〈孤立した量子系の時間発展〉 1

§時間発展

ハミルトニアンとシュレディンガー方程式

- ある瞬間での1粒子の状態 $|\psi\rangle \leftrightarrow \psi(x)$

  t : 時刻

  時刻 t での状態 $|\psi(t)\rangle \leftrightarrow \psi(t, x)$

- 系が外界から孤立しているときの $|\psi(t)\rangle$ の時間発展

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle} \quad (1)$$

Schrödinger方程式

$t=0$ での状態 $|\psi(0)\rangle$ がわかっていれば

(1)から任意の t での状態 $|\psi(t)\rangle$ がわかる

力学

ハミルトニアン $\hat{H}$

エネルギーに対応する自己共役演算子

（$\hat{H}$ の固有値がエネルギーの確定値）

ⅲ ポテンシャル $V(\boldsymbol{x})$ 中の粒子

古典力学のエネルギー

$$E = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{x}) \qquad (1)$$

対応するハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(\hat{\boldsymbol{x}}) \qquad (2)$$

$$\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla, \quad \hat{\boldsymbol{p}}^2 = \hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} = -\hbar^2\Delta$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\varphi(t)\rangle = \hat{H}|\varphi(t)\rangle \qquad (3)$$ は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t,\boldsymbol{x}) = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{x})\right\}\varphi(t,\boldsymbol{x}) \qquad (4)$$

（最初にでてきた）時間発展のSchrödinger方程式

(1) ハミルトニアンが時間に依存するとき

何らかの理由で $V(x)$ が時間によって変わる $V(t, x)$

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(t, \hat{x}) \quad (1)$$

も t による。

この場合の Sch. eq. は

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (2)$$

ブラ状態の時間発展

$$\left(\frac{d}{dt}|\varphi(t)\rangle\right)^\dagger = \left(\lim_{\Delta t \to 0} \frac{|\varphi(t+\Delta t)\rangle - |\varphi(t)\rangle}{\Delta t}\right)^\dagger \quad (1)$$

$$= \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\langle\varphi(t+\Delta t)| - \langle\varphi(t)|}{\Delta t} = \frac{d}{dt}\langle\varphi(t)| \quad (2)$$

$$\left(i\hbar\frac{d}{dt}|\varphi(t)\rangle\right)^\dagger = \left(\hat{H}|\varphi(t)\rangle\right)^\dagger \quad (3)$$

$$-i\hbar\frac{d}{dt}\langle\varphi(t)| = \langle\varphi(t)|\hat{H} \quad (4)$$

内積の時間発展

$|\varphi_1(t)\rangle, |\varphi_2(t)\rangle$ Sch. eq. の解

$$\frac{d}{dt}\langle\varphi_1(t)| = -\frac{1}{i\hbar}\langle\varphi_1(t)|\hat{H} \quad (1)$$

$$\frac{d}{dt}|\varphi_2(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\varphi_2(t)\rangle \quad (2)$$

すると

$$\frac{d}{dt}\langle\varphi_1(t)|\varphi_2(t)\rangle$$

$$= \left(\frac{d}{dt}\langle\varphi_1(t)|\right)|\varphi_2(t)\rangle + \langle\varphi_1(t)|\left(\frac{d}{dt}|\varphi_2(t)\rangle\right)$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\langle\varphi_1(t)|\hat{H}|\varphi_2(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\varphi_1(t)|\hat{H}|\varphi_2(t)\rangle \quad (3)$$

$$\boxed{= 0}$$ ← 内積は時間変化しない

ノルム $\||\varphi(t)\rangle\| = \sqrt{\langle\varphi(t)|\varphi(t)\rangle}$

も時間変化しない

時間発展のユニタリー演算子

$|\varphi_1(t)\rangle, |\varphi_2(t)\rangle$ Sch. eq. の解

$\alpha|\varphi_1(t)\rangle + \beta|\varphi_2(t)\rangle$ も Sch eq. の解

時間発展は線形　　　$\alpha, \beta \in \mathbb{C}$

時間発展の演算子 $\hat{U}(t)$

$$\hat{U}(t)|\varphi(0)\rangle = |\varphi(t)\rangle \quad (1)$$

$$\langle\varphi(t)| = \langle\varphi(0)|(\hat{U}(t))^\dagger \quad (2)$$

$$\langle\varphi_1(t)|\varphi_2(t)\rangle = \langle\varphi_1(0)|\varphi_2(0)\rangle \quad (3)$$ だった

つまり

$$\langle\varphi_1(0)|(\hat{U}(t))^\dagger\hat{U}(t)|\varphi_2(0)\rangle = \langle\varphi_1(0)|\varphi_2(0)\rangle \quad (4)$$

が任意の $|\varphi_1(0)\rangle, |\varphi_2(0)\rangle$ について成立

$$(\hat{U}(t))^\dagger\hat{U}(t) = \hat{1} \quad (5)$$

$\hat{U}(t)$ はユニタリー演算子

任意の $s, t \in \mathbb{R}$ について $\hat{U}(s)\hat{U}(t) = \hat{U}(s+t)$ (6)

期待値の時間変化

演算子 $\hat{A}$

$|\varphi(t)\rangle$ における期待値 $\langle\hat{A}\rangle_{\varphi(t)} = \langle\varphi(t)|\hat{A}|\varphi(t)\rangle$ (1)

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle_{\varphi(t)} = \frac{d}{dt}\langle\varphi(t)|\hat{A}|\varphi(t)\rangle \tag{2}$$

$$= \left(\frac{d}{dt}\langle\varphi(t)|\right)\hat{A}|\varphi(t)\rangle + \langle\varphi(t)|\hat{A}\left(\frac{d}{dt}|\varphi(t)\rangle\right) \tag{3}$$

$$= -\frac{1}{i\hbar}\langle\varphi(t)|\hat{H}\hat{A}|\varphi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\varphi(t)|\hat{A}\hat{H}|\varphi(t)\rangle \tag{4}$$

$$\boxed{= \frac{i}{\hbar}\langle\varphi(t)|[\hat{H},\hat{A}]|\varphi(t)\rangle} \tag{5}$$

もし $[\hat{H},\hat{A}]=0$ なら $\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle_{\varphi(t)} = 0$ (6)

$\langle\hat{A}\rangle_{\varphi(t)}$ は t によらない → $\hat{A}$ は保存量

特に $\langle\hat{H}\rangle_{\varphi(t)}$ は t によらない

エネルギー保存則

§エーレンフェストの定理

量子力学とNewton力学のひとつのつながり

$|\psi(t)\rangle$ は $i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$ (1) をみたす $(\||\psi(t)\rangle\| = 1)$

$\langle \hat{A} \rangle_{\psi(t)} = \langle \psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle$ (2) とすると

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A}\rangle_{\psi(t)} = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{A}]\rangle_{\psi(t)} \quad (3)$$

◎ブツウのハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbb{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbb{X}}) \quad (4)$$

◎位置の期待値 $\langle \hat{x} \rangle_{\psi(t)}$ の時間変化？

$$[\hat{H}, \hat{x}] = \frac{1}{2m}[\hat{\mathbb{P}}^2, \hat{x}] = \frac{1}{2m}[\hat{p}_x^2, \hat{x}] = -i\hbar\frac{\hat{p}_x}{m} \quad (5)$$

$$\hat{p}_x[\hat{p}_x, \hat{x}] + [\hat{p}_x, \hat{x}]\hat{p}_x = -2i\hbar\hat{p}_x \quad (6)$$

(3)に代入して $\frac{d}{dt}\langle \hat{x}\rangle_{\psi(t)} = \frac{1}{m}\langle \hat{p}_x\rangle_{\psi(t)}$ (7)

よって $\frac{d}{dt}\langle \hat{\mathbb{X}}\rangle_{\psi(t)} = \frac{1}{m}\langle \hat{\mathbb{P}}\rangle_{\psi(t)}$ (8)

古典なら $\dot{\mathbb{X}} = \frac{\mathbb{P}}{m}$ (9) だ！

$\langle \hat{\boldsymbol{p}} \rangle_{\varphi(t)}$ の時間変化？

交換子 $[\hat{H}, \hat{p}_x] = [V(\hat{\boldsymbol{r}}), \hat{p}_x] = ?$ (1)

$$[V(\boldsymbol{r}), \hat{p}_x]\boxed{\varphi(\boldsymbol{r})}$$ ← 任意の波動関数

$$= V(\boldsymbol{r})\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi(\boldsymbol{r}) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)V(\boldsymbol{r})\varphi(\boldsymbol{r})$$

$$= i\hbar\frac{\partial V(\boldsymbol{r})}{\partial x}\varphi(\boldsymbol{r}) \quad (2)$$

よって $$[V(\hat{\boldsymbol{r}}), \hat{p}_x] = i\hbar\frac{\partial V(\hat{\boldsymbol{r}})}{\partial x} \quad (3)$$

他の成分も同じなので

$$[V(\hat{\boldsymbol{r}}), \hat{\boldsymbol{p}}] = i\hbar\,\mathrm{grad}\,V(\hat{\boldsymbol{r}}) \quad (4)$$

$\left(([V(\hat{\boldsymbol{r}}), \hat{p}_x], [V(\hat{\boldsymbol{r}}), \hat{p}_y], [V(\hat{\boldsymbol{r}}), \hat{p}_z])\ \text{というベクトル} \right)$

p8−(3)より

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{\boldsymbol{p}} \rangle_{\varphi(t)} = -\langle \mathrm{grad}\,V(\hat{\boldsymbol{r}}) \rangle_{\varphi(t)} \quad (5)$$

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{\mathbf{r}}\rangle_{\varphi(t)} = \frac{1}{m}\langle \hat{\mathbf{p}}\rangle_{\varphi(t)} \qquad (1)\ (p8-(8))$$

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{\mathbf{p}}\rangle_{\varphi(t)} = -\langle \mathrm{grad}\, V(\hat{\mathbf{r}})\rangle_{\varphi(t)} \qquad (2)\ (p9-(5))$$

エーレンフェストの定理

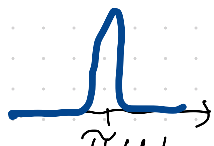
$$\boxed{m\frac{d^2}{dt^2}\langle \hat{\mathbf{r}}\rangle_{\varphi(t)} = -\langle \mathrm{grad}\, V(\hat{\mathbf{r}})\rangle_{\varphi(t)}} \qquad (3)$$

Newton方程式 $m\ddot{\mathbf{r}}(t) = -\mathrm{grad}\, V(\mathbf{r}(t))$ (4)

とそっくり！

ただし(3)は期待値についての関係

・もし $\varphi(t,\mathbf{r})$ が $\tilde{\mathbf{r}}(t)$ のまわりに集中していれば



$$\langle \hat{\mathbf{r}}\rangle_{\varphi(t)} \simeq \tilde{\mathbf{r}}(t) \qquad (5)$$

$$\langle \mathrm{grad}\, V(\hat{\mathbf{r}})\rangle_{\varphi(t)} \simeq \mathrm{grad}\, V(\tilde{\mathbf{r}}(t)) \qquad (6)$$

(3)より $m\dfrac{d^2}{dt^2}\tilde{\mathbf{r}}(t) \simeq -\mathrm{grad}\, V(\tilde{\mathbf{r}}(t))$ (7)

$\tilde{\mathbf{r}}(t)$ は ほぼ Newton方程式の解

→次をみよ

しかし実際には $\varphi(t,\mathbf{r})$ は すぐに広がってしまう。

§1次元自由粒子の時間発展

Schrödinger方程式 $(V(x)=0)$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t,x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(t,x) \qquad (1)$$

$x \in \mathbb{R}$

例 平面波 $\varphi(t,x) = e^{i(kx-\omega t)}$ (2)

ただし $\hbar\omega = \dfrac{(\hbar k)^2}{2m}$ (3)

は (1) を満たすがノルムが無限大 → 状態ではない!

例 規格化された解の一例 (あとで導く)

$$\varphi(t,x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{1+\frac{i\hbar\alpha}{m}t}}\,e^{-\frac{\alpha}{2}\left(1+\frac{i\hbar\alpha}{m}t\right)^{-1}x^2} \qquad (4)$$

$\alpha > 0$

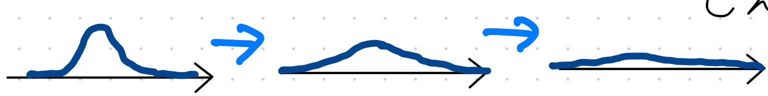
$$|\varphi(t,x)|^2 = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi\left\{1+\left(\frac{\hbar\alpha}{m}t\right)^2\right\}}}\,e^{-\frac{\alpha}{1+\left(\frac{\hbar\alpha}{m}t\right)^2}x^2}. \qquad (5)$$

よって

$$\langle \hat{x}^2\rangle_{\varphi(t)} = \frac{1+\left(\frac{\hbar\alpha}{m}t\right)^2}{2\alpha} \qquad (6)$$

$\varphi(t,x)$は「粒子の形」を表わすのではない.

どんどん広がる!!



§エネルギー固有状態と時間発展

エネルギー固有状態

$\hat{H}$ ハミルトニアン

(エネルギーに対応する自己共役演算子)

▷ 定常状態のSchrödinger方程式

$$\hat{H}|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle \qquad (1)$$

エネルギー固有値 (E)　エネルギー固有状態 ($|\varphi\rangle$)

スペクトル集合 spec($\hat{H}$) はすべて固有値からなるとする.

$$\begin{cases} \hat{H}|\psi_j\rangle = E_j|\psi_j\rangle & (2) \\ \mathrm{spec}(\hat{H}) = \{E_1, E_2, \cdots\} & (3) \\ \{|\psi_j\rangle\}_{j=1,2,\cdots} \text{ は正規直交完全系} & \end{cases}$$

としてよい.

定常状態

ある j について $|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{E_j}{\hbar}t}|\psi_j\rangle$ (1)

とする.

(波動関数 $\psi(t,x) = \underbrace{e^{-i\frac{E_j}{\hbar}t}}_{t\text{のみに依存}}\ \underbrace{\psi_j(x)}_{x\text{のみに依存}}$ (2)

(定在波と同じ))

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = i\hbar\left(-i\frac{E_j}{\hbar}\right)|\psi(t)\rangle = E_j|\psi(t)\rangle \quad (3)$$

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = E_j|\psi(t)\rangle \quad (4)$$

よって $i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$ (5)

Sch. 方程式の解だ。!

$|\psi(t)\rangle$ はつねに $|\psi_j\rangle$ と同じ物理的状態を表わす

$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{E_j}{\hbar}t}|\psi_j\rangle$ は定常状態の解

時間依存のSchrödinger方程式の一般解

任意の初期状態 $|\psi(0)\rangle$

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} a_j |\varphi_j\rangle \quad (1)$$

と展開

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} a_j e^{-i\frac{E_j}{\hbar}t} |\varphi_j\rangle \quad (2)$$

とする.

線形性 → (2)はSch.方程式の解

初期条件は任意 → 一般解!!

物理量の期待値の時間変化

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} a_j e^{-i\frac{E_j}{\hbar}t} |\psi_j\rangle \quad (1)$$

$$\langle\varphi(t)| = \sum_{j=1}^{\infty} a_j^* e^{i\frac{E_j}{\hbar}t} \langle\psi_j| \quad (2)$$

よって

$$\langle\hat{A}\rangle_{\varphi(t)} = \langle\varphi(t)|\hat{A}|\varphi(t)\rangle$$

$$= \sum_{j,k=1}^{\infty} a_j^* a_k e^{i\frac{E_j - E_k}{\hbar}t} \langle\psi_j|\hat{A}|\psi_k\rangle \quad (3)$$

角振動数 $(E_j - E_k)/\hbar$ で振動

時間発展のユニタリー演算子

$e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}$ という演算子を

$$e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}|\psi_j\rangle = e^{-i\frac{E_j}{\hbar}t}|\psi_j\rangle \quad (1)$$

により定ぎ

一般の自己共役演算子 $\hat{A}$ → spec($\hat{A}$)はすべて固有値

$$\hat{A}|\xi_j\rangle = a_j|\xi_j\rangle \quad (2)$$

$\alpha \in \mathbb{C}$ のとき

$$e^{\alpha\hat{A}}|\xi_j\rangle = e^{\alpha a_j}|\xi_j\rangle \quad (3)$$

によって $e^{\alpha\hat{A}}$ を定ぎ

$\hat{A}$ が有界なら

$$e^{\alpha\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\alpha\hat{A})^n \quad (4)$$

でも定ぎできる.

$$e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}|\psi(0)\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}\sum_j a_j|\psi_j\rangle$$

$$= \sum_j a_j e^{-i\frac{E_j}{\hbar}t}|\psi_j\rangle = |\psi(t)\rangle \quad (5)$$

$e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}$ は時間発展を表わすユニタリー演算子

$$\boxed{\hat{U}(t) = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}} \quad (6)$$

＜一般化固有状態＞

§デルタ関数の積分表示

2回目に

積分の中で!!

$$\delta(z) = \frac{1}{L}\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\frac{2\pi n}{L}z} \quad (1)$$

を示した $\left(-\frac{L}{2} \leq z \leq \frac{L}{2}\right)$

フツウの $x \in \mathbb{R}$ についてのデルタ関数は

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\lim_{L\to\infty}\sum_{n=-\infty}^{\infty} \boxed{\frac{2\pi}{L}}\, e^{i\overbrace{\boxed{\frac{2\pi n}{L}}}^{k}x}$$

$$= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk\, e^{ikx} \quad (2)$$

§平面波状態

3次元への拡張もかんたん

1次元系　$x \in \mathbb{R}$

$p \in \mathbb{R}$に対して

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x} \quad (1)$$

関数そのものを$|u_p\rangle$

$$\hat{p}\,u_p(x) = -i\hbar\,u_p'(x) = p\,u_p(x) \quad (2)$$

$\hat{p}$の固有状態っぽい → 一般化固有状態

しかし

$$\|u_p\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,|u_p(x)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dx = \infty \quad (3)$$

ノルムは無限大！
状態ではない

ためしに　$p, p' \in \mathbb{R}$について

$$\langle u_p | u_{p'} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,(u_p(x))^* u_{p'}(x)$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dx\,e^{i\frac{p'-p}{\hbar}x} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dw\,e^{i(p'-p)w}$$

$w = \frac{x}{\hbar}$

$$= \delta(p-p') \quad (4)$$

$$\langle u_p | u_{p'} \rangle = \delta(p-p') \quad (1) \qquad \langle \psi_j | \psi_{j'} \rangle = \delta_{j,j'} \quad (2)$$

これらは似ている.

(デルタ関数規格化)

$\{|\psi_j\rangle\}_{j=1,2\ldots}$ 任意の正規直交完全系

① 状態の展開

任意の状態 $|\varphi\rangle$ $(\||\varphi\|| < \infty)$

$$|\varphi\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j |\psi_j\rangle \quad (3) \qquad \alpha_j = \langle \psi_j | \varphi \rangle \quad (4)$$

と展開できる

同じように

$$|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \alpha_p |u_p\rangle \quad (5)$$

と展開できるのでは?

もし展開できるなら

$$\langle u_p | \varphi \rangle = \langle u_p | \int_{-\infty}^{\infty} dp' \alpha_{p'} |u_{p'}\rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp' \alpha_{p'} \underbrace{\langle u_p | u_{p'} \rangle}_{\text{“}\delta(p-p')\text{”}} = \alpha_p \quad (6)$$

$$\alpha_p = \langle u_p | \varphi \rangle \quad (7)$$

となる.

任意の$|\varphi\rangle$について

$$|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \alpha_p |u_p\rangle \quad (1), \qquad \alpha_p = \langle u_p|\varphi\rangle \quad (2)$$

が言いたい//

つまり

$$|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, |u_p\rangle\langle u_p|\varphi\rangle \quad (3)$$

証明

右辺 $= \int dp\, u_p(x) \int dx' (u_p(x'))^* \varphi(x')$

$$= \int dx' \underbrace{\int dp\, u_p(x)(u_p(x'))^*}_{= \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\, e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')} = \delta(x-x')} \varphi(x') = \varphi(x) \quad (4)$$

左辺

展開できる!//

よって

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} dp\, |u_p\rangle\langle u_p| = \hat{1}} \quad (5)$$

まとめと比較

$\lvert u_p\rangle \quad p\in\mathbb{R}$	$\lvert\psi_j\rangle \quad j=1,2,\cdots$
$\langle u_p\lvert u_{p'}\rangle=\delta(p-p')$ (1a)	$\langle\psi_j\lvert\psi_{j'}\rangle=\delta_{j,j'}$ (1b)

任意の状態 $\lvert\varphi\rangle$ $(\lVert\varphi\rVert<\infty)$ について

$\lvert\varphi\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}dp\,\alpha_p\lvert u_p\rangle$ (2a)	$\lvert\varphi\rangle=\sum_{j=1}^{\infty}\alpha_j\lvert\psi_j\rangle$ (2b)
$\alpha_p=\langle u_p\lvert\varphi\rangle$ (3a)	$\alpha_j=\langle\psi_j\lvert\varphi\rangle$ (3b)
$\lVert\varphi\rVert^2=\int_{-\infty}^{\infty}dp\,\lvert\alpha_p\rvert^2$ (4a)	$\lVert\varphi\rVert^2=\sum_{j=1}^{\infty}\lvert\alpha_j\rvert^2$ (4b)
$\int_{-\infty}^{\infty}dp\,\lvert u_p\rangle\langle u_p\rvert=\hat{1}$ (5a)	$\sum_{j=1}^{\infty}\lvert\psi_j\rangle\langle\psi_j\rvert=\hat{1}$ (5b)

$\lvert u_p\rangle$ そのものは状態ではないが 状態の展開に使える → ときに便利.

§1次元自由粒子の時間発展への応用

Sch. eq. $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(t,x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(t,x)$ (1)

▷ $u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p}{\hbar}x}$ (2)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}u_p(x) = \boxed{\frac{p^2}{2m}}u_p(x) \quad (3)$$

$E(p) = \frac{p^2}{2m}$

よって $e^{-i\frac{E(p)}{\hbar}t}u_p(x)$ は (1)をみたす.

(しかし状態ではない)

▷ 任意の初期状態 $\varphi(0,x)$ $\left(\int dx|\varphi(0,x)|^2 = 1\right)$

$$\varphi(0,x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \alpha_p u_p(x) \quad (4)$$

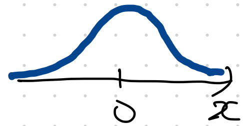
と展開

$$\varphi(t,x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \alpha_p e^{-i\frac{E(p)}{\hbar}t} u_p(x) \quad (5)$$

は この初期状態に対応する

(1)の解 !

例　$\alpha > 0$ 定数



$$\varphi(0,x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{\alpha}{2}x^2} \quad (1)$$

→ ガウス型

$$a_p = \langle u_p | \varphi(0) \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{p}{\hbar}x} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\frac{\alpha}{2}x^2 - i\frac{p}{\hbar}x} \quad (2)$$

積分公式　$a, b \in \mathbb{C}$, $\mathrm{Re}\, a > 0$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ax^2+bx} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\, e^{\frac{b^2}{4a}} \quad (3)$$

ただし　$a = |a| e^{i\theta}$ として $\sqrt{a} = \sqrt{|a|}\, e^{i\theta/2}$　(4)

$$\therefore a_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}}\, e^{-\frac{p^2}{2\alpha\hbar^2}}$$

$$= (\pi\alpha)^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{\hbar}}\, e^{-\frac{p^2}{2\alpha\hbar^2}} \quad (5)$$

→ ここもガウス型

$$\varphi(t,x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, a_p\, e^{-i\frac{E(p)}{\hbar}t}\, u_p(x)$$

$$= (\pi\alpha)^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp\, e^{-\left\{\frac{1}{2\alpha\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}\right\}p^2 + i\frac{x}{\hbar}p}$$

積分公式（前ページの(3)）

$$= (\pi\alpha)^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\hbar} \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\frac{1}{2\alpha\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}}}\, e^{-\frac{x^2}{4\left\{\frac{1}{2\alpha\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}\right\}\hbar^2}}$$

$$= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{i\hbar\alpha}{m}t}}\, e^{-\frac{\alpha}{2}\left(1 + \frac{i\hbar\alpha}{m}t\right)^{-1} x^2}$$

p11 −(4)が導かれた。