1. ハミルトニアンとSchrödinger方程式

1-1 力学

(a) 古典力学

Newtonの運動方程式

$$\boxed{m\ddot{\mathbb{r}} = \mathbb{F}} \qquad \begin{cases} \dot{\mathbb{r}} \equiv \dfrac{d\mathbb{r}}{dt} \\ \ddot{\mathbb{r}} \equiv \dfrac{d^2\mathbb{r}}{dt^2} \end{cases}$$

- $\mathbb{r}$ は質点の座標を表わす

↓ だから時間による

- $\mathbb{F}$ は外からの力

$(\mathbb{F} = -\nabla U)$

↑ ポテンシャル

- 運動方程式を解くと

質点の座標 $\mathbb{r}$ の時間発展がわかる

↑

2階の微分方程式なので

2個の条件（初期条件）が必要

No.

Date

(b) Lagrange 形式

Lagrangian $\underline{L = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 - U(\mathbf{r})}$

による力学の記述

↓ 何故必要？

$\boxed{\text{簡単だから}}$

- $L = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 - U(\mathbf{r})$ （但し $\mathbb{F} = -\nabla U$）

Lagrange 方程式

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} &= \frac{\partial L}{\partial x} \\ \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{y}} &= \frac{\partial L}{\partial y} \\ \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{z}} &= \frac{\partial L}{\partial z} \end{aligned} \right. \quad \Longleftrightarrow \quad m\ddot{\mathbf{r}} = -\nabla U$$

- 極座標 (r, θ, φ) でも

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{r}} &= \frac{\partial L}{\partial r} \\ \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} &= \frac{\partial L}{\partial \theta} \\ \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} &= \frac{\partial L}{\partial \varphi} \end{aligned} \right.$$

が成立

（かなり複雑）

(c) ハミルトニアンによる力学

ハミルトニアン H

$$\boxed{H \equiv \dot{\mathbb{r}} \cdot \mathbb{P} - L}$$ ← 何故か

$$\left(\mathbb{P} \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbb{r}}},\ P_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\ \text{etc} \right)$$ → これが保存量になる

- $L = \frac{1}{2} m \dot{\mathbb{r}}^2 - U(\mathbb{r})$, $\mathbb{P} = m \dot{\mathbb{r}}$ より

$$H = \frac{1}{m} \mathbb{P}^2 - \left(\frac{1}{2} m \left(\frac{\mathbb{P}}{m} \right)^2 - U(\mathbb{r}) \right)$$

$$\therefore \boxed{H = \frac{\mathbb{P}^2}{2m} + U(\mathbb{r})}$$

- ハミルトニアンは $\boxed{\frac{dH}{dt} = 0}$ （保存量）

（証）
$$H = \dot{\mathbb{r}} \cdot \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbb{r}}} - L$$

$$\therefore \frac{dH}{dt} = \ddot{\mathbb{r}} \cdot \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbb{r}}} + \dot{\mathbb{r}} \cdot \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbb{r}}} \right) - \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbb{r}} \cdot \dot{\mathbb{r}} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbb{r}}} \ddot{\mathbb{r}} \right)$$

一方 Lagrange 方程式より $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbb{r}}} = \frac{\partial L}{\partial \mathbb{r}}$

よって $\boxed{\frac{dH}{dt} = 0}$

[量子力学]

- ハミルトニアン H は保存量。
  従って物理的に意味のある量になりうる

- 量子化：　運動量 $\mathbb{P}$ を微分演算子でおきかえる

$$\boxed{\mathbb{P} = -i\hbar\nabla}$$ とする

（但し $\hbar$ は定数）

$$\boxed{\nabla \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)}$$

$\mathbb{P} \to \hat{\mathbb{P}}$ とかく　（オペレータだから）

$$\hat{P}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\quad \hat{P}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\quad \hat{P}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

- $\hbar$：Planck 定数という

- i が入ってくるのは $\hat{\mathbb{P}}$ をエルミートにするためである。

- 量子化 $\Longleftrightarrow$ $\hat{p} = -i\hbar \nabla$

↑ これだけでは意味をなさない

$$\boxed{\text{オペレートされる相手が必要}}$$

$$\underline{\hat{p}\ \psi(x)}$$

$\psi(x)$: 波動関数 という

- 交換関係

$[\hat{p}_x, x] = -i\hbar$ である.

∵ $[\hat{p}_x, x] \equiv \hat{p}_x x - x \hat{p}_x$

$\therefore [\hat{p}_x, x]\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\psi(x)) + i\hbar x \frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$

$= -i\hbar\psi(x) - i\hbar x \frac{\partial}{\partial x}\psi(x) + i\hbar x \frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$

$= -i\hbar\psi(x)$

よって

$$\underline{[\hat{p}_x, x] = -i\hbar}$$

または $[\hat{p}_x, x]\psi(x) = -i\hbar\psi(x)$

[量子化されたハミルトニアン]

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(r)$$

$\hat{p} = -i\hbar\nabla$ とするから

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)}$$ となる.

この $\hat{H}$ はオペレータ.

オペレートされる相手は $\psi(r)$

$$\boxed{\hat{H}\psi(r) = E\psi(r)}$$

Schrödinger 方程式という

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)\right]\psi(r) = E\psi(r)$$

E をエネルギー固有値という