

量子力学

Quantum mechanics

2022.6.23 現在

鹿児島現代物理勉強会

御領 悟志

量子論の発端・量子仮説(1900年)

- 19世紀の末頃ドイツを中心に製鋼業が盛んになる。
- 高温物体からの放射の性質が詳しく調べられた。
- 黒体放射の放射公式を電磁気学から導こうとするが成功しなかった。
- プランクが1900年に、振動数 ν [Hz]の放射のエネルギーが、 $h\nu$ [J]ずつの単位で行動すると仮定し、**プランクの公式**を導いた。
- エネルギーが、 $h\nu$ [J]の整数倍しか許さない仮説を**量子仮説**という。

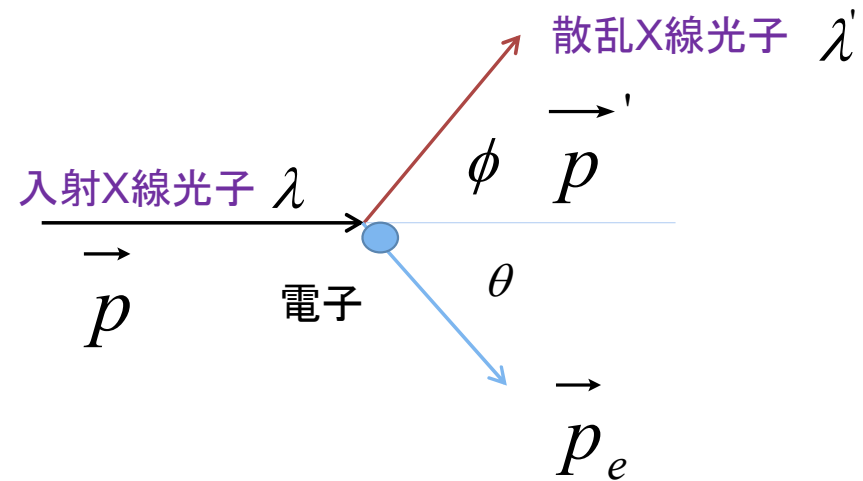
光電効果(1905年)

- 金属面にX線を当てると電子が飛び出す現象(光電効果)が詳しく調べられ、従来の電磁気学では説明できないことがいろいろ出てきた。
- アインシュタインは**プランクの量子仮説**を押し進め、振動数 ν [Hz]の光はそれぞれ $h\nu$ [J]のエネルギーをもち、
- 光の粒子(光子)として行動し、金属中の自由電子は光子からエネルギーを吸収し運動エネルギーを得て、金属表面から飛び出すと説明した。
- 光は、粒子と波動の両方の性質をもつことになる。

コンプトン効果(1923年)

- X線を物質に当てたときに入射X線よりも波長の長い散乱X線について詳しく調べられた。
- その波長のずれが、曲げられた角 ϕ だけで定まり入射X線の波長や散乱物質に無関係であることがわかった。

$$\Delta\lambda = 0.024(1 - \cos\phi)\text{\AA}$$



コンプトン効果(計算)

電子についての特殊相対論的スカラー保存より

$$\frac{E^2}{c^2} - p_x^2 - p_y^2 - p_z^2 = (m_e c)^2$$

$$\frac{E}{c} = \sqrt{(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + (m_e c)^2} = \sqrt{p_e^2 + (m_e c)^2} \cdots \textcircled{1}$$

4元運動量の時間部分(エネルギー)についての保存より

$$p + m_e c = p' + \frac{E}{c} \cdots \textcircled{2}$$

4元運動量の空間部分(運動量)についての保存より

$$(p_e)^2 = (p)^2 + (p')^2 - 2pp' \cos \phi \cdots \textcircled{3}$$

$$p - p' + m_e c = \frac{E}{c} \cdots \textcircled{4}$$

$$(p)^2 + (p')^2 + (m_e c)^2 - 2pp' + 2pm_e c - 2p'm_e c = p_e^2 + (m_e c)^2 \cdots \textcircled{5}$$

③の関係式を⑥に代入すると

$$-2pp' + 2pm_e c - 2p'm_e c = p_e^2 - (p)^2 - (p')^2 \cdots \textcircled{6}$$

$$2pm_e c - 2p'm_e c = 2pp' - 2pp' \cos \phi$$

$$m_e c(p - p') = pp'(1 - \cos \phi)$$

$$m_e c h \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) = \frac{h}{\lambda} \frac{h}{\lambda'} (1 - \cos \phi)$$

$$m_e c h \left(\frac{\lambda' - \lambda}{\lambda \lambda'} \right) = \frac{h}{\lambda} \frac{h}{\lambda'} (1 - \cos \phi)$$

$$\Delta \lambda = (\lambda' - \lambda) = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \phi) \cdots \textcircled{7}$$

ド・ブロイの物質波(1923年)

- 運動量をもつ粒子は、波動性を示し、その波長は次の式で示される。

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

- ダビットソンとガーマーは、電子線を結晶に当てド・ブロイの物質波の波長と同じ干渉現象が現れることを確かめた。(1927年)

シュレディンガー方程式(1926年)

- シュレディンガーが、定式化した[量子力学の基本方程式](#)(偏微分方程式で表現)
- ψ の2乗は、粒子の存在する確率密度を意味する。

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

プランク定数 $h = 6.625 \times 10^{-34} [\text{J} \cdot \text{s}]$ $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

シュレディンガー方程式の作り方

力学的エネルギー保存則の式は

$$\frac{1}{2}m\upsilon^2 + V = E \cdots \textcircled{1}$$

①式を運動量を用いて書き替えると

$$p = m\upsilon \quad \upsilon = \frac{p}{m}$$

$$\frac{p^2}{2m} + V = E \cdots \textcircled{2}$$

更に②式の物理量を以下の演算子で書き替える

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + V = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \cdots \textcircled{3}$$

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

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

3次元的に書き替えると ※ 詳細は補遺参照

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \cdots \textcircled{4}$$

エルミート演算子

$$(\phi, Q\phi) = \int \phi^* Q\phi d\vec{r} \quad \cdots \textcircled{1}$$

次の②の関係を満たす演算子Qをエルミート演算子という。

$$(\phi, Q\phi)^* = (\phi, Q\phi) \quad \cdots \textcircled{2}$$

$$(\phi, Q\phi)^* = \left(\int \phi^* Q\phi d\vec{r} \right)^* = \int (Q\phi)^* \phi d\vec{r} \quad \cdots \textcircled{3}$$

$$(\phi, Q\phi)^* = (Q\phi, \phi) \quad \cdots \textcircled{4}$$

②と④式からエルミート演算子は次の関係を満たす。

$$(\phi, Q\phi) = (Q\phi, \phi) \quad \cdots \textcircled{5}$$

$$Q\phi = q\phi \quad \cdots \textcircled{6}$$

$$(\phi, Q\phi)^* = (\phi, Q\phi) \quad \cdots \textcircled{7}$$

$$(\phi, q\phi)^* = (\phi, q\phi) \quad \cdots \textcircled{8}$$

$$q^* = q \quad \cdots \textcircled{9}$$

エルミート演算子Qの固有値qは、実数である。

観測される物理量の演算子は、エルミート演算子である。

物理量の期待値

物理量Aの期待値 $\langle A \rangle$ の時間変化について

$$\langle A \rangle = (\varphi, A\varphi) \quad \langle A \rangle = \iiint \varphi^* A \varphi dx dy dz$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t}, A\varphi \right) + \left(\varphi, A \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) + \left(\varphi, \frac{\partial A}{\partial t} \varphi \right)$$

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H\varphi \quad -i\hbar \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} = H^* \varphi^*$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{H}{i\hbar} \varphi \quad \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} = -\frac{H^*}{i\hbar} \varphi^*$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left(\frac{H}{i\hbar} \varphi, A\varphi \right) + \left(\varphi, A \frac{H}{i\hbar} \varphi \right) + \left(\varphi, \frac{\partial A}{\partial t} \varphi \right)$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = -\frac{1}{i\hbar} (H\varphi, A\varphi) + \frac{1}{i\hbar} (\varphi, AH\varphi) + \left(\varphi, \frac{\partial A}{\partial t} \varphi \right)$$

Hはエルミート演算子なので

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = -\frac{1}{i\hbar} (\varphi, HA\varphi) + \frac{1}{i\hbar} (\varphi, AH\varphi) + \left(\varphi, \frac{\partial A}{\partial t} \varphi \right)$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} (\varphi, -HA\varphi) + \frac{1}{i\hbar} (\varphi, AH\varphi) + \left(\varphi, \frac{\partial A}{\partial t} \varphi \right)$$

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} (\varphi, (AH - HA)\varphi) + \left(\varphi, \frac{\partial A}{\partial t} \varphi \right)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = (\varphi, [A, H]\varphi) + i\hbar \left(\varphi, \frac{\partial A}{\partial t} \varphi \right)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle [A, H] \rangle + i\hbar \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

$$\left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle = 0 \quad \text{ならば} \quad i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle [A, H] \rangle$$

不確定性原理(ハイゼンベルク)

位置を確定させようとするとも運動量が不確定になり、運動量を確定させようとするとも位置が不確定になる。

位置と運動量が同時に決まらないことを表す。

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{h}{2}$$

(位置の不確定) × (運動量の不確定)

不確定性原理・計算(1)

$\langle x \rangle$
 $\langle p \rangle$ を $\frac{x}{p}$ の期待値として

$$\begin{array}{ccc} (\Delta x)^2 & \xrightarrow{\text{blue arrow}} & (x - \langle x \rangle)^2 \\ (\Delta p)^2 & & (p - \langle p \rangle)^2 \end{array}$$

$$\begin{aligned} & [x - \langle x \rangle, p - \langle p \rangle] \\ &= (x - \langle x \rangle)(p - \langle p \rangle) - (p - \langle p \rangle)(x - \langle x \rangle) \\ &= xp - x\langle p \rangle - \langle x \rangle p + \langle x \rangle \langle p \rangle \\ &\quad - px + p\langle x \rangle + \langle p \rangle x - \langle p \rangle \langle x \rangle \\ &= [x, p] = i\hbar \end{aligned}$$

次の負にならない積分を考える。

$$I(\lambda) = \int |\{\lambda(x - \langle x \rangle) - i(p - \langle p \rangle)\}\varphi|^2 dx \geq 0$$

λ は、任意の実数とする。

$$\begin{aligned} I(\lambda) &= \int \{\lambda(x - \langle x \rangle) - i(p - \langle p \rangle)\}^* \varphi^* \{\lambda(x - \langle x \rangle) - i(p - \langle p \rangle)\} \varphi dx \\ I(\lambda) &= \int \{\lambda(x - \langle x \rangle)^* + i(p - \langle p \rangle)^*\} \varphi^* \{\lambda(x - \langle x \rangle) - i(p - \langle p \rangle)\} \varphi dx \\ I(\lambda) &= \int \{\lambda(x - \langle x \rangle)^* + i(p - \langle p \rangle)^*\} \varphi^* \{\lambda(x - \langle x \rangle)\} \varphi dx \\ &\quad + \int \{\lambda(x - \langle x \rangle)^* + i(p - \langle p \rangle)^*\} \varphi^* \{-i(p - \langle p \rangle)\} \varphi dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I(\lambda) &= \lambda^2 ((x - \langle x \rangle)\varphi, (x - \langle x \rangle)\varphi) \\ &\quad - i\lambda ((x - \langle x \rangle)\varphi, (p - \langle p \rangle)\varphi) \\ &\quad + i\lambda ((p - \langle p \rangle)\varphi, (x - \langle x \rangle)\varphi) \\ &\quad + ((p - \langle p \rangle)\varphi, (p - \langle p \rangle)\varphi) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I(\lambda) &= \lambda^2 (\varphi, (x - \langle x \rangle)^2 \varphi) - i\lambda (\varphi, (x - \langle x \rangle)(p - \langle p \rangle)\varphi) \\ &\quad + i\lambda (\varphi, (p - \langle p \rangle)(x - \langle x \rangle)\varphi) + (\varphi, (p - \langle p \rangle)^2 \varphi) \end{aligned}$$

$$I(\lambda) = \lambda^2 (\Delta x)^2 + i\lambda [p, x] + (\Delta p)^2$$

$$I(\lambda) = \lambda^2 (\Delta x)^2 - i\lambda [x, p] + (\Delta p)^2$$

$$I(\lambda) = \lambda^2 (\Delta x)^2 - i\lambda i\hbar + (\Delta p)^2 = \lambda^2 (\Delta x)^2 + \lambda\hbar + (\Delta p)^2$$

不確定性原理・計算(2)

全ての実数 λ に成立する条件について。

$$I(\lambda) = (\Delta x)^2 \lambda^2 + \hbar \lambda + (\Delta p)^2 \geq 0$$

$$a = (\Delta x)^2 > 0$$

$$b = \hbar > 0$$

$$c = (\Delta p)^2 > 0$$

$$I(\lambda) = a\lambda^2 + b\lambda + c \geq 0$$

$$I(\lambda) = a\left(\lambda^2 + \frac{b}{a}\lambda\right) + c \geq 0$$

$$I(\lambda) = a\left\{\left(\lambda + \frac{b}{2a}\right)^2 - \frac{b^2}{4a^2}\right\} + c \geq 0$$

$$I(\lambda) = a\left(\lambda + \frac{b}{2a}\right)^2 + c - \frac{b^2}{4a} \geq 0$$

$$I(\lambda) = a\left(\lambda + \frac{b}{2a}\right)^2 + \frac{4ac - b^2}{4a} \geq 0$$

$$\frac{4ac - b^2}{4a} \geq 0 \quad 4ac \geq b^2 \quad 4(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq \hbar^2$$

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad \Rightarrow \quad \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

位置と運動量が同時に決まらないことを表す

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

不確定性原理・計算(3)

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \dots \textcircled{1}$$

$$E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m} \text{ なので}$$

$$\Delta E = \frac{p \Delta p}{m}$$

$$\Delta p = \frac{m}{p} \Delta E \dots \textcircled{2}$$

$$\Delta x = v \Delta t \dots \textcircled{3}$$

$$p = m v \dots \textcircled{4}$$

②と③を①に代入して④を用いると

$$\Delta t \Delta E \frac{m v}{p} = \Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \dots \textcircled{5}$$

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \dots \textcircled{6}$$

(エネルギーの不確定) × (時間の不確定)

エーレンフェストの定理

- シュレディンガー方程式を用いて量子力学的に位置の期待値を計算することで、ニュートンの運動方程式を導くことが出来る。巨視的な運動方程式が、微視的な物理法則から導ける。

$$\langle x \rangle = \iiint \varphi^* x \varphi dx dy dz \quad \frac{d \langle x \rangle}{dt} = \frac{i\hbar}{m} \iiint \left(\frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \cdot \varphi \right) dx dy dz$$

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$

エーレンフェストの定理・計算(1)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right]\varphi = i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} \cdots \textcircled{1}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right]\varphi^* = -i\hbar \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} \cdots \textcircled{2}$$

x の期待値は

$$\langle x \rangle = \iiint \varphi^* x \varphi dx dy dz \cdots \textcircled{3}$$

x の期待値の時間微分は

$$\frac{d \langle x \rangle}{dt} = \iiint \left(\frac{d \varphi^*}{dt} x \varphi + \varphi^* x \frac{d \varphi}{dt} \right) dx dy dz \cdots \textcircled{4}$$

$$\frac{1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial t} \cdots \textcircled{5}$$

$$\frac{-1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \varphi^* = \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} \cdots \textcircled{6}$$

$$\frac{d \langle x \rangle}{dt} = \iiint \left(\frac{-1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \varphi^* (x \varphi) + \varphi^* x \frac{1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \varphi \right) dx dy dz$$

$$\frac{d \langle x \rangle}{dt} = \frac{-1}{i\hbar} \iiint \left(\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \varphi^* (x \varphi) - \varphi^* x \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \varphi \right) dx dy dz$$

$$\nabla (\nabla \varphi^* (x \varphi) - (\varphi^* x) \nabla \varphi) - (\nabla \varphi^* \nabla (x \varphi) - \nabla (\varphi^* x) \nabla \varphi) = \nabla^2 \varphi^* (x \varphi) - (\varphi^* x) \nabla^2 \varphi$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m} \iiint (\Delta \varphi^* (x \varphi) - (\varphi^* x) \Delta \varphi) dx dy dz$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m} \iiint \nabla (\nabla \varphi^* (x \varphi) - (\varphi^* x) \nabla \varphi) - (\nabla \varphi^* \nabla (x \varphi) - \nabla (\varphi^* x) \nabla \varphi) dx dy dz$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m} \iint (\nabla \varphi^* (x \varphi) - (\varphi^* x) \nabla \varphi) dS + \frac{i\hbar}{2m} \iiint (\nabla \varphi^* \nabla (x \varphi) - \nabla (\varphi^* x) \nabla \varphi) dx dy dz$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} \iiint (\nabla \varphi^* \nabla (x \varphi) - \nabla (\varphi^* x) \nabla \varphi) dx dy dz$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} \iiint (\nabla \varphi^* (\nabla x \cdot \varphi + x \nabla \varphi) - (\nabla \varphi^* \cdot x + \varphi^* \nabla x) \nabla \varphi) dx dy dz$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} \iiint (\nabla \varphi^* (\nabla x \cdot \varphi) - (\varphi^* \nabla x) \nabla \varphi) dx dy dz$$

$$\frac{d \langle x \rangle}{dt} = \frac{i\hbar}{2m} \iiint \left(\frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \cdot \varphi - \varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) dx dy dz \cdots \textcircled{7}$$

エーレンフェストの定理・計算(2)

$$\frac{i\hbar}{2m} \iiint \left(\frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \cdot \varphi \right) dx dy dz = \frac{i\hbar}{2m} \iint \varphi^* \cdot \varphi dS - \frac{i\hbar}{2m} \iiint \left(\varphi^* \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) dx dy dz$$

$$\frac{i\hbar}{2m} \iiint \left(\frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \cdot \varphi \right) dx dy dz = -\frac{i\hbar}{2m} \iiint \left(\varphi^* \cdot \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) dx dy dz$$

$$\frac{d \langle x \rangle}{dt} = \frac{i\hbar}{2m} \iiint \left(\frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \cdot \varphi - \varphi^* \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) dx dy dz$$

$$\frac{d \langle x \rangle}{dt} = \frac{i\hbar}{m} \iiint \left(\frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \cdot \varphi \right) dx dy dz \quad \dots \textcircled{8}$$

$\frac{d}{dt} \langle x \rangle$ のさらに時間微分は

$$\frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = \frac{i\hbar}{m} \iiint \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \varphi^*}{\partial t} \right) \cdot \varphi + \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) dx dy dz \quad \dots \textcircled{9}$$

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = i\hbar \iiint \left(\frac{-1}{i\hbar} \frac{\partial}{\partial x} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi^* + V \varphi^* \right] \cdot \varphi + \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \frac{1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi + V \varphi \right] \right) dx dy dz$$

$$= -\iiint \left(\frac{\partial}{\partial x} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi^* + V \varphi^* \right] \cdot \varphi - \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi + V \varphi \right] \right) dx dy dz$$

$$= -\iiint \left(\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} (V \varphi^*) \right] \cdot \varphi - \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \Delta \varphi + \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} V \varphi \right] \right) dx dy dz$$

$$= -\iiint \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \varphi + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \Delta \varphi + \frac{\partial}{\partial x} (V \varphi^*) - \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} V \varphi \right) dx dy dz$$

$$= -\iiint \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\Delta \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \varphi - \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \Delta \varphi \right] + \frac{\partial}{\partial x} (V \varphi^*) - \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} V \varphi \right) dx dy dz$$

$$= -\iiint \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\Delta \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \varphi - \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \Delta \varphi \right] + \varphi^* \frac{\partial V}{\partial x} \varphi + V \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \varphi - V \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \varphi \right) dx dy dz$$

$$= -\iiint \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\Delta \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \varphi - \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \Delta \varphi \right] + \varphi^* \frac{\partial V}{\partial x} \varphi \right) dx dy dz$$

$$= \iiint \left(\frac{\hbar^2}{2m} \left[\Delta \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \varphi - \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \Delta \varphi \right] - \varphi^* \frac{\partial V}{\partial x} \varphi \right) dx dy dz \quad \dots \textcircled{10}$$

$$= \iiint \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \left(\nabla \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \cdot \varphi - \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} \cdot \nabla \varphi \right) - \varphi^* \frac{\partial V}{\partial x} \varphi \right] dx dy dz \quad \dots \textcircled{11}$$

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = \iiint \varphi^* \left(-\frac{\partial V}{\partial x} \right) \varphi dx dy dz \quad \dots \textcircled{12}$$

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \quad \dots \textcircled{13}$$

確率密度の流れ（ ψ の意味）

次のシュレディンガー方程式①の複素共役をとる。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \dots \textcircled{1}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \psi^* = -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \dots \textcircled{2}$$

$\psi^* \times \textcircled{1} - \psi \times \textcircled{2}$ を計算する。

$$\psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \psi = i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \dots \textcircled{3}$$

$$\psi \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \psi^* = -i\hbar \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \dots \textcircled{4}$$

③-④

$$\psi^* \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \psi - \psi \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \psi^* = i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + i\hbar \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \dots \textcircled{5}$$

$$\frac{\hbar}{2mi} (-\psi^* \Delta \psi + \psi \Delta \psi^*) = \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) \dots \textcircled{6}$$

$$\frac{\hbar}{2mi} \nabla (-\psi^* \nabla \psi + \psi \nabla \psi^*) = \frac{\partial \psi \psi^*}{\partial t} \dots \textcircled{7}$$

$$0 = \frac{\partial \psi \psi^*}{\partial t} + \nabla \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \dots \textcircled{8}$$

$$\rho = \psi \psi^* \quad \vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

と置くと次のようにある密度の保存の式が得られる。

$$0 = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} \dots \textcircled{9}$$

粒子について確率密度の流れがあると考えれば良い。

シュレディンガー方程式の解(1)

3次元的にシュレディンガー方程式を書くと

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \dots \textcircled{1}$$

簡単のために一次元方向のみに話を限定する。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x,t) = i\hbar \frac{d\psi(x,t)}{dt}$$

$\psi(x,t) = \varphi(x)\phi(t)$ と変数分離すると

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \varphi(x)\phi(t) = i\hbar \frac{d\varphi(x)\phi(t)}{dt}$$

$$\phi(t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \varphi(x) = \varphi(x) i\hbar \frac{d\phi(t)}{dt}$$

$$\frac{\phi(t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \varphi(x)}{\varphi(x)\phi(t)} = \frac{\varphi(x) i\hbar \frac{d\phi(t)}{dt}}{\varphi(x)\phi(t)}$$

$$\frac{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \varphi(x)}{\varphi(x)} = \frac{i\hbar \frac{d\phi(t)}{dt}}{\phi(t)} = E(\text{一定})$$

このように左辺と右辺で変数を分離できる

シュレディンガー方程式の解(2)

$$\frac{1}{\phi(t)} \frac{d\phi(t)}{dt} = -i \frac{E}{\hbar} \quad \log \phi(t) = -i \frac{E}{\hbar} t + C$$

$$\phi(t) = e^{-i \frac{E}{\hbar} t + C} = A e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

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

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \varphi(x) = E \varphi(x) \cdots \textcircled{2}$$

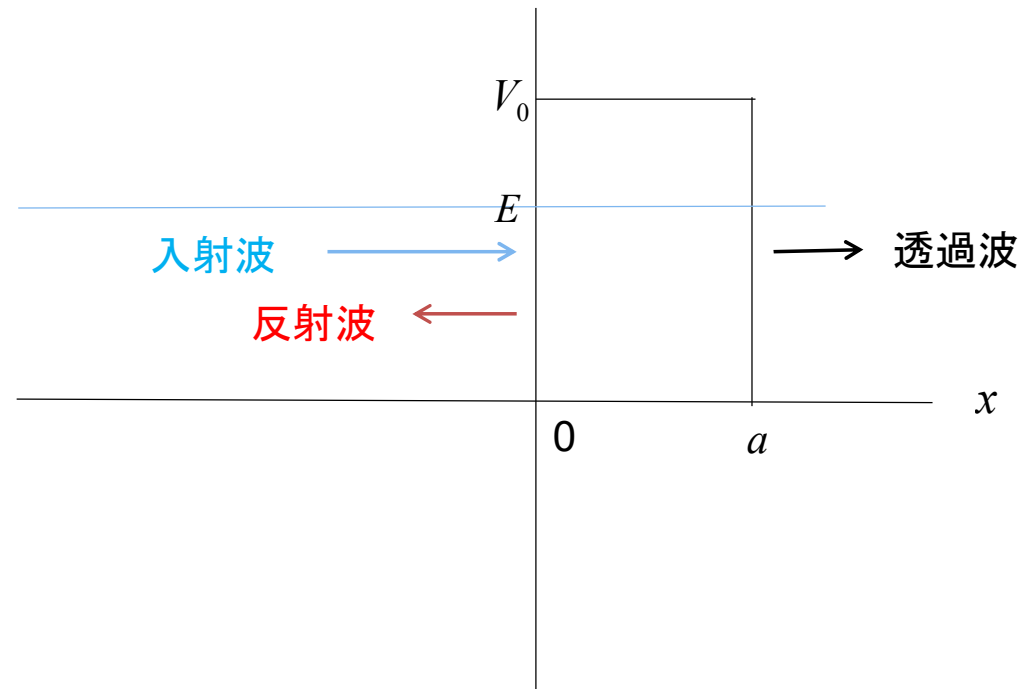
方程式の一般解は次のようになる。

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \phi(t) = A \varphi(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \cdots \textcircled{3}$$

となり、x軸方向についての式②を解けばいいことになる。

トンネル効果(1)

エネルギー E の粒子(質量 m)が、図のように $x < 0$ と $a < x$ で $V(x) = 0$ 、 $0 < x < a$ で $V(x) = V_0$ という長方形のポテンシャル障壁に $x < 0$ から入射したとする。



**太陽の内部で核融合がゆっくりと進んだい
無の揺らぎの中から宇宙が生まれたいすることの基本となる現象**

トンネル効果(2)

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

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \varphi(x)$$

$\varphi(x) = Ae^{kx}$ と仮定する。

$$k^2 e^{kx} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} e^{kx}$$

$$k = \pm \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$x < 0 \quad V_0 = 0$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_2 e^{-ik_1 x} \dots \textcircled{1}$$

$$\frac{d\varphi_1(x)}{dx} = ik_1 A_1 e^{ik_1 x} - ik_1 A_2 e^{-ik_1 x}$$

$$0 \leq x \leq a \quad V_0 > E$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\varphi_2(x) = B_1 e^{k_2 x} + B_2 e^{-k_2 x} \dots \textcircled{2}$$

$$\frac{d\varphi_2(x)}{dx} = k_2 B_1 e^{k_2 x} - k_2 B_2 e^{-k_2 x}$$

トンネル効果(3)

$$a < x \quad V_0 = 0$$

$$\varphi_3(x) = C_1 e^{ik_1 x} + C_2 e^{-ik_1 x} \dots \textcircled{3}$$

$$\frac{d\varphi_3(x)}{dx} = ik_1 C_1 e^{ik_1 x} - ik_1 C_2 e^{-ik_1 x}$$

$x = 0$ のとき

$$A_1 + A_2 = B_1 + B_2$$

$$ik_1(A_1 - A_2) = k_2(B_1 - B_2)$$

$x = a$ のとき $C_2 = 0$ なので

$$B_1 e^{k_2 a} + B_2 e^{-k_2 a} = C_1 e^{k_1 a}$$

$$k_2(B_1 e^{k_2 a} - B_2 e^{-k_2 a}) = ik_1 C_1 e^{ik_1 a}$$

$$k_2(B_1 e^{k_2 a} - B_2 e^{-k_2 a}) = ik_1(B_1 e^{k_2 a} + B_2 e^{-k_2 a})$$

$$k_2 B_1 e^{k_2 a} - k_2 B_2 e^{-k_2 a} = ik_1 B_1 e^{k_2 a} + ik_1 B_2 e^{-k_2 a}$$

$$(ik_1 + k_2)B_2 e^{-k_2 a} = (-ik_1 + k_2)B_1 e^{k_2 a}$$

$$B_2 = \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a} B_1$$

$$A_1 + A_2 = B_1 + B_2$$

$$A_1 - A_2 = \frac{k_2}{ik_1} (B_1 - B_2)$$

$$A_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1} \right) B_1 + \frac{1}{2} \left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1} \right) B_2$$

$$A_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1} \right) B_1 + \frac{1}{2} \left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1} \right) \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a} B_1$$

トンネル効果(4)

$$C_1 e^{k_1 a} = e^{k_2 a} B_1 + e^{-k_2 a} B_2 = e^{k_2 a} B_1 + e^{-k_2 a} \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a} B_1$$

$$= e^{k_2 a} B_1 + \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{k_2 a} B_1 = \left(1 + \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} \right) e^{k_2 a} B_1$$

$$C_1 e^{k_1 a} = \left(\frac{(k_2 + ik_1)}{(k_2 + ik_1)} + \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} \right) e^{k_2 a} B_1 = \frac{(2k_2)}{(k_2 + ik_1)} e^{k_2 a} B_1$$

$$C_1 = \frac{(2k_2)}{(k_2 + ik_1)} e^{(k_2 - k_1)a} B_1$$

$$\begin{aligned} \frac{C_1}{A_1} &= \frac{\frac{(2k_2)}{(k_2 + ik_1)} e^{(k_2 - k_1)a} B_1}{\frac{1}{2} \left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1} \right) B_1 + \frac{1}{2} \left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1} \right) \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a} B_1} \\ &= \frac{\frac{(2k_2)}{(k_2 + ik_1)} e^{(k_2 - k_1)a}}{\frac{1}{2} \frac{(k_2 + ik_1)(k_1 - ik_2)}{k_1(k_2 + ik_1)} + \frac{1}{2} \frac{(k_1 + ik_2)(k_2 - ik_1)}{k_1(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a}} \\ &= \frac{\frac{(4k_1 k_2)}{(k_2 + ik_1)} e^{(k_2 - k_1)a}}{\frac{(k_2 + ik_1)(k_1 - ik_2)}{(k_2 + ik_1)} + \frac{(k_1 + ik_2)(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a}} \\ &= \frac{4k_1 k_2 e^{(k_2 - k_1)a}}{(k_2 + ik_1)(k_1 - ik_2) + (k_1 + ik_2)(k_2 - ik_1) e^{2k_2 a}} \end{aligned}$$

トンネル効果(5)

$$\begin{aligned}
 \frac{C_1}{A_1} &= \frac{4k_1k_2e^{(k_2-k_1)a}}{(k_2+ik_1)(k_1-ik_2)+(k_1+ik_2)(k_2-ik_1)e^{2k_2a}} \\
 &= \frac{4k_1k_2e^{(k_2-k_1)a}}{i(-ik_2+k_1)(k_1-ik_2)-i(k_1+ik_2)(ik_2+k_1)e^{2k_2a}} \\
 &= \frac{4k_1k_2e^{(k_2-k_1)a}}{i(k_1-ik_2)^2-i(k_1+ik_2)^2e^{2k_2a}} \\
 &= \frac{4ik_1k_2e^{(k_2-k_1)a}}{-(k_1-ik_2)^2+(k_1+ik_2)^2e^{2k_2a}} \\
 &= -\frac{4ik_1k_2e^{(k_2-k_1)a}}{(k_1-ik_2)^2-(k_1+ik_2)^2e^{2k_2a}}
 \end{aligned}$$

$$T = \left(\frac{C_1}{A_1} \right)^2 = \left(\frac{4ik_1k_2e^{(k_2-k_1)a}}{(k_1-ik_2)^2-(k_1+ik_2)^2e^{2k_2a}} \right)^2$$

透過率 $T > 0$ であり、通り抜ける粒子が存在することを示している。

トンネル効果(6)

$$\begin{aligned} A_2 &= \frac{1}{2} \left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1} \right) B_1 + \frac{1}{2} \left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1} \right) B_2 \\ A_2 &= \frac{1}{2} \left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1} \right) B_1 + \frac{1}{2} \left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1} \right) \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a} B_1 \\ \frac{A_2}{A_1} &= \frac{\frac{1}{2} \left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1} \right) B_1 + \frac{1}{2} \left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1} \right) \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a} B_1}{\frac{1}{2} \left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1} \right) B_1 + \frac{1}{2} \left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1} \right) \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a} B_1} \\ &= \frac{\left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1} \right) B_1 + \left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1} \right) \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a} B_1}{\left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1} \right) B_1 + \left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1} \right) \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a} B_1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1} \right) + \left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1} \right) \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a}}{\left(\frac{k_1 - ik_2}{k_1} \right) + \left(\frac{k_1 + ik_2}{k_1} \right) \frac{(k_2 - ik_1)}{(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a}} \\ &= \frac{\frac{(k_1 + ik_2)(k_2 + ik_1)}{k_1(k_2 + ik_1)} + \frac{(k_1 - ik_2)(k_2 - ik_1)}{k_1(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a}}{\frac{(k_2 + ik_1)(k_1 - ik_2)}{k_1(k_2 + ik_1)} + \frac{(k_1 + ik_2)(k_2 - ik_1)}{k_1(k_2 + ik_1)} e^{2k_2 a}} \\ &= \frac{(k_1 + ik_2)(k_2 + ik_1) + (k_1 - ik_2)(k_2 - ik_1) e^{2k_2 a}}{(k_2 + ik_1)(k_1 - ik_2) + (k_1 + ik_2)(k_2 - ik_1) e^{2k_2 a}} \\ &= \frac{i(k_1 + ik_2)(k_2 + ik_1) + i(k_1 - ik_2)(k_2 - ik_1) e^{2k_2 a}}{i(k_2 + ik_1)(k_1 - ik_2) + i(k_1 + ik_2)(k_2 - ik_1) e^{2k_2 a}} \end{aligned}$$

トンネル効果(7)

$$\begin{aligned}\frac{A_2}{A_1} &= \frac{(k_1 + ik_2)(ik_2 - k_1) + (k_1 - ik_2)(ik_2 + k_1)e^{2k_2a}}{(ik_2 - k_1)(k_1 - ik_2) + (k_1 + ik_2)(ik_2 + k_1)e^{2k_2a}} \\ &= \frac{-(k_1^2 + k_2^2) + (k_1^2 + k_2^2)e^{2k_2a}}{-(k_1 - ik_2)^2 + (k_1 + ik_2)^2 e^{2k_2a}}\end{aligned}$$

$$T = \left(\frac{C_1}{A_1} \right)^2 = \left(\frac{4ik_1k_2e^{(k_2-k_1)a}}{(k_1 - ik_2)^2 - (k_1 + ik_2)^2 e^{2k_2a}} \right)^2$$

$$\begin{aligned}R &= \left(\frac{A_2}{A_1} \right)^2 = \left(\frac{(k_1^2 + k_2^2) + (k_1^2 + k_2^2)e^{2k_2a}}{(k_1 - ik_2)^2 - (k_1 + ik_2)^2 e^{2k_2a}} \right)^2 \\ &= \left(\frac{(k_1^2 + k_2^2)(1 + e^{2k_2a})}{(k_1 - ik_2)^2 - (k_1 + ik_2)^2 e^{2k_2a}} \right)^2\end{aligned}$$

演算子の行列表現(1)

ある線形演算子 $\hat{Q}$ によって関数 $f(\vec{r}) \Rightarrow g(\vec{r})$ に変換されるとする。

$$g(\vec{r}) = \hat{Q} f(\vec{r}) \quad \cdots \textcircled{1}$$

規格化完全系 $\{u_n(\vec{r})\}$ を基底ベクトルとして展開する。

$$f(\vec{r}) = \sum_{m=1}^n c_m(t) u_m(\vec{r}) \quad \cdots \textcircled{2}$$

$$g(\vec{r}) = \sum_{n=1}^n d_n(t) u_n(\vec{r}) \quad \cdots \textcircled{3}$$

展開係数を求めると

$$d_n(t) = \int u_n^*(\vec{r}) g(\vec{r}) d\vec{r} = \int u_n^*(\vec{r}) \hat{Q} f(\vec{r}) d\vec{r} \quad \cdots \textcircled{4}$$

$$d_n(t) = \int u_n^*(\vec{r}) \hat{Q} \left(\sum_{m=1}^n c_m(t) u_m(\vec{r}) \right) d\vec{r}$$

$$d_n(t) = \sum_{m=1}^n c_m(t) \left[\int u_n^*(\vec{r}) \hat{Q} u_m(\vec{r}) d\vec{r} \right]$$

$$d_n(t) = \sum_{m=1}^n \left[\int u_n^*(\vec{r}) \hat{Q} u_m(\vec{r}) d\vec{r} \right] c_m(t) \quad \cdots \textcircled{5}$$

$$Q_{nm} = \int u_n^*(\vec{r}) \hat{Q} u_m(\vec{r}) d\vec{r} \quad \text{とおけば}$$

$$d_n(t) = \sum_{m=1}^n Q_{nm} c_m(t) \quad \cdots \textcircled{6}$$

演算子の行列表示(2)

$$\begin{bmatrix} d_1(t) \\ d_2(t) \\ d_3(t) \\ d_n(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{1n} \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{2n} \\ Q_{n1} & Q_{n2} & Q_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ c_3(t) \\ c_n(t) \end{bmatrix} \quad \cdots \textcircled{7}$$

$$Q_{nm} = Q_{mn}^* \quad \cdots \textcircled{10}$$

エルミート演算子ならば全ての行列要素は、
上記関係を満たす。

$\hat{Q}$ は、エルミート演算子なので

$$\left(g, \hat{Q} f \right) = \left(f, \hat{Q} g \right)^* \quad \cdots \textcircled{8}$$

$$\left(u_n(\vec{r}), \hat{Q} u_m(\vec{r}) \right) = \left(u_m(\vec{r}), \hat{Q} u_n(\vec{r}) \right)^* \quad \cdots \textcircled{9}$$

エルミート演算子の行列表現



エルミート行列

演算子の行列表示(3)

2つの演算子 $\hat{P}$ $\hat{Q}$ の積演算子 $\hat{P}\hat{Q}$

$$f \Rightarrow \hat{Q} \Rightarrow g \Rightarrow \hat{P} \Rightarrow h$$

$$g(\vec{r}) = \hat{Q} f(\vec{r}) \quad \cdots \textcircled{11}$$

$$h(\vec{r}) = \hat{P} g(\vec{r}) \quad \cdots \textcircled{12}$$

$$f(\vec{r}) = \sum_{m=1}^n a_m(t) u_m(\vec{r}) \quad \cdots \textcircled{13}$$

$$g(\vec{r}) = \sum_{m=1}^n b_m(t) u_m(\vec{r})$$

$$h(\vec{r}) = \sum_{m=1}^n c_m(t) u_m(\vec{r})$$

$$b_l(t) = \sum_{m=1}^n Q_{lm} a_m(t) \quad \cdots \textcircled{14}$$

$$c_n(t) = \sum_{l=1}^n P_{nl} b_l(t) \quad \cdots \textcircled{15}$$

$$c_n(t) = \sum_{l=1}^n P_{nl} \sum_{m=1}^n Q_{lm} a_m(t) \quad \cdots \textcircled{16}$$

$$c_n(t) = \sum_{l=1}^n \sum_{m=1}^n P_{nl} Q_{lm} a_m(t) \quad \cdots \textcircled{17}$$

$$c_n(t) = \sum_{m=1}^n \left(\sum_{l=1}^n P_{nl} Q_{lm} \right) a_m(t) \quad \cdots \textcircled{18}$$

$$\left[\hat{P} \hat{Q} \right]_{nm} = \sum_{l=1}^n P_{nl} Q_{lm} \quad \cdots \textcircled{19}$$

演算子の行列表示(4)

積演算子の行列表現は各々の演算子の行列表現の積に等しい。

$$\left[\hat{P} \hat{Q} \right]_{nm} = \sum_{l=1}^n P_{nl} Q_{lm} \quad \cdots \textcircled{19}$$

$$Q_{lm} = \left(u_l(\vec{r}), \hat{Q} u_m(\vec{r}) \right)$$

$$P_{nl} = \left(u_n(\vec{r}), \hat{P} u_l(\vec{r}) \right)$$

$$\begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ c_3(t) \\ c_n(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & P_{1n} \\ P_{21} & P_{22} & P_{2n} \\ P_{n1} & P_{n2} & P_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{1n} \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{2n} \\ Q_{n1} & Q_{n2} & Q_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ a_3(t) \\ a_n(t) \end{bmatrix} \quad \cdots \textcircled{20}$$

量子力学の行列表示(1)

$\Psi(\vec{r}, t)$ は、力学系の状態を表す。 $\Rightarrow$ 状態ベクトル $\cdots$ ①

ケット(ket) $\Psi(\vec{r}, t) = |\Psi\rangle$

ブラ(bra) $\Psi^*(\vec{r}, t) = \langle\Psi|$

$$\Psi(\vec{r}, t) = |\Psi\rangle = \begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ c_3(t) \\ \vdots \\ c_n(t) \end{bmatrix} \cdots \textcircled{4}$$

基底ベクトルを決める $\Rightarrow$ 表示を決める $\cdots$ ②

規格化完全系 $\{u_n(\vec{r})\}$ を基底ベクトルとする。

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_{n=1}^n c_n(t) u_n(\vec{r}) \cdots \textcircled{3}$$

$$\left(\phi, \hat{Q} \phi \right) = \int \phi^* \hat{Q} \phi d\vec{r} = \langle \phi | \hat{Q} | \phi \rangle$$

特に ϕ ϕ が基底ベクトルの時

$$\langle n | \hat{Q} | m \rangle = \int u_n(\vec{r})^* \hat{Q} u_m(\vec{r}) d\vec{r} = Q_{nm} \cdots \textcircled{5}$$

量子力学の行列表示(2)

$$\hat{Q} = Q_{nm} = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{1n} \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{2n} \\ Q_{n1} & Q_{n2} & Q_{nn} \end{bmatrix} \quad \dots \textcircled{6}$$

$$\Phi(\vec{r}, t) = \sum_{n=1}^n d_n(t) u_n(\vec{r}) \quad \dots \textcircled{7}$$

$$\langle \Phi | = [d^*_1(t) \quad d^*_2(t) \quad d^*_n(t)] \quad \dots \textcircled{8}$$

$$\langle \Phi | \hat{Q} | \Psi \rangle = [d^*_1(t) \quad d^*_2(t) \quad d^*_n(t)] \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{1n} \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{2n} \\ Q_{n1} & Q_{n2} & Q_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ c_3(t) \\ c_n(t) \end{bmatrix} \quad \dots \textcircled{9}$$

量子力学の行列表示(3)

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^n \mathbf{c}_n(t) |n\rangle \quad \mathbf{c}_n(t) = \langle n | \Psi(t) \rangle \quad \cdots \textcircled{1}$$

ただし $\{|n\rangle\}$ は規格直交系である。

$$\hat{H}|n\rangle = E_n |n\rangle \quad \langle n | m \rangle = \delta_{nm} \quad \cdots \textcircled{2}$$

シュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle \quad \text{に代入する。}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_{n=1}^n \mathbf{c}_n(t) |n\rangle \right) = \hat{H} \left(\sum_{n=1}^n \mathbf{c}_n(t) |n\rangle \right) \quad \cdots \textcircled{3}$$

$$i\hbar \sum_{n=1}^n \frac{\partial \mathbf{c}_n(t)}{\partial t} |n\rangle = \sum_{n=1}^n \mathbf{c}_n(t) \hat{H} |n\rangle$$

$$i\hbar \sum_{n=1}^n \frac{\partial \mathbf{c}_n(t)}{\partial t} |n\rangle = \sum_{n=1}^n \mathbf{c}_n(t) E_n |n\rangle$$

$$i\hbar \frac{\partial \mathbf{c}_n(t)}{\partial t} = \mathbf{c}_n(t) E_n$$

$$\frac{1}{\mathbf{c}_n(t)} \frac{\partial \mathbf{c}_n(t)}{\partial t} = \frac{E_n}{i\hbar} = -i \frac{E_n}{\hbar}$$

$$\ln \mathbf{c}_n(t) = -i \frac{E_n}{\hbar} t + c$$

$$\mathbf{c}_n(t) = e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t + c} = e^c e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} = \mathbf{c}_n(0) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \quad \cdots \textcircled{4}$$

量子力学の行列表示(4)

$$c_n(t) = c_n(0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \quad \dots \textcircled{4}$$

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^n c_n(t)|n\rangle = \sum_{n=1}^n c_n(0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|n\rangle \quad \dots \textcircled{5}$$

$|\Psi(t)\rangle$ を $\{|n\rangle\}$ を基底ベクトルとすると
状態関数の行列成分は次の通りになる。

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ c_3(t) \\ c_n(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1(0)e^{-i\frac{E_1}{\hbar}t} \\ c_2(0)e^{-i\frac{E_2}{\hbar}t} \\ c_3(0)e^{-i\frac{E_3}{\hbar}t} \\ c_n(0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \end{bmatrix} \quad \dots \textcircled{6}$$

基底ベクトルを $|u_n(t)\rangle = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}|n\rangle$ とすれば
状態関数の行列成分は次の通りになる。

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{bmatrix} c_1(0) \\ c_2(0) \\ c_3(0) \\ c_n(0) \end{bmatrix} \quad \dots \textcircled{7}$$

演算子 $\hat{Q}$ のハイゼンベルグ表示は

$$\hat{Q}|u_m(t)\rangle = \hat{Q}e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t}|m\rangle \quad \hat{Q} \text{ は固有ベクトルのみに作用}$$

$$\langle u_n(t)| = e^{i\frac{E_n}{\hbar}t}\langle n|$$

$$\langle u_n(t)|\hat{Q}|u_m(t)\rangle = e^{i\frac{E_n}{\hbar}t}e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t}\langle n|\hat{Q}|m\rangle = e^{i\frac{(E_n-E_m)}{\hbar}t}\langle n|\hat{Q}|m\rangle$$

波動関数の時間変化を表示する演算子(1)

$$e^{\hat{A}} = 1 + \hat{A} + \frac{1}{2!} \hat{A}^2 + \frac{1}{3!} \hat{A}^3 + \dots + \frac{1}{k!} \hat{A}^k \dots \textcircled{8}$$

$$e^{\hat{A}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \hat{A}^k \dots \textcircled{9}$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right)^k = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \dots \textcircled{10}$$

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |n\rangle &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right)^k |n\rangle \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(-\frac{i}{\hbar} E_n t \right)^k |n\rangle \dots \textcircled{11} \end{aligned}$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |n\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n\rangle \dots \textcircled{12}$$

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \sum_{n=1}^n c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} |n\rangle \\ &= \sum_{n=1}^n c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |n\rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \sum_{n=1}^n c_n(0) |n\rangle \dots \textcircled{13} \end{aligned}$$

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\Psi(0)\rangle \dots \textcircled{14}$$

波動関数の時間変化を表示する演算子(2)

$$|\Psi(t_0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_0} |\Psi(0)\rangle \quad \dots \textcircled{15}$$

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_0} |\Psi(0)\rangle$$

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} |\Psi(t_0)\rangle \quad \dots \textcircled{16}$$

$t=t_0$ における状態ベクトル $|\Psi(t_0)\rangle = \Psi(r, t_0)$ が求まれば、その他の時刻の状態ベクトルは

$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$ を作用させることで求まる。

$$|u_m\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |m\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_m t} |m\rangle$$

$$\langle u_n(t) | = \langle n | e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

演算子Qの行列要素は

$$\langle u_n(t) | \hat{Q} | u_m(t) \rangle = \langle n | e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{Q} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} | m \rangle \quad \dots \textcircled{17}$$

$$\hat{Q}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{Q} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \quad \dots \textcircled{18}$$

演算子 $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ はシュレディンガー表示からハイゼンベルク表示への基底ベクトルの変換を表す。

$$\langle n | \hat{Q}(t) | m \rangle$$

波動関数の時間変化を表示する演算子(3)

物理量Qの期待値 $\langle Q \rangle$

$$\langle \hat{Q} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{Q} | \psi(t) \rangle \quad \cdots (19)$$

演算子Qそのものに時間変化の性質はない。全て状態ベクトルの時間的变化により決まる。

状態ベクトルは変化せず演算子の方が時間とともに変化する記述も可能である。

$$| \Psi(t) \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | \Psi(t_0) \rangle \quad \cdots (16)$$

を用いる。

$$\hat{Q}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \hat{Q} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t}$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q} \rangle &= \langle \psi(t) | \hat{Q} | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \hat{Q} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | \psi(t_0) \rangle \\ e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \hat{Q} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} &= \hat{Q}(t-t_0) \quad \text{とおくと} \quad \cdots (20) \end{aligned}$$

$$\langle \psi(t) | \hat{Q} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \hat{Q}(t-t_0) | \psi(t_0) \rangle$$

状態ベクトルは時刻の基準 $t=t_0$ にとどまり、物理量を表す演算子 $\hat{Q}(t-t_0)$ の方が時間とともに変化する。

演算子の交換関係について(1)

$$[A, B] = AB - BA \quad \text{と定義する。}$$

$$[cA, B] = cAB - BcA = c(AB - BA) = c[A, B] \quad \text{ここで } c \text{ は定数とする。}$$

$$[A + B, C] = (A + B)C - C(A + B) = AC + BC - CA - CB = AC - CA + BC - CB = [A, C] + [B, C]$$

$$[A, B + C] = A(B + C) - (B + C)A = AB + AC - BA - CA = AB - BA + AC - CA = [A, B] + [A, C]$$

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

$$[A, A] = AA - AA = 0$$

$$[A^2, B] = A^2B - BA^2 = A^2B - ABA + ABA - BA^2 = A(AB - BA) + (AB - BA)A = A[A, B] + [A, B]A$$

$$[A, B^2] = AB^2 - B^2A = AB^2 - BAB + BAB - B^2A = (AB - BA)B + B(AB - BA) = [A, B]B + B[A, B]$$

演算子の交換関係について(2)

$$\left(\begin{array}{lll} [x, p_x] = i\hbar & [y, p_y] = i\hbar & [z, p_z] = i\hbar \\ [L_y, L_z] = i\hbar L_x & [L_z, L_x] = i\hbar L_y & [L_x, L_y] = i\hbar L_z \end{array} \right) \longrightarrow \vec{L} \times \vec{L} = i\hbar \vec{L}$$

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \quad \text{とおくと} \quad [L^2, L_z] = [L_x^2, L_z] + [L_y^2, L_z] + [L_z^2, L_z]$$

$$[L_x^2, L_z] = L_x [L_x, L_z] + [L_x, L_z] L_x = L_x (-i\hbar L_y) + (-i\hbar L_y) L_x = -i\hbar L_x L_y - i\hbar L_y L_x$$

$$[L_y^2, L_z] = L_y [L_y, L_z] + [L_y, L_z] L_y = L_y (i\hbar L_x) + (i\hbar L_x) L_y = i\hbar L_y L_x + i\hbar L_x L_y$$

$$[L_z^2, L_z] = L_z [L_z, L_z] + [L_z, L_z] L_z = L_z (0) + (0) L_z = 0$$

$$[L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_z] = [L^2, L_z] = 0 \quad \text{となる。}$$

$$\text{同様に} \quad [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_x] = [L^2, L_x] = 0 \quad [L_x^2 + L_y^2 + L_z^2, L_y] = [L^2, L_y] = 0$$

一般化された角運動量(1)

交換関係から一般的な角運動量を導く。

一般的に角運動量演算子 $\vec{J}$

が、下記の交換関係を満たすと仮定する。

$$\vec{J} \times \vec{J} = i\hbar \vec{J}$$

$$[J_y, J_z] = i\hbar J_x \quad [J_z, J_x] = i\hbar J_y \quad [J_x, J_y] = i\hbar J_z$$

$$[\vec{J}^2, J_z] = 0 \quad [\vec{J}^2, J_x] = 0 \quad [\vec{J}^2, J_y] = 0$$

$$\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$$

は $\vec{J}$ の各成分と交換可能である。

したがって $\vec{J}^2$ と J_z

とが同時に確定値 λ と μ を持つ状態が存在する。

$$\vec{J}^2 \varphi = \lambda \varphi \quad \dots \textcircled{1} \quad J_z \varphi = \mu \varphi \quad \dots \textcircled{2}$$

を同時に満足する $\varphi = \varphi(\lambda, \mu)$

が存在することになる。

一般化された角運動量(2)

$$\vec{J}^2 \varphi - J_z^2 \varphi = \lambda \varphi - \mu^2 \varphi$$

$$\left(\vec{J}^2 - J_z^2 \right) \varphi = (\lambda - \mu^2) \varphi$$

$$(J_x^2 + J_y^2) \varphi(\lambda, \mu) = (\lambda - \mu^2) \varphi(\lambda, \mu)$$

$\varphi = \varphi(\lambda, \mu)$ は、 $J_x^2 + J_y^2$ の固有値 $\lambda - \mu^2$ に対する固有関数である。

また、 $J_x^2 + J_y^2$ の固有値は負にならない。

なぜなら、エルミート演算子の固有値は実数である。

$$(\varphi, (J_x^2 + J_y^2) \varphi) = \langle J_x^2 + J_y^2 \rangle = \lambda - \mu^2 \geq 0$$

$$\lambda \geq 0 \quad \text{でかつ} \quad \lambda \geq \mu^2 \quad \therefore \quad \sqrt{\lambda} \geq |\mu|$$

$J_+ = J_x + iJ_y$ $J_- = J_x - iJ_y$ と定義する。

$$[J_z, J_{\pm}]$$

$$= [J_z, J_x \pm iJ_y]$$

$$= [J_z, J_x] \pm i[J_z, J_y]$$

$$= i\hbar J_y \mp i\hbar J_x = i\hbar J_y \pm \hbar J_x = \pm \hbar (J_x \pm iJ_y)$$

$$= \pm \hbar J_{\pm}$$

一般化された角運動量(3)

$$(J_z J_{\pm} - J_{\pm} J_z) \varphi(\lambda, \mu) = \pm \hbar J_{\pm} \varphi(\lambda, \mu)$$

$$\begin{aligned} J_z J_{\pm} \varphi(\lambda, \mu) &= J_{\pm} J_z \varphi(\lambda, \mu) \pm \hbar J_{\pm} \varphi(\lambda, \mu) \\ &= J_{\pm} \mu \varphi(\lambda, \mu) \pm \hbar J_{\pm} \varphi(\lambda, \mu) \end{aligned}$$

$$J_z J_{\pm} \varphi(\lambda, \mu) = (\mu \pm \hbar) J_{\pm} \varphi(\lambda, \mu)$$

$$J_{\pm} \varphi(\lambda, \mu) \text{ は } J_z \text{ の固有値 } \mu \pm \hbar$$

に対する固有関数である。

$$J_{\pm} \varphi(\lambda, \mu) = C \varphi(\lambda, \mu \pm \hbar)$$

$\vec{J}^2$ と J_z の固有値を λ, μ とすれば $\lambda, \mu \pm \hbar$

も固有値であることを示している。

したがって

$\lambda, \mu - 2\hbar : \lambda, \mu - \hbar : \lambda, \mu : \lambda, \mu + \hbar : \lambda, \mu + 2\hbar$
が固有値の組となる。

$|\mu| \leq \sqrt{\lambda}$ の関係より μ には最小値と最大値がある。

$\mu_0 \rightarrow$ 最小
 $\mu_1 \rightarrow$ 最大
とすれば

$J_+ J_-$ が固有値を増減させる昇降演算子の意味から

$$J_- \varphi(\lambda, \mu_0) = 0 \quad J_+ \varphi(\lambda, \mu_1) = 0$$

一般化された角運動量(4)

$$J_{\mp}J_{\pm} = (J_x \mp iJ_y)(J_x \pm iJ_y) = J_x^2 \pm iJ_xJ_y \mp iJ_yJ_x + J_y^2$$

$$= J_x^2 + J_y^2 \pm i(J_xJ_y - J_yJ_x) = J_x^2 + J_y^2 \pm i\hbar J_z$$

$$J_{\mp}J_{\pm} = J_x^2 + J_y^2 \mp \hbar J_z \quad \text{で演算すると}$$

$$J_+J_- \varphi(\lambda, \mu_0) = (J_x^2 + J_y^2 + \hbar J_z) \varphi(\lambda, \mu_0)$$

$$= (\lambda - \mu_0^2 + \mu_0 \hbar) \varphi(\lambda, \mu_0) = 0$$

$$J_-J_+ \varphi(\lambda, \mu_1) = (J_x^2 + J_y^2 - \hbar J_z) \varphi(\lambda, \mu_1)$$

$$= (\lambda - \mu_1^2 - \mu_1 \hbar) \varphi(\lambda, \mu_1) = 0$$

$$\varphi(\lambda, \mu_0) \neq 0 \quad \varphi(\lambda, \mu_1) \neq 0 \quad \text{なので}$$

$$\lambda - \mu_0^2 + \mu_0 \hbar = 0$$

$$\lambda - \mu_1^2 - \mu_1 \hbar = 0 \quad \text{となり}$$

$$\mu_1^2 - \mu_0^2 + \mu_0 \hbar + \mu_1 \hbar = 0$$

$$(\mu_1 + \mu_0)(\mu_1 - \mu_0) + \hbar(\mu_1 + \mu_0) = 0$$

$$(\mu_1 + \mu_0)(\mu_1 - \mu_0 + \hbar) = 0$$

$$\mu_1 - \mu_0 \geq 0 \quad \text{なので} \quad \mu_1 + \mu_0 = 0 \quad \mu_0 = -\mu_1$$

$$\mu_1 = \mu + j\hbar$$

$$\mu_0 = \mu - j\hbar \quad \mu_1 - \mu_0 = 2j\hbar \quad \text{とすると}$$

$$\mu_1 - \mu_0 = 2j\hbar \quad \mu_1 = j\hbar$$

$$\mu_1 + \mu_0 = 0 \quad 2\mu_1 = 2j\hbar \quad \mu_0 = -j\hbar$$

$$\lambda - \mu_0^2 + \mu_0 \hbar = 0 \quad \lambda - (-j\hbar)^2 + (-j\hbar)\hbar = 0$$

$$\lambda - j^2 \hbar^2 - j\hbar^2 = 0$$

$$\lambda = j^2 \hbar^2 + j\hbar^2 = (j^2 + j)\hbar^2 = j(j+1)\hbar^2$$

一般化された角運動量(5)

$\vec{J} \times \vec{J} = i\hbar \vec{J}$ の交換関係を満足する $\vec{J}^2$ の固有値は $\lambda = j(j+1)\hbar^2$ であり

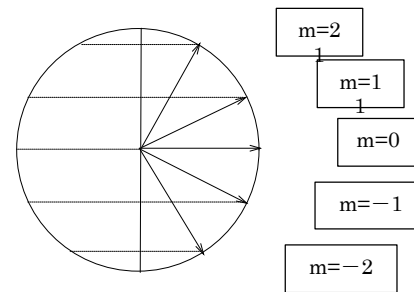
その固有状態は J_z の固有値 $\mu = m\hbar = j\hbar, (j-1)\hbar, \dots, -j\hbar$ に対する $2j+1$ の縮重を持つ。

j は0または正の整数 あるいは半奇数 $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}$

角運動量 $\vec{J}^2$ の大きさが $\sqrt{\lambda} = \sqrt{j(j+1)\hbar^2} = \sqrt{j(j+1)}\hbar$

$j = 2$ とすれば $\sqrt{j(j+1)}\hbar = \sqrt{2(2+1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar$

ベクトルの長さ $\sqrt{6}$ 縦軸は J_z の m



一般化された角運動量(6)

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{J}^2 \varphi(j, m) = j(j+1)\varphi(j, m) \\ J_z \varphi(j, m) = m\hbar \varphi(j, m) \\ J_{\pm} \varphi(j, m) = C \varphi(j, m \pm 1) \end{array} \right\}$$

$$(J_{\pm} \varphi, J_{\pm} \varphi)$$

$$((J_x \pm iJ_y) \varphi, (J_x \pm iJ_y) \varphi) = (C \varphi(j, m \pm 1), C \varphi(j, m \pm 1))$$

$$= C_{\pm}^* C_{\pm} (\varphi(j, m \pm 1), \varphi(j, m \pm 1)) = C_{\pm}^* C_{\pm} = |C_{\pm}|^2$$

$$= (J_x \varphi, J_x \varphi) + (J_x \varphi, \pm iJ_y \varphi) + (\pm iJ_y \varphi, J_x \varphi) + (\pm iJ_y \varphi, \pm iJ_y \varphi)$$

$$= (\varphi, J_x^2 \varphi) \pm i(\varphi, J_x J_y \varphi) \mp i(\varphi, J_y J_x \varphi) \mp i \pm i(\varphi, J_y^2 \varphi)$$

$$= (\varphi, J_x^2 \varphi) \pm i(\varphi, J_x J_y \varphi) \mp i(\varphi, J_y J_x \varphi) + (\varphi, J_y^2 \varphi)$$

$$= (\varphi, (J_x^2 + J_y^2 \pm i\{J_x J_y - J_y J_x\}) \varphi)$$

$$= (\varphi, (J_x^2 + J_y^2 \pm i\hbar J_z) \varphi)$$

$$= (\varphi, (J_x^2 + J_y^2 \mp \hbar J_z) \varphi)$$

$$= \left(\varphi, \left\{ \vec{J}^2 - J_z^2 \mp \hbar J_z \right\} \varphi \right)$$

$$= (\varphi, \{j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 \mp m\hbar^2\} \varphi)$$

$$= \{j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 \mp m\hbar^2\}$$

$$= \{j(j+1) - m^2 \mp m\} \hbar^2$$

$$= \{j(j+1) - m(m \pm 1)\} \hbar^2$$

$$|C_{\pm}|^2 = \{j(j+1) - m(m \pm 1)\} \hbar^2$$

一般化された角運動量(7)

$$\begin{aligned}|C_{\pm}| &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} \\&= \hbar \sqrt{j^2 + j - m^2 \mp m} \\&= \hbar \sqrt{(j-m)(j+m) + (j \mp m)} \\&= \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m) + (j \mp m)} \\&= \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}J_{\pm} \varphi(j, m) &= (J_x \pm iJ_y) \varphi(j, m) \\&= \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \varphi(j, m \pm 1)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}J_{+} \varphi(j, m) &= (J_x + iJ_y) \varphi(j, m) \\&= \hbar \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \varphi(j, m+1)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}J_{-} \varphi(j, m) &= (J_x - iJ_y) \varphi(j, m) \\&= \hbar \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \varphi(j, m-1)\end{aligned}$$

一般化された角運動量(8)

$$(J_x + iJ_y)\varphi(j, m) + (J_x - iJ_y)\varphi(j, m) = J_+\varphi(j, m) + J_-\varphi(j, m)$$

$$2J_x\varphi(j, m) = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\varphi(j, m+1) + \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\varphi(j, m-1)$$

$$J_x\varphi(j, m) = \frac{\hbar}{2} \left\{ \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\varphi(j, m+1) + \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\varphi(j, m-1) \right\}$$

$$(J_x + iJ_y)\varphi(j, m) - (J_x - iJ_y)\varphi(j, m) = J_+\varphi(j, m) - J_-\varphi(j, m)$$

$$2iJ_y\varphi(j, m) = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\varphi(j, m+1) - \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\varphi(j, m-1)$$

$$J_y\varphi(j, m) = \frac{\hbar}{2i} \left\{ \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\varphi(j, m+1) - \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\varphi(j, m-1) \right\}$$

$$J_z\varphi(j, m) = m\hbar\varphi(j, m)$$

スピン角運動量の行列表現(1)

ブラケットル表示を用いると

$$J^2|J, M\rangle = J(J+1)\hbar^2|J, M\rangle \quad J_z|J, M\rangle = M\hbar|J, M\rangle$$

$M = -J, -(J-1), \dots, 0, 1, \dots, J-1, J$ の 2J+1個の縮重あり

$$J \text{ のとき } J_{\pm}|J, M\rangle = \hbar\sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)}|J, M \pm 1\rangle$$

$$\begin{aligned} \langle J \ M'|J_{\pm}|J, M\rangle &= \hbar\sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)}\langle J \ M'|J, M \pm 1\rangle \\ &= \hbar\sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)}\delta_{M', M \pm 1} \end{aligned}$$

$$\langle J \ M'|J^2|J, M\rangle = J(J+1)\hbar^2\delta_{M', M}$$

$$\langle J \ M'|J_z|J, M\rangle = M\hbar\delta_{M', M}$$

スピン角運動量の行列表現(2)

$J = \frac{1}{2}$ について計算する。2行2列の行列表現となる。 $\langle J \ M' | J_{\pm} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} \delta_{M', \ M \pm 1}$

(ア) $M' = \frac{1}{2} \quad M = \frac{1}{2}$ 1行1列

$$\langle J \ M' | J_{\pm} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{\left(\frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} + 1\right)} \delta_{\frac{1}{2}, \ \frac{1}{2} \pm 1}$$

$$\langle J \ M' | J_{+} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 1\right)} \delta_{\frac{1}{2}, \ \frac{1}{2} + 1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_{-} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)} \delta_{\frac{1}{2}, \ \frac{1}{2} - 1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_z | J, \ M \rangle = \frac{1}{2} \hbar \delta_{\frac{1}{2}, \ \frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \hbar$$

$$\langle J \ M' | J^2 | J, \ M \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1\right) \hbar^2 \delta_{\frac{1}{2}, \ \frac{1}{2}} = \frac{3}{4} \hbar^2$$

(イ) $M' = \frac{1}{2} \quad M = -\frac{1}{2}$ 1行2列

$$\langle J \ M' | J_{\pm} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{\left(\frac{1}{2} \mp \left(-\frac{1}{2}\right)\right) \left(\frac{1}{2} \pm \left(-\frac{1}{2}\right) + 1\right)} \delta_{\frac{1}{2}, \ \left(-\frac{1}{2}\right) \pm 1}$$

$$\langle J \ M' | J_{+} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{\left(\frac{1}{2} - \left(-\frac{1}{2}\right)\right) \left(\frac{1}{2} + \left(-\frac{1}{2}\right) + 1\right)} \delta_{\frac{1}{2}, \ \left(-\frac{1}{2}\right) + 1} = \hbar$$

$$\langle J \ M' | J_{-} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \left(-\frac{1}{2}\right)\right) \left(\frac{1}{2} - \left(-\frac{1}{2}\right) + 1\right)} \delta_{\frac{1}{2}, \ \left(-\frac{1}{2}\right) - 1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_z | J, \ M \rangle = -\frac{1}{2} \hbar \delta_{\frac{1}{2}, \ -\frac{1}{2}} = 0$$

$$\langle J \ M' | J^2 | J, \ M \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1\right) \hbar^2 \delta_{\frac{1}{2}, \ -\frac{1}{2}} = 0$$

スピン角運動量の行列表現(3)

$J = \frac{1}{2}$ について計算する。

$$\langle J \quad M' | J_{\pm} | J, \quad M \rangle = \hbar \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} \delta_{M', \quad M \pm 1}$$

(ウ) $M' = -\frac{1}{2}$ $M = \frac{1}{2}$ 2行1列

$$\langle J \quad M' | J_{\pm} | J, \quad M \rangle = \hbar \sqrt{\left(\frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} + 1\right)} \delta_{-\frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2} \pm 1}$$

$$\langle J \quad M' | J_{+} | J, \quad M \rangle = \hbar \sqrt{\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + 1\right)} \delta_{-\frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2} + 1} = 0$$

$$\langle J \quad M' | J_{-} | J, \quad M \rangle = \hbar \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)} \delta_{-\frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2} - 1} = \hbar$$

$$\langle J \quad M' | J_z | J, \quad M \rangle = \frac{1}{2} \hbar \delta_{-\frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2}} = 0$$

$$\langle J \quad M' | J^2 | J, \quad M \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1\right) \hbar^2 \delta_{-\frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2}} = 0$$

(エ) $M' = -\frac{1}{2}$ $M = -\frac{1}{2}$ 2行2列

$$\langle J \quad M' | J_{\pm} | J, \quad M \rangle = \hbar \sqrt{\left(\frac{1}{2} \mp \left(-\frac{1}{2}\right)\right) \left(\frac{1}{2} \pm \left(-\frac{1}{2}\right) + 1\right)} \delta_{-\frac{1}{2}, \quad \left(-\frac{1}{2}\right) \pm 1}$$

$$\langle J \quad M' | J_{+} | J, \quad M \rangle = \hbar \sqrt{\left(\frac{1}{2} - \left(-\frac{1}{2}\right)\right) \left(\frac{1}{2} + \left(-\frac{1}{2}\right) + 1\right)} \delta_{-\frac{1}{2}, \quad \left(-\frac{1}{2}\right) + 1} = 0$$

$$\langle J \quad M' | J_{-} | J, \quad M \rangle = \hbar \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \left(-\frac{1}{2}\right)\right) \left(\frac{1}{2} - \left(-\frac{1}{2}\right) + 1\right)} \delta_{-\frac{1}{2}, \quad \left(-\frac{1}{2}\right) - 1} = 0$$

$$\langle J \quad M' | J_z | J, \quad M \rangle = -\frac{1}{2} \hbar \delta_{-\frac{1}{2}, \quad -\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} \hbar$$

$$\langle J \quad M' | J^2 | J, \quad M \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1\right) \hbar^2 \delta_{-\frac{1}{2}, \quad -\frac{1}{2}} = \frac{3}{4} \hbar^2$$

スピン角運動量の行列表現(4)

$$J_+ = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad J_- = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad J_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$J_+ = J_x + iJ_y \quad J_- = J_x - iJ_y \quad \longrightarrow \quad J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-) \quad J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-)$$

$$J = \frac{1}{2} \quad \text{のとき}$$

$$J_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad J_y = \frac{\hbar}{2i} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad J_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad J^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

粒子のスピンは、軌道角運動量とは異なりその粒子に固有の内部自由度に関わる一般化された角運動量の一種である。スピン角運動量は、粒子の位置 $\vec{r}$ や運動量 $\vec{p}$ のような力学変数とは無関係の独自の自由度に基づく。

スピン角運動量の行列表現(5)

2行2列のパウリ行列を導入すると $\rightarrow \left(\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \right)$

$S = \frac{1}{2}$ のとき

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \sigma_y \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z \quad S^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_x^2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \sigma_y^2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \sigma_z^2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \sigma^2 = 3 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \sigma_x \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{2} \sigma_y \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{2} \sigma_z \right)^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{\hbar^2}{4} \sigma^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

★スピン演算子は、何らかの変数の微分演算子という形では書けない。
行列表示で示すしか方法はない。(Pauli)

スピン角運動量の行列表現(6)

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad \alpha = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \beta = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \text{と} \text{お} \text{い} \text{て} \text{ス} \text{ピ} \text{ン} \text{演} \text{算} \text{子} \text{に} \text{作} \text{用} \text{さ} \text{せ} \text{る} \text{と}$$

$$S_z \alpha = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \alpha \quad S_z \beta = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \end{bmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = -\frac{\hbar}{2} \beta$$

$\alpha = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ は固有値が $\frac{\hbar}{2}$ の固有関数で $\beta = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ は固有値が $-\frac{\hbar}{2}$ の固有関数であることを示している。

一般にスピン $\frac{1}{2}$ の粒子の波動関数の φ 中には、上向きの成分と、下向きの成分が含まれる。

$$\varphi = \varphi_+(\vec{r}) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \varphi_-(\vec{r}) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varphi_+(\vec{r}) \\ \varphi_-(\vec{r}) \end{bmatrix}$$

角運動量の行列表現(1)

$J=1$ について計算する。3行3列の行列表現となる。
 $\langle J \ M' | J_{\pm} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} \delta_{M', \ M \pm 1}$
 $\langle J \ M' | J_z | J, \ M \rangle = M \hbar \delta_{M', \ M} \quad \langle J \ M' | J^2 | J, \ M \rangle = J(J+1) \hbar^2 \delta_{M', \ M}$

(ア) $M'=1 \quad M=1$ 1行1列

(イ) $M'=1 \quad M=0$ 1行2列

$$\langle J \ M' | J_{\pm} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 \mp 1)(1 \pm 1 + 1)} \delta_{1, \ 1 \pm 1}$$

$$\langle J \ M' | J_{\pm} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 \mp (0))(1 \pm (0) + 1)} \delta_{1, \ (0) \pm 1}$$

$$\langle J \ M' | J_{+} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1-1)(1+1+1)} \delta_{1, \ 1+1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_{+} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1-(0))(1+(0)+1)} \delta_{1, \ (0)+1} = \hbar \sqrt{2}$$

$$\langle J \ M' | J_{-} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1+1)(1-1+1)} \delta_{1, \ 1-1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_{-} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1+(0))(1-(0)+1)} \delta_{1, \ (0)-1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_z | J, \ M \rangle = \hbar \delta_{1, \ 1} = \hbar$$

$$\langle J \ M' | J_z | J, \ M \rangle = 0 \cdot \hbar \delta_{1, \ 0} = 0$$

$$\langle J \ M' | J^2 | J, \ M \rangle = 1(1+1) \hbar^2 \delta_{1, \ 1} = 2 \hbar^2$$

$$\langle J \ M' | J^2 | J, \ M \rangle = 1(1+1) \hbar^2 \delta_{1, \ 0} = 0$$

角運動量の行列表現(2)

$J=1$ について計算する。3行3列の行列表現となる。
 $\langle J \ M' | J_{\pm} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} \delta_{M', \ M \pm 1}$
 $\langle J \ M' | J_z | J, \ M \rangle = M \hbar \delta_{M', \ M} \quad \langle J \ M' | J^2 | J, \ M \rangle = J(J+1) \hbar^2 \delta_{M', \ M}$

(ウ) $M'=1 \quad M=-1$ 1行3列

(エ) $M'=0 \quad M=1$ 2行1列

$$\langle J \ M' | J_{\pm} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 \mp (-1))(1 \pm (-1) + 1)} \delta_{1, \ (-1) \pm 1}$$

$$\langle J \ M' | J_{\pm} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 \mp (1))(1 \pm (1) + 1)} \delta_{0, \ (1) \pm 1}$$

$$\langle J \ M' | J_{+} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 - (-1))(1 + (-1) + 1)} \delta_{1, \ (-1)+1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_{+} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 - (1))(1 + (1) + 1)} \delta_{0, \ (1)+1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_{-} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 + (-1))(1 - (-1) + 1)} \delta_{1, \ (-1)-1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_{-} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 + (1))(1 - (1) + 1)} \delta_{0, \ (1)-1} = \hbar \sqrt{2}$$

$$\langle J \ M' | J_z | J, \ M \rangle = -\hbar \delta_{1, \ -1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_z | J, \ M \rangle = 1 \cdot \hbar \delta_{0, \ 1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J^2 | J, \ M \rangle = 1(1+1) \hbar^2 \delta_{1, \ -1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J^2 | J, \ M \rangle = 1(1+1) \hbar^2 \delta_{0, \ 1} = 0$$

角運動量の行列表現(3)

$J=1$ について計算する。3行3列の行列表現となる。
 $\langle J \ M' | J_{\pm} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} \delta_{M', \ M \pm 1}$
 $\langle J \ M' | J_z | J, \ M \rangle = M \hbar \delta_{M', \ M} \quad \langle J \ M' | J^2 | J, \ M \rangle = J(J+1) \hbar^2 \delta_{M', \ M}$

(才) $M'=0 \quad M=0$ 2行2列

(力) $M'=0 \quad M=-1$ 2行3列

$$\langle J \ M' | J_{\pm} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 \mp (0))(1 \pm (0) + 1)} \delta_{0, \ 0 \pm 1} \quad \langle J \ M' | J_{\pm} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 \mp (-1))(1 \pm (-1) + 1)} \delta_{0, \ (-1) \pm 1}$$

$$\langle J \ M' | J_{+} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 - (0))(1 + (0) + 1)} \delta_{0, \ 0+1} = 0 \quad \langle J \ M' | J_{+} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 - (-1))(1 + (-1) + 1)} \delta_{0, \ (-1)+1} = \hbar \sqrt{2}$$

$$\langle J \ M' | J_{-} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 + (0))(1 - (0) + 1)} \delta_{1, \ 0-1} = 0 \quad \langle J \ M' | J_{-} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 + (-1))(1 - (-1) + 1)} \delta_{0, \ (-1)-1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_z | J, \ M \rangle = 0 \cdot \hbar \delta_{0, \ 0} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_z | J, \ M \rangle = -1 \cdot \hbar \delta_{0, \ -1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J^2 | J, \ M \rangle = 1(1+1) \hbar^2 \delta_{0, \ 0} = 2 \hbar^2$$

$$\langle J \ M' | J^2 | J, \ M \rangle = 1(1+1) \hbar^2 \delta_{0, \ -1} = 0$$

角運動量の行列表現(4)

$J=1$ について計算する。3行3列の行列表現となる。
 $\langle J \ M' | J_{\pm} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} \delta_{M', \ M \pm 1}$
 $\langle J \ M' | J_z | J, \ M \rangle = M \hbar \delta_{M', \ M} \quad \langle J \ M' | J^2 | J, \ M \rangle = J(J+1) \hbar^2 \delta_{M', \ M}$

(キ) $M' = -1 \quad M = 1$ 3行1列

(ク) $M' = -1 \quad M = 0$ 3行2列

$$\langle J \ M' | J_{\pm} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 \mp (1))(1 \pm (1) + 1)} \delta_{-1, \ 1 \pm 1}$$

$$\langle J \ M' | J_{\pm} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 \mp (0))(1 \pm (0) + 1)} \delta_{-1, \ (0) \pm 1}$$

$$\langle J \ M' | J_{+} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 - (1))(1 + (1) + 1)} \delta_{-1, \ 1+1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_{+} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 - (0))(1 + (0) + 1)} \delta_{-1, \ (0)+1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_{-} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 + (1))(1 - (1) + 1)} \delta_{-1, \ 1-1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_{-} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 + (0))(1 - (0) + 1)} \delta_{-1, \ (0)-1} = \hbar \sqrt{2}$$

$$\langle J \ M' | J_z | J, \ M \rangle = 1 \cdot \hbar \delta_{-1, \ 1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_z | J, \ M \rangle = 0 \cdot \hbar \delta_{-1, \ 0} = 0$$

$$\langle J \ M' | J^2 | J, \ M \rangle = 1(1+1) \hbar^2 \delta_{-1, \ 1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J^2 | J, \ M \rangle = 1(1+1) \hbar^2 \delta_{-1, \ 0} = 0$$

角運動量の行列表現(5)

$J=1$ について計算する。3行3列の行列表現となる。
 $\langle J \ M' | J_{\pm} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} \delta_{M', \ M \pm 1}$
 $\langle J \ M' | J_z | J, \ M \rangle = M \hbar \delta_{M', \ M} \quad \langle J \ M' | J^2 | J, \ M \rangle = J(J+1) \hbar^2 \delta_{M', \ M}$

(ケ) $M' = -1 \quad M = -1$ 3行3列

$$\langle J \ M' | J_{\pm} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 \mp (-1))(1 \pm (-1) + 1)} \delta_{-1, \ (-1) \pm 1}$$

$$\langle J \ M' | J_{+} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 - (-1))(1 + (-1) + 1)} \delta_{-1, \ (-1) + 1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_{-} | J, \ M \rangle = \hbar \sqrt{(1 + (-1))(1 - (-1) + 1)} \delta_{-1, \ (-1) - 1} = 0$$

$$\langle J \ M' | J_z | J, \ M \rangle = -1 \cdot \hbar \delta_{-1, \ -1} = -\hbar$$

$$\langle J \ M' | J^2 | J, \ M \rangle = 1(1+1) \hbar^2 \delta_{-1, \ -1} = 2\hbar^2$$

角運動量の行列表現(6)

$$J_+ = \hbar \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad J_- = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{bmatrix} \quad J_z = \hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$J_+ = J_x + iJ_y \quad J_- = J_x - iJ_y \quad \longrightarrow \quad J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-) \quad J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-)$$

$J = 1$ のとき

$$J_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad J_y = \frac{\hbar}{2i} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}$$

$$J_z = \hbar \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad J^2 = 2\hbar^2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

ディラック方程式(1928年)

- ディラックが、定式化した特殊相対論に従う相対論的量子力学方程式
- γ^μ など4行4列の行列を用いて方程式は記述される。
- ψ の2乗が粒子の存在する確率密度を意味することはシュレディンガー方程式と同じだが、 ψ は4成分で表される。

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi = 0$$

プランク定数 $h = 6.625 \times 10^{-34} [\text{J} \cdot \text{s}]$ $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

現代物理の黎明期（ソルベール会議にて）



第5回ソルベール会議 1927年10月 量子力学について激論がなされたとのこと。前列中央 アインシュタイン

補遺(1)

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\Delta = \nabla^2$$

$$\begin{aligned} &= \left(\vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(\vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{aligned}$$

$$\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{B}(\vec{C} \cdot \vec{A}) - \vec{C}(\vec{A} \cdot \vec{B}) \quad \cdots \textcircled{1}$$

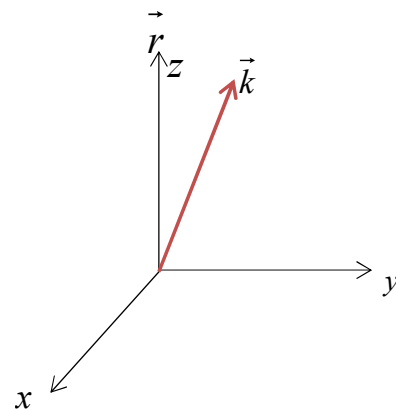
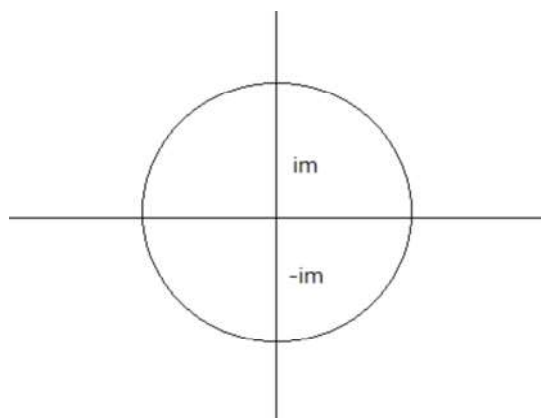
$$\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{C} \cdot \vec{A})\vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B})\vec{C} \quad \cdots \textcircled{2}$$

$$\begin{aligned} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) &= \nabla \cdot (\nabla \cdot \mathbf{A}) - \mathbf{A}(\nabla \cdot \nabla) \\ &= \nabla \cdot (\nabla \cdot \mathbf{A}) - (\nabla \cdot \nabla)\mathbf{A} \\ &= \nabla \cdot (\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} \\ &= \nabla \cdot (\nabla \cdot \mathbf{A}) - \Delta \mathbf{A} \quad \cdots \textcircled{3} \end{aligned}$$

留数定理

$$\oint_C f(z)dz = \oint_{C_1} f(z)dz + \oint_{C_2} f(z)dz$$

$$\oint_C f(z)dz = 2\pi i b_1 = 2\pi i \operatorname{Re} s(z_0)$$



基底ベクトルの変換

N個の基底ベクトル

$$\mathbf{e}_1 \quad \mathbf{e}_2 \quad \mathbf{e}_3 \quad \cdots \quad \mathbf{e}_N$$

正規直交系であるので

$$(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j) = \delta_{ij}$$

$$\mathbf{A} = A_1 \mathbf{e}_1 + A_2 \mathbf{e}_2 + A_3 \mathbf{e}_3$$