量子力学セミナー

～粒子の「状態」とは何か？～

総合図書館LS（理学研究科・D2）

本セミナーの目標

- 「ブラケット記法」を用いた量子力学の定式化に慣れる。
- １次元調和振動子の問題をブラケット記法を用いて解けるようになる。

導入

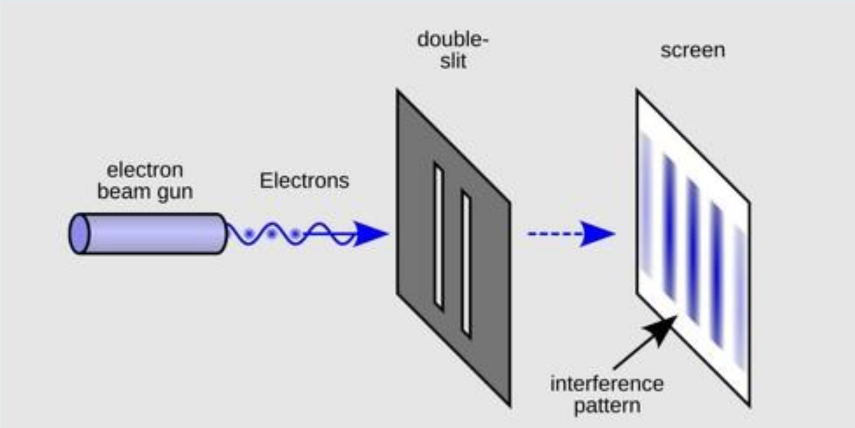
量子力学とは？

量子力学：電子や原子核などの粒子の状態を記述する学問。

<特徴>

- 粒子の**位置・運動量は同時かつ正確に測定できない！**
  （不確定性原理）

- 観測するまでの間、**電子の位置は確率的に広がっており、その確率が波のように振る舞う！**（確率的解釈）
  →波の重ね合わせ



- 電子の位置は、**観測することで1点に決まる！**
  （波動関数（後述）の収縮）

画像引用元：https://ja.wikipedia.org/wiki/%E4%BA%8C%E9%87%8D%E3%82%B9%E3%83%AA%E3%83%83%E3%83%88%E5%AE%9F%E9%A8%93

波動関数

時刻t, 位置xにおける粒子の存在確率　→　**波動関数** $\psi(x,t)$

①一般に波動関数は複素数（確率の波の性質をうまく表すため）

→**絶対値の２乗** $|\psi(x,t)|^2$ が確率密度を表す。

②確率の総和は１になる。

例：サイコロで1から6の目が出る確率　$\frac{1}{6}\times 6=1$

→ $\int|\psi(x,t)|^2dx=1$を満たす。（波動関数の**規格化**）

シュレーディンガー方程式

シュレーディンガー方程式（一次元）

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

$\hat{H}$:ハミルトニアン

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

参考：古典力学のハミルトニアン

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

$p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ の置き換えに対応

波動関数はシュレーディンガー方程式に従って時間発展する。

運動量表示

波動関数$\psi(x,t)$をフーリエ変換

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\tilde{\psi}(p,t)e^{ipx}$$

シュレーディンガー方程式 (自由粒子の場合)

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

規格化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\psi^*(x,t)\psi(x,t) = 1 \Longleftrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dp\tilde{\psi}^*(p,t)\tilde{\psi}(p,t) = 1$$

規格化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\psi^*(x,t)\psi(x,t) = 1 \quad \xLeftrightarrow{\text{フーリエ変換}} \quad \int_{-\infty}^{\infty} dp\tilde{\psi}^*(p,t)\tilde{\psi}(p,t) = 1$$

位置表示でも運動量表示でも、
規格化条件は**複素関数の内積**で与えられる。

→粒子の「状態」の、**表示に依存しない定式化**が便利

粒子の「状態」・・・内積が定義された複素ベクトル

ブラベクトルとケットベクトル

ケットベクトル

ケットベクトル $|a\rangle$: 内積が定義された複素ベクトル空間（**ヒルベルト空間**）$\mathcal{H}$ 上で定義されるベクトル

イメージ：

$$|a\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

性質

① $\forall |a\rangle,\ |b\rangle \in \mathcal{H}, |a\rangle + |b\rangle \in \mathcal{H}$ (ケットベクトルの加法)

② $\forall c \in \mathbb{C}, \forall |a\rangle \in \mathcal{H}, c|a\rangle \in \mathcal{H}$ (定数倍)

ブラベクトル

ブラベクトル $\langle a|$: $\mathcal{H}$と双対なヒルベルト空間$\mathcal{H}^*$で定義されるベクトル

イメージ： $\langle a| = (a_1^* \ a_2^* \ \cdots)$

性質

① $\forall\langle a|, \langle b| \in \mathcal{H}^*, \langle a| + \langle b| \in \mathcal{H}^*$ （ブラベクトルの加法）

② $\forall c \in \mathbb{C}, \forall\langle a| \in \mathcal{H}^*, \langle a|c \in \mathcal{H}^*$ （定数倍）

注: ブラベクトルとケットベクトルの加法
$\langle a| + |b\rangle$は定義されない

内積

ブラベクトルとケットベクトルの内積

$$\langle a|b\rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \cdots$$ （イメージ）

高校数学で扱ったベクトルの内積と同様

外積と演算子

ブラベクトルとケットベクトルの外積：**行列**

$$|a\rangle\langle b| = \begin{pmatrix} a_1 b_1^* & a_1 b_2^* & \cdots \\ a_2 b_1^* & & \\ \vdots & \ddots & \end{pmatrix}$$

ベクトルに作用する**演算子**

ブラベクトル$\langle\alpha|$ とケットベクトル$|\beta\rangle$ への作用

$\langle\alpha|a\rangle\langle b|$

左から

$|a\rangle\langle b|\beta\rangle$

右から

演算子について

行列要素　$\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle$：演算子$\hat{A}$の (α,β)成分

期待値　$\langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle$：状態$|\alpha\rangle$に対する演算子$\hat{A}$の期待値

エルミート演算子　$\hat{A}=\hat{A}^\dagger$

$$\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle=\langle\beta|\hat{A}|\alpha\rangle^*$$

位置や運動量などの観測可能量はエルミート演算子で与えられる

演算子の固有ベクトル　（離散スペクトル）

エルミート演算子$\hat{A}$の固有値 a_nと固有ベクトル$|a_n\rangle$

$$\hat{A}|a_n\rangle = a_n|a_n\rangle$$

$$\begin{cases} a_n\text{は実数} \\ \langle a_m|a_n\rangle = \delta_{mn} \end{cases}$$

エルミート演算子の固有ケット　→　**完全系**

完全性関係

$$\sum_n |a_n\rangle\langle a_n| = \mathbf{1}$$

← **状態を固有状態で展開する際に重要**

演算子の固有ベクトル　（連続スペクトル）

エルミート演算子$\hat{\xi}$の固有値 ξと固有ベクトル$|\xi\rangle$

$$\hat{\xi}|\xi\rangle = \xi|\xi\rangle$$

$$\begin{cases} \xi\text{は実数} \\ \langle\xi|\xi'\rangle = \delta(\xi - \xi') \end{cases}$$

デルタ関数

エルミート演算子の固有ケット　→　**完全系**

完全性関係

$$\int d\xi|\xi\rangle\langle\xi| = \mathbf{1}$$

波動関数（位置表示）

位置演算子$\hat{x}$の固有ベクトル $|x\rangle$

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

完全系　$\int dx\,|x\rangle\langle x| = \mathbf{1}$

正規直交　$\langle x'|x\rangle = \delta(x'-x)$

$|\psi\rangle$:ある粒子の状態ベクトル (規格化されている)

$$|\psi\rangle = \int dx\langle x|\psi\rangle|x\rangle \equiv \int dx\,\psi(x)|x\rangle$$

規格化条件　$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \quad \Longleftrightarrow \quad \int dx\,|\psi(x)|^2 = 1$

波動関数　⇔　展開係数

波動関数（運動量表示）

運動量演算子$\hat{p}$の固有ベクトル $|p\rangle$

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$$

完全系　$\int dp\ |p\rangle\langle p| = \mathbf{1}$

正規直交　$\langle p'|p\rangle = \delta(p' - p)$

$|\psi\rangle$:ある粒子の状態ベクトル (規格化されている)

$$|\psi\rangle = \int dp\langle p|\psi\rangle|x\rangle \equiv \int dp\ \tilde{\psi}(p)|p\rangle$$

規格化条件　$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \Longleftrightarrow \int dp\ \left|\tilde{\psi}(p)\right|^2 = 1$

波動関数　⇔　展開係数

位置表示から運動量表示へ

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x'-x) \quad \Longleftrightarrow \quad \int dp\langle x'|p\rangle\langle p|x\rangle = \delta(x'-x)$$

$$\int dp\, |p\rangle\langle p| = \mathbf{1}$$

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip}{\hbar}x}$$

平面波

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\langle p|\psi\rangle e^{\frac{ip}{\hbar}x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\tilde{\psi}(p) e^{\frac{ip}{\hbar}x}$$

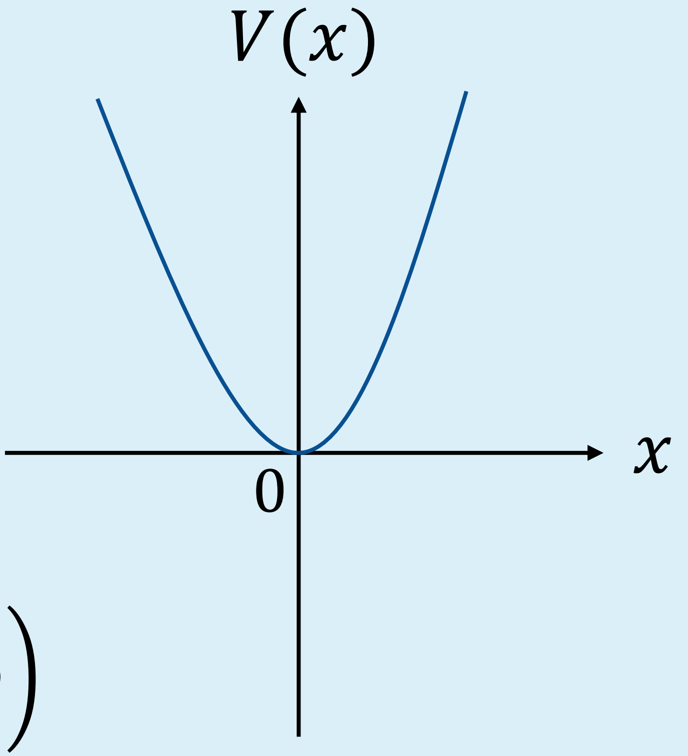
フーリエ変換の式が導出できる！

一次元調和振動子

生成演算子と消滅演算子

ハミルトニアン　$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$

（天下り的に）以下の演算子を導入



生成演算子

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

消滅演算子

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$$

交換関係

$$\left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = 1, \qquad [\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0$$

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

個数演算子とその固有状態

個数演算子　$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$　を導入

→　エネルギー固有状態　$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$

固有状態　$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$

$|n\rangle$: 正規直交、完全系

「生成・消滅演算子」の名前の由来

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}, \qquad [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = +\hat{a}^\dagger$$

→　$\hat{a}^\dagger|n\rangle \propto |n+1\rangle, \qquad \hat{a}|n\rangle \propto |n-1\rangle$

$\hat{a}^\dagger$: **nを１増やす（生成）**　　$\hat{a}$: **nを１減らす（消滅）**

nの条件

$$\langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle \quad \Longleftrightarrow \quad n = \underline{\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle}$$

（$\hat{a}|n\rangle$のノルム）≥ 0　　　$\therefore$ **nは０以上**

さらに、$\hat{a}|n\rangle$ が　$n=0$で打ち止めになるためには、

nが整数でなければならず、$a|0\rangle = 0$　が必要

$\Longrightarrow$　基底状態のエネルギー　$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \neq 0$

基底状態の波動関数

基底状態のベクトル：$|0\rangle$

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

両辺左から $\langle x|$を掛ける

$$\left(x + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)\underbrace{\langle x|0\rangle}_{\psi_0(x)} = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi_0(x) \propto \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

規格化　→　**ガウス積分**

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

まとめ

- 粒子の「状態」→　**ヒルベルト空間**で定義される**複素ベクトル**
（ブラベクトル・ケットベクトル）

- ブラベクトルとケットベクトルの扱いは「ほぼ」高校数学のベクトルと同じ

- 波動関数は粒子の「状態」を観測可能量の固有ベクトルで展開したときの**展開係数**

- 調和振動子の問題はブラケット記法を使って解くのが便利

参考文献

- J.J. サクライ「現代の量子力学（上）」
  総合図書館　A棟4階　学習用図書
  請求記号：420.8||BUT||56

- John R. Taylor “Scattering Theory：the quantum theory of non-relativistic collision”
  総合図書館　A棟4階　学習用図書
  請求記号：429||TAY