

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。

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 $\{x, p\} = i\hbar$ 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) $\Psi_1(x, t), \Psi_2(x, t), \dots, \Psi_n(x, t)$

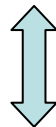
一般には複素数

(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。

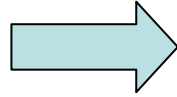
ひとつのベクトルは種々のベクトルの1次結合として表される。

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

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

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

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

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

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

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

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

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

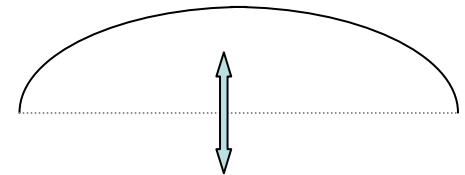
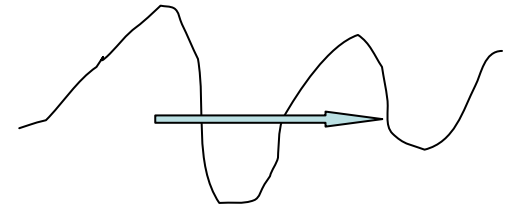
$\hat{H}$ が時間に依存する場合

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

$\hat{H}$ 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



境界条件

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