0. はじめに

量子力学とは何か？

・水素原子における
「電子」のダイナミックスを記述できる
(エネルギー準位等…)

・方程式は
Schrödinger 方程式
である.

◎ 量子力学 ⇒ 場に対する方程式
↓
Maxwell 方程式と同じ

◎ 目標 : Schrödinger 方程式がきちんと
解けるようになる

「場」の概念を少しでも理解する

1. ハミルトニアンとSchrödinger方程式

1-1 力学

(a) 古典力学 (Newton力学)

$$m\ddot{\mathbb{r}} = \mathbb{F} \qquad (\text{Newton方程式})$$

によって記述される

(Kepler問題, 単振動が理解される)

・ $\mathbb{r}$ は質点の座標を表わす.

(これは時間の関数となる)

$$\left(\dot{\mathbb{r}} \equiv \frac{d\mathbb{r}}{dt}, \quad \ddot{\mathbb{r}} \equiv \frac{d^2\mathbb{r}}{dt^2} \right)$$

・ $\mathbb{F}$ は外からの力

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

U はポテンシャル

(量子力学では力はでてこない.
ポテンシャル U のみがあらわれる)

・ Newton方程式を解くと

$\mathbb{r}$ (質点) の時間発展がわかる.

(b) ハミルトニアンによる力学

ハミルトニアン

$$H \equiv \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{p} - L$$

$$\left(\begin{array}{c} \text{但し } L \text{ はラグランジアン} \\ L = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 - U(\mathbf{r}) \end{array} \right)$$

$$\mathbf{p} \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} \quad \left(p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}, \ p_y = \frac{\partial L}{\partial \dot{y}}, \ p_z = \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} \right)$$

この時，H を $\mathbf{p}$，$\mathbf{r}$ で表わす。 $(\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{r}})$

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

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

- ハミルトニアン H は保存量 $\Longleftrightarrow$ $\boxed{\frac{dH}{dt} = 0}$

$$H = \dot{\mathbf{r}} \cdot \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} - L(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}})$$

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

Lagrange 方程式 $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}}$ より $\boxed{\frac{dH}{dt} = 0}$

[量子力学]

ハミルトニアン を『量子化』する
(保存量だから)

- 量子化 : 運動量 p を

$$\boxed{\hat{p} = -i\hbar\nabla}$$ とする

- 但し $\nabla \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right)$
(微分演算子)
- $\hbar$ は定数 (Planck 定数という)

- $p = -i\hbar\nabla$

これだけでは意味がない

$\Downarrow$

$\boxed{\text{微分される相手が必要}}$

それを $\psi(r)$ (波動関数) と書く

【交換関係式】 $[A,B] \equiv AB - BA$ とする

$\hat{p}_x = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x}$ とすれば

$$[\hat{p}_x, x] = -i\hbar$$ である

(証) $[\hat{p}_x, x] = \hat{p}_x x - x\hat{p}_x$

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

よって

$[\hat{p}_x, x] = -i\hbar$ が成立する.

[量子化されたハミルトニアン]

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(r)$$ である

p（運動量）を演算子 $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ とする

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

[$\hat{H}$ はオペレータ
オペレートされる相手は $\psi(r)$]

$\Downarrow$

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

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

Schrödinger 方程式という

E をエネルギー固有値という

この E は微分方程式を解くことによって求められるものである.