DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

No.

(復習) 波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$

$\rightarrow \langle \hat{A} \rangle = \int d\boldsymbol{r}\, \psi^*(\boldsymbol{r},t)\, \hat{A}\, \psi(\boldsymbol{r},t)$

例: $\langle \hat{\boldsymbol{p}} \rangle = \int d\boldsymbol{r}\, \psi^*(\boldsymbol{r},t) \left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right) \psi(\boldsymbol{r},t)$

フーリエ変換 $\tilde{\psi}(\boldsymbol{p},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\boldsymbol{r}\, \psi(\boldsymbol{r},t) \times e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}$

$\rightarrow \langle \hat{A} \rangle = \int d\boldsymbol{p}\, \tilde{\psi}^*(\boldsymbol{p},t)\, \hat{A}\, \tilde{\psi}(\boldsymbol{p},t)$

例: $\langle \hat{\boldsymbol{r}} \rangle = \int d\boldsymbol{p}\, \tilde{\psi}^*(\boldsymbol{p},t) (i\hbar \nabla_{\boldsymbol{p}}) \tilde{\psi}(\boldsymbol{p},t)$

◀

演算子の行列要素

$A_{ij} \equiv \int d\boldsymbol{r}\, \psi_i^*(\boldsymbol{r},t)\, \hat{A}\, \psi_j(\boldsymbol{r},t)$

$= \int d\boldsymbol{p}\, \tilde{\psi}_i^*(\boldsymbol{p},t)\, \hat{A}\, \tilde{\psi}_j(\boldsymbol{p},t)$

エルミート共役 $\hat{A} \leftrightarrow \hat{A}^\dagger$

定義 $(\hat{A}^\dagger)_{ij} = A_{ji}^*$

エルミート演算子 $\hat{A} = \hat{A}^\dagger \rightarrow$ 期待値は実数

↕

オブザーバブル

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

$[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = -[\hat{x}_j, \hat{p}_i] = \frac{\hbar}{i}\delta_{i,j}$ (正準交換関係)

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

2.6. 不確定性関係

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

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

$$= (x - \langle x \rangle)\psi(r,t)$$

$$\psi_p(r,t) \equiv (\hat{p}_x - \langle p_x \rangle)\psi(r,t)$$

$$= \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} - \langle p_x \rangle\right)\psi(r,t)$$

とする。ただし、$\int dr\ \psi^*(r,t)\psi(r,t) = 1$.

$$\int dr\ \psi_x^*(r,t)\psi_x(r,t)$$

$$= \int dr\ \psi(r,t)\underbrace{(x - \langle x \rangle)^2}_{\parallel}\psi(r,t)$$

$$x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2$$

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

x の分散

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

No.

$$\int d\boldsymbol{r}\ \psi_p^*(\boldsymbol{r},t)\,\psi_p(\boldsymbol{r},t)$$

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

$$= \int d\boldsymbol{r}\ \left[\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi\right) - \langle p_x\rangle\,\psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)\right.$$

$$\left. + \langle p_x\rangle\,\psi\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right) + \langle p_x\rangle^2\,\psi^*\psi\right]$$

$\longrightarrow$ 部分積分

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

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

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

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

(note) $\int d\boldsymbol{r}\ \psi_p^*(\boldsymbol{r},t)\,\psi_p(\boldsymbol{r},t)$

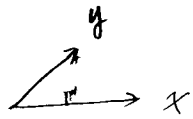
$$= \int d\boldsymbol{r}\ \psi^*(\boldsymbol{r},t)\left(\hat{p}_x - \langle p_x\rangle\right)^\dagger\left(\hat{p}_x - \langle p_x\rangle\right)\psi(\boldsymbol{r},t)$$

$$= \int d\boldsymbol{r}\ \psi^*(\boldsymbol{r},t)\left(\hat{p}_x^2 - 2\langle p_x\rangle\hat{p}_x + \langle p_x\rangle^2\right)\psi(\boldsymbol{r},t)$$

$$= \langle p_x^2\rangle - \langle p_x\rangle^2$$

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

$\hat{A}\psi$ ↕ 行列 ↘ ベクトル



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

↓

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

(note) コーシー・シュワルツの不等式

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

⌣

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

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

↑ 複素数

↓

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

⌣

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

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

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

↓

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

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

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

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

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

例 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ 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

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

「同時固有状態」

cf. ハミルトニアンの対称性

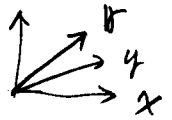
DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

2.7. 波動関数のブラケット表示

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

重ね合せの原理 → $|\psi\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle$
「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. 

$\boldsymbol{r} = x\boldsymbol{e}_x + y\boldsymbol{e}_y + z\boldsymbol{e}_z$

「ヒルベルト空間」

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

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

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

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

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

$\hat{A} = c$ (c数) の時は

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

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

No.

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

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

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

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

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

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

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

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

運動量の固有状態

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

(note) $\frac{\hbar}{i}\nabla\,\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{p}\,\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})$

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

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

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

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

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

フーリエ逆変換

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

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

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

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

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

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

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

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