

古典力学(ニュートン力学から解析力学へ進化)

ニュートン力学(I. Newton, 17世紀、英国)

運動の3法則

第1法則(慣性の法則)

第2法則(運動法則、運動方程式)

第3法則(作用反作用の法則)

時間の等質性無限性

空間の等質性・等方性・無限性

測定に関わるエネルギー≪運動状態の変化に関わるエネルギー
→測定により、対象系の状態は変化しない(変化は無視できる)
物理量は実数であり、その測定により、測定値は一義的に決まる。

解析力学:ラグランジュ力学(方程式)→ハミルトン力学(方程式);18-19世紀

$$L(x, \dot{x}) \equiv \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - U(x) \rightarrow \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) = \frac{\partial L}{\partial x}$$

ラグランジュの運動方程式は時間についての2階の微分方程式である。

解析力学のラグランジュ形式はその計算上の柔軟性、実用性に長所がある。

ハミルトン形式または正準形式 (canonical formulation of analytical dynamics)

$$H(x, p) \equiv \frac{p^2}{2m} + U(x) \quad H: \text{ハミルトン関数}$$

$$\rightarrow p \equiv \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right), \quad p: \text{一般化運動量(正準運動量)}$$

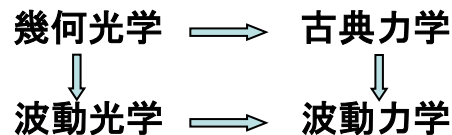
$$\rightarrow \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad \text{ハミルトン方程式}$$

Poissonの括弧式(正準交換関係)

Hamilton による、光学一力学のアナロジー(類推)

波動光学の短波長極限(幾何光学)として古典力学

→1928年以降、光学器械に対する電子光学のアナログ(電子顕微鏡その他)への開発にも利用された
岩波講座現代物理学の基礎「古典物理学I」、p.356他



古典力学と量子力学の橋渡し役がその最大の功績

⇒ シュレーディンガーの波動力学

1924-25年

ディラックによる正準量子化

1926年

量子力学の基本法則

公理1: 量子状態とその重ね合わせの原理

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]波動関数とその確率解釈

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、運動量演算子は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: 閉じた系の量子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) $\Psi_1(x,t), \Psi_2(x,t), \dots, \Psi_n(x,t)$

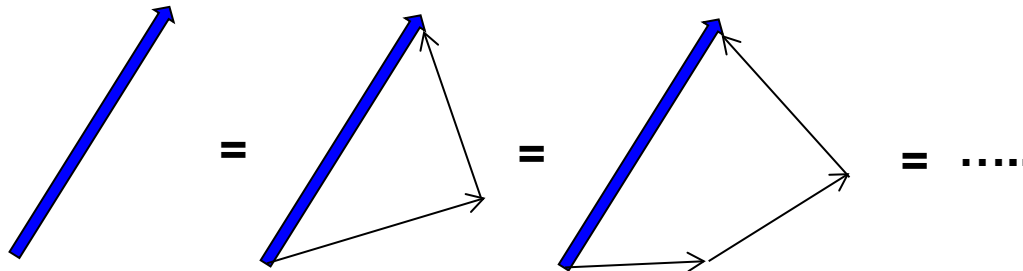
一般には複素数

重ね合わせた状態も量子状態である。

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

→ 干渉 波動性

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: [量子状態というベクトルの射影] 波動関数の確率解釈

量子的粒子が領域 $(x, x + \Delta x)$ に存在する確率が

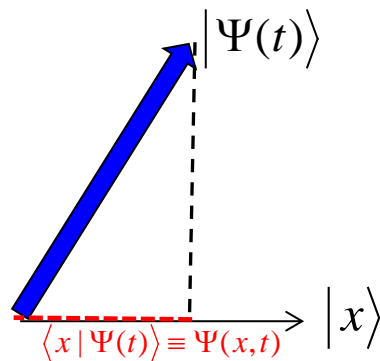
$$|\Psi(x, t)|^2 \Delta x \text{ 比例する}$$

⇒ 量子的粒子は空間のどこかに存在するはず

$$\int |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad \text{波動関数の規格化}$$

存在確率振幅としての波動関数

実は、波動関数は量子状態という抽象的なベクトルのx軸成分である！



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の定義

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

演算子の固有関数と固有値

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

一般には、ある演算子とそのエルミート共役は等しくない！ $\hat{A}^\dagger \neq \hat{A}$



エルミート演算子の定義 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ $\left[\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right]^\dagger = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$
このとき、 $(a_n)^* = a_n$

エルミート演算子の固有値は実数である

物理量に対応するのは、線形エルミート演算子である。

公理4: 量子化条件

座標演算子

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

運動量演算子

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

h : プランク定数,

$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$: ディラック定数

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



正準交換関係(を公理として理論的に要請する!)

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

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必ずしも同じではないこと
演算子の非可換性

公理5: 物理量の測定とその期待値

- (1) 量子状態がある物理量(エルミート演算子)の固有状態になっている場合、この物理量の測定値はその固有状態の固有値となる

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

- (2) 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

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

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

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

波動関数そのものは測定できない: 物理量ではない!

公理6: 量子状態の時間変化を決めるシュレディンガー方程式

E. Schroedinger 1925-1926

ハミルトニアン

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

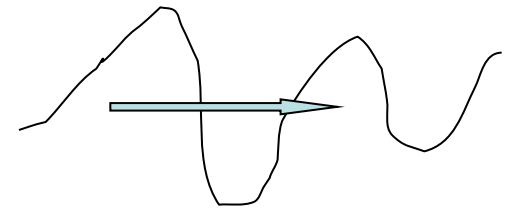
ポテンシャル U が時間に依存する場合; $U = U(x; t)$

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

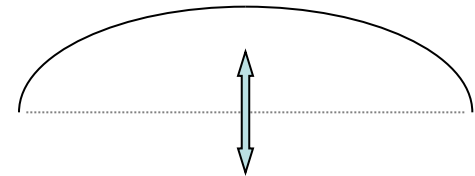
ポテンシャル U が時間に依存しない場合; $U = U(x)$

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

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



複素空間中を進行する波動



複素空間中に定在する波動

波動関数の性質

微分方程式とその一般解 \longrightarrow 特殊解
境界条件

- (a) 一般には複素数の値をもつ
- (b) 一価である(ある位置ではひとつの値が決まる)
- (c) 連続関数である
- (d) 有限の値をもつ
- (e) 2階微分可能である(有限の大きさのポテンシャルに対しては)

シュレーディンガー方程式から導かれること

量子的粒子の存在確率についての連続の方程式 **存在確率の保存則**

確率密度 $\rho(x,t) \equiv \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = |\Psi(x,t)|^2,$

確率流れ密度 $j_x(x,t) \equiv \frac{\hbar}{2im} \left[\Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial x} \Psi(x,t) \right] = \text{Re} \left(\Psi^*(x,t) \frac{\hat{p}_x}{m} \Psi(x,t) \right)$

$$\Rightarrow \frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial j_x(x,t)}{\partial x} = 0 \quad \rightarrow \text{量子反射、トンネル効果の計算に使用}$$

比較: 電磁気学における電荷の保存則、
流体力学における質量保存則

エーレンフェストの法則:

座標演算子と運動量演算子の平均値はニュートンの運動法則に従う!

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle = \frac{\langle \hat{p}_x \rangle}{m}, \quad \longleftrightarrow \quad (\text{速度}) = (\text{運動量}) / (\text{質量})$$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p}_x \rangle = - \left\langle \frac{\partial U(x,t)}{\partial x} \right\rangle \longleftrightarrow \begin{aligned} (\text{運動量の時間微分}) &= -(\text{ポテンシャルの微分}) \\ &= (\text{力}) \end{aligned}$$

公理7: 同種粒子の識別不可能性(画一性, 同一性)

同じ種類の量子的粒子の同一性(画一性).

量子力学の対象になるような微視的な粒子(量子的な粒子と呼ぶことにする)のうち、同種の粒子は原理的に区別がつかない。複数の粒子系の波動関数については、同じ交換操作を2回施すと元の状態にもどらなければならないため、粒子の座標などの属性の交換に対して波動関数の符号が変化するか(反対称)、変化しない(対称)かのいずれかしかない。電子などフェルミ粒子にはパウリの排他原理が成立し、それは物質の性質の深い理解には不可欠である。

例えば、すべての電子の固有の性質(質量, 電荷, スピン, 磁気モーメントなど)は全く同じである! すべての酸素原子の固有の性質も同じである。

この事実は1920年代後半、量子力学の上位の理論体系である量子場理論(場の量子論)で証明された。

参考: 17世紀, イギリスの化学者、物理学者ならびに気象学者ジョン・ドルトン(John Dalton, 1766- 1844)は化学反応における質量保存の法則と定比例の法則とが矛盾しないよう説明するため原子説を提唱。

1. 同じ元素の原子は、同じ大きさ、質量、性質を持つ。
2. 化合物は、異なる原子が一定の割合で結合してできる。
3. 化学反応は、原子と原子の結合の仕方が変化するだけで、新たに原子が生成したり、消滅することはない。