Appendix (付録)

◆量子力学入門◆

解析力学の手法は，量子力学でも重要な役割を演じることになるんだね。ここでは，量子力学の入門として，量子力学の基礎方程式である1次元のシュレーディンガー方程式とハミルトニアン演算子$\hat{H}$の関係について簡単に解説しておこう。

● シュレーディンガーの波動方程式を紹介しよう！

量子的(ミクロな)粒子は，粒子と波動の2重性をもち，この力学的な状態は波動関数で表されるんだね。そして，時刻tを含む1次元の波動関数$\Psi(x,\ t)$については，次のシュレーディンガー(*E.Schrödinger*)の波動方程式が成り立つことが分かっている。

シュレーディンガーの波動方程式

時刻tを含む1次元の波動関数$\Psi(x, t)$について，次のシュレーディンガーの波動方程式が成り立つ。

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + U(x)\Psi \quad \cdots\cdots\cdots(*a_1)$$

(ただし，$\Psi(x,\ t)$：波動関数，i：虚数単位，m：粒子の質量，
t：時刻，x：位置，$U(x)$：ポテンシャルエネルギー，
$\hbar\left(=\dfrac{h}{2\pi}\right)$　(h：プランク定数 ($h = 6.63\times10^{-34}(\mathrm{J\cdot s})$)))

このシュレーディンガー方程式$(*a_1)$は，ハミルトニアン演算子$\hat{H}(\hat{x},\ \hat{p})$を用いると，$i\hbar\dfrac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \cdots\cdots(*a_1)'$とシンプルに表現することができる。

でも今は，波動関数$\Psi(x, t)$って何？シュレーディンガー方程式って何??そして，ハミルトニアン演算子って何???の状態だと思う。これから，これらの意味と関係について簡単に解説し，量子力学の基本について理解して頂こうと思う。

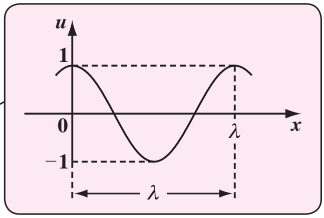
● 波動関数 $\Psi(x,\ t)$ は，複素指数関数で表される！

まず，実数関数での余弦波（cos の波）について考えてみよう。

(i) 位置 x について，波長 λ の波動を $u(x)$ とおくと，

$$u(x) = \cos 2\pi\frac{x}{\lambda} \quad \cdots\cdots\cdots ①$$ となる。

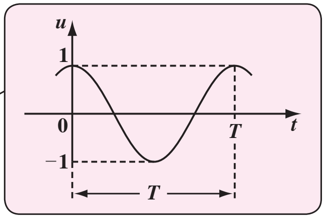
$x : 0 \to \lambda$ のとき，$2\pi\frac{x}{\lambda} : 0 \to 2\pi$ となるからね。



(ii) 時刻 t について，周期 T の波動を $u(t)$ とおくと，同様に，

$$u(t) = \cos 2\pi\frac{t}{T} \quad \cdots\cdots\cdots ②$$ となるんだね。

$t : 0 \to T$ のとき，$2\pi\frac{t}{T} : 0 \to 2\pi$ となるからね。

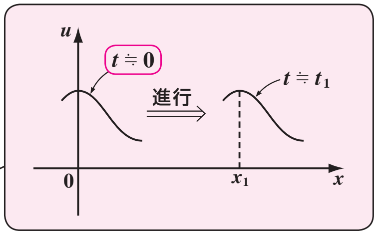


そして，この (i)(ii) の①，②を組み合わせることにより，次に示すような x 軸の正の向きに進む進行波 $u(x,\ t)$ を表すことができる。

$$u(x,\ t) = \cos 2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T}\right) \quad \cdots\cdots\cdots ③$$

右図に示すように，時刻 $t \fallingdotseq 0$ のとき $x \fallingdotseq 0$ 付近にあった波について考えよう。

すると，$\frac{x_1}{\lambda} - \frac{t_1}{T} \fallingdotseq 0$ をみたすような，ある正の数 x_1 と t_1 が必ず存在するわけだから，これは，$t \fallingdotseq 0$ のとき $x \fallingdotseq 0$ 付近にあった波が，時刻 $t \fallingdotseq t_1$ のとき $x \fallingdotseq x_1$ 付近に移動（進行）するものと考えられるからなんだね。



この③は，実数関数における進行波の波動関数だったわけだけれど，量子力学においては，次のオイラーの公式：

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta \quad \cdots\cdots\cdots (*b_1)$$ を利用して，

1 次元の波動関数 $\Psi(x,\ t)$ を，次のようにおくんだね。

$$\Psi(x,\ t)=e^{2\pi i\left(\frac{x}{\lambda}-\frac{t}{T}\right)}=\cos 2\pi\left(\frac{x}{\lambda}-\frac{t}{T}\right)+i\sin 2\pi\left(\frac{x}{\lambda}-\frac{t}{T}\right)\ \cdots\cdots\cdots③'$$

オイラーの公式：$e^{i\theta}=\cos\theta+i\sin\theta$ より

この複素指数関数で表される量子力学の波動関数って何？と疑問が湧いてくるだろうけど，これは，この絶対値の2乗，すなわち $|\Psi(x,\ t)|^2$ が，ミクロな粒子が微小区間 $[x,\ x+dx]$ の範囲に存在する確率の確率密度を表す，すなわち，確率の波と考えてくれたらいいんだよ。

そして，さらに量子力学の次の2つの基本公式

$E=h\nu\ \cdots\cdots\cdots④$ と　$p=\dfrac{h}{\lambda}\ \cdots\cdots\cdots⑤$ を用いると，

$\left(E：力学的エネルギー，\nu\left(=\dfrac{1}{T}\right)：振動数，p：運動量\right)$

波動関数 $\Psi(x,\ t)$ は，次のように変形できるんだね。

$$\Psi(x,\ t)=e^{2\pi i\left(\frac{p}{h}x-\frac{E}{h}t\right)}=e^{i\left(\frac{p}{\hbar}x-\frac{E}{\hbar}t\right)}\ \cdots\cdots\cdots③''$$

この③″と，力学的エネルギーの保存則：

$$E=\frac{p^2}{2m}+U\ \cdots\cdots\cdots⑥$$

$\left(\dfrac{p^2}{2m}：運動エネルギー，U：ポテンシャルエネルギー\right)$

を組み合せることにより，1次元のシュレーディンガー方程式：

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+U\Psi\ \cdots\cdots\cdots(*a_1)$$ を導くことができる。

早速やってみよう。

まず，$\Psi(x,\ t)=e^{i\frac{p}{\hbar}x}\cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\ \cdots\cdots\cdots③''$ を

t と x でそれぞれ偏微分してみると，次のようになるね。

(i) $$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\underbrace{e^{i\frac{p}{\hbar}x}}_{定数扱い}\cdot\left(-i\frac{E}{\hbar}\right)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}=-i\frac{E}{\hbar}\underbrace{e^{i\left(\frac{p}{\hbar}x-\frac{E}{\hbar}t\right)}}_{\Psi(x,t)}\ \cdots\cdots\cdots⑦$$

(ii) $$\frac{\partial\Psi}{\partial x}=i\frac{p}{\hbar}e^{i\frac{p}{\hbar}x}\cdot\underbrace{e^{-i\frac{E}{\hbar}t}}_{定数扱い}=i\frac{p}{\hbar}\underbrace{e^{i\left(\frac{p}{\hbar}x-\frac{E}{\hbar}t\right)}}_{\Psi(x,t)}\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots⑧$$

(ⅰ) よって，$\dfrac{\partial\Psi}{\partial t}=-i\dfrac{E}{\hbar}\Psi$ ………⑦ より，

$$E\Psi=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\frac{i^2\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t}=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}\quad\cdots\cdots\cdots⑦'$$ となる。また，

(ⅱ) $\dfrac{\partial\Psi}{\partial x}=i\dfrac{p}{\hbar}\Psi$ ………⑧ より，

$$p\Psi=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial x}=-\frac{i^2\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial x}=-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}\quad\cdots\cdots\cdots⑧'$$ となるのもいいね。

ここで⑧′より，p を Ψ にかけるということは，「$-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ という演算子を Ψ に作用させることである」と考えると，$p^2\Psi$ は，

$$p^2\Psi=\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\Psi=\underbrace{i^2}_{-1}\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi=-\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\quad\cdots\cdots\cdots⑧''$$ となるんだね。

以上で準備終了です！ これから，⑥のエネルギーの保存則の式の両辺に，右から波動関数 $\Psi(x,\ t)$ をかけると，

$$\underbrace{E\Psi}_{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}\ (⑦'より)}=\frac{1}{2m}\underbrace{p^2\Psi}_{-\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\ (⑧''より)}+U\Psi\quad\cdots\cdots\cdots⑥'$$ となる。

この⑥′に，⑦′と⑧″を代入すると，シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+U\Psi\quad\cdots\cdots\cdots(*a_1)$$ が導けるんだね。

ここで，新たに，3 つの演算子を次のように定義しよう。

$$\hat{p}\equiv-i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\quad \hat{x}\equiv x,\quad \underbrace{\hat{H}(\hat{x},\ \hat{p})}_{これを“ハミルトニアン演算子”と呼ぶ。}\equiv\frac{\hat{p}^2}{2m}+U(\hat{x})$$

すると，ハミルトニアン演算子 $\hat{H}(\hat{x},\ \hat{p})$ は，⑧″より，

$$\hat{H}(\hat{x},\ \hat{p})=\frac{1}{2m}\cdot(-\hbar^2)\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U$$ となるので，$(*a_1)$ は，

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi\quad\cdots\cdots(*a_1)'$$ とシンプルに表すこともできるんだね。

面白かった？