

量子力学の基本法則

公理1: 量子状態と重ね合わせの原理

系の状態は(抽象的な)ベクトル、または波動関数で表される。

ある状態は二つ以上の別の状態の重ね合わせとして表すことができる。そして、重ね合わせの仕方は複数可能であり、一義的ではない。

公理2: 量子状態というベクトルの射影としての波動関数の確率解釈

波動関数の絶対値の2乗は粒子の存在確率の密度に比例する。

公理3: 演算子としての物理量

観測される物理量はエルミート線形演算子(自己共役演算子)で表される。

公理4: 量子化条件

座標演算子、運動量演算子、関係式(正準交換関係)を満たす。

公理5: 物理量の測定とその期待値

物理量の測定によって得られる値は、状態が固有状態である場合には、その物理量に対応する演算子の特定の固有値である。固有状態ではない場合、演算子の期待値が測定を繰り返したときの平均値と等しい。

公理6: 状態の時間変化を決めるシュレーディンガー方程式

公理7: 同種粒子の識別不可能性と粒子交換対称性

公理1: 量子状態と重ね合わせの原理

量子状態(波動関数) $\Psi_1(x,t), \Psi_2(x,t), \dots, \Psi_n(x,t)$

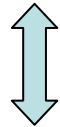
一般には複素数

(複素数)定数 $c_1, c_2, \dots, c_n$

重ね合わせた状態も量子状態である。  干渉 波動性

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= c_1 \Psi_1(x,t) + c_2 \Psi_2(x,t) + \dots + c_n \Psi_n(x,t) \\ &= c'_1 \Psi'_1(x,t) + c'_2 \Psi'_2(x,t) + \dots + c'_n \Psi'_n(x,t)\end{aligned}$$

同じ量子状態でも種々の重ね合わせが可能



ベクトルの1次結合もベクトルである。

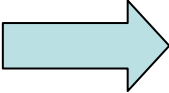
ひとつのベクトルは種々のベクトルの1次結合として表される。

公理2: 波動関数の確率解釈

粒子が領域 $(x, x + \Delta x)$ に存在する確率は

$$|\Psi(x, t)|^2 \Delta x \text{ 比例する}$$

粒子は空間のどこかに存在するはず


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

存在確率振幅としての波動関数

公理3: 線形エルミート演算子としての物理量

演算子 は関数に作用して、一般には別の関数をつくる

$$\hat{A}f(x) = g(x); \quad \frac{d}{dx}(x^3) = 3x^2$$

演算子とそのエルミート共役

$$\hat{A}^\dagger \rightarrow \int \phi^*(x) \hat{A}^\dagger \psi(x) dx \equiv \left(\int \psi^*(x) \hat{A} \phi(x) dx \right)^*; \phi(x), \psi(x) \text{は任意の関数}$$

演算子の固有関数と固有値

$$\hat{A}\phi_n(x) = a_n \phi_n(x), \quad (n=1, 2, \dots); a_n \text{はある数値 (値)}$$

エルミート演算子の固有値は実数である

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A} \text{ のとき、 } (a_n)^* = a_n$$

$$\left[\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right]^\dagger = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$$

公理4: 量子化条件

座標演算子

$$x \Rightarrow \hat{x}(=x)$$

運動量演算子

$$p_x \Rightarrow \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$$

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} \quad \text{プランク定数}$$

$$i \equiv \sqrt{-1}, i^2 = -1$$



正準交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \quad [\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

演算子の積 $\hat{x}\hat{p}_x$ と $\hat{p}_x\hat{x}$ は演算子としての機能は同じではないこと
演算子の非可換性

公理5: 物理量の測定とその期待値

量子状態が固有状態になっている場合、測定値はその固有状態の固有値となる

$$\hat{A}\phi_n(x) = a_n\phi_n(x)$$

量子状態が固有状態になっていない場合、測定値はその演算子の期待値となる

$$\psi(x) = c_1\phi_1(x) + c_2\phi_2(x) + \dots$$

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \equiv \int \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx$$

$$= \sum_{n=1} a_n |c_n|^2 \quad ; \sum_{n=1} |c_n|^2 = 1; |c_n|^2 = a_n \text{ を測定する確率}$$

公理6: 状態の時間変化を決めるシュレディンガー方程式

E. Schroedinger 1925

ハミルトニアン

$$\hat{H} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U; (U: \text{ポテンシャル})$$

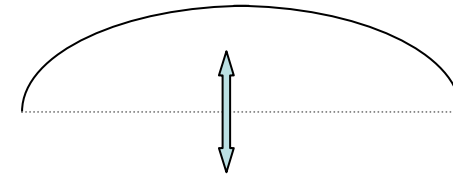
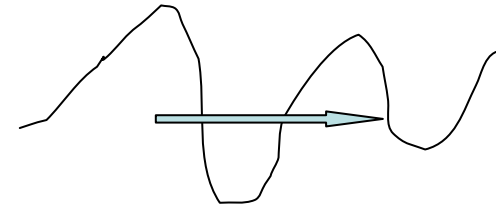
$\hat{H}$ が時間に依存する場合

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

$\hat{H}$ が時間に依存しない場合

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

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \exp(-iEt/\hbar)$$



微分方程式とその一般解



特殊解

波動関数の性質

一般には複素数の値をもつ

一価である(ある位置ではひとつの値が決まる)

連続関数である

有限の値をもつ

2階微分可能である