(復習)

波動関数 $\psi(\mathbb{r}, t)$

→ 演算子の期待値

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d\mathbb{r}\ \psi^*(\mathbb{r}, t)\ \hat{A}\ \psi(\mathbb{r}, t)$$

フーリエ逆変換 $\tilde{\psi}(\mathbb{p}, t) = \dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\mathbb{r}\ \psi(\mathbb{r})\ e^{-i\mathbb{p}\cdot\mathbb{r}/\hbar}$

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d\hat{\mathbb{p}}\ \tilde{\psi}^*(\mathbb{p}, t)\ \hat{A}\ \tilde{\psi}(\mathbb{p}, t)$$

量子力学

- 演算子 $\hat{A}$
- 波動関数 $\psi(\mathbb{r}, t)$ 又は $\tilde{\psi}(\mathbb{p}, t)$

$$\hat{A}\ \Phi_n(\mathbb{r}) = A_n\ \Phi_n(\mathbb{r})$$

固有関数 eigen-function

固有値 eigen-value

特にハミルトニアン演算子 $\hat{H}$ の固有値と固有関数

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

$$[(AB)^\dagger]_{ij} = [(AB)_{ji}]^* = \sum_k A_{jk}^* B_{ki}^* = \sum_k (B^\dagger)_{ik}(A^\dagger)_{kj} = (B^\dagger A^\dagger)_{ij}$$

2.4. 演算子のエルミート共役とオブザーバブル

$$A_{12} \equiv \int d\mathbf{r}\ \psi_1^*(\mathbf{r},t)\hat{A}\psi_2(\mathbf{r},t) = \int d\mathbf{p}\ \tilde{\psi}_1^*(\mathbf{p},t)\hat{A}\tilde{\psi}_2(\mathbf{p},t)$$

を考える。 $\longrightarrow$ $\hat{A}$ の「行列要素」

すなわち 演算子 $\longleftrightarrow$ 行列

エルミート共役 $\hat{A}^\dagger$

$$(\hat{A}^\dagger)_{ij} \equiv A_{ji}^*$$

$$(A^\dagger)_{12} = \left(\int d\mathbf{r}\ \psi_2^*(\mathbf{r},t)\hat{A}\psi_1(\mathbf{r},t)\right)^*$$

エルミート演算子 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$

このとき $\langle \hat{A} \rangle_{11} = \int d\mathbf{r}\ \psi_1^*(\mathbf{r},t)\hat{A}\psi_1(\mathbf{r},t)$

$$\langle \hat{A}^\dagger \rangle_{11} = \left(\int d\mathbf{r}\ \psi_1^*(\mathbf{r},t)\underbrace{\hat{A}^\dagger}_{=\hat{A}}\psi_1(\mathbf{r},t)\right)^*$$

$$= \langle \hat{A} \rangle_{11}^*$$

$\longrightarrow$ 期待値は常に実数.

観測可能量（オブザーバブル）

$\longrightarrow$ エルミート演算子を用いて記述.

(note)

$$(\hat{\mathbb{p}}^\dagger)_{12} = \left[\int d\mathbb{r} \; \psi_2^*(\mathbb{r},t) \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right) \psi_1(\mathbb{r},t) \right]^*$$

$$= \int d\mathbb{r} \; \psi_2(\mathbb{r},t) \left(-\frac{\hbar}{i}\nabla\right) \psi_1^*(\mathbb{r},t)$$

$$= \int d\mathbb{r} \; \psi_1^*(\mathbb{r},t) \underbrace{\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)}_{= \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)^\dagger} \psi_2(\mathbb{r},t) = \hat{\mathbb{P}}_{12}$$

部分積分

すなわち $\hat{\mathbb{p}}^\dagger = \hat{\mathbb{p}}$: $\hat{\mathbb{p}}$ はエルミート演算子

同様に $\hat{\mathbb{r}}^\dagger = \hat{\mathbb{r}}$

2.5. 演算子の交換関係

演算子の積も演算子 $\hat{C} \equiv \hat{A}\hat{B}$

$$\hat{C}\psi = \hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}\underbrace{(\hat{B}\psi)}_{= \phi} = \hat{A}\phi$$

一般に $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$

(例えば) $\hat{\mathbb{p}}\cdot\hat{\mathbb{r}}\,\psi(\mathbb{r}) = \hat{\mathbb{P}}\cdot(\mathbb{r}\,\psi(\mathbb{r})) = \frac{\hbar}{i}\nabla\cdot(\mathbb{r}\,\psi(\mathbb{r}))$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(\psi(\mathbb{r}) + \mathbb{r}\cdot\nabla\psi(\mathbb{r})\right)$$

$$\hat{\mathbb{r}}\cdot\hat{\mathbb{p}}\,\psi(\mathbb{r}) = \hat{\mathbb{r}}\cdot\frac{\hbar}{i}(\nabla\psi(\mathbb{r})) = \frac{\hbar}{i}\mathbb{r}\cdot\nabla\psi(\mathbb{r})$$

$$(\hat{A}+\hat{B})^2 = (\hat{A}+\hat{B})(\hat{A}+\hat{B})$$
$$= \hat{A}^2 + \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} + \hat{B}^2 \neq \hat{A}^2 + 2\hat{A}\hat{B} + \hat{B}^2$$

交換関係

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

(note) $[\hat{B}, \hat{A}] = -[\hat{A}, \hat{B}]$

例) $[\hat{x}_i, \hat{p}_j]\psi(\mathbf{r}, t) = (\hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{p}_j \hat{x}_i)\psi(\mathbf{r}, t)$
$$= (\hat{x}_i \cdot \frac{\hbar}{i}\partial_j - \frac{\hbar}{i}\partial_j \hat{x}_i)\psi$$
$$= \frac{\hbar}{i} x_i (\partial_j \psi) - \frac{\hbar}{i}\partial_j (x_i \psi)$$
$$= \cancel{\frac{\hbar}{i} x_i (\partial_j \psi)} - \frac{\hbar}{i}(\delta_{i,j}\psi + \cancel{x_i \partial_j \psi})$$
$$= i\hbar\, \delta_{i,j}\psi$$

任意の波動関数ψに対してこれが成り立つので

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{i,j}$$
$$[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = \frac{\hbar}{i}\delta_{i,j}$$

「正準交換関係」

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

(note) $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = ABC - BCA$

$= (AB - BA)C - B(CA - AC)$

$= [A, B]C + B[A, C]$

$$[\hat{p}, \hat{x}^2] = \hat{x}[\hat{p}, \hat{x}] + [\hat{p}, \hat{x}]\hat{x} = \frac{2\hbar}{i}\hat{x}$$

$$[\hat{p}, \hat{x}^3] = \hat{x}^2[\hat{p}, \hat{x}] + [\hat{p}, \hat{x}^2]\hat{x} = \frac{3\hbar}{i}\hat{x}^2$$

$$[\hat{p}, \hat{x}^n] = \frac{\hbar}{i} n \hat{x}^{n-1}$$

(note) $[\hat{p}, \hat{x}^n]\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(\hat{x}^n\psi) - \hat{x}^n(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi)$

$= \frac{\hbar}{i} \cdot n\hat{x}^{n-1}\psi$

$$[\hat{p}, f(\hat{x})] = [\hat{p}, \sum_n \frac{1}{n!} f^{(n)}(0)\hat{x}^n]$$

$$= \frac{\hbar}{i}\sum_n \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \cdot n\hat{x}^{n-1}$$

$$= \frac{\hbar}{i} f'(\hat{x})$$

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]}$$

ベイカー・キャンベル・ハウスドルフの公式

→ レポート問題

2.6. 不確定性関係

$$\begin{cases} \langle x \rangle = \int d\mathbf{r}\ \psi^*(\mathbf{r},t)\ x\ \psi(\mathbf{r},t) \\ \langle p_x \rangle = \int d\mathbf{r}\ \psi^*(\mathbf{r},t) \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(\mathbf{r},t) \end{cases}$$

$$\psi_x(\mathbf{r},t) \equiv (\hat{x} - \langle x \rangle)\psi(\mathbf{r},t)$$

$$= (x - \langle x \rangle)\psi(\mathbf{r},t)$$

$$\psi_p(\mathbf{r},t) \equiv (\hat{p}_x - \langle p_x \rangle)\psi(\mathbf{r},t)$$

$$= \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} - \langle p_x \rangle\right)\psi(\mathbf{r},t)$$

とする。 ただし, $\int d\mathbf{r}\ \psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t) = 1.$

$$\downarrow$$

$$\int d\mathbf{r}\ \psi_x^*(\mathbf{r},t)\psi_x(\mathbf{r},t)$$

$$= \int d\mathbf{r}\ \psi(\mathbf{r},t)\ (x - \langle x \rangle)^2\ \psi(\mathbf{r},t)$$

$$(x - \langle x \rangle)^2 = x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2$$

$$= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = (\Delta x)^2$$

x の分散

$$\boxed{(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \frac{\hbar}{2}}$$ 「不確定性関係」

位置と運動量を同時に決めることはできない。

例） $\psi(x,t) = e^{ipx/\hbar - iEt/\hbar}$

$$\hat{p}\,\psi(x,t) = p\,\psi(x,t)$$
$$\hat{p}^2\psi(x,t) = p^2\psi(x,t)$$

$\rightarrow \Delta p_x = 0$

$e^{ipx/\hbar}$ は $-\infty \leq x \leq \infty$ の範囲で広がっている。

一般化： $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$ のとき

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{|\langle \hat{C} \rangle|}{2}$$

四 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ のとき $(\Delta A)(\Delta B) = 0$

$\rightarrow$ A と B を同時に決めることができる。

$\leftrightarrow$ 演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ の両方の固有状態

$$\hat{A}\,\psi_{AB}(\mathbf{r},t) = A\,\psi_{AB}(\mathbf{r},t)$$
$$\hat{B}\,\psi_{AB}(\mathbf{r},t) = B\,\psi_{AB}(\mathbf{r},t)$$

「同時固有状態」

cf. ハミルトニアンの対称性