付録 A－１
古典力学

Hamiltonian　　$H(q,p)$

q : 座標

p : 運動量 $= mv = m\dfrac{dq}{dt}$

$$H = \frac{1}{2}mv^2 + V(q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$$

$$\frac{dq}{dt} = v = \frac{p}{m} = \frac{\partial H}{\partial p}$$

$$\frac{dp}{dt} = m\frac{d^2 q}{dt^2} = ma = F = -\frac{\partial V(q)}{\partial q} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

Poisson bracket（ポアッソン括弧式）

$$\{F,G\} = \frac{\partial F}{\partial q}\frac{\partial G}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p}\frac{\partial G}{\partial q}$$

このとき、

$$\frac{dq}{dt} = \{q,H\}$$

$$\frac{dp}{dt} = \{p,H\}$$

となる。

問：これを証明せよ。

又、全ての関数 F(q,p)に対しても

$$\frac{dF}{dt} = \{F,H\}$$

例えば、

$$\frac{dH}{dt} = \{H,H\} = \phi$$

となりこれは、エネルギー保存則を表す。

量子力学

Q：座標

P：運動量

Poisson bracket

$$[A,B]=AB-BA$$

$$[Q,P]=QP-PQ=i\hbar \quad \left(\hbar=\frac{h}{2\pi}\right)$$

これが量子力学の原理である。

$$\frac{dQ}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[Q,H]$$

$$\frac{dP}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[P,H]$$

一般に、F(Q,P)に関しても

$$\frac{dF}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[F,H]$$

が成り立つ。

量子力学では量子論的な状態は、ヒルベルト空間におけるベクトルによって表される。
観測量が確定した値を持つのは、固有ベクトルになる場合。
特に位置Ｑと運動量Ｐとは、同時に確定した値を持てない。

何故なら

$Qu=\alpha u$かつ$Pu=\beta u$となったとすると

$$i\hbar u=[Q,P]u=QPu-PQu=\beta Qu-\alpha Pu$$

$$=\beta\alpha u-\alpha\beta u=0$$

となり、矛盾する。
これをハイゼンベルグの不確定性原理という。

量子化１

ｎ行ｎ列の行列で

$$[Q,P]=i\hbar\,1 \qquad (1\text{ は単位行列})$$

となるものはない。

$$Q=\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix} \qquad P=\begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}$$

という形の無限次元行列か、又は

$$\frac{d}{dx}(xf)=x\frac{d}{dx}f+f$$

$$\left[\frac{d}{dx},x\right]=\frac{d}{dx}x-x\frac{d}{dx}=1$$

$$Q=x,\quad P=-i\hbar\frac{d}{dx}$$

ここから量子化規則が生まれる。

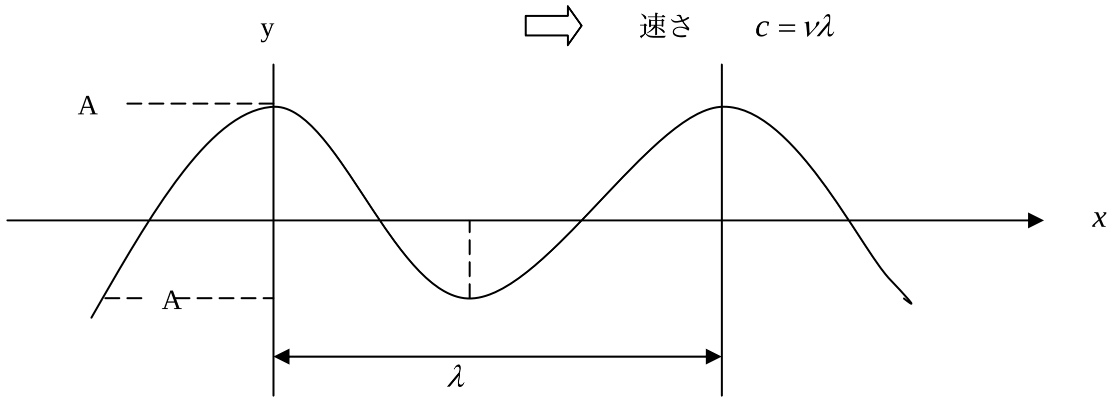
$$P\Rightarrow -i\hbar\nabla$$

$$x\Rightarrow x$$

$$E=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

波動を表す式

$$y = A\sin\left\{2\pi\left(\nu t - \frac{x}{\lambda}\right)\right\}$$



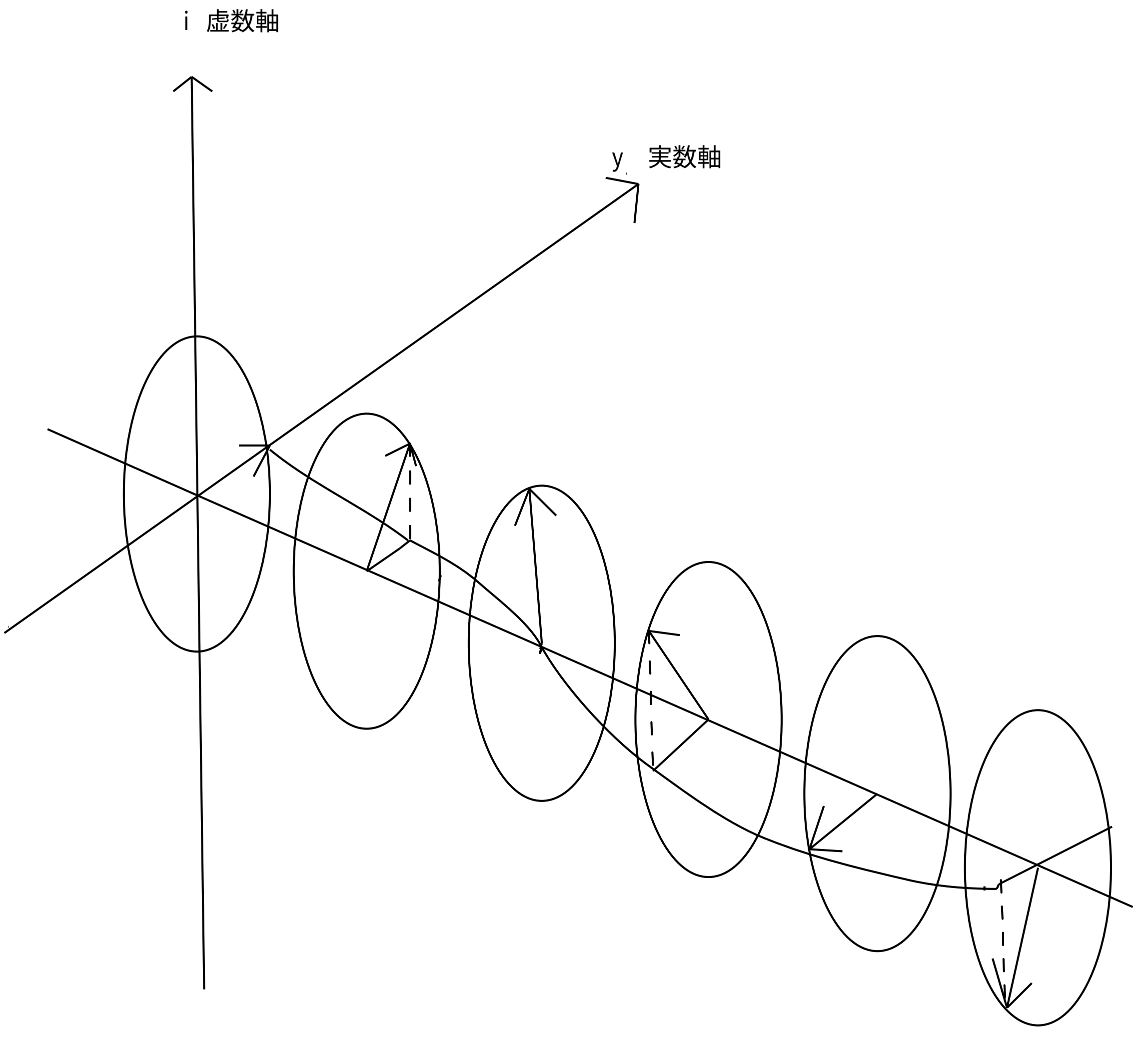
$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$$

$e^{i\omega t}$　角速度 ω で回転する針

ここで、

$y = A\cos(\omega t - kx)$　という波の式は

$y = Ae^{i(\omega t - kx)}$　の実数部分と考えればよい。


i 虚数軸
y 実数軸

Schrödinger equation

$$\psi = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

$$\Delta\psi = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = -k^2\psi$$

$$E = \frac{P^2}{2m} = \hbar\omega, \quad P = \hbar k$$

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}, \qquad k^2 = \frac{2m\omega}{\hbar}$$

$$\Delta\psi = -\frac{2m\omega}{\hbar}\psi$$

$$-\frac{\hbar}{2m}\Delta\psi = \omega\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi$$

$$\frac{1}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} = \omega\psi$$

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} = -i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi = E\psi$$

$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ も　$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ も、エネルギーを表す。従って、

$$[t, E] = \left[t, -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right] = i\hbar$$

交換関係

$$Px\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi\right) = xp\psi + \frac{\hbar}{i}\psi$$

$$(px - xp)\psi = \frac{\hbar}{i}\psi$$

$$px - xp = \frac{\hbar}{i}$$

$[A, B] = AB - BA$　とおくと

$$[\mathrm{p}, \mathrm{x}] = \frac{\hbar}{i}$$

$$[E, t] = \frac{\hbar}{i}$$

一次元の Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi$$

$\psi(x,t) = u(x)\cdot f(t)$　と変数分離すると仮定すると、

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = f(t)\frac{du(x)}{dx} \quad , \quad \frac{\partial\psi}{\partial t} = u(x)\frac{df(t)}{dt}$$

$$i\hbar u(x)\frac{df(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}f(t)\frac{d^2u(x)}{dx^2} + V(x)\cdot u(x)\cdot f(t)$$

両辺を$u(x)f(t)$で割ると

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{df(t)}{dt}=\frac{1}{u(x)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2}+V(x)u(x)\right)$$

左辺と右辺は変数に関して独立。従って、定数と考えられる。

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{df(t)}{dt}=E$$

$$\frac{1}{u(x)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2}+V(x)u(x)\right)=E$$

時間ｔに関する方程式の解

$$i\hbar\frac{df(t)}{dt}=Ef(t)$$

$f(t)=Ae^{\alpha t}$　とおくと

$i\hbar A\alpha e^{\alpha t}=E\cdot Ae^{\alpha t}$

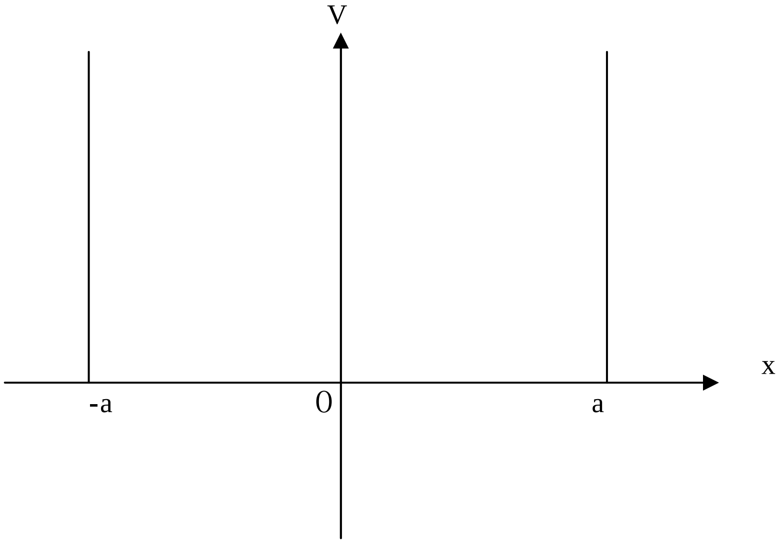
$$\therefore \alpha=\frac{E}{i\hbar}=-\frac{iE}{\hbar}$$

$$\therefore\ f(t)=Ae^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

波動関数の形に関する解

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2}+V(x)u(x)=Eu(x)$$

１次元の無限に高い井戸型ポテンシャル



壁の位置　　　$x = \pm a$ において波動関数の値が 0 になる。

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} = Eu(x)$$

この解を　$u = e^{\lambda x}$　とおくと、

$$\frac{d^2u}{dx^2} = \lambda^2 e^{\lambda x} = \lambda^2 u$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\lambda^2 u = Eu$$

$$\lambda = \pm\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = \pm\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}i$$

一般解は

$$u(x) = Ae^{\frac{i\sqrt{2mE}}{\hbar}x} + Be^{-\frac{i\sqrt{2mE}}{\hbar}x}$$

$$u(a) = Ae^{\frac{i\sqrt{2mE}}{\hbar}a} + Be^{-\frac{i\sqrt{2mE}}{\hbar}a} = 0$$

$$u(-a) = Ae^{-\frac{i\sqrt{2mE}}{\hbar}a} + Be^{\frac{i\sqrt{2mE}}{\hbar}a} = 0$$

ここで$\dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = k$　とおく。

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} = 0 \qquad ①$$

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = 0 \qquad ②$$

$$A^2e^{ika} + ABe^{-ika} = 0 \qquad ①\times \mathrm{A}$$

$$-\quad ABe^{-ika} + B^2e^{ika} = 0 \qquad ②\times \mathrm{B}$$

$$(A^2 - B^2)e^{ika} = 0$$

$e^{ika} \neq 0$ より

$$A^2 - B^2 = 0 \qquad \therefore B = \pm A$$

Ｂ＝Ａのとき

$$u = A\left(e^{ikx} + e^{-ikx}\right) = 2A\cos kx$$

ここでもう一度境界条件を入れると、
$2A\cos ka = 0 \rightarrow \cos ka = 0$ より

$$ka = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi$$ ；ｎは整数

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi$$

$$\sqrt{2mE} = \left(\frac{2n+1}{2}\right)\pi \cdot \frac{\hbar}{a}$$

$$E = (2n+1)^2 \cdot \frac{\pi^2\hbar^2}{4a^2} \cdot \frac{1}{2m} = (2n+1)^2 \cdot \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

この時、波動関数は、 $k = \frac{2n+1}{2a}\pi$ より

$$u = ZA\cos kx = 2A\cos\frac{2n+1}{2a}\pi x$$

$$= A_1 \cdot \cos\frac{2n+1}{2a}\pi x$$

Ｂ＝－Ａのとき

$$u = A\left(\mathrm{e}^{\mathrm{ikx}} - e^{-ikx}\right) = 2iA\sin kx$$

境界条件より

$$\sin ka = 0$$
$$ka = n\pi$$
$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a = n\pi$$

$$2mE = \left(n\pi, \frac{\hbar}{a}\right)^2, E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

波動関数は、$k = \dfrac{n\pi}{a}$より

$$u(x) = 2iA\sin\frac{n\pi x}{a} = A_2\sin\frac{n\pi x}{a}$$

$$= A_2\sin\frac{2n}{2a}\pi x$$

$\therefore n'$が奇数のとき、$u(x) = A_1\cos\dfrac{n'\pi x}{2a}$

$\therefore n'$が偶数のとき、$u(x) = A_2\sin\dfrac{n'\pi x}{2a}$

又、　$En' = \dfrac{n'^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$

n'：量子数