

〈言葉和形の量子力学〉

（準備）演算子と交換関係

運動量演算子

一次元平面波状態 e^{ikx}

$$(1) \frac{d}{dx} e^{ikx} = ik e^{ikx}$$

$$(2) -i\hbar \frac{d}{dx} e^{ikx} = \hbar k e^{ikx}$$

この微分演算子が運動量に相当

$$(3) \hat{P} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

運動量演算子

- ・ 三波動関数に作用 (2)
- ・ 他の三波動関数に加え子
- ・ 線形

$$(4) \hat{P} \sin(kx) = -i\hbar k \cos(kx)$$

$$\hat{P} \psi(x) = -i\hbar \psi'(x)$$



11>2<も運動量が

2<3<4<1<は反(1)

位置演算子

\hat{x} 「波動関数を x 倍する」演算子 (1) $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$

\hat{x} と \hat{p} の交換関係

$\psi(x)$: 任意の波動関数

$\hat{x}\hat{p}\psi(x)$ と $\hat{p}\hat{x}\psi(x)$ は等しい?

$$\text{左2式.} \quad (2) \hat{x}\hat{p}\psi(x) = x(-i\hbar\frac{d}{dx})\psi(x) = x(-i\hbar\psi'(x)) = -i\hbar x\psi'(x)$$

$$(3) \hat{p}\hat{x}\psi(x) = -i\hbar\frac{d}{dx}(x\psi(x)) = -i\hbar\psi(x) - i\hbar x\psi'(x)$$

$$\text{任意の波動関数 } \psi(x) \text{ について} \quad (4) (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\psi(x) = i\hbar\psi(x)$$

二の事実を $(5) \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$

$$(6) [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad \text{と書く}$$

位置演算子と運動量演算子の順番は交換できない!

§ 調和振動子(harmonic oscillator)の Schrödinger 方程式

3

→ 王道ハーモニクス

ハミング数 $k > 0$



古典力学

$$\text{Newton eq. (1)} \quad m \frac{d^2}{dt^2} x(t) = -k x(t)$$

$$\text{-般解 (2)} \quad x(t) = C \cos(\omega t + \theta)$$

$$\text{エネルギー (3)} \quad E = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2} x^2 = V(x) \quad k = m\omega^2$$

量子力学

$$\text{定常状態の Sch. eq. (4)} \quad \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right\} \psi(x) = E \psi(x) \quad (x \in \mathbb{R})$$

$$\text{境界条件 (5)} \quad |x| \rightarrow \infty \text{ で } \psi(x) \rightarrow 0$$

$$\hat{H} \quad (\text{if } p_x = p_{x_0})$$

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad \& \quad \hat{x} = x \text{ を使うと (6)} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2$$

$$\text{Sch. eq. (4) は (7)} \quad \hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle \leftrightarrow \text{実数 } \psi(x) \text{ 全体}$$

多段階三演算子

$$(1) \text{ミリニ=アノ} \quad (1) \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2$$

△ \hat{H} の「因数分解」

フツの因数

$$(2) \left(\sqrt{\frac{m\omega^2}{2}} x - \frac{i}{\sqrt{2m}} \hat{p} \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega^2}{2}} x + \frac{i}{\sqrt{2m}} \hat{p} \right) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2$$

三演算子との組合せ

$$(3) \left(\sqrt{\frac{m\omega^2}{2}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m}} \hat{p} \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega^2}{2}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m}} \hat{p} \right)$$

$$= \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 + \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{i\omega}{2} (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) = \hat{H} - \frac{\hbar\omega}{2}$$

よし

この辺はあとで

 $i\hbar$

$$(4) \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega}} \left(\sqrt{\frac{m\omega^2}{2}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m}} \hat{p} \right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}$$

$$(5) \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{\hbar\omega}} \left(\sqrt{\frac{m\omega^2}{2}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m}} \hat{p} \right) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}$$

よしよし

$$(6) \boxed{\hat{H} = \hbar\omega (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2})}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{a}^\dagger \text{ 上げ三演算子} \\ \hat{a} \text{ 下げ三演算子} \end{array} \right.$$

この辺は
あとで
ある。

▶ \hat{a} と \hat{a}^\dagger の交換関係

$$(1) \hat{a} \hat{a}^\dagger = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} \right)$$

$$= \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 - \frac{i}{2\hbar} \{ \hat{x} \hat{p} - \hat{p} \hat{x} \} = \frac{1}{2}$$

同様に

$$(2) \hat{a}^\dagger \hat{a} = \frac{m\omega}{2\hbar} \hat{x}^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega} \hat{p}^2 + \frac{i}{2\hbar} \{ \hat{x} \hat{p} - \hat{p} \hat{x} \} = -\frac{1}{2}$$

より (3) $\hat{a} \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} = 1$ または (4) $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$

つまり (5) $\hat{a} \hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1$

(6) $\hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{a} \hat{a}^\dagger - 1$



\hat{a} と \hat{a}^\dagger は 1 の和で表される
余分な 1 がでる！

§ 状態(波動関数)の内積ヒル

「ket 状態」

状態 $\psi(x)$

$|\psi\rangle$

$\psi(x)$

$|\psi\rangle$

△ 状態の内積

$|\psi\rangle$ と $|\psi\rangle$ の内積

(1)

$$\langle \psi | \psi \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x)^* \psi(x)$$

$$\langle a, b \rangle = \sum_{j=1}^d a_j^* b_j$$

(1) $\times 2113$

$|\psi\rangle$ と $|\psi\rangle$ の内積

$\langle \psi |$ は 「bra 状態」 なのが

$$(2) \langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x)^* \psi(x) = \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x)^* \psi(x) \right)^* = \langle \psi | \psi \rangle^*$$

△ 状態のヒル (大きさ)

$$(3) \|\psi\| := \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle} = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2}$$

$\|\psi\|$
と書く

つまり $\|\psi\| > 0$

実現化されないのは $\|\psi\| = 0$

四 降演算子を含む関係

$$\langle \alpha, A\beta \rangle = \langle A^\dagger \alpha, \beta \rangle$$

7

任意の状態(波動関数) $|\psi\rangle, |\psi\rangle$ (\Rightarrow 12)

$|\psi\rangle$ と $\hat{a}|\psi\rangle$ の内積を $\langle \psi | \hat{a}|\psi\rangle$ と書く。 $= \langle \beta, A^\dagger \alpha \rangle^*$

$$(1) \quad \langle \psi | \hat{a}|\psi\rangle = \langle \psi | \hat{a}^\dagger |\psi\rangle^* \quad \text{CT3=CE=規則式}$$

±53h

$$(2) \quad \langle \psi | \hat{a}^\dagger |\psi\rangle = \langle \psi | \hat{a}|\psi\rangle^* \quad (|\psi\rangle \text{ と } |\psi\rangle \text{ で } \text{CTF=IT})$$

$$(1) \text{ を使うと 任意の } |\psi\rangle \text{ に } |\beta\rangle = \hat{a}|\psi\rangle$$

$$(3) \quad \langle \psi | \hat{a}^\dagger \hat{a} |\psi\rangle = \langle \psi | \hat{a}^\dagger |\beta\rangle = \langle \beta | \hat{a} |\psi\rangle^* = \langle \beta | \beta \rangle^* = \|\beta\|^2$$

$$\text{よし} \quad (4) \quad \langle \psi | \hat{a}^\dagger \hat{a} |\psi\rangle = \|\hat{a}|\psi\rangle\|^2 \geq 0$$

$$\text{同様に} \quad (5) \quad \langle \psi | \hat{a} \hat{a}^\dagger |\psi\rangle = \|\hat{a}|\psi\rangle\|^2 \geq 0$$

こので
すぐ使う

$$(1) \langle \psi | \hat{a} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{a}^\dagger (\psi)^* \in \mathbb{R}$$

また

$$(1) \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx} = \alpha x + \beta \frac{d}{dx}$$

同様に

$$(2) \hat{a}^\dagger = \alpha x - \beta \frac{d}{dx}$$

$$(3) \langle \psi | \hat{a} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x)^* \left\{ (\alpha x + \beta \frac{d}{dx}) \psi(x) \right\}$$

[$\psi(x)^* \psi(x)$] $_{-\infty}^{\infty}$

$$= \alpha \int_{-\infty}^{\infty} dx x \psi(x)^* \psi(x) + \beta \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x)^* \psi'(x)$$

$- \int_{-\infty}^{\infty} dx (\psi'(x))^* \psi(x)$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx (\alpha x \psi(x))^* \psi(x) - \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\beta \frac{d}{dx} \psi(x) \right)^* \psi(x)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ (\alpha x - \beta \frac{d}{dx}) \psi(x) \right\}^* \psi(x) = \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x)^* \left((\alpha x - \beta \frac{d}{dx}) \psi(x) \right) \right\}^*$$

$$= (\langle \psi | \hat{a}^\dagger | \psi \rangle)^*$$

エカルギー固有値と固有状態

$\hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有値 $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有状態

$$(1) \hat{a}^\dagger \hat{a} |\Psi_\mu\rangle = \mu |\Psi_\mu\rangle \text{ となる } \mu \text{ と } |\Psi_\mu\rangle \text{ があると仮定} \quad ||\Psi_\mu|| > 0$$

$$(2) ||\hat{a}|\Psi_\mu\rangle||^2 = \langle \Psi_\mu | \hat{a}^\dagger \hat{a} |\Psi_\mu\rangle = \mu \langle \Psi_\mu | \Psi_\mu \rangle$$

$$(3) \mu = \frac{||\hat{a}|\Psi_\mu\rangle||^2}{||\Psi_\mu||^2} \geq 0$$

$\hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有値 μ は 0 以上の実数

昇降演算子の働き

- $\hat{a}^\dagger |\Psi_\mu\rangle$ と 113 状態を考えて

$$(6) \hat{a}^\dagger \hat{a} (\hat{a}^\dagger |\Psi_\mu\rangle) = \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger |\Psi_\mu\rangle = \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} |\Psi_\mu\rangle + \hat{a}^\dagger |\Psi_\mu\rangle = (\mu + 1) \hat{a}^\dagger |\Psi_\mu\rangle$$

$\hat{a}^\dagger |\Psi_\mu\rangle$ も $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有状態 固有値は $\mu + 1$

くり返せば $\mu + 2, \mu + 3, \dots$ とどんどん作れる

$$(4) \hat{H} = \hbar \omega (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}) \text{ エリ}$$

$$(5) \hat{H} |\Psi_\mu\rangle = \hbar \omega (\mu + \frac{1}{2}) |\Psi_\mu\rangle$$

エカルギー 固有状態！

- $\hat{a}|\psi_\mu\rangle$ もう1つ状態を考える $\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger - 1 = \mu |\psi_\mu\rangle$ 10
- (1) $\hat{a}^\dagger \hat{a} (\hat{a} |\psi_\mu\rangle) = \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger |\psi_\mu\rangle - \hat{a} |\psi_\mu\rangle = (\mu - 1) \hat{a} |\psi_\mu\rangle$
- $\hat{a} |\psi_\mu\rangle$ も $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有状態 固有値は $\mu - 1$
- <り返せば $\mu - 2, \mu - 3, \dots$ とどんどん作れる
- $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有値は 0 以上?
- $\hat{a} |\psi_\mu\rangle$ のノルム (2) $\|\hat{a} |\psi_\mu\rangle\|^2 = \langle \psi_\mu | \hat{a}^\dagger \hat{a} |\psi_\mu\rangle = \mu \langle \psi_\mu | \psi_\mu \rangle = \mu \|\psi_\mu\|^2$
- 特に (3) $\|\hat{a} |\psi_0\rangle\| = 0 \iff (4) \hat{a} |\psi_0\rangle = 0$ なぜなら (4) 大きさではない)
- $\mu = 0$ より ψ_0 は正規化可能。

$\hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有値 μ は 0 以上の整数であることはなぜなら。

証明 μ が正で、整数であるとする $\rightarrow \mu - 1, \mu - 2, \dots, \mu' \quad 0 < \mu' < 1$ となる固有値 μ'

(2) より $\|\hat{a} |\psi_{\mu'}\rangle\|^2 = \mu' \|\psi_{\mu'}\|^2 \neq 0 \Rightarrow 2 \hat{a} |\psi_{\mu'}\rangle$ はゼロではない。

$\hat{a} |\psi_{\mu'}\rangle$ は $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有状態で固有値は $\mu' - 1 < 0$ 矛盾！

□ エネギー固有状態の構成

- $n = 0, 1, 2, \dots$ ($\vdash \rightarrow 112$)

(1) $\hat{a}^\dagger \hat{a} |\psi_n\rangle = n |\psi_n\rangle$, $\|\psi_n\|=1$ を満たす状態 $|\psi_n\rangle$ をつくりたい

- $\hat{a} |\psi_0\rangle = 0$, $\|\psi_0\|=1$ を満たす状態 $|\psi_0\rangle$ があると仮定 \rightarrow あとで元

$$(2) \hat{a}^\dagger \hat{a} |\psi_0\rangle = 0$$

- $\hat{a}^\dagger |\psi_0\rangle$ という状態 $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ の固有状態で 固有値は $\mu = 1$

$$(3) \|\hat{a}^\dagger |\psi_0\rangle\|^2 = \langle \psi_0 | \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger |\psi_0\rangle = \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle + \langle \psi_0 | \hat{a}^\dagger \hat{a} |\psi_0\rangle = 1$$

↑ PD-(5) = 1 + $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ 0 天井不格化され?
(13)

$$(4) |\psi_1\rangle := \hat{a}^\dagger |\psi_0\rangle$$
 とする

• $|\psi_{n-1}\rangle$ がてきたとする ($n=1, 2, \dots$)

$$(1) \quad \|\hat{a}^{\dagger}|\psi_{n-1}\rangle\|^2 = \langle\psi_{n-1}|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}^{\dagger}|\psi_{n-1}\rangle = \langle\psi_{n-1}|\psi_{n-1}\rangle + \langle\psi_{n-1}|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|\psi_{n-1}\rangle = n$$

$$\text{よし} \quad (2) \quad |\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^{\dagger}|\psi_{n-1}\rangle$$

「リ返しがえり」 (3) $|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^{\dagger})^n |\psi_0\rangle \quad n=0, 1, 2, \dots$

$$(4) \quad \hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \frac{1}{2}) \quad (5) \quad \hat{H}|\psi_n\rangle = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|\psi_n\rangle$$

左：エネルギー固有状態 $|\psi_n\rangle$
 右：エネルギー固有値 $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad (n=0, 1, 2, \dots)$

- よりよるの値 ($\omega = \sqrt{\frac{m}{k}}$ のとき $= \hbar\omega$)
- 基底エネルギー $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ も口点。エネルギー

(2) より

$$(S) \quad \hat{a}|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}\hat{a}^{\dagger}|\psi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} (\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + 1)|\psi_{n-1}\rangle = \sqrt{n}|\psi_{n-1}\rangle$$

△ 基底状態の運動力学

$|\psi_0\rangle$ は $\hat{a}|\psi_0\rangle = 0$ と $\|\psi_0\| = 1$ を満たす。

$$(1) \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx} \quad \text{ただし}$$

$$(2) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) = 0$$

$$(3) \frac{d\psi_0(x)}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0(x) \quad \leftarrow \text{1階の常微分方程式}$$

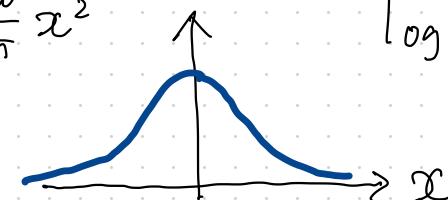
変数分離法で

$$(4) \frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0$$

$$(5) \int \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} \int x dx$$

$$(6) \psi_0(x) = A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

ガウス型



$$\log \psi_0 + C$$

$$\frac{x^2}{2} + C'$$

Gauss 積分

$$(1) \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} = \sqrt{\pi}$$

$$(2) \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\alpha x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (\alpha > 0)$$

正規化

$$(3) \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_0(x)|^2 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = 1$$

$A > 0$ と $\text{「} \text{」}$

$$(4) \boxed{\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}$$

基底状態の波動関数.

$|\psi_0\rangle$ が存在することもわかる.

一般のエネルギー固有状態の波動関数

$$(1) |\Psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |\Psi_0\rangle \quad n=1, 2, \dots$$

$$(2) \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \tilde{x} - \frac{d}{d\tilde{x}} \right\} = -\frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{\tilde{x}^2}{2}} \frac{d}{d\tilde{x}} e^{-\frac{\tilde{x}^2}{2}}$$

$$\tilde{x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

$$(3) e^{\frac{\tilde{x}^2}{2}} \frac{d}{d\tilde{x}} \left(e^{-\frac{\tilde{x}^2}{2}} f(\tilde{x}) \right)$$

$$= e^{\frac{\tilde{x}^2}{2}} (-\tilde{x}) e^{-\frac{\tilde{x}^2}{2}} f(\tilde{x}) + e^{\frac{\tilde{x}^2}{2}} e^{-\frac{\tilde{x}^2}{2}} f'(\tilde{x})$$

$$= -\tilde{x} f(\tilde{x}) + f'(\tilde{x})$$

$$\text{また } (4) |\Psi_0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{\tilde{x}^2}{2}} \text{ とす}$$

$$(5) |\Psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |\Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{\tilde{x}^2}{2}} \frac{d}{d\tilde{x}} e^{-\frac{\tilde{x}^2}{2}} \right)^n e^{-\frac{\tilde{x}^2}{2}}$$

$$(1) \Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \left\{ -\frac{1}{\sqrt{2}} e^{\frac{z^2}{2}} \frac{d}{dz} e^{-\frac{z^2}{2}} \right\}^n e^{-\frac{z^2}{2}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{\frac{z^2}{2}} (-1)^n \frac{d^n}{dz^n} e^{-\frac{z^2}{2}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{z^2}{2}} H_n(\frac{z}{\sqrt{2}})$$

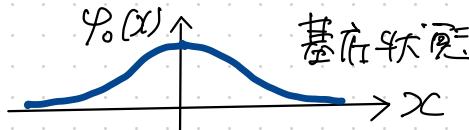
\therefore (2) $H_n(\frac{z}{\sqrt{2}}) = (-1)^n e^{\frac{z^2}{2}} \frac{d^n}{dz^n} e^{-\frac{z^2}{2}}$ エルミート多項式

$$(3) H_0(\frac{z}{\sqrt{2}}) = 1, H_1(\frac{z}{\sqrt{2}}) = 2\frac{z}{\sqrt{2}}, H_2(\frac{z}{\sqrt{2}}) = 4\frac{z^2}{2} - 2, H_3(\frac{z}{\sqrt{2}}) = 8\frac{z^3}{2} - 12\frac{z}{\sqrt{2}}, \dots$$

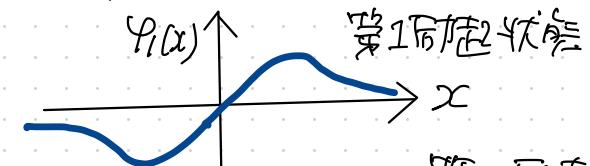
正規化

固有状態

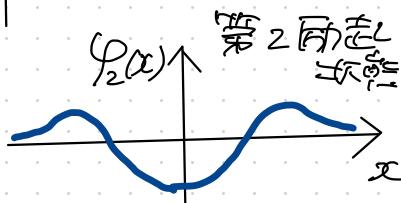
$$(4) \Psi_0(x) = \text{const. } e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$



$$(5) \Psi_1(x) = \text{const. } x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$



$$(6) \Psi_2(x) = \text{const. } \left(\frac{2m\omega}{\hbar} x^2 - 1 \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$



多期待値の計算

一般の状態ごとの位置の期待値

任意の状態変化された状態(1次元) $\Psi(x)$ ($x \in \mathbb{R}$)

$|\Psi(x)|^2$ 粒子の位置を測定した際に x にかかる確率密度

- 式2 (2) $\langle \hat{x} \rangle_\psi := \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\Psi(x)|^2$

は (同じ状態 $|\Psi\rangle$ をFCさん用意(2) 位置を同時に測定したときの期待値
 (いつも「新しい $|\Psi\rangle$ 」をつかう!)

期待値は (3) $\langle \hat{x} \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x)^* (x \Psi(x)) = \langle \Psi | \hat{x} | \Psi \rangle$ とも書ける

- 同様に $(\text{位置})^2$ の期待値

(4) $\langle \hat{x}^2 \rangle_\psi := \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 |\Psi(x)|^2 = \langle \Psi | \hat{x}^2 | \Psi \rangle$

■ 基底状態ごとの位置の期待値

18

140 > 語和子の基底状態

位置の期待値 $\langle \hat{x} \rangle_{\psi_0}$, 位置の2乗の期待値 $\langle \hat{x}^2 \rangle_{\psi_0}$

2つの方法で
計算する。

方法1 三次運動関数をつかう (1) $\varphi_0(x) = \left(\frac{mc_0}{T\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{mc_0}{2\hbar}x^2}$

$$(2) \langle \hat{x} \rangle_{\psi_0} = \int_{-\infty}^{\infty} dx x (\psi_0(x))^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx x e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} = 0$$

奇偶卷积

$$(3) \langle \hat{x}^2 \rangle_{\phi_0} = \sqrt{\frac{m\omega}{T\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} = \sqrt{\frac{m\omega}{T\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx x \left(-\frac{\hbar}{2m\omega}\right) (e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2})'$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \sqrt{\frac{m\omega}{T\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

(4) $\langle \hat{x} \rangle_{\psi_0} = 0$ 平均値は0にいる ← あたりまえ

電子力学！

$$(5) \langle \hat{x}^2 \rangle_{\psi_0} = \frac{\hbar}{2m\omega}, \quad x=0 \text{ のまわり} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \text{ 程度 } 45^\circ \text{ に}.$$

方法2 \hat{a} と \hat{a}^\dagger をつかう ← 頻りにかく、二(1) 計算法!

$$(1) \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p} \quad (2) \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}$$

より (3) $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})$

\hat{a} と \hat{a}^\dagger の基本的性質

- $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$
- $\hat{a}|\psi_0\rangle = 0$
- $\langle \psi_0 | \hat{a}^\dagger = 0$

(任意の $|z\rangle$) で

$$(4) \langle \psi_0 | \hat{a}^\dagger | z \rangle = \langle z | \hat{a} | \psi_0 \rangle^* = 0$$

(3) と 同じ 3つの性質で
を使、期待値を計算!

$$(5) \langle \hat{x} \rangle_{\psi_0} = \langle \psi_0 | \hat{x} | \psi_0 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \psi_0 | (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) | \psi_0 \rangle = 0$$

線形性
 $\langle \psi_0 | (\hat{A} + \hat{B}) | \psi_0 \rangle$
 $= \langle \psi_0 | \hat{A} | \psi_0 \rangle + \langle \psi_0 | \hat{B} | \psi_0 \rangle$ で

$$(6) \langle \hat{x}^2 \rangle_{\psi_0} = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi_0 | (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 | \psi_0 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$(7) \langle \psi_0 | (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}^2 + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | \hat{a} \hat{a}^\dagger | \psi_0 \rangle = 1$$

$\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1$

複雑な期待値の計算には \hat{a}, \hat{a}^\dagger を使う方法が有利

部分積分をすると同じことだが、能率的に計算ができる (E2 案 C1)

$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1$ を使って \hat{a} を右へ \hat{a}^\dagger を左へ $\rightarrow \hat{a}|\Psi_0\rangle = 0, \langle \Psi_0 | \hat{a}^\dagger = 0$ を使って もう少し違う。さりげなく $\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = 1$ をつかう

$$(1) \langle \Psi_0 | \hat{a} \hat{a}^\dagger |\Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) |\Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle = 1$$

$$(2) \langle \Psi_0 | \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger |\Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | (\hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger) |\Psi_0 \rangle = 0$$

$$(3) \langle \Psi_0 | \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger |\Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | (\hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) |\Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \hat{a} \hat{a}^\dagger |\Psi_0 \rangle = 1$$

$$(4) \langle \Psi_0 | \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger |\Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | (\hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger) |\Psi_0 \rangle = 2$$

$$(5) \langle \Psi_0 | \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger |\Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger) |\Psi_0 \rangle = 0 \quad \text{など}$$

よく考える (6) $\langle \Psi_0 | \hat{a}^\# \hat{a}^\# \cdots \hat{a}^\# |\Psi_0 \rangle = 0$

$$\left(\hat{a}^\# = \hat{a} \text{ or } \hat{a}^\dagger \right)$$

\hat{a} と \hat{a}^\dagger の数が異なった

例 $\langle \varphi_1 | \hat{x}(\varphi_1) \rangle, \langle \varphi_1 | \hat{x}^2(\varphi_1) \rangle$

$$(1) |\varphi_1\rangle = \hat{a}^\dagger(\varphi_0) \text{ と } \langle \varphi_1 | = \langle \varphi_0 | \hat{a}$$

$$\begin{aligned} & \because \text{左辺の} |\beta\rangle \\ (2) \quad & \langle \beta | \varphi_1 \rangle = \langle \varphi_1 | \beta \rangle^* \quad (\text{P7-(2)}) \\ (3) \quad & \langle \beta | \varphi_1 \rangle = \langle \beta | \hat{a}^\dagger(\varphi_0) = \langle \varphi_0 | \hat{a} | \beta \rangle^* \end{aligned}$$

$$(4) \langle \varphi_1 | \hat{x}(\varphi_1) \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \varphi_0 | \hat{a}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \hat{a}^\dagger | \varphi_0 \rangle = 0$$

$$(5) \langle \varphi_1 | \hat{x}^2(\varphi_1) \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \varphi_0 | \hat{a}(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 \hat{a}^\dagger | \varphi_0 \rangle = \frac{3\hbar}{2m\omega}$$

$$(6) \langle \varphi_0 | \hat{a}(\hat{a}^\dagger)^3 | \varphi_0 \rangle + \langle \varphi_0 | (\hat{a})^3 \hat{a}^\dagger | \varphi_0 \rangle + \langle \varphi_0 | \hat{a} \hat{a}^\dagger \hat{a} \hat{a}^\dagger | \varphi_0 \rangle + \langle \varphi_0 | \hat{a}^2(\hat{a}^\dagger)^2 | \varphi_0 \rangle$$

|| 0 || 0 P20-(3) 1 P20-(4) 2

例 $\langle \varphi_0 | \hat{x}^4(\varphi_0) \rangle$

$$(7) \langle \varphi_0 | \hat{x}^4(\varphi_0) \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \langle \varphi_0 | (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^4 | \varphi_0 \rangle = \frac{3}{4} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2$$

|| 0

$$\begin{aligned} (8) \quad & \langle \varphi_0 | ((\hat{a}^\dagger)^2 a^2 + a^\dagger a a^\dagger a + a^\dagger a^2 a^\dagger + a a^\dagger a a^\dagger + a^2 (\hat{a}^\dagger)^2 + a (\hat{a}^\dagger)^2 a) | \varphi_0 \rangle \\ & \approx \langle \varphi_0 | a a^\dagger a a^\dagger | \varphi_0 \rangle + \langle \varphi_0 | a^2 (\hat{a}^\dagger)^2 | \varphi_0 \rangle = 3 \end{aligned}$$

► $|\Psi_n\rangle$ を含む計算(参考)

$$(1) \hat{a}^{\dagger} |\Psi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\Psi_{n+1}\rangle \quad n=0, 1, 2, \dots \quad P(2-(2))$$

$$(2) \hat{a} |\Psi_n\rangle = \sqrt{n} |\Psi_{n-1}\rangle \quad n=1, 2, \dots \quad P(2-(5))$$

$$(3) \hat{a}^{\dagger} \hat{a} |\Psi_n\rangle = n |\Psi_n\rangle \quad n=0, 1, 2, \dots \quad P(1-(1))$$

おまけ

$$(4) \langle \Psi_n | \Psi_{n'} \rangle = \delta_{n,n'} \quad n, n' = 0, 1, 2, \dots$$

を使うと \hat{x}^2 の

$$\hat{a}^{\dagger} \hat{a} + 1$$

例

$$(5) \langle \Psi_n | \hat{x}^2 |\Psi_n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \Psi_n | (\hat{a}^2 + (\hat{a}^{\dagger})^2 + \hat{a} \hat{a}^{\dagger} + \hat{a}^{\dagger} \hat{a}) |\Psi_n \rangle = \frac{2n+1}{2} \frac{\hbar}{m\omega}$$

$$2n+1$$

$$(6) \langle \Psi_{n+2} | \hat{x}^2 |\Psi_n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \Psi_{n+2} | (\hat{a}^{\dagger})^2 |\Psi_n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \sqrt{n+1} \langle \Psi_{n+2} | \hat{a}^{\dagger} |\Psi_{n+2} \rangle$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} \sqrt{n+1} \sqrt{n+2} \langle \Psi_{n+2} | \Psi_{n+2} \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \sqrt{(n+1)(n+2)}$$

Ⅳ 期待値の時間変化

23

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

時間発展の Schrödinger 方程式¹ (1) $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, x) = \hat{H} \Psi(t, x)$

(2) $\Psi_n(t, x) := e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \phi_n(x)$ は (1) の解 $(n=0, 1, 2, \dots)$
→ エネルギー固有状態

$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ たり (3) $\Psi_n(t, x) = e^{-i\omega(n + \frac{1}{2})t} \phi_n(x)$

→ 誰が振動かの振動?

• $\Psi_0(t, x)$ ごの位置の期待値

$$(4) \langle \hat{x} \rangle_{\Psi_0(t)} = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\Psi_0(t, x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx x (\psi_0(x))^2 = \langle \hat{x} \rangle_{\psi_0} = 0$$

• $\Psi_1(t, x)$ ごの位置の期待値

$$(5) \langle \hat{x} \rangle_{\Psi_1(t)} = \int_{-\infty}^{\infty} dx x (\psi_1(x))^2 = \langle \hat{x} \rangle_{\psi_1} = 0$$

振動して!

(定常状態だから)
あたりまん

Schrödinger 方程式 (p23-(1)) の解法

任意の係数 $\alpha_0, \alpha_1, \dots \in \mathbb{C}$ で $\sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \Psi_n(t, x)$ も解!

かんたんな例 (1) $\Psi(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_0(t, x) + \Psi_1(t, x) \}$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ e^{-\frac{i\omega}{2}t} \Psi_0(x) + e^{-\frac{i3\omega}{2}t} \Psi_1(x) \right\}$$

(2)

$$\langle \hat{x} \rangle_{\Psi(t)} = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\Psi(t, x)|^2$$

$$= \frac{1}{2} \int dx x \left(e^{\frac{i\omega}{2}t} \Psi_0(x) + e^{\frac{i3\omega}{2}t} \Psi_1(x) \right) \left(e^{-\frac{i\omega}{2}t} \Psi_0(x) + e^{-\frac{i3\omega}{2}t} \Psi_1(x) \right)$$

$$= \frac{1}{2} \left[\underbrace{\int_0^\infty x (\Psi_0(x))^2}_{0} + \underbrace{\int_0^\infty x (\Psi_1(x))^2}_{0} + (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) \int dx x \Psi_0(x) \Psi_1(x) \right]$$

$$\langle \Psi_0 | \hat{x} | \Psi_1 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cos(\omega t)$$

古典の場合と似た振動

コヒーレント状態 (おまけ)

$\alpha \in \mathbb{C}, \alpha \neq 0$ について (1)

$$|\chi_\alpha\rangle := e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\varphi_n\rangle$$

- $\alpha \rightarrow 0$ のとき $|\chi_\alpha\rangle \rightarrow |\varphi_0\rangle$

- $|\alpha|$ が大きければ “大きさ n に $1/2$ の $|\varphi_n\rangle$ の重ね合わせ”

古典的状態

$$\hat{a}|\varphi_0\rangle = 0, \quad \hat{a}|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle \quad (n=1,2,\dots) \quad \text{と} \quad \text{と}$$

$$(2) \quad \hat{a}|\chi_\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{(n-1)!}} |\varphi_{n-1}\rangle$$

$$\stackrel{n' = n-1}{=} e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{\alpha \alpha^{n'}}{\sqrt{n'!}} |\varphi_{n'}\rangle = \alpha |\chi_\alpha\rangle$$

下げ“演算子 \hat{a} の固有状態”

位置の期待値

$$(1) \langle \chi_\alpha | = e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)^n}{\sqrt{n!}} \langle \varphi_n | \delta y$$

$$(2) \|\chi_\alpha\|^2 = \langle \chi_\alpha | \chi_\alpha \rangle = e^{-|\alpha|^2} \sum_{n',n=0}^{\infty} \frac{(\alpha^{n'})^*}{\sqrt{n'!}} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle \varphi_{n'} | \varphi_n \rangle$$

" $S_{n',n}$

$$= e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = 1 \quad \text{ ragazzi てんご}$$

$$(3) \langle \hat{x} \rangle_{\chi_\alpha} = \langle \chi_\alpha | \hat{x} | \chi_\alpha \rangle = e^{-|\alpha|^2} \sum_{n',n=0}^{\infty} \frac{(\alpha^{n'})^*}{\sqrt{n'!}} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle \varphi_{n'} | \hat{x} | \varphi_n \rangle$$

$$(4) \langle \varphi_n | \hat{x} | \varphi_n \rangle = \sqrt{\frac{5}{2m\omega}} \langle \varphi_n | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | \varphi_n \rangle$$

P22 η \hat{a} \hat{a}^\dagger

$$(5) \langle \varphi_n | \hat{a} | \varphi_n \rangle = \sqrt{n} \langle \varphi_{n-1} | \varphi_{n-1} \rangle = \sqrt{n} S_{n',n-1} \quad \begin{matrix} (n=1,2,\dots) \\ (n'=0,1,2,\dots) \end{matrix}$$

F)

$$(6) \langle \varphi_n | \hat{a}^\dagger | \varphi_n \rangle = \sqrt{n+1} \langle \varphi_{n+1} | \varphi_{n+1} \rangle = \sqrt{n+1} S_{n',n+1} \quad \begin{matrix} (n=0,1,2,\dots) \\ (n'=1,2,\dots) \end{matrix}$$

5.2

$$(1) \langle \hat{x} \rangle_{\hat{x}_\alpha} = e^{-|\alpha|^2} \sum_{n', n=0}^{\infty} \frac{(\alpha^{n'})^*}{\sqrt{n'!}} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \underbrace{\langle \varphi_{n'}, |\hat{x}| \varphi_n \rangle}_{(1)}$$

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n} S_{n', n-1} + \sqrt{n+1} S_{n', n+1})$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} e^{-|\alpha|^2} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\alpha^{n-1})^*}{\sqrt{(n-1)!}} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \sqrt{n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha^{n+1})^*}{\sqrt{(n+1)!}} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \sqrt{n+1} \right\}$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} e^{-|\alpha|^2} \left\{ \sum_{n'=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n'} \alpha^*}{n'!} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n} \alpha^*}{n!} \right\}$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha + \alpha^*)$$

$n' = n - 1$

時間発展

(1) $e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t} |\psi_n\rangle$ は時間発展の Schr. eq. の解

よし2

(2) $|\Psi(t)\rangle = e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega(n+\frac{1}{2})t} |\psi_n\rangle$ も解. (3) $|\Psi(0)\rangle = |\chi_\alpha\rangle$

(4) $|\Psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\omega}{2}t} e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |\psi_n\rangle = e^{-i\frac{\omega}{2}t} |\chi_{\alpha e^{-i\omega t}}\rangle$

】ヒーリント状態は時間が経過してもヒーリント状態のま。

（） $\times A - \alpha$ 变化する

位置の期待値

$$\begin{aligned}
 (5) \langle \Psi(t) | \hat{x} | \Psi(t) \rangle &= \int \frac{1}{2\pi\omega} (\alpha e^{-i\omega t} + \alpha^* e^{i\omega t}) \\
 &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} A \cos(\omega t + \theta)
 \end{aligned}$$

古典力学と同じ運動！

$A, \theta \in \mathbb{R}$

$$\alpha = A e^{-i\theta}$$