DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

(復習) 不確定性関係

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

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

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

$$\rightarrow \quad \int d\mathbf{r}\ \psi_x^*(\mathbf{r},t)\psi_x(\mathbf{r},t) = \cdots = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = (\Delta x)^2$$

xの分散

$$\int d\mathbf{r}\ \psi_p^*(\mathbf{r},t)\psi_p(\mathbf{r},t) = \cdots = \langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2 = (\Delta p_x)^2$$

$$\therefore (\Delta x)^2(\Delta p_x)^2 = \left[\int d\mathbf{r}\ \psi_x^*(\mathbf{r},t)\psi_x(\mathbf{r},t)\right]\left[\int d\mathbf{r}\ \psi_p^*(\mathbf{r},t)\psi_p(\mathbf{r},t)\right]$$

$$\geq \left|\int d\mathbf{r}\ \psi_x^*(\mathbf{r},t)\psi_p(\mathbf{r},t)\right|^2$$

$\uparrow$ コーシー・シュワルツの不等式

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

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

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

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

$$= \langle \hat{x}\hat{p}_x\rangle - \langle\hat{x}\rangle\langle\hat{p}_x\rangle$$

$$\int \psi_p^*(\mathbf{r},t)\,\psi_x(\mathbf{r},t)\,d\mathbf{r} = \langle \hat{p}_x\hat{x}\rangle - \langle\hat{x}\rangle\langle\hat{p}_x\rangle$$

$\downarrow$

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

$\downarrow$

$$\boxed{(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \frac{\hbar}{2}}$$ 「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) $\psi(x) = e^{ipx/\hbar}$

$$\hat{p}\,\psi(x) = p\,\psi(x)$$
$$\hat{p}^2\psi(x) = p^2\psi(x)$$
$$\rightarrow \Delta p_x = 0$$

$e^{ipx/\hbar}$ 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

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

• 同時固有状態

$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ 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

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

「同時固有状態」

cf. ハミルトニアンの対称性

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

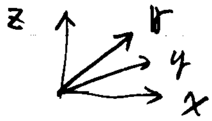
No.

2.7. 波動関数のブラケット表示

ディラック： 波動関数 $\leftrightarrow$ 抽象的なベクトル $|\psi\rangle$
「状態ベクトル」

重ね合せの原理 $\longrightarrow$ $|\psi\rangle = \sum_i c_i \underbrace{|\psi_i\rangle}_{\text{「基底ベクトル」}}$

$|\psi\rangle$を いくつかの単位状態ベクトルに分解

cf.  $\mathbf{r} = x\,\mathbf{e}_x + y\,\mathbf{e}_y + z\,\mathbf{e}_z$

「ヒルベルト空間」

$|\psi\rangle$ $\longrightarrow$ 転置複素共役 $\langle\psi|$
ケットベクトル　　　　　　ブラベクトル

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \langle\psi| = (c_1^* \;\; c_2^* \;\; \cdots\cdots)$$

2つの状態ベクトルの内積： $\langle\psi|\phi\rangle$

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

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

$\hat{A} = c$ （c数）の時は

$|\phi\rangle = c|\psi\rangle \rightarrow \langle\phi| = c^*\langle\psi|$ となる。

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

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

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

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

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

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

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

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

運動量の固有状態

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

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

$$\int d\mathbb{r}\, \psi_{p'}^*(\mathbb{r})\psi_p(\mathbb{r}) = \underbrace{\delta(\mathbb{p} - \mathbb{p}')}_{\parallel}$$

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

同様に

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

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

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

(note) $\langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \int d\mathbf{r}\ \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$

$$= \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int d\mathbf{r}\ \underbrace{e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}}_{\text{フーリエ逆変換}}\ \psi(\mathbf{r})$$

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

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

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

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

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

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

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

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