量子物理学Ⅱ

5月20日

調和振動子

3次元のシュレーディンガー方程式

調和振動子の波動関数の性質

$$\psi(x) = u(x)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

エルミート多項式$H_n(z)$と$e^{-\frac{1}{2}z^2}$の積

$$\psi(z) = u(z)e^{-\frac{1}{2}z^2}$$

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad z = \frac{x}{\xi}$$

$$n = 0: \quad E = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad \psi(z) = c_0 e^{\frac{1}{2}z^2}$$

$$n = 1: \quad E = \frac{3}{2}\hbar\omega \quad \psi(z) = c_1 z e^{\frac{1}{2}z^2}$$

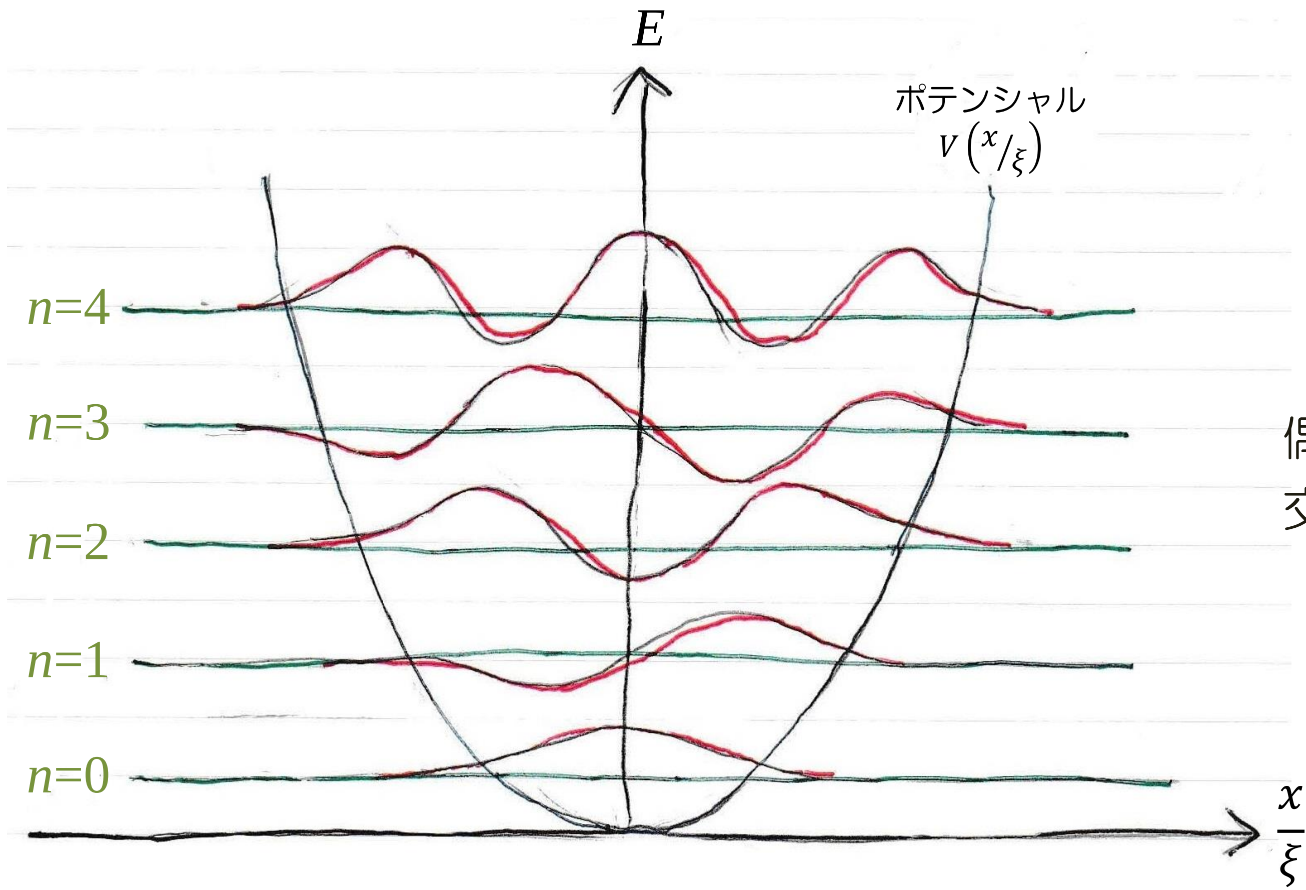
$$n = 2: \quad E = \frac{5}{2}\hbar\omega \quad \psi(z) = c_2(-2z^2 + 1)e^{\frac{1}{2}z^2}$$

$\vdots$

c_{n}は規格化条件によってきまる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = 1$$

注）教科書p.62 式(3.20)の被積分関数に2乗が抜けている



偶関数と奇関数が交互に現れる

$$f(x) = f(-x)$$

$$f(x) = -f(-x)$$

例）$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\xi\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2\xi^2}}$

$x = \xi$ の範囲に局在化

$$\frac{\psi_0(\xi)}{\psi_0(0)} = e^{-\frac{1}{2}} \sim 0.65$$

教科書p62の図で目盛等確認してください

$$\psi_0(x) = c_0 e^{-\frac{1x^2}{2\xi^2}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = c_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{\xi^2}} dx = c_0^2 \cdot \xi\sqrt{\pi} = 1$$

$\Rightarrow c_0 = \frac{1}{\sqrt{\xi\sqrt{\pi}}}$ ガウスの積分公式より

波動関数の偶奇性

いろいろな量子数に対する波動関数(固有関数)が偶関数と奇関数の２種類だけに分かれる

？

いま、ポテンシャルが偶関数　$V(x)=V(-x)$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-V(x)\right)\psi(x)=0$$

$$\frac{d^2\psi(-x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-V(x)\right)\psi(-x)=0$$

等しいEに対して$\psi(x)$が解であれば$\psi(-x)$も解

$E\rightarrow\psi$が1つ決まる　$\Rightarrow$　$\psi(-x)=\varepsilon\psi(x)$　ε:定数　　一方は他の定数倍

$$\psi(x)=\varepsilon\psi(-x)=\varepsilon^2\psi(x)$$

$$\Rightarrow\quad\varepsilon^2=1$$

$$\Rightarrow\quad\varepsilon=\pm1$$

井戸型ポテンシャルの時はどうだったか？

$\varepsilon=1$：偶関数　　$\varepsilon=-1$：奇関数

零点振動

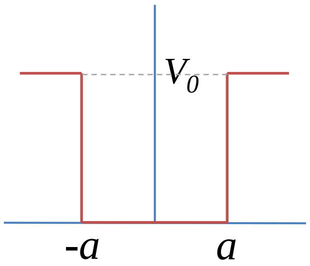
最低エネルギー状態（基底状態）　$E = \frac{1}{2}\hbar\omega \ (\neq 0)$

$\psi_0(x)$は$x=0$の回りにξ程度の広がりを持つ粒子の確率分布

⇒　零点振動

井戸型ポテンシャル

基底状態のエネルギー　$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}$　（$V_0 = \infty$のとき）



xとpが一義に決まらない　⇒　不確定性関係

基底状態でも粒子が静止しない　⇒　零点振動

（最低エネルギーが有限の値を持つ）

例） ヘリウム ･･･ 零点エネルギーが大きい

常圧では0 Kでも固体にならない

^{4}He:25atm以上、^{3}He:35atm以上で固体

零点振動が格子間隔の数10%にもなる。

隣り合う原子がトンネル効果などの量子効果を示す。

零点エネルギーは固体の圧縮率にも影響する

固体を圧縮

→ 格子振動の振動数が変わる

→ 零点エネルギーが変わる

→ 固体のエネルギーが変わる

教科書p71「いろいろな調和振動子」参照

例題3.3

$\xi = 1.00\ \text{Å}\ (1.0 \times 10^{-10}\ \text{m})$ とし、mとして電子の質量（$9.1 \times 10^{-31}\text{kg}$）を用いたときの零点エネルギーを求めよ。

$\xi = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ より $\omega = \frac{\hbar}{m}\frac{1}{\xi^2} = 1.15 \times 10^{16}$ 1/s

$E = \frac{1}{2}\hbar\omega = 6.06 \times 10^{-19}$ J

$1\text{eV} = 1.6 \times 10^{-19}$ J より

$\underline{E = 3.81\ \text{eV}}$

粒子の位置座標の期待値（波動関数のひろがり）

$\psi_0(x)$を考える

xの期待値　$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x|\psi_0(x)|^2\,dx = \frac{1}{\xi\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-\frac{x^2}{\xi^2}}\,dx$

被積分関数はxに関して奇関数で積分値は0

x^2の期待値　$\overline{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} x^2|\psi_0(x)|^2\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} x^2\left|\frac{1}{\sqrt{\xi\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{x^2}{2\xi^2}}\right|^2 dx$

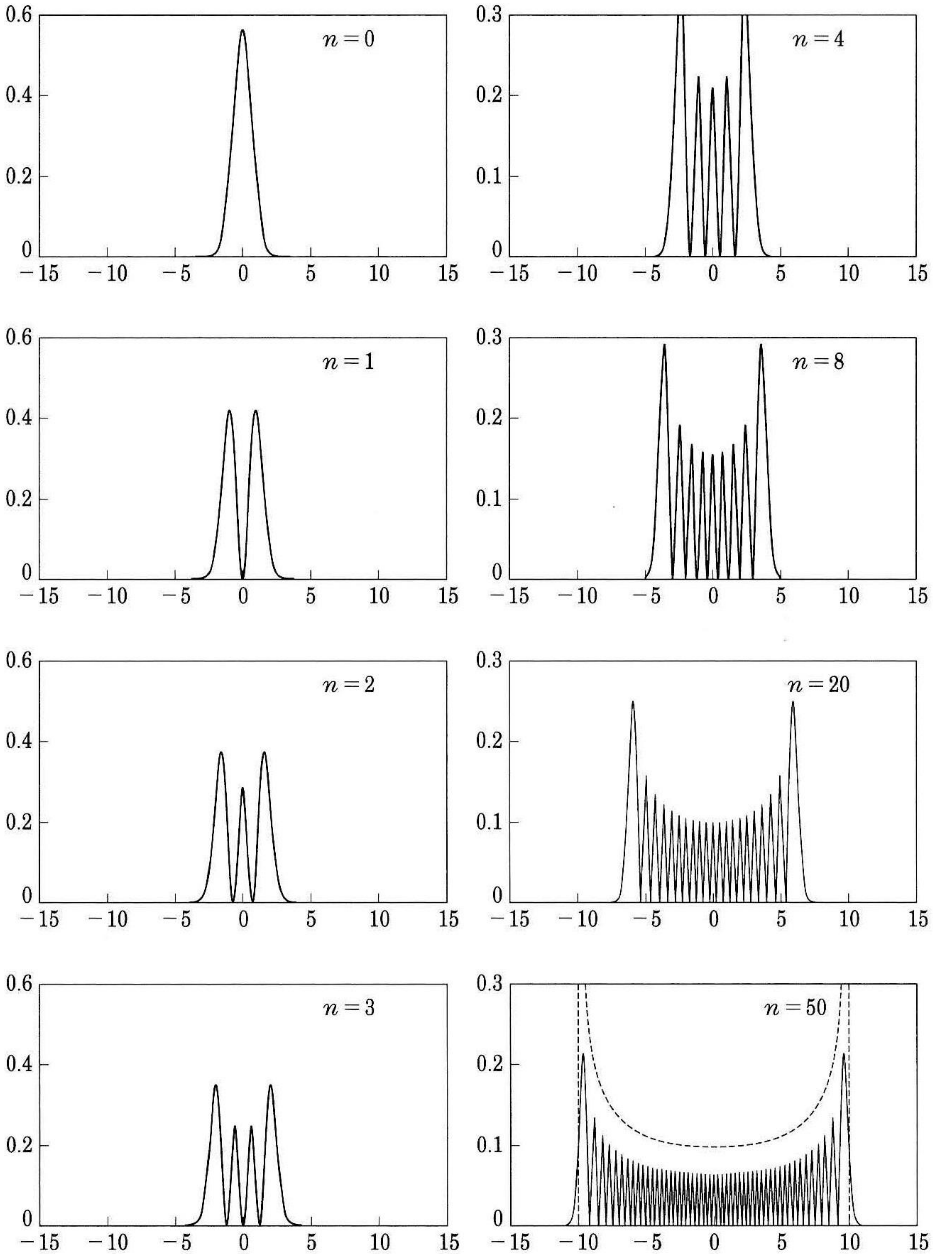
$$= \frac{1}{\xi\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{x^2}{\xi^2}}\,dx = \frac{1}{\xi\sqrt{\pi}}\frac{1}{2}\xi^2\sqrt{\frac{\pi}{1/\xi^2}} = \frac{\xi^2}{2}$$

この結果より、粒子はだいたい$\sqrt{\overline{x^2}}$の範囲にある。

$\Rightarrow$　座標　$\pm\frac{\xi}{\sqrt{2}}$

$\Rightarrow$　波動関数の大まかなひろがり
（粒子はだいたい原点からξの範囲にある）

波動関数の絶対値の2乗



n個の節
粒子の存在確率が0となる位置がある

存在確率が端付近で最大となる。
(古典力学との対応)

波動関数の直交性

エネルギー固有値E_n, E_m対する波動関数$\psi_n(x), \psi_m(x)$を考える。

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi_m(x)dx}$$

ψ_n^*はψ_nの複素共役

ベクトルの内積に相当

$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi_m(x)dx = 0 \quad \Rightarrow$ “$\psi_n(x)$と$\psi_m(x)$は直交する”

（参考）

$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi_m(x)dx$は$<\psi_n|\psi_m>$ と表記することもある。

$<\psi_n|$ （ブラ） ・・・ 波動関数ψ_nで与えられる量子状態

$|\psi_m>$ （ケット） ・・・ 波動関数ψ_mで与えられる量子状態

$<\psi_n|\psi_m>$

実験装置で準備された$|\psi_m>$という状態にある系で、体系のとることのできる状態を検出する実験を行うとき$<\psi_n|$という状態が検出される確率振幅。

確率は$|<\psi_n|\psi_m>|^2$で与えられる。

量子力学の大前提

ハミルトニアン $\hat{H}$
運動量演算子 $\hat{p}$

- 物理量は線形演算子

$$\hat{f}\,(a\psi_1 + b\psi_2) = a\hat{f}(\psi_1) + b\hat{f}(\psi_2)$$

- 演算子$\hat{f}$に対応する物理量を測定したとき、とりうる測定値は演算子$\hat{f}$の固有値である。

$$\hat{f}\psi_n = f_n\psi_n$$

$$\int |\psi_n(x)|^2 dx = 1 \quad \leftarrow \text{ 規格化条件}$$

- 状態の1つの固有関数がψ_nで、その固有値がf_nである。このとき、波動関数ψは

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\psi_n$$

で表される。（重ね合わせの原理）

（一般的なお話）

任意の関数ψ_1 、ψ_2に対して

$$\int \psi_1^*(\hat{f}\psi_2)dx = \int (\hat{g}\psi_1)^*\psi_2 dx$$

†:ダガー

が成り立つとき、$\hat{g}$を$\hat{f}$の共役演算子といい、$\hat{g} = \hat{f}^\dagger$と表記する。

これを用いると、

$$\boxed{\int \psi_1^*(\hat{f}\psi_2)dx = \int \left(\hat{f}^\dagger\psi_1\right)^*\psi_2 dx} \quad \text{（式15-1）}$$

と表される。

ここで、

$$\hat{f}^\dagger = \hat{f}$$

が成り立つ場合、$\hat{f}$は共役演算子（またはエルミート演算子）と呼ばれる。

<u>物理量に対応する演算子はエルミート演算子</u>

このとき

$$\hat{f}\psi_n = f_n\psi_n \quad \text{（固有値問題）}$$

物理量⇒実数

$$f_n^* = f_n$$

直交性の確認

$\psi_m(x)$が満たすシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi_m(x)=E_m\psi_m(x)$$

$$\Rightarrow\ \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi_m(x)dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)E_m\psi_m(x)dx$$

(一般的に考える)

上式の演算子を$\hat{f}$とすると

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\hat{f}\psi_m dx=E_m\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\psi_m dx$$

と表される。この左辺は、

$$\int\psi_n^*\hat{f}\psi_m dx=\int\left(\hat{f}^\dagger\psi_n\right)^*\psi_m dx=\int\left(\hat{f}\psi_n\right)^*\psi_m d$$
$$=\int\left(E_n\psi_n\right)^*\psi_m dx=E_n\int\psi_n^*\psi_m dx\quad(\because E_n^*=E_n)$$

前ページ(式15-1)
$$\int\psi_1^*\left(\hat{f}\psi_2\right)dx=\int\left(\hat{f}^\dagger\psi_1\right)^*\psi_2 dx$$

$\hat{f}$がエルミート演算子であることより、
$$\hat{f}^\dagger=\hat{f}$$

固有関数、固有値の関係より
$$\hat{f}\psi_n=E_n\psi_n$$

よって

$$E_n\int\psi_n^*\psi_m dx=E_m\int\psi_n^*\psi_m dx\ \Rightarrow\ (E_n-E_m)\int\psi_n^*\psi_m dx=0$$

これより、$E_n\neq E_m$であれば、$\int\psi_n^*\psi_m dx=0\ \Rightarrow\ \psi_n$と$\psi_m$は直交している。

エネルギー固有値の異なる波動関数は直交している

($E_n=E_m$となるような場合 ⇒ “固有値が縮退している”という)

まとめ （1）

【調和振動子】（振動の量子化）

- 調和振動子のシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi(x)=E\psi(x)$$

- エルミートの微分方程式

$$\frac{d^2}{dz^2}u(z)-2z\frac{d}{dz}u(z)+2\varepsilon u(z)=0 \quad \left(\xi=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}},\quad z=\frac{x}{\xi},\quad \varepsilon=\frac{E}{\hbar\omega}-\frac{1}{2}\right)$$

これを多項式に展開して解く $\Rightarrow$ <u>エネルギーの量子化</u>
エネルギー固有値

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

$\Rightarrow$ エルミート多項式の性質

まとめ（2）

- 調和振動子の波動関数

$$
\begin{aligned}
\psi(x) &= u(x)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\
\psi(z) &= u(z)e^{\frac{1}{2}z^2}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
n=0 \quad &: \quad E=\frac{1}{2}\hbar\omega \quad \psi_0(z)=C_0e^{-\frac{1}{2}x^2} \\
n=1 \quad &: \quad E=\frac{3}{2}\hbar\omega \quad \psi_1(z)=C_1ze^{-\frac{1}{2}x^2} \\
n=2 \quad &: \quad E=\frac{5}{2}\hbar\omega \quad \psi_2(z)=C_2\left(-2z^2+1\right)e^{-\frac{1}{2}x^2} \\
&\cdots
\end{aligned}
$$

規格化条件 $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2dx=1$ より係数を決定。

例）$$\psi_0(x)=\frac{1}{\sqrt{\xi\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}x^2}$$

波動関数 → ポテンシャルとの対応、偶関数と奇関数
期待値（存在範囲）、古典力学での単振動との対応

まとめ （3）

- 零点振動
  最低のエネルギーが 0 ではない有限の値を持つ。

- 波動関数の直交性
  エネルギー固有値の異なる波動関数は直交性を持つ。
  $(E_n \to \psi_n(x),\ E_m \to \psi_m(x),\ E_n \neq E_m)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi_m(x)dx = \delta_{nm}$$

量子力学における基礎
- 物理量は実数
- 物理量に対する演算子はエルミート演算子
- 固有関数どうしが直交性を持つ

3次元のシュレーディンガー方程式

3次元のシュレーディンガー方程式

- 古典力学

$$\boldsymbol{P} = (p_x, p_y, p_z)$$

運動エネルギー $E = \dfrac{\boldsymbol{P}^2}{2m} = \dfrac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right)$

- 量子力学 ･･･ 演算子で置き換え

$$p_x \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\left(\underline{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}} + V(x)\right)\psi(x) = E\,\psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\underline{\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}}\right)$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$ ･･･ ラプラシアン

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x,y,z)\right)\psi(x,y,z) = E\,\psi(x,y,z)}$$

例）原子核によるクーロンポテンシャル

3次元における球対称ポテンシャル

原点からの動径方向の距離 r の関数

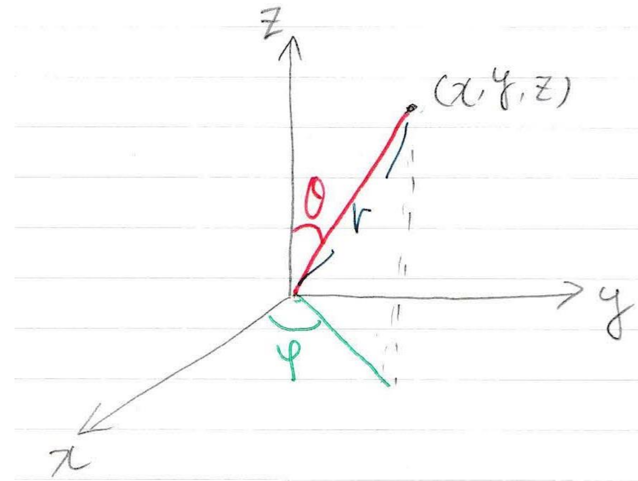
↑

古典力学における中心力の問題

極座標で考える

極座標によるラプラシアン

$$
\begin{cases}
x = r\sin\theta\cos\varphi \\
y = r\sin\theta\cos\varphi \\
z = r\cos\theta
\end{cases}
$$



$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

$$\tan\theta = \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z} \quad \Rightarrow \quad \theta = \tan^{-1}\frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}$$

$$\tan\varphi = \frac{y}{x} \quad \Rightarrow \quad \varphi = \tan^{-1}\frac{y}{x}$$

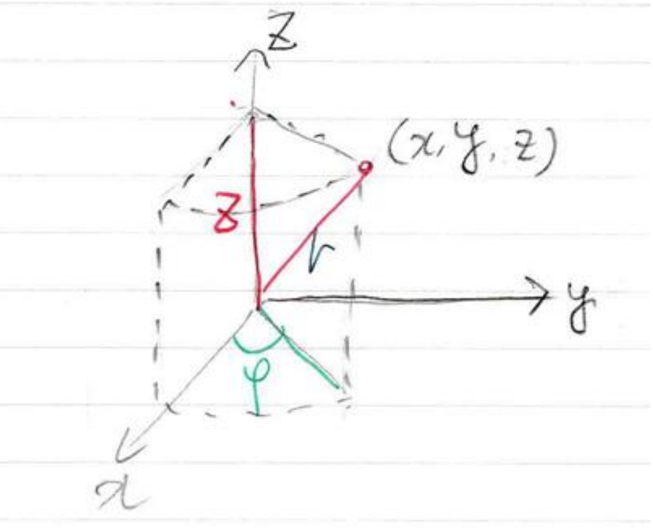
$$\boxed{\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]}$$

円筒座標の場合

$$x = r\cos\varphi$$

$$y = r\sin\varphi$$

$$z = z$$



$$\Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

角運動量

円運動（古典）を考える。

質量 m、半径 r、速度 v、角速度 $\omega = \frac{v}{r}$、慣性モーメント $I = mr^2$

角運動量　$L = I\omega = mr^2 \frac{v}{r} = mrv = rp$

（運動量$p = mv$）

運動エネルギー　$E = \frac{1}{2} mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2} mr^2\omega^2 = \frac{1}{2} I\omega^2 = \frac{L^2}{2mr^2}$

3次元のシュレーディンガー方程式（中心力⇒ $V(r)$）

波動関数　$\psi(r,\theta,\phi)$

波動方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\,\Delta+V(r)\right)\psi=E\,\psi$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+V(r)\right)\psi=E\,\psi$$

ここで

$$\widehat{\boldsymbol{L}^2}\equiv-\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

と定義すると

$$\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{\widehat{\boldsymbol{L}^2}}{2mr^2}+V(r)\right)}_{\hat{H}}\psi=E\,\psi$$

円運動の運動エネルギーの形と一致

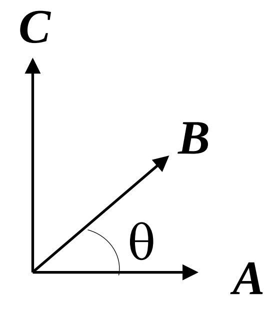
3次元のシュレーディンガー方程式の極座標表示の解を求める。

角運動量演算子

ベクトル積（外積）

大きさ：$|A||B|\sin\theta$

向き：
　$\boldsymbol{A}$から$\boldsymbol{B}$の方向に回転する
　右ネジの進む向き



$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B}$$

角運動量　$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$

成分
$$\begin{cases} L_x = yp_z - zp_y \\ L_y = zp_x - xp_z \\ L_z = xp_y - yp_x \end{cases}$$

量子力学　演算子 ⇔ 物理量

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad \rightarrow$$ エネルギー固有値

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

角運動量演算子

$$\begin{cases} \widehat{L_x} = \hat{y}\widehat{p_z} - \hat{z}\widehat{p_y} = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \\ \widehat{L_y} = \hat{z}\widehat{p_x} - \hat{x}\widehat{p_z} = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \\ \widehat{L_z} = \hat{x}\widehat{p_y} - \hat{y}\widehat{p_x} = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \end{cases}$$

（中心力問題　→　極座標で考える）

$$\begin{cases} \widehat{L_x} = -i\hbar\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ \widehat{L_y} = -i\hbar\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\ \widehat{L_z} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{cases}$$

$$\widehat{\boldsymbol{L}^2} = \widehat{L_x^2} + \widehat{L_y^2} + \widehat{L_z^2} = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

ラプラシアンの極座標表示の一部と同じ形

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

3次元のシュレーディンガー方程式（中心力⇒ $V(r)$）

波動関数　$\psi(r,\theta,\phi)$

波動方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right)\psi = E\,\psi$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) + V(r)\right)\psi = E\,\psi$$

ここで

$$\widehat{\boldsymbol{L}^2} \equiv -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

と定義すると

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\widehat{\boldsymbol{L}^2}}{2mr^2} + V(r)\right)\psi = E\,\psi$$

3次元のシュレーディンガー方程式の極座標表示の解を求める。

（もう少し一般的なお話）

- <u>演算子の積と交換関係</u>

演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$

$$\hat{A}\,\hat{B}\,\psi = \hat{A}\left(\hat{B}\psi\right)$$

関数ψにまず$\hat{B}$を作用させ、次に$\hat{A}$を作用させる。

$\hat{A}\,\hat{B} \neq \hat{B}\,\hat{A}$ $\Rightarrow$ $\hat{A}$と$\hat{B}$は非可換

例）

運動量演算子 $\widehat{p_x} = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$

位置座標の演算子 $\hat{x} = x\times$ （掛けるという演算子）

$$\hat{p}\,\hat{x}\,\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(x\psi(x)\right) = -i\hbar\left(\psi(x) + x\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right) \qquad ①$$

$$\hat{x}\,\hat{p}\,\psi(x) = x\left(-i\hbar\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right) \qquad ②$$

① − ②より

$$\underbrace{\boxed{(\hat{p}\,\hat{x} - \hat{x}\,\hat{p})}}\psi(x) = \underbrace{\boxed{-i\hbar}}\psi(x)$$

演算子が等しい

左辺と右辺の演算子をどんな関数に作用させても結果は等しい

演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$

$$\hat{A}\,\hat{B}\ -\hat{B}\,\hat{A} \Rightarrow [\hat{A},\hat{B}]$$

演算子$\hat{A}$と$\hat{B}$の交換関係

交換子 commutator

特に、運動量と位置座標の交換関係

$$[\widehat{p_x},\hat{x}] = -i\hbar$$

を<u>正準交換関係</u>という。

一般に物理量は座標と運動量の関数として表されるので、その交換関係は正準交換関係からなる。

2つの演算子が可換である

⇒　両者に共通な固有関数をつくることができる。（<u>同時対角化</u>）

（証明は教科書p.152）

(もう少し一般的なお話)

- 演算子$\hat{A}$，$\hat{B}$が共通の固有関数ψを持つ場合

$$\hat{A}\psi = a\psi \quad \Rightarrow \quad \hat{B}\hat{A}\,\psi = \hat{B}(a\psi)$$

$$\hat{B}\psi = b\psi \quad \Rightarrow \quad \hat{A}\hat{B}\,\psi = \hat{A}(b\psi)$$

$$b\hat{A}\psi = ab\psi$$
$$a\hat{B}\psi = ab\psi$$

$$\left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right)\psi = \hat{A}(b\psi) - \hat{B}(a\psi) = 0$$

$$\left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right)\psi = 0$$

＊$\hat{A}$、$\hat{B}$に共通な固有関数は、交換子$[\hat{A},\hat{B}]$の固有関数でもあり、その固有値は0である。

＊a, bが同時に決められるような量子状態が1つある。

$[\widehat{p_x}, \hat{x}] = -i\hbar \quad \Rightarrow$ xとp_xを同時に正確に決められる状態はない。

不確定性関係

- <u>ハミルトニアン$\hat{H}$と$\widehat{\boldsymbol{L}^2}$の可換性</u>

$\left[\hat{H}, \widehat{\boldsymbol{L}^2}\right] = 0$　　← 証明は復習課題で

⇒　両者に共通の固有関数が存在する。

$\hat{H}$ の固有関数 → エネルギーを測定すると常に確定値

$\widehat{\boldsymbol{L}^2}$の固有関数 → 角運動量を測定すると常に確定値

系の状態が同時に記述される

⇒　エネルギーと角運動量が同時に保存

ここまでのまとめ

- 三次元シュレーディンガー方程式（極座標系）

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\psi+V(r)\psi=E\psi$$

波動関数 $\psi(r,\theta,\varphi)$、エネルギー固有値 E

- 角運動量演算子を考えて、$\hat{L^2}=\hat{L_x^2}+\hat{L_y^2}+\hat{L_z^2}$ とすると、

$$\hat{L^2}=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial^2\theta}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$$

シュレーディンガー方程式は、

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)-\frac{\hat{L^2}}{2mr^2}\psi+V(r)\psi=E\psi$$