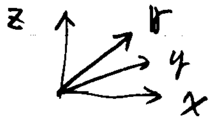
2.7. 波動関数のブラケット表示

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 → $|\psi\rangle = \sum_i c_i \underbrace{|\psi_i\rangle}_{}$
「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.  $\mathbf{r} = x\,\mathbf{e}_x + y\,\mathbf{e}_y + z\,\mathbf{e}_z$

「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

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

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

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

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

$\hat{A} = c$（c数）の時は

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

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

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

↓

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

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

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

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

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

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

運動量の固有状態

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

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

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

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

同様に

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\langle\psi_n|\hat{A}^\dagger = \langle\psi_n|\hat{A}$$

↓

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

$$\langle\psi_n|\hat{A}|\psi_n\rangle = A_n\langle\psi_n|\psi_n\rangle \quad \rightarrow \quad A_n = A_n^*$$

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

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

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

$n \neq n'$ 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

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

(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,

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

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

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

$\Rightarrow \boxed{\hat{U}^{+}(t) = \hat{U}^{-1}(t)}$ 「ユニタリー演算子」

一般に
(Vがtに依存しても)

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

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

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

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」

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

$$= -\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{A} \hat{U} + \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{H} \hat{U}$$

$$= -\hat{H} \hat{A}_H(t) + \hat{A}_H(t) \hat{H}$$

$$= [\hat{A}_H(t), H] = \hat{U}^\dagger [\hat{A}, H] \hat{U}$$

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

ハイゼンベルク方程式

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

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

$\to$ A は保存量