(復習)

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

$$\begin{cases} \text{演算子 } \hat{A} \longleftrightarrow \text{行列} \\ \text{波動関数 } \psi \longleftrightarrow \text{ベクトル} \end{cases}$$

エルミート共役 $(A^\dagger)_{ij} \equiv (A_{ji})^*$

エルミート演算子 $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$

$\longrightarrow (A)_{ii} = (A_{ii})^*$ 期待値は実数

「オブザーバブル」

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

正準交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

$[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar = \dfrac{\hbar}{i}$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$$

任意の関数が $\{\phi_i(\mathbf{r},t)\}$ で展開できたとする。「完全系」

$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_i c_i \phi_i(\mathbf{r},t)$ ← ベクトル $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix}$

$\rightarrow A_{ij} = \int d\mathbf{r}\ \phi_i^*(\mathbf{r},t)\ \hat{A}\ \phi_j(\mathbf{r},t)$ ← 行列 $\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & \ddots & \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix}$

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

2.6. 不確定性関係

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

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

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

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

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

x の分散

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

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

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

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

$$\xrightarrow[\psi(x=\pm\infty)=0]{\text{部分積分}} \int d\mathbf{r}\ \left[-\hbar^2\psi^*\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi - 2\langle p_x\rangle\psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi\right)\right] + \langle p_x\rangle^2$$

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

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

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

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

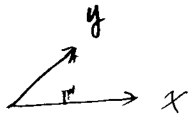
$$= \int d\mathbf{r}\ \psi^*(\mathbf{r},t)\left(\hat{p}_x^2 - 2\langle p_x\rangle\hat{p}_x + \langle p_x\rangle^2\right)\psi(\mathbf{r},t)$$

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

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

$\hat{A}\psi$

演算子　ベクトル



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

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

(note) コーシー・シュワルツの不等式

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

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

(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

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

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

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

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

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

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

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

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

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

$\rightarrow \Delta p_x = 0$

$e^{ipx/\hbar}$ 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

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

四 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ 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

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

「同時固有状態」

cf. ハミルトニアンの対称性

2.7. 波動関数のブラケット表示

ディラック： 波動関数 $\longleftrightarrow$ 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

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

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 $\hat{\mathbf{r}}$
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」

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

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

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

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

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

DEPARTMENT OF PHYSICS
GRADUATE SCHOOL OF SCIENCE
KYOTO UNIVERSITY

同様に

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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