2-3 オペレータの期待値と観測量

[内積の定義]

(1) $(\mathbb{u}, \mathbb{v}_1 + \mathbb{v}_2) = (\mathbb{u}, \mathbb{v}_1) + (\mathbb{u}, \mathbb{v}_2)$

$(\mathbb{u}_1 + \mathbb{u}_2, \mathbb{v}) = (\mathbb{u}_1, \mathbb{v}) + (\mathbb{u}_2, \mathbb{v})$

(2) $(\mathbb{u}, c\mathbb{v}) = c(\mathbb{u}, \mathbb{v})$

$(c\mathbb{u}, \mathbb{v}) = c^*(\mathbb{u}, \mathbb{v})$

(3) $(\mathbb{u}, \mathbb{v})^* = (\mathbb{v}, \mathbb{u})$

をみたすとき、ベクトル $\mathbb{u}$ は
内積が定義される という.

1. 通常のベクトル空間 (n 次元)

$$\begin{cases} \mathbb{u} = (u_1, u_2, \cdots, u_n) \\ \mathbb{v} = (v_1, v_2, \cdots, v_n) \end{cases}$$

• 内積 :

$$(\mathbb{u}, \mathbb{v}) \equiv u_1^* v_1 + u_2^* v_2 + \cdots + u_n^* v_n$$

$$\equiv \sum_{i=1}^{n} u_i^* v_i$$

と定義すると これは内積の性質をみたす

2、積分での内積（1次元空間の場合）

内積：$\boxed{\langle \psi, \phi \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\,\phi(x)\,dx}$

内積の性質をみたしている。

注：　$\langle \psi, \phi \rangle$ の表記

$\langle \psi, \phi \rangle \equiv \langle \psi | \phi \rangle$　とも書く

（棒を入れるのはその方が見やすいと思うから）

No

Date

◎ エルミート オペレータ $\hat{A}$

• 行列の場合 : エルミート行列

$$\boxed{A = A^{+}}$$

↓ 成分でかくと

$$\boxed{A_{ij} = A_{ji}^{*}}$$

エルミート行列なら

$$(u, Av) = (Au, v) \quad \text{が成立つ}$$

(証)
$$(u, Av) = \sum_{i=1}^{n} u_i^{*} (Av)_i$$
$$= \sum_{i,j=1}^{n} u_i^{*} A_{ij} v_j = \sum_{i,j=1}^{n} u_i^{*} A_{ji}^{*} v_j$$
$$= \sum_{j=1}^{n} (Au)_j^{*} v_j = (Au, v)$$

• 一般のオペレータ (微分がある時など)

$$\langle \hat{A}\psi, \phi \rangle = \langle \psi, \hat{A}\phi \rangle$$

が成立するとき、$\hat{A}$ がエルミートであるという

◉ エルミートオペレータ $\hat{A}$ の固有値は実数

$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ のとき

$\boxed{\hat{A}u = au}$ が固有値方程式

a が固有値であり実数

(証) $\hat{A}u = au$

エルミートであるから

$$\langle u, \hat{A}u \rangle = \langle \hat{A}u, u \rangle$$

よって

$$\langle u, au \rangle = \langle au, u \rangle$$

$$a \langle u, u \rangle = a^* \langle u, u \rangle$$

よって $\boxed{a = a^*}$

これは a が実数であることを意味している

○ オペレータ $\hat{A}$ の期待値

$$\langle \hat{A} \rangle \equiv \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx$$

↑ $\hat{A}$ の期待値という

この時、$\psi(x)$ はわかっていないと
計算できない。

↓

Schödiger 方程式を解いて
$\psi(x)$ が求められる。

● $\hat{A}$ の固有値と期待値

$$\underline{\hat{A} u = a u}$$

このとき

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle u | \hat{A} | u \rangle = \langle u | a u \rangle$$

$$= a \langle u | u \rangle = a$$

(但し、$\langle u | u \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} u^*(x) u(x) dx = 1$ とする。
これを規格化という)

• 観測量 (observables)

運動量オペレータ $\underline{\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}}$

これ自体、そのままでは観測できない

↓ 状態関数 $\psi(x)$ で期待値をとる

$$\langle \hat{p} \rangle \equiv \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} \right) dx$$

↑ この期待値は観測量になる

[例 1] $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$ のとき

$$\langle \hat{p} \rangle = \frac{1}{L} (-i\hbar) \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{-ikx} \frac{d}{dx} e^{ikx} dx = \hbar k$$

$$\therefore \langle \hat{p} \rangle = \hbar k$$

[例 2] $\psi(x) = \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$ のとき

$$\langle \hat{p} \rangle = \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \right) dx$$

$$= \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} (-i\hbar)(-\alpha^2) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 x^2} x \, dx = 0$$

よって $\langle \hat{p} \rangle = 0$

• $\langle \hat{p}^2 \rangle$ はどうか？

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \langle \psi | \hat{p}^2 | \psi \rangle$$

$$= \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}\right) dx$$

$$= -\hbar^2 \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\alpha^2 + (\alpha^2 x)^2\right) e^{-\alpha^2 x^2} dx$$

$$= -\hbar^2 \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left[-\alpha^2 \left(\frac{\pi}{\alpha^2}\right)^{\frac{1}{2}} + \alpha^4 \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^6}}\right]$$

$$= \frac{\hbar^2}{2} \alpha^2$$

$$\therefore \ \underline{\langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2} \alpha^2}$$

• $\langle x^2 \rangle$ も同様に計算.

$$\langle x^2 \rangle = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{1}{2\alpha^2}$$

$$\therefore \ \underline{\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2\alpha^2}}$$

このことより $\sqrt{\langle p^2 \rangle} \sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2}\alpha^2} \sqrt{\frac{1}{2\alpha^2}} = \frac{\hbar}{2}$

これは不確定性関係式をみたす.