位置演算子と運動量演算子は交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \tag{9}$$

をみたす。一般に演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ に対して $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ を、$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の交換子とよぶ。

期待値　波動関数 $\psi(x,t)$ で表される状態において、ある物理量 A の期待値は

$$\langle A\rangle = \int \psi^*(x,t)\hat{A}\psi(x,t)\,dx \tag{10}$$

によって与えられる。
物理量とエルミート演算子　演算子 $\hat{A}$ が与えられ、任意の ψ_1 と ψ_2 に対して、

$$\int (\hat{A}\psi_2)^*\psi_1\,dx = \int \psi_2{}^*\hat{A}^\dagger\psi_1\,dx \tag{11}$$

の関係をみたすとき、$\hat{A}^\dagger$ を $\hat{A}$ に対するエルミート共役な演算子という。$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ をみたす自己共役な $\hat{A}$ をエルミート演算子という。物理量 A の期待値は実数だから、対応する演算子 $\hat{A}$ はエルミート演算子である。
エルミート演算子の固有関数と固有値　演算子 $\hat{A}$ に対して、$\hat{A}\varphi_i = a_i\varphi_i$ をみたす波動関数 φ_i とある数 a_i があるとき、 φ_i を $\hat{A}$ の固有関数または固有ベクトル、a_i を固有値といい、固有値が離散的な場合、i を量子数という。
エルミート演算子の性質

1. エルミート演算子 $\hat{A}$ の固有値 a は実数、すなわち、$a^* = a$ である。
2. エルミート演算子 $\hat{A}$ の異なる固有値 a_i、a_j $(a_i \neq a_j)$ に属する 2 つの固有関数 φ_i、φ_j は直交する。すなわち、

$$\int \varphi_i^*\,\varphi_j\,dx = 0 \tag{12}$$

3. 離散的なスペクトルをもつエルミート演算子の固有関数の全体は、直交規格化関数系をつくる。

完全性　$\hat{A}$ の固有関数の全体 $\{\varphi_i\}$ が直交規格化関数系をなし、任意の波動関数 $\psi(x)$ が

$$\psi(x) = \sum_i c_i\varphi_i(x), \quad c_i = \int \varphi_i^*(x)\psi(x)\,dx \tag{13}$$

のように展開できるとき、$\{\varphi_i\}$ を完全系という。φ_i の完全性は

$$\sum_i \varphi_i(x)\varphi_i^*(x') = \delta(x-x') \tag{14}$$

という式で表される。波動関数 $\psi(x)$ が規格化されているとき次式が成り立つ。

$$\sum_i |c_i|^2 = 1 \tag{15}$$

量子力学の基本法則

1. $\hat{A}$ の固有値 a_i に属する固有関数 φ_i で表される状態で、物理量 A を測定した結果は、確実に a_i という値が得られる。
2. ある状態 ψ で物理量 A を測定すると、測定値として $\hat{A}$ の固有値 a_i のどれか 1 つが得られる。ψ が規格化されているとき、固有値 a_i が測定値として得られる確率は $|c_i|^2$ で与えられる。