座標と運動量の交換関係

$$\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = ?$$

任意の状態 $|\varphi\rangle$ に対して、$\hat{x}\hat{p}$, $\hat{p}\hat{x}$ を作用させ、座標表示にすると.

$$\langle x|\hat{x}\hat{p}|\varphi\rangle = \langle x|x\cdot\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)|\varphi\rangle = x\cdot\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\langle x|\varphi\rangle \quad \text{—①}$$

$$\langle x|\hat{p}\hat{x}|\varphi\rangle = \langle x|\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\cdot x|\varphi\rangle =$$

$$= -i\hbar\frac{d}{dx}\cdot x\langle x|\varphi\rangle$$

$$= -i\hbar\langle x|\varphi\rangle - x\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\langle x|\varphi\rangle \quad \text{—②}$$

①−② $\quad \langle x|\left(\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}\right)|\varphi\rangle = i\hbar\langle x|\varphi\rangle$

$$\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x} = [\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$$

∴ $\hat{x}$, $\hat{p}$ は、交換関係 $[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$ を満たすという

逆にこれが量子化条件になってる.

▷ 状態の時間発展

今までは、定常状態を考えていた

状態の時間発展は、ある時刻 t における状態を $|\varphi(t)\rangle$ と書くと、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\varphi(t)\rangle = \hat{H}(\hat{x},\hat{p})|\varphi(t)\rangle$$

☆ 量子力学のエッセンス

$$\begin{cases} ① & i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\varphi(t)\rangle = \hat{H}(\hat{x},\hat{p})|\varphi(t)\rangle \\ ② & \hat{H}(\hat{x},\hat{p}) \\ ③ & [\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \end{cases}$$

この3つの式で量子力学の本質は書き下せる

<u>座標表示</u>

$|x\rangle$ と内積をとる。

$$1 = \int dx'\,|x'\rangle\langle x'|$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\langle x|\varphi(t)\rangle = \langle x|\hat{H}(\hat{x},\hat{p})|\varphi(t)\rangle$$

$\langle x|\varphi(t)\rangle = \Psi(x,t)$ と書くと、

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \int dx'\,\langle x|\hat{H}(\hat{x},\hat{p})|x'\rangle\,\Psi(x',t)$$

$$\hat{H}(\hat{x},\hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$ とすると、

$$V(\hat{x}) = V_0 + V_1\hat{x} + V_2\hat{x}^2 + \cdots\cdots$$

$$V(\hat{x})|x'\rangle = (V_0 + V_1 x' + V_2 x'^2 + \cdots)|x'\rangle = V(x')|x'\rangle$$

なので

$$\langle x|V(\hat{x})|x'\rangle = V(x')\langle x|x'\rangle = V(x')\,\delta(x-x')$$

$$\int dx'\,\langle x|V(x')|x'\rangle\,\Psi(x',t) = V(x)\,\Psi(x,t)$$

一方，

$$\int dx' \langle x | \frac{\hat{p}^2}{2m} | x' \rangle \Psi(x',t)$$

$$= \frac{1}{2m} \int dx' \langle x | \hat{p} \cdot \hat{p} | x' \rangle \Psi(x',t)$$

$$\int dx'' |x''\rangle\langle x''| = 1$$

$$= \frac{1}{2m} \int dx' \int dx'' \underbrace{\langle x | \hat{p} | x'' \rangle}_{-i\hbar \frac{d}{dx} \delta(x-x'')} \langle x'' | \hat{p} | x' \rangle \Psi(x',t)$$

$$= \frac{1}{2m} \int dx' \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \underbrace{\langle x | \hat{p} | x' \rangle}_{-i\hbar \frac{d}{dx} \delta(x-x')} \Psi(x',t)$$

$$= \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \Psi(x,t)$$

従って．

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \int dx' \langle x | \hat{H}(\hat{x}, \hat{p}) | x' \rangle \Psi(x',t)$$

$$= H\left(x\, ; -i\hbar \frac{d}{dx}\right) \Psi(x,t)$$

つまり，

$$\begin{cases} H(\hat{x}, \hat{p}) \\ [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi(t)\rangle = H(\hat{x}, \hat{p}) |\varphi(t)\rangle \end{cases}$$ の３式により

量子力学の本質が記述される

ハミルトニアン $H(\hat{x},\hat{p})$ が時間に依存しないときは、
定常問題を解いて、完全系、が判ると、

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$$|\varphi(t)\rangle = \sum_n a_n(t)|n\rangle$$ と書くことができる

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(t)\rangle = i\hbar\sum_n \dot{a}_n(t)|n\rangle$$

$$= \hat{H}(\hat{x},\hat{p})\sum_n a_n(t)|n\rangle$$

$$= \sum_n a_n(t)E_n|n\rangle.$$

$|m\rangle$ と内積をとると

$$i\hbar\,\dot{a}_m(t) = E_m a_m(t)$$

$$\rightarrow \quad a_m(t) = e^{-i\frac{E_m}{\hbar}t}a_m(0)$$

$$\therefore \quad |\varphi(t)\rangle = \sum_n e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}a_n(0)|n\rangle$$

$a_n(0)$ は、初期条件(状態) $|\varphi(0)\rangle$ が与えられると

$$\sum_n a_n(0)|n\rangle = |\varphi(0)\rangle$$ から

$$a_n(0) = \langle n|\varphi(0)\rangle$$ として求まる