

2.6. 不確定性關係

$$\left\{ \begin{aligned} \langle x \rangle &= \int dr \psi^*(r, t) x \psi(r, t) \\ \langle p_x \rangle &= \int dr \psi^*(r, t) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(r, t) \end{aligned} \right.$$

$$\begin{aligned} \psi_x(r, t) &\equiv (\hat{x} - \langle x \rangle) \psi(r, t) \\ &= (x - \langle x \rangle) \psi(r, t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi_p(r, t) &\equiv (\hat{p}_x - \langle p_x \rangle) \psi(r, t) \\ &= \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \langle p_x \rangle \right) \psi(r, t) \end{aligned}$$

と 3. $\int dr \psi^*(r, t) \psi(r, t) = 1.$

$$\begin{aligned} &\int dr \psi_x^*(r, t) \psi_x(r, t) \\ &= \int dr \psi^*(r, t) \underbrace{(x - \langle x \rangle)^2}_{\text{''}} \psi(r, t) \\ &\quad x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \end{aligned}$$

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

x の分散

$$\begin{aligned}
& \int dr \psi_p^*(r, t) \psi_p(r, t) \\
&= \int dr \left(-\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi_p^*(r, t) \right) - \langle P_x \rangle \psi_p^*(r, t) \right) \left(\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi_p \right) - \langle P_x \rangle \psi_p \right) \\
&= \int dr \left[\hbar^2 \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi_p^* \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi_p \right) - \langle P_x \rangle \psi_p^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi_p}{\partial x} \right) \right. \\
&\quad \left. + \langle P_x \rangle \psi_p \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_p^* \right) + \langle P_x \rangle^2 \psi_p^* \psi_p \right]
\end{aligned}$$

→ 部分積分

$$\int dr \left[-\hbar^2 \psi_p^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_p - 2 \langle P_x \rangle \psi_p^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi_p \right) \right] + \langle P_x \rangle^2$$

$\psi(x = \pm\infty) = 0$

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

↑

$$\hat{P}_x^2 = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

(note) $\int dr \psi_p^*(r, t) \psi_p(r, t)$

$$\begin{aligned}
&= \int dr \psi_p^*(r, t) (\hat{P}_x - \langle P_x \rangle)^\dagger (\hat{P}_x - \langle P_x \rangle) \psi_p(r, t) \\
&= \int dr \psi_p^*(r, t) (\hat{P}_x^2 - 2 \langle P_x \rangle \hat{P}_x + \langle P_x \rangle^2) \psi_p(r, t) \\
&= \langle P_x^2 \rangle - \langle P_x \rangle^2
\end{aligned}$$

$$\Downarrow (\Delta x)^2 (\Delta p_x)^2 = \left[\int dr \psi_x^*(r, t) \psi_x(r, t) \right] \left[\int dr \psi_p^*(r, t) \psi_p(r, t) \right]$$

(note) コーシー・シュワルツの不等式

$$\langle x, x \rangle \cdot \langle y, y \rangle \geq |\langle x, y \rangle|^2$$

$$\Downarrow (\Delta x)^2 (\Delta p_x)^2 \geq \left| \int dr \psi_x^*(r, t) \psi_p(r, t) \right|^2$$

(note) $|z|^2 = (\operatorname{Re} z)^2 + (\operatorname{Im} z)^2 \geq (\operatorname{Im} z)^2 = \left(\frac{z - z^*}{2i} \right)^2$

↑
複素数

$$\Downarrow (\Delta x)^2 (\Delta p_x)^2 \geq \left[\frac{1}{2i} \int dr \psi_x^*(r, t) \psi_p(r, t) - \frac{1}{2i} \int dr \psi_p^*(r, t) \psi_x(r, t) \right]^2$$

(note) $\int \psi_x^*(r, t) \psi_p(r, t) dr = \int dr \psi^*(r, t) \hat{p}_x (\hat{p}_x - \langle p_x \rangle) \psi$
 $= \langle x p_x \rangle - \langle x \rangle \langle p_x \rangle$

$$\int \psi_p^*(r, t) \psi_x(r, t) dr = \langle p_x x \rangle - \langle x \rangle \langle p_x \rangle$$

$$\Downarrow (\Delta x)^2 (\Delta p_x)^2 \geq \left(\frac{1}{2i} (\langle x p_x \rangle - \langle p_x x \rangle) \right)^2 = \left(\frac{1}{2i} \langle [x, p_x] \rangle \right)^2$$

$$= \left(\frac{i\hbar}{2i} \right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2$$

↓

$$\boxed{(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \frac{\hbar}{2}}$$

「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「定数」になる。

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

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

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

→ A と B を同時に決めることができる。

↔ 演算子 \hat{A} , \hat{B} の両方の固有状態

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

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

「同時固有状態」

cf. ハミルトニアン \hat{H} の対称性

位置演算子 \hat{r}
運動量 $= \hat{p}$) の固有状態 $\rightarrow \hat{r}|r\rangle = r|r\rangle$
 $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$

(note) $\langle r|\hat{r}^\dagger = \langle r|\hat{r} = \langle r|r$
 $\langle p|\hat{p}^\dagger = \langle p|p$

↓ $\psi(r, t) = \langle r|\psi(t)\rangle$ と解釈する。

$\rightarrow \psi^*(r, t) = \langle r|\psi(t)\rangle^* = \langle \psi(t)|r\rangle$

同様に $\tilde{\psi}(p, t) = \langle p|\psi(t)\rangle$, $\tilde{\psi}^*(p, t) = \langle \psi(t)|p\rangle$

← 抽象的な状態ベクトル $|\psi\rangle$ を $|r\rangle$ や $|p\rangle$ と内積をとって具象化: 「表示をとる」

$\hat{r}\psi(r, t) = r\psi(r, t)$

↔ $\langle r|\hat{r}|\psi(t)\rangle = r\langle r|\psi(t)\rangle = r\psi(r, t)$

運動量の固有状態

$\psi_p(r) = \langle r|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}$

(note) $\frac{\hbar}{i}\nabla\psi_p(r) = p\psi_p(r)$

$\int d\mathbf{r} \psi_{p'}^*(r)\psi_p(r) = \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$

$\delta(p_x - p_x')\delta(p_y - p_y')\delta(p_z - p_z')$

同様

$$\psi_r(p) = \langle p | r \rangle = \langle r | p \rangle^* = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} e^{-i p \cdot r / \hbar}$$

(note) $\hat{r} \psi_r(p) = i\hbar \nabla_p \psi_r(p) = r \psi_r(p)$

$$\int dP \psi_{r'}^*(P) \psi_r(P) = \delta(r - r')$$

(note) $\langle p | \psi \rangle = \int d^3r \langle p | r \rangle \langle r | \psi \rangle$
 $= \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int d^3r e^{-i p \cdot r / \hbar} \psi(r)$

フーリエ変換

$$\langle \psi | \phi \rangle = \int d^3r \underbrace{\langle \psi | r \rangle}_{\psi^*(r)} \underbrace{\langle r | \phi \rangle}_{\phi(r)} = \int d^3p \underbrace{\langle \psi | p \rangle}_{\tilde{\psi}^*(p)} \underbrace{\langle p | \phi \rangle}_{\tilde{\phi}(p)}$$

$$\langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle \rightarrow \langle \phi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle$$

$$\langle \psi | \hat{A} \hat{B} | \phi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \phi_B \rangle$$

||
| ϕ_B \rangle

$$\rightarrow \langle \phi_B | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle = \langle \phi | (\hat{A}\hat{B})^\dagger | \psi \rangle$$

$$\langle \phi | \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger | \psi \rangle = \langle \phi | (\hat{A}\hat{B})^\dagger | \psi \rangle$$

$$\Downarrow \boxed{(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger}$$

同様 $(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$

$$(c\hat{A})^\dagger = c^* \hat{A}^\dagger$$