

$$(AB)^T = B^T A^T$$

$$[(AB)^T]_{ij} = [(AB)_{ji}]^* = \sum_k (B^T)_{ik} (A^T)_{kj} = (B^T A^T)_{ij}$$

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。 →  $\hat{A}$  の「行列要素」

すなわち 演算子 ↔ 行列

エルミート共役  $\hat{A}^+$       例)  $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$   
 $(\hat{A}^+)_{ij} = A_{ji}^*$       →  $A^T = \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix}$

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

エルミート演算子       $\hat{A}^+ = \hat{A}$

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

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

$\hat{A}$  の定義より →  $\left( \int d\mathbf{r} \psi_1^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \psi_1(\mathbf{r}, t) \right)^* = \langle \hat{A} \rangle_{11}^*$

→ 期待値は常に実数。 ( $\langle \hat{A} \rangle_{11} = \langle \hat{A} \rangle_{11}^*$ )

↳ 観測可能量 (オブザーバブル)

→ エルミート演算子を用いて記述。

$$A = A^+ \rightarrow \begin{cases} a = a^* \\ d = d^* \\ b = c^* \end{cases}$$

(note)

$$\begin{aligned}
 (\hat{P}^T)_{12} &= \left[ \int dV \psi_2^*(r, t) \left( \frac{\hbar}{i} \nabla \right) \psi_1(r, t) \right]^* \\
 &= \int dV \psi_2(r, t) \left( -\frac{\hbar}{i} \nabla \right) \psi_1^*(r, t) \\
 &\stackrel{\uparrow}{=} \int dV \psi_1^*(r, t) \underbrace{\left( \frac{\hbar}{i} \nabla \right)}_{\parallel} \psi_2(r, t) = \hat{P}_{12} \\
 &\quad \text{部分積分} \quad \left( \frac{\hbar}{i} \nabla \right)^T
 \end{aligned}$$

すなわち  $\hat{P}^T = \hat{P}$  :  $\hat{P}$  はエルミート演算子

同様に  $\hat{V}^T = \hat{V}$

## 2.5. 演算子の交換関係

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

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

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

(例として)

$$\begin{aligned}
 \hat{P}_x \hat{x} \psi(r) &= \hat{P}_x (x \psi(r)) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x \psi(r)) \\
 &= \frac{\hbar}{i} \left( \psi(r) + x \frac{\partial}{\partial x} \psi(r) \right)
 \end{aligned}$$

$$\hat{x} \hat{P}_x \psi(r) = \hat{x} \cdot \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial x} \psi(r) \right) = \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial}{\partial x} \psi(r)$$

$$\begin{aligned}
 \hat{P}_x \hat{x} - \hat{x} \hat{P}_x &= \frac{\hbar}{i} \psi(r) \\
 \hat{x} \hat{P}_x - \hat{P}_x \hat{x} &= i\hbar \psi(r)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \downarrow (\hat{A} + \hat{B})^2 &= (\hat{A} + \hat{B})(\hat{A} + \hat{B}) \\ &= \hat{A}^2 + \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} + \hat{B}^2 \quad \neq \quad \hat{A}^2 + 2\hat{A}\hat{B} + \hat{B}^2 \end{aligned}$$

交換関係

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

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

例)  $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] \psi(r, t) = (\hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{p}_j \hat{x}_i) \psi(r, t)$

$$\begin{aligned} &= (\hat{x}_i \cdot \frac{\hbar}{i} \partial_j - \frac{\hbar}{i} \partial_j \hat{x}_i) \psi \\ &= \frac{\hbar}{i} x_i (\partial_j \psi) - \frac{\hbar}{i} \partial_j (x_i \psi) \\ &= \frac{\hbar}{i} \cancel{x_i} (\partial_j \psi) - \frac{\hbar}{i} (\delta_{i,j} \psi + \cancel{x_i} \partial_j \psi) \\ &= i\hbar \delta_{i,j} \psi \end{aligned}$$

任意の波動関数  $\psi$  に対して  $\psi$  が成り立つ。

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

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

「正準交換関係」

$$\begin{aligned} \text{(note)} \quad [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= ABC - BCA \\ &= (AB - \underline{BA})C - B(\underline{CA} - AC) \\ &= [A, B]C + B[A, C] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \downarrow \\ [\hat{p}, \hat{x}^2] &= \hat{x} [\hat{p}, \hat{x}] + [\hat{p}, \hat{x}] \hat{x} = \frac{2\hbar}{i} \hat{x} \\ [\hat{p}, \hat{x}^3] &= \hat{x}^2 [\hat{p}, \hat{x}] + [\hat{p}, \hat{x}^2] \hat{x} = \frac{3\hbar}{i} \hat{x}^2 \\ [\hat{p}, \hat{x}^n] &= \frac{\hbar}{i} n \hat{x}^{n-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{(note)} \quad [\hat{p}, \hat{x}^n] \psi &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (\hat{x}^n \psi) - \hat{x}^n \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \cdot n \hat{x}^{n-1} \psi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \downarrow \quad [\hat{p}, f(\hat{x})] &= [\hat{p}, \sum_n \frac{1}{n!} f^{(n)}(0) \hat{x}^n] \\ &= \frac{\hbar}{i} \sum_n \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \cdot n \hat{x}^{n-1} \\ &= \frac{\hbar}{i} f'(\hat{x}) \end{aligned}$$

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

ハイカー・ファインマン・ハウスドルフの公式

→ レポート問題

## 2.6. 不確定性關係

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

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

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

と訂正。  $\int dr \psi^*(r, t) \psi(r, t) = 1.$

$$\begin{aligned} &\int dr \psi_x^*(r, t) \psi_x(r, t) \\ &= \int dr \psi^*(r, t) \underbrace{(x - \langle x \rangle)^2}_{=} \psi(r, t) \\ &\quad x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \end{aligned}$$

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

$x$  の分散

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

→ 部分積分

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

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

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

↑

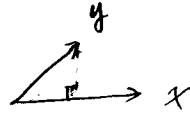
$$\hat{p}_x^2 = \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

(note)

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

$\hat{A}\psi$ 

行列ベクトル



$$\vec{x} \cdot \vec{y} = xy \cos \theta$$

No

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

(note) コーシー・シュワルツの不等式

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

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

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

↑  
複素数

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

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

$$= \langle x p_x \rangle - \langle x \rangle \langle p_x \rangle$$

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

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

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

↓

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

「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)  $\psi(x, t) = e^{i p x / \hbar - i E t / \hbar}$

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

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

$$\rightarrow \Delta p_x = 0$$

$e^{i p x / \hbar}$  は  $-\infty \leq x \leq \infty$   
の範囲で「定数」である。

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

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

□  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$  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