(復習) ブラケット表示

波動関数 $|\psi\rangle$
演算子 $\hat{A}$

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

演算子の行列要素

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

(期待値は $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \int d\mathbf{r}\ \psi^*(\mathbf{r})\ \hat{A}\ \psi(\mathbf{r})$)

表示

$$\psi(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\psi\rangle$$
$$\psi^*(\mathbf{r}) = \langle\psi|\mathbf{r}\rangle$$

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

同様に

$$\tilde{\psi}(\mathbf{p}) = \langle\mathbf{p}|\psi\rangle$$
$$\tilde{\psi}^*(\mathbf{p}) = \langle\psi|\mathbf{p}\rangle$$

エルミート共役

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

$\hat{A}|\phi\rangle \equiv |\phi_A\rangle$ とすると

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

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

$\Downarrow$

$$\phi_A^*(\mathbf{r}) \longleftrightarrow \langle \phi | \hat{A}^\dagger$$

すなわち $\hat{A}|\phi\rangle \longrightarrow \langle \phi | \hat{A}^\dagger$

$$(c|\phi\rangle \to \langle \phi | c^*)$$

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

$|\phi_B\rangle$

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

$\Downarrow$

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

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

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

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

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

↓

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

$$= A_n\langle\psi_n|\psi_n\rangle \qquad \rightarrow \qquad A_n = A_n^*$$

(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.

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

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

$\Downarrow$

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

$\Downarrow$

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

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

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，

$$|\psi(t)\rangle = \underbrace{e^{-i\hat{H}t/\hbar}}_{} |\psi(0)\rangle$$

　　　　　　　　　　‖
時間発展演算子 $\equiv \hat{U}(t)$

(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 $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$
(Vがtに依存しても)

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

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」

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

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

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

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」

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

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

ハイゼンベルク方程式

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

$\rightarrow \hat{A}_H(t) = \hat{A}_H(0)$

$\rightarrow$ A は保存量