DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

(復習)　ブラケット表示

波動関数　$|\psi\rangle$
演算子　$\hat{A}$

内積　$\langle\psi|\phi\rangle \equiv \int d\mathbf{r}\ \psi^*(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})$

$|\phi\rangle \longleftrightarrow \langle\phi|$

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

位置の固有状態　$\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}_0\rangle = \mathbf{r}_0|\mathbf{r}_0\rangle$

$\rightarrow$ 波動関数　$\psi(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\psi\rangle$

(note)　$\psi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\mathbf{r}_0\rangle = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$

同様に　$\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle$

$$\tilde{\psi}_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{p}) = \langle\mathbf{p}|\mathbf{r}_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\, e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_0/\hbar}$$

(note)
$$\langle\psi|A\underbrace{B|\phi\rangle}_{\equiv\ |\phi_B\rangle} = \langle\psi|A|\phi_B\rangle$$

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

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

2.8. エルミート演算子の固有状態と完全正規直交性

エルミート演算子 $\hat{A}$: $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$

$$\hat{A}\,|\psi_n\rangle = A_n\,|\psi_n\rangle$$

(1) 固有値 A_n は実数

$$\underbrace{\langle\psi_n|\hat{A}^\dagger}_{=\langle\psi_n|\hat{A}} = A_n^*\langle\psi_n|$$

$$\downarrow$$

$$\underbrace{\langle\psi_n|\hat{A}|\psi_n\rangle}_{=A\langle\psi_n|\psi_n\rangle} = A_n^*\langle\psi_n|\psi_n\rangle \quad \longrightarrow \quad A_n = A_n^*$$

(2) 固有状態は正規直交 : $\langle\psi_n|\psi_{n'}\rangle = \delta_{n,n'}$

$$\underbrace{\langle\psi_{n'}|\hat{A}}_{}|\psi_n\rangle = A_n\langle\psi_{n'}|\psi_n\rangle$$

$$= A_{n'}\langle\psi_{n'}|\psi_n\rangle$$

$n\neq n'$ のとき, $A_n\neq A_{n'}$ とすると $\langle\psi_{n'}|\psi_n\rangle = 0$
$n=n'$ のとき, 規格化条件より $\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1$.

(note) $n\neq n'$ で $A_n = A_{n'}$ でもシュミットの直交化を行うことで同様の議論が可.

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

$$|\mathbf{r}\rangle = \int d\mathbf{r}'\, |\mathbf{r}'\rangle \underbrace{\langle \mathbf{r}' | \mathbf{r} \rangle}_{= \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} = |\mathbf{r}\rangle$$

No.

(3) 完全性　$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = 1$　（"完全系をはる"）

$\boxed{|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle}$　と書けたとする.

$\leftrightarrow$ $\hat{A}$ で表される物理量を観測したとき,
確率 $|c_n|^2$ で A_n を観測.

いずれかの値が観測される確率 : $\sum_n |c_n|^2$

$\rightarrow$ $\sum_n |c_n|^2 = 1$

「観測されない」値は定義できない.

(note) $\langle\psi_n|\psi\rangle = \sum_{n'} c_{n'} \underbrace{\langle\psi_n|\psi_{n'}\rangle}_{= \delta_{n,n'}} = c_n$

$\Updownarrow$

$$1 = \sum_n c_n^* c_n = \sum_n \langle\psi|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle$$

$\Updownarrow$

$$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = 1$$

$\rightarrow$ 任意の波動関数は完全系で展開できる
$|\psi\rangle = \sum_n \langle\psi_n|\psi\rangle\, |\psi_n\rangle$

(note) $\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi| \left(\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| \right) |\phi\rangle$
$= \sum_n \langle\psi|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\phi\rangle$

特に $\hat{A}$ として $\hat{\mathbf{r}}$, $\hat{\mathbf{p}}$ をとると

$$1 = \int d\mathbf{r}\, |\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| = \int d\mathbf{p}\, |\mathbf{p}\rangle\langle\mathbf{p}|$$

(note) $\langle\psi|\phi\rangle = \int d\mathbf{r}\, \langle\psi|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}|\phi\rangle = \int d\mathbf{r}\, \psi^*(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})$

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

2.9 シュレーディンガー描像とハイゼンベルク描像

時間に依存する S.-eq：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

系の「時間発展」を記述

V が時間に依らないとき,

$$|\psi(t)\rangle = \underbrace{e^{-i\hat{H}t/\hbar}}_{\text{時間発展演算子} \equiv \hat{U}(t)} |\psi(0)\rangle$$

(note) $\hat{U}^{+}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}$

$$\downarrow \quad \hat{U}(t)\hat{U}^{+}(t) = \hat{U}^{+}(t)\hat{U}(t) = 1$$

$$\downarrow \quad \boxed{\hat{U}^{+}(t) = \hat{U}^{-1}(t)}$$

「ユニタリー演算子」

一般に $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$

$$\rightarrow \quad \boxed{i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} = \hat{H}\hat{U}}$$

演算子 $\hat{A}$ の期待値

$$\langle \hat{A} \rangle (t) = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$$

$$= \langle \psi(0) | \hat{U}^{-1} \hat{A} \hat{U} | \psi(0) \rangle$$

$\hat{A}$ は変化せず, $|\psi\rangle$ が時間変化：「シュレーディンガー描像」

$$[\hat{H}, e^{\pm i\hat{H}t/\hbar}] = 0$$

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

一方で、$\langle \hat{A} \rangle(t) = \langle \psi(0) | \underbrace{\hat{U}^{\dagger} \hat{A} \hat{U}}_{\hat{A}_H(t)} | \psi(0) \rangle$

とみると、$|\psi\rangle$ は変化せず、演算子 $\hat{A}$ が時間変化
「ハイゼンベルグ描像」

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = i\hbar \left(\frac{d\hat{U}^{\dagger}}{dt} \hat{A} \hat{U} + \hat{U}^{\dagger} \hat{A} \frac{d\hat{U}}{dt} \right)$$
$$= -\hat{U}^{\dagger} \hat{H} \hat{A} \hat{U} + \hat{U}^{\dagger} \hat{A} \hat{H} \hat{U}$$
$$= -\hat{H} \hat{A}_H(t) + \hat{A}_H(t) \hat{H}$$
$$= [\hat{A}_H(t), H]$$

$[e^{\pm iHt/\hbar}, H] = 0$

ハイゼンベルク方程式

$[\hat{H}, \hat{A}]$ のとき，$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_H(t) = 0$

$\rightarrow$ A は保存量