量子力学

解析力学

古典力学: Newtonの運動方程式

$$\mathbf{F} = m\frac{d^2}{dt^2}\mathbf{r}$$

・ガリレイの相対性原理
互いに慣性運動 (等速運動) している系からみた運動は同じ
＝＞ 座標変換 $\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{v}t$ により運動方程式は不変

・デカルト座標以外では表式が変わる場合がある

・力の概念がはっきりしない
＝＞ エネルギーの方が基本的な物理概念

・場の方程式ではない (粒子の方程式)

問題: 異なる慣性系から測定した光速は不変だが、ガリレイ変換では変わる
Maxwellの方程式はガリレイ不変ではない

アインシュタインの相対性原理: すべての慣性系から光速は不変で c である
異なる慣性系の時間は同じではない

特殊相対論: Lorentz変換に対して不変 (**Lorentz不変**) な運動方程式
結果: 運動する物質の質量は速度に依存する
質量はそれ自身が $E = mc^2$ のエネルギーをもつ

解析力学: ラグランジ方程式

一般化座標 $\mathbf{r} = \mathbf{r}(q_1, q_2, \cdots q_n, t)$

ラグランジアン
(Lagrangian) $L = T - V$

T: 運動エネルギー　V:ポテンシャルエネルギー

一般化(正準)運動量 $p_r = \dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}_r}$ **p_rを "q_r に共役な運動量" と呼ぶ**

オイラー・ラグランジの方程式 $\dfrac{d}{dt}\dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} - \dfrac{\partial L}{\partial q_r} = 0$

デカルト座標の $L = \frac{1}{2} m \left(\frac{dr}{dt}\right)^2 - V(r)$ で確かめる

$$q_r = x_r, \dot{q}_r = \frac{dx_r}{dt} = v_r \; (r = x, y, z)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} = \frac{\partial L}{\partial v_r} = m\frac{dx_r}{dt}, \frac{\partial L}{\partial q_r} = \frac{\partial L}{\partial x_r} = \frac{\partial V}{\partial x_r}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} - \frac{\partial L}{\partial q_r} = \boldsymbol{m\frac{d^2 x_r}{dt^2} - \frac{\partial V}{\partial x_r} = 0}$$

解析力学: ハミルトン方程式

ハミルトニアン $H(q,p,t) = \sum_r p_r \dot{q}_r - L(q,p,t)$

デカルト座標 $H(r,p,t) = \sum_r \frac{1}{2m_i} p_i{}^2 + V(r,p)$

ハミルトンの運動方程式 $\frac{\partial q_r}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial p_r} \qquad \frac{\partial p_r}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial q_r}$

デカルト座標

$$H = \frac{1}{2m} p_x{}^2 + V(x) \qquad \frac{\partial x}{\partial t} = \frac{p_x}{m} \qquad \frac{\partial p_r}{\partial t} = -\frac{\partial V(x)}{\partial x}$$

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

Newtonの運動方程式

ポアソン括弧

ポアソン括弧

$$\{A,B\}_{qp}=\frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial B}{\partial p}-\frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial q}$$

$$\{A,B\}_{qp}=-\{B,A\}_{qp}$$

$$\{q,p\}_{qp}=\frac{\partial q}{\partial q}\frac{\partial p}{\partial p}-\frac{\partial q}{\partial p}\frac{\partial p}{\partial q}=1$$

ハミルトンの運動方程式

$$\frac{\partial q_r}{\partial t}=\frac{\partial H}{\partial p_r} \qquad \frac{\partial p_r}{\partial t}=-\frac{\partial H}{\partial q_r}$$

$$\frac{\partial q_r}{\partial t}=\{q_r,H\}_{q_r p_r}=\frac{\partial q_r}{\partial q_r}\frac{\partial H}{\partial p_r}-\frac{\partial q_r}{\partial p_r}\frac{\partial H}{\partial q_r}=\frac{\partial H}{\partial p_r}$$

$$\frac{\partial p_r}{\partial t}=\{p_r,H\}_{q_r p_r}=\frac{\partial p_r}{\partial q_r}\frac{\partial H}{\partial p_r}-\frac{\partial p_r}{\partial p_r}\frac{\partial H}{\partial q_r}=-\frac{\partial H}{\partial q_r}$$

$$\dot{q}_r=\{q_r,H\}_{q_r p_r} \qquad \dot{p}_r=\{p_r,H\}_{q_r p_r}$$

量子力学

古典力学から量子力学へ

(第一) 量子化: 共役な物理量 $\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{P_Q}$ の交換関係

$$\boldsymbol{QP_Q - P_QQ = i\hbar}$$

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

$$\hat{x} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}, \hat{p}_x = p_x$$

どちらも交換関係を満たす

$$\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar$$

↓

Heisenbergの不確定性原理

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \sim h$$

Schrödinger方程式

古典的なハミルトニアン $H(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{p}_i, t) = \sum_r \frac{1}{2m_i} {p_i}^2 + V(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{p}_i)$

交換関係 $\hat{x} = x, \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

ハミルトニアン中の物理変数 (x, pなど) を演算子 (Q数) とみなし、
交換関係を満たすように置き換える

$$H = \sum \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla_i)^2 + V(\mathbf{r})$$

Schrödinger方程式

$$H\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

- 多変数(粒子数×6)の偏微分方程式
- 解析的には解けない

量子理論の基本と定式化のバリエーション

古典論と量子論の違い:

プランク定数 h = 6.626×10^{-34} Js を無視できるか、できないか

共役な物理量 q, p_q の交換関係 $[q, p_q] = qp_q - p_q q = ih/2\pi$

(古典力学、直交座標系では、$p_x = dx/dt$。一般的な導出については解析力学を参照)

=> Heisenbergの不確定性関係が導出される

定式化: どの定式化を使っても良い。問題によって解の容易さに違いがある

1. Heisenbergの行列力学: 行列方程式 (参考: 朝永振一郎 量子力学I)
   固有値 (固有エネルギー)、固有状態 (線形代数的ベクトル) が得られる。

2. 波動力学 (Schrödinger方程式): 微分方程式
   古典的なHamiltonianに、物理量の交換関係を導入 (第一量子化)。
   固有値 (固有エネルギー)、固有状態 (関数空間のベクトル、場) が得られる。

3. 第二量子化 (場の量子論): 非可換代数方程式
   場を量子論的な交換関係を満たすように量子化
   固有値 (固有エネルギー)、固有状態 (抽象的な状態ベクトル $\prod_q \hat{a}_q^\dagger |0\rangle$:
   真空 $|0\rangle$ に生成演算子 $\hat{a}_q^\dagger$ を作用) が得られる。

4. 密度汎関数理論: Hohenberg-Kohnの定理
   数学的定理: すべての物理量を電子密度 $\rho(r)$ の汎関数として扱える
   一般にSchrödinger方程式類似の一電子微分方程式として扱う (Kohn-Sham方程式)