§ 復習 量子力学の一般原理

(1 次元の場合を考察； 3 次元への一般化は容易)

[A] 波動関数の内積

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle \equiv \begin{cases} \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x,t)\psi_j(x,t)\,\mathrm{d}x & \text{：無限区間} \\ \displaystyle\int_0^L \psi_i^*(x,t)\psi_j(x,t)\,\mathrm{d}x & \text{：}[0,L]\text{ の周期境界条件} \end{cases}$$

[B] 随伴演算子 (adjoint operator)

演算子 $\hat{A}$ の随伴演算子 $\hat{A}^\dagger$ (定義式)： $\langle \hat{A}^\dagger \psi_i | \psi_j \rangle = \langle \psi_i | \hat{A} \psi_j \rangle$

(注： この定義では，部分積分の際に境界からの寄与が 0 となることが本質的)

[C] Hermite 演算子

$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ を満たす演算子　　このとき，$\langle \psi_i | \hat{A} \psi_j \rangle = \langle \hat{A}\psi_i | \psi_j \rangle \equiv \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_j \rangle$

[D] Hermite 演算子の行列表現

- ある完全規格直交系 $\{\psi_j\}$ を用いた Hermite 演算子 $\hat{A}$ の行列表現： $A_{ij} \equiv \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_j \rangle$
- 行列 $\underline{A}$ の性質： $A_{ij}^* = \langle \psi_i | \hat{A} \psi_j \rangle^* = \langle \hat{A} \psi_j | \psi_i \rangle = A_{ji}$ —— Hermite 行列

[E] 量子力学と Hermite 演算子

物理量に対応した演算子は全て Hermite 演算子 $\Longrightarrow$ 期待値 $\langle \hat{A} \rangle_i \equiv \langle \psi_i | \hat{A} | \psi_i \rangle$ は実数

例： $\hat{x} \equiv x$, $\quad \hat{p} \equiv \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$, $\quad \hat{H} \equiv -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)$

[F] 完全規格直交系

Hermite 演算子 $\hat{A}$ のある境界条件のもとでの固有値問題： $\hat{A}\varphi(x) = a\varphi(x)$

$$\Downarrow$$

(i) 離散的な固有値 a_n $(n = \cdots, 1, 2, \cdots)$ と固有関数 $\varphi_n(x)$ が得られる場合

$$\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{mn} \text{ ：規格直交} \qquad \sum_n \varphi_n(x)\varphi_n^*(x') = \delta(x - x') \text{ ：完全}$$

(ii) 連続的な固有値 a $(-\infty < a < \infty)$ と固有関数 $\varphi_a(x)$ が得られる場合

$$\langle \varphi_a | \varphi_{a'} \rangle = \delta(a - a') \text{ ：規格直交} \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_a(x)\varphi_a^*(x')\,\mathrm{d}a = \delta(x - x') \text{ ：完全}$$

[G] 量子力学の行列形式

Hermite 演算子 $\hat{B}$ の固有値問題： $\hat{B}\phi_\mu(x) = b_\mu \phi_\mu(x)$

$\Updownarrow$ $\quad \phi_\mu(x) = \sum_n U_{n\mu}\varphi_n(x)$ の展開

Hermite 行列 $B_{mn} \equiv \langle \varphi_m | \hat{B} | \varphi_n \rangle$ の対角化問題： $\underline{B}' = \underline{U}^\dagger \underline{BU}$

$[\ (\underline{B}')_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} b_\mu, \quad (\underline{U})_{n\mu} = U_{n\mu}, \quad (\underline{B})_{mn} \equiv \langle \varphi_m | \hat{B} | \varphi_n \rangle\ ]$

[H] 確率解釈

(i) 離散的な場合

$\varphi_n(x)$ ： Hermite 演算子 $\hat{A}$ の固有関数 —— $\hat{A}\varphi_n(x) = a_n\varphi_n(x)$

$\phi(x) = \sum_n c_n\varphi_n(x)$ ：ある波動関数 $\phi(x)$ の $\varphi_n(x)$ による展開

状態 $\phi(x)$ において物理量 $\hat{A}$ を測定したとき，固有値 a_n を観測する確率は $\lvert c_n\rvert^2$

(ii) 連続的な場合

$\varphi_a(x)$ ： Hermite 演算子 $\hat{A}$ の固有関数 —— $\hat{A}\varphi_a(x) = a\varphi_n(x)$

$\phi(x) = \int c(a)\,\varphi_a(x)\,\mathrm{d}a$ ：ある波動関数 $\phi(x)$ の $\varphi_a(x)$ による展開

状態 $\phi(x)$ において物理量 $\hat{A}$ を測定したとき，固有値 a を観測する確率は $\lvert c(a)\rvert^2\mathrm{d}a$

[I] 不確定性原理

$\hat{A}, \hat{B}$ ： Hermite 演算子　　　$\langle\hat{A}\rangle \equiv \langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle$ ： $\hat{A}$ の期待値

$\Delta\hat{A} \equiv \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle, \quad \Delta\hat{B} \equiv \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle$ ： 期待値からのずれに対する Hermite 演算子

$$\boxed{\sqrt{\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle} \geq \frac{1}{2}\sqrt{\langle -i[\hat{A},\hat{B}]\rangle^2}}$$

例：　$\hat{A} = x,\, \hat{B} = \hat{p}$ のとき，$[x,\hat{p}] = i\hbar$ より $\sqrt{\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle} \geq \dfrac{\hbar}{2}$

[J] Heisenberg の運動方程式 —— Hamiltonian $\hat{H}$ が時間に依存しない場合

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}(t),\hat{H}] \qquad \hat{A}(t) \equiv \mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}\,\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}$$ ：Heisenberg 表示

[K] 古典力学との対応

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = (A,\hat{H})$$

$(A,\hat{H})$ ：Poisson 括弧式 $\iff$ $\dfrac{1}{i\hbar}[\hat{A}(t),\hat{H}]$ ：交換子

[L] Dirac の bra と ket

(i) 波動関数の bra-ket 表示：　$\varphi_n(x) \equiv \langle x|\varphi_n\rangle$,　　$\varphi_n^*(x) \equiv \langle\varphi_n|x\rangle$

$$\begin{cases} \phi(x) = \sum_n c_n\varphi_n(x) \\ c_n \equiv \langle\varphi_n|\phi\rangle \end{cases} \iff \langle x|\phi\rangle = \sum_n \langle x|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\phi\rangle \iff |\phi\rangle = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\phi\rangle$$

(ii) 規格直交性と完全性

$\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle = \delta_{mn}$ ：規格直交　　$\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 1$ ：完全

(iii) 連続固有値の場合：　$\varphi_a(x) \equiv \langle x|a\rangle$,　　$\varphi_a^*(x) \equiv \langle a|x\rangle$

$\langle a|a'\rangle = \delta(a - a')$ ：規格直交　　$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}a\,|a\rangle\langle a| = 1$ ：完全

[1] $\hat{p} \equiv \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ と $\hat{H} \equiv -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)$ が Hermite 演算子であることを，以下の二つの場合について確かめよ。

(i) 無限区間 $(-\infty < x < \infty)$，かつ，境界条件が $\varphi(\pm\infty) = 0$ の場合

(ii) 区間 $[0, L]$ の周期境界条件の場合

[2] Hermite 演算子 $\hat{B}$ の固有値問題：

$$\hat{B}\phi_\mu(x) = b_\mu \phi_\mu(x)$$

が，$\phi_\mu(x)$ の完全規格直交系 $\{\varphi_n(x)\}_n$ による展開：

$$\phi_\mu(x) = \sum_n U_{n\mu}\varphi_n(x)$$

を用いて，Hermite 行列 $(\underline{B})_{mn} \equiv \langle\varphi_m|\hat{B}|\varphi_n\rangle$ の対角化問題に変形できることを示せ。

[3] 不等式 $\sqrt{\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle} \geq \dfrac{1}{2}\sqrt{\langle -i[\hat{A}, \hat{B}]\rangle^2}$ を証明せよ。

[4] Hamiltonian が $\hat{H} \equiv -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)$ で与えられる場合について，$\hat{x}(t) \equiv \mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar} x\, \mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}$ と $\hat{p}(t) \equiv \mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}$ の時間微分を計算せよ。