2-3 オペレータの期待値と観測量

内積 を定義する

$$
\begin{cases}
1. & (\mathbf{u}, \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2) = (\mathbf{u}, \mathbf{v}_1) + (\mathbf{u}, \mathbf{v}_2) \\
2. & (\mathbf{u}, c\mathbf{v}) = c\,(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \\
 & (c\mathbf{u}, \mathbf{v}) = c^*\,(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \\
3. & (\mathbf{u}, \mathbf{v})^* = (\mathbf{v}, \mathbf{u})
\end{cases}
$$

を満足するベクトル $\mathbf{u}$ には
内積が定義されている．　という

1. 通常のベクトル空間（ n 次元）

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

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

$$\equiv \sum_{i=1}^{n} u_i^* v_i \quad \text{（と書く）}$$

これは内積の性質をみたす．

2. 積分による内積の定義：

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

[内積の表記の仕方]

$$\langle \psi_1, \psi_2 \rangle \equiv \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

$$\equiv \int \psi_1^*(x)\,\psi_2(x)\,dx$$

$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$

棒を入れるのは気分の問題

[エルミート・オペレータ $\hat{A}$]

◎ 行列　　エルミート行列 A とは

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

すなわち $\boxed{A_{ij} = A_{ji}^*}$ のこと

[定理]　エルミート行列だと

$(u, Av) = (Au, v)$ が成立つ

(証)

$$(u, Av) = \sum_{i=1}^{n} u_i^* (Av)_i$$

$$= \sum_{i,j=1}^{n} u_i^* A_{ij} v_j = \sum_{i,j=1}^{n} u_i^* A_{ji}^* v_j$$

$$= \sum_{j=1}^{n} (Au)_j^* v_j = (Au, v)$$

//

◎ 微分

$\boxed{\langle \hat{A}\psi, \phi \rangle = \langle \psi, \hat{A}\phi \rangle}$ が成立つとき

$\hat{A}$ はエルミート・オペレータである

という

（重要）　エルミートオペレータ $\hat{A}$ の固有値は実数

$$\hat{A} = \hat{A}^{+} \text{ のとき}$$

$$\boxed{\hat{A} u = a u}$$ が固有値方程式

この時，a は実数 である

（証）

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

エルミートだから

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

よって

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

すなわち　$a \langle u, u \rangle = a^{*} \langle u, u \rangle$

これより　$\boxed{a = a^{*}}$

よって a は実数である．

【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 $\boxed{\text{期待値}}$ という.

ここで $\psi(x)$ は波動関数

⇓

[Schrödinger 方程式を解くと
$\psi(x)$ が求まる]

• $\hat{A}$ の固有値と期待値

$$\hat{A} u = a u \quad \text{(固有値方程式)}$$

この時:

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

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

但し $\langle u | u \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} u^*(x) u(x) dx = 1$

と決めてある

これを規格化条件という

【観測量 (observables)】

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

⇓

これ自体は観測できない!!

↓

$\psi(x)$ で期待値をとる

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

↑

期待値は観測量になりうる

(例1)　$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$　とすると

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

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

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

(αは定数)のとき

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

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

よって $\boxed{\langle \hat{p} \rangle = 0}$

(例3)　$\langle \hat{p}^2 \rangle$ の期待値の場合

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

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

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

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

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

$\langle x^2 \rangle$ も同様にして計算する。

$$\boxed{\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2\alpha^2}}$$ と求まる

よって

$$\sqrt{\langle p^2 \rangle} \sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{\frac{\hbar^2 \alpha}{2}} \sqrt{\frac{1}{2\alpha^2}} = \frac{\hbar}{2}$$

これは不確定性関係式をみたしている。