

量子力学の定式化Ⅲ

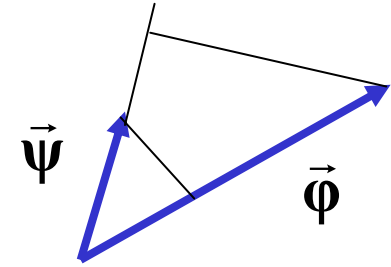
非可換代数
行列力学

[空間ベクトル]

(1) 内積: $\vec{\psi} \cdot \vec{\phi}$

(2) 基準単位ベクトル (直交規格条件)

$$\vec{1}, \vec{2}, \vec{3}; \quad \vec{i} \cdot \vec{j} = \delta_{ij}$$



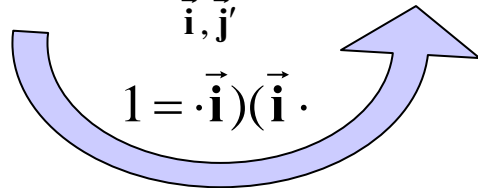
(3) 任意の単位ベクトル

$$\vec{\psi} = c_1 \vec{1} + c_2 \vec{2} + c_3 \vec{3} = \sum_{\vec{i}} \vec{i} (\vec{i} \cdot \vec{\psi}); \quad c_i = \vec{i} \cdot \vec{\psi}$$

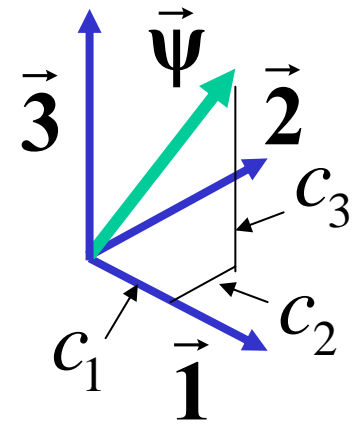
$$c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 = 1$$

(4) 座標変換

$$\vec{\psi} = \sum_{\vec{j}'} \vec{j}' (\vec{j}' \cdot \vec{\psi}) = \sum_{\vec{i}, \vec{j}'} \vec{j}' (\vec{j}' \cdot \vec{i}) (\vec{i} \cdot \vec{\psi})$$



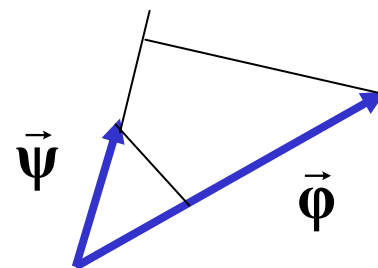
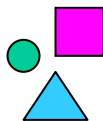
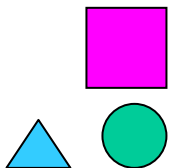
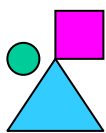
$$1 = \vec{j}' \cdot \vec{i} (\vec{i} \cdot \vec{\psi})$$



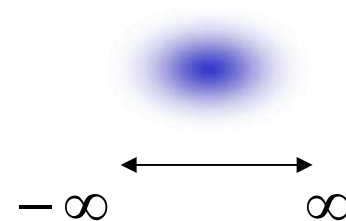
[状態関数]

(1) 内積

$$\psi(x) \quad \phi(x) \quad \longrightarrow \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \phi(x) dx$$

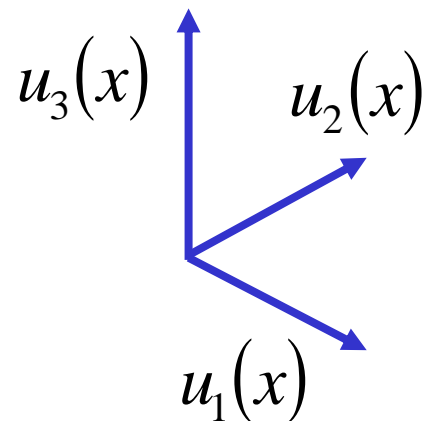


$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \phi(x) dx = \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x)^* \psi(x) dx \right\}^*$$



(2) 基底 (基準固有関数)

$$u_1(x), u_2(x), u_3(x), u_4(x), u_5(x), \dots$$

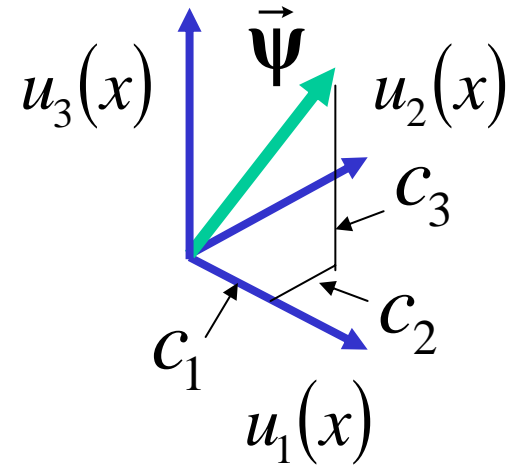


(3) 状態関数

$$\psi(x) = c_1 u_1(x) + c_2 u_2(x) + c_3 u_3(x) + c_4 u_4(x) + \dots$$

(4) 直交規格化:

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_j^*(x) u_i(x) dx = \delta_{ij}$$



(5) 完全性

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \psi(x) dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \{c_1^* u_1^*(x) + c_2^* u_2^*(x) + \dots\} \{c_1 u_1(x) + c_2 u_2(x) + \dots\} dx = 1$$

$$c_1^* c_1 + c_2^* c_2 + c_3^* c_3 + c_4^* c_4 + c_5^* c_5 + \dots$$

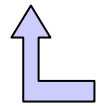
$$= |c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 + |c_4|^2 + |c_5|^2 + \dots = 1$$

状態ベクトル

状態関数をベクトルで表示

[記号]

$\langle |$: ブラベクトル (bra vector) } ← $\langle \rangle$: bracket
 $| \rangle$: ケットベクトル (ket vector)



状態ベクトルを特徴付ける英数字

$|\lambda\rangle$: 固有値 $\lambda \hbar^2$ の固有ベクトル

$|l, m, n\rangle$: 量子数 l, m, n の同時固有ベクトル

$|x\rangle$: x 座標系での状態ベクトル

$|\rangle, |\psi\rangle$: 一般状態ベクトル

状態ベクトルの諸性質

(1) 内積

$$\langle \psi | \phi \rangle, \quad \langle \psi | = | \psi \rangle^*, \quad \langle \psi | \phi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle^*$$

(2) 基底(基準ベクトル)

$$|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle, |5\rangle, \dots, |N\rangle$$

$$|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + c_3|3\rangle + c_4|4\rangle + c_5|5\rangle + \dots + c_N|N\rangle$$

(3) 直交規格化

$$\langle j | i \rangle = \delta_{ji}$$

(4) 完全, 完全性

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} c_i |i\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \langle i | \psi \rangle |i\rangle = \left(\sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle \langle i| \right) |\psi\rangle$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle \langle i| = 1 \quad : \text{完全性の条件}$$

無限連続のベクトル

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} c_i |i\rangle + \int_{-\infty}^{\infty} c(x) |x\rangle dx$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 + \int_{-\infty}^{\infty} |c(x)|^2 dx$$

$$\longrightarrow \langle j|i\rangle = \delta_{ij}, \quad \langle x|x'\rangle = \delta(x-x'), \quad \langle i|x\rangle = 0$$

☆ Dirac のデルタ関数

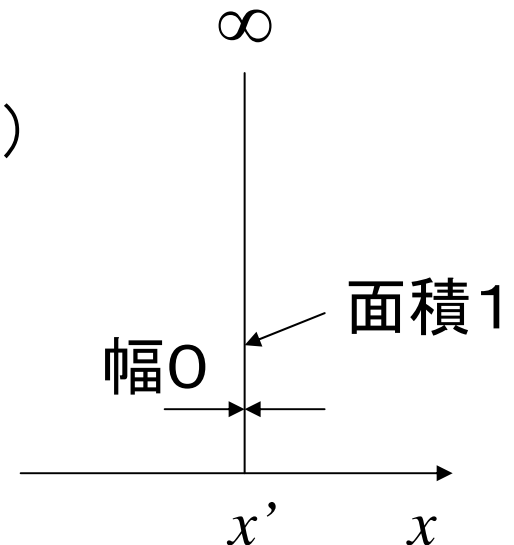
$$x \neq x' \text{ で } \delta(x-x') = 0 \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x') dx = 1$$

$$f(a) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x-a) dx \quad (f(x) : \text{連続関数})$$

$$\text{デルタ関数の一例} \quad \delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx} dp$$

☆ 完全性

$$\sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle\langle i| + \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle\langle x| dx = 1$$



状態, 物理量, 測定値

同一状態 $|\psi\rangle$ を色々な物理量 \hat{E}, \hat{p}, \dots の固有関数で表示可能

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= c_{e,1}|1_e\rangle + c_{e,2}|2_e\rangle + c_{e,3}|3_e\rangle + c_{e,4}|4_e\rangle + \dots + c_{e,N}|N_e\rangle \\ &= c_{p,1}|1_p\rangle + c_{p,2}|2_p\rangle + c_{p,3}|3_p\rangle + c_{p,4}|4_p\rangle + \dots + c_{p,M}|M_p\rangle \end{aligned}$$

$$\hat{E}|1_e\rangle = a_{e,1}|1_e\rangle, \hat{E}|2_e\rangle = a_{e,2}|2_e\rangle, \hat{E}|3_e\rangle = a_{e,3}|3_e\rangle, \dots$$

$$\hat{p}|1_p\rangle = a_{p,1}|1_p\rangle, \hat{p}|2_p\rangle = a_{p,2}|2_p\rangle, \hat{p}|3_p\rangle = a_{p,3}|3_p\rangle, \dots$$

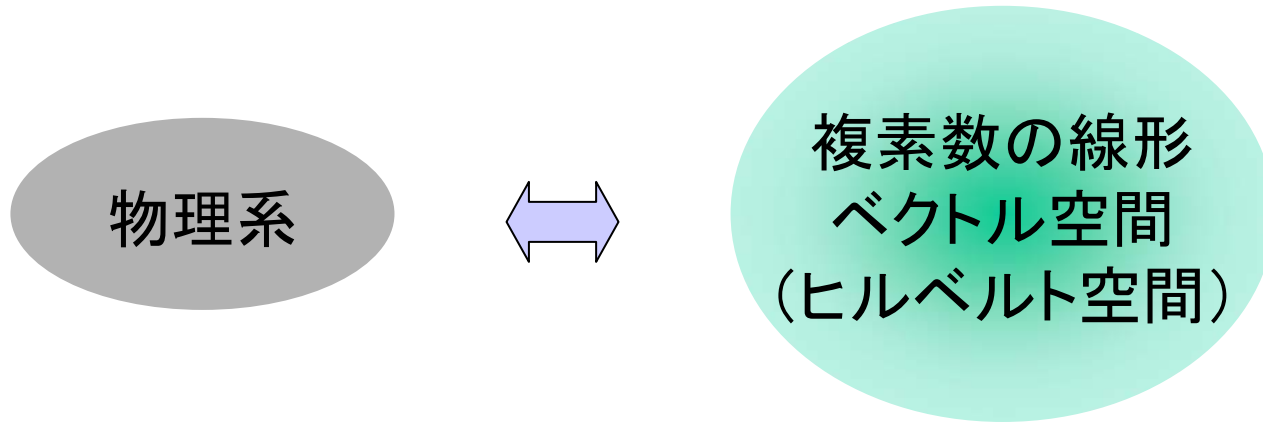
観測 (= 物理量 \hat{E}, \hat{p}, \dots に対応する操作) を行うと固有値

$a_{e,1}, a_{e,2}, a_{e,3}, a_{e,4}, \dots, a_{e,N}$ の1つを測定値として得る.

各固有値を測定値として得る確率は $|c_{e,1}|^2, |c_{e,2}|^2, |c_{e,3}|^2, |c_{e,4}|^2, \dots$ に比例する.

量子力学における主要概念

(1) 状態ベクトル



(2) 物理量

線形演算子 \hat{A}, \hat{B}, \dots

$$\hat{A}|k\rangle = a_k|k\rangle$$

a_k : \hat{A} の固有値, $|k\rangle$: a_k の固有ベクトル

(3) 量子条件

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar: \quad \text{正準な交換関係 (非可換関係)}$$

☆

[証明]

ディラック (Dirac) の括弧式の定義

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad \text{行列との類似性}$$

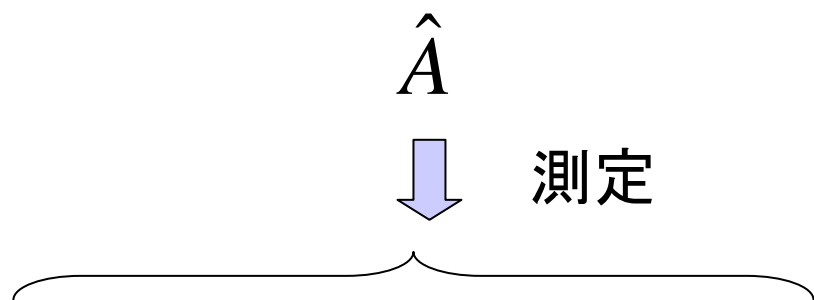
量子条件:

物理量 = 演算子 \longrightarrow 変換代数では ?

$$\hat{B} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial A}$$

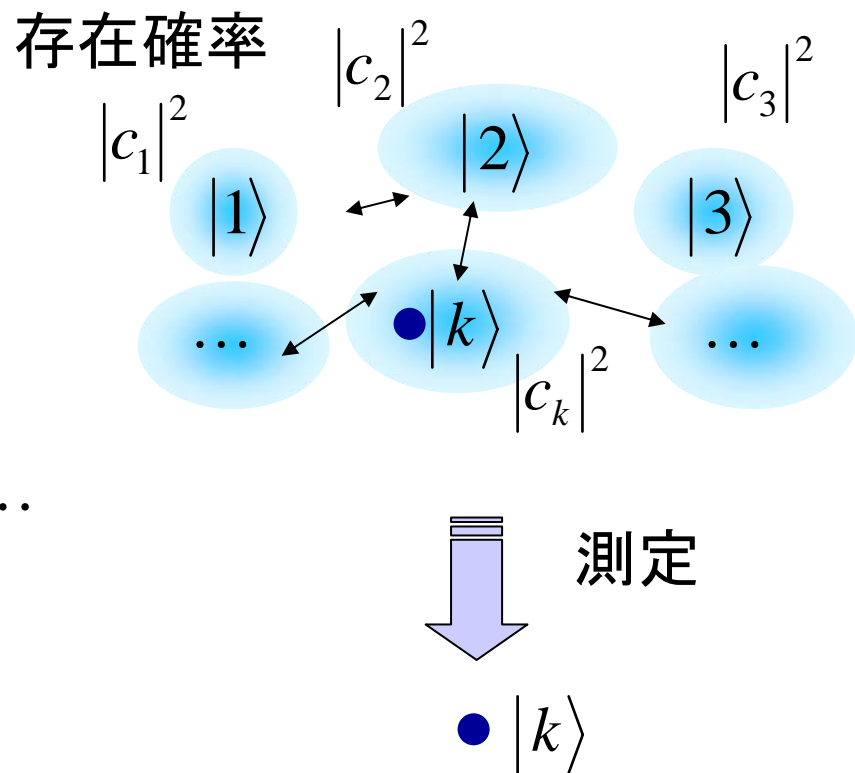
$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle &= (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle \\ &= -i\hbar \left(A \frac{\partial}{\partial A} - \frac{\partial}{\partial A} A \right) |\psi\rangle \\ &= -i\hbar \left(A \frac{\partial}{\partial A} - A \frac{\partial}{\partial A} - 1 \right) |\psi\rangle \end{aligned}$$

(4) 測定値



$$|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + \dots + c_k|k\rangle + \dots$$

$$\hat{A}|1\rangle = a_1|1\rangle, \dots, \hat{A}|k\rangle = a_k|k\rangle, \dots$$



→ 測定値: $a_1, a_2, \dots, a_k, \dots$ のどれか1つ

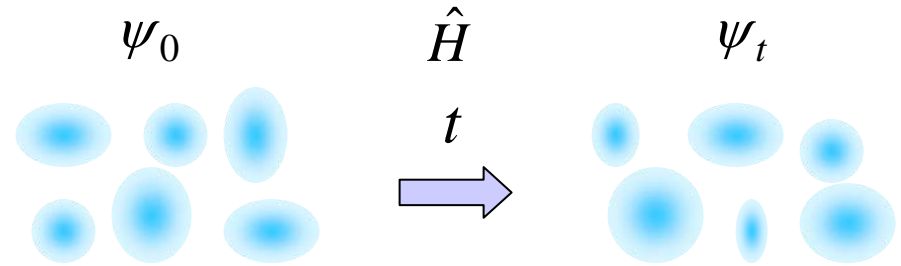
→ a_k を得る確率

$$w_k = |c_k|^2 = \langle k | \psi \rangle^2$$

(5) 運動

☆ シュレーディンガー描像

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = \hat{H}\psi$$



状態ベクトルは時間とともに連続的, 因果的に変化

☆ ハイゼンベルグ描像

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}$$

物理量が変化

演算子の可換性

1つのベクトル = 多くの演算子の固有ベクトル

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle, \quad \hat{C}|c\rangle = c|c\rangle$$

$$\begin{array}{ccc} \xrightarrow{\quad} & \hat{A}|a,c\rangle = a|a,c\rangle, & \hat{C}|a,c\rangle = c|a,c\rangle \\ \hat{C} \times \nearrow & \downarrow & \hat{A} \times \nearrow \\ & & \downarrow \end{array}$$

$$\hat{C}\hat{A}|a,c\rangle = ac|a,c\rangle, \quad \hat{A}\hat{C}|a,c\rangle = ca|a,c\rangle$$

—

$$\xrightarrow{\quad} [\hat{A}, \hat{C}]|a,c\rangle = ac|a,c\rangle$$

$$\therefore [\hat{A}, \hat{C}] = 0$$

\hat{A}, \hat{C} は互いに交換可能(可換)

非可換代数で運動方程式を解く

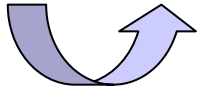
固有値方程式: $\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$ ← (2階微分方程式)

別

物理量でない演算子

固有値でない係数

$$\hat{b}^-|n\rangle = c|n-1\rangle$$



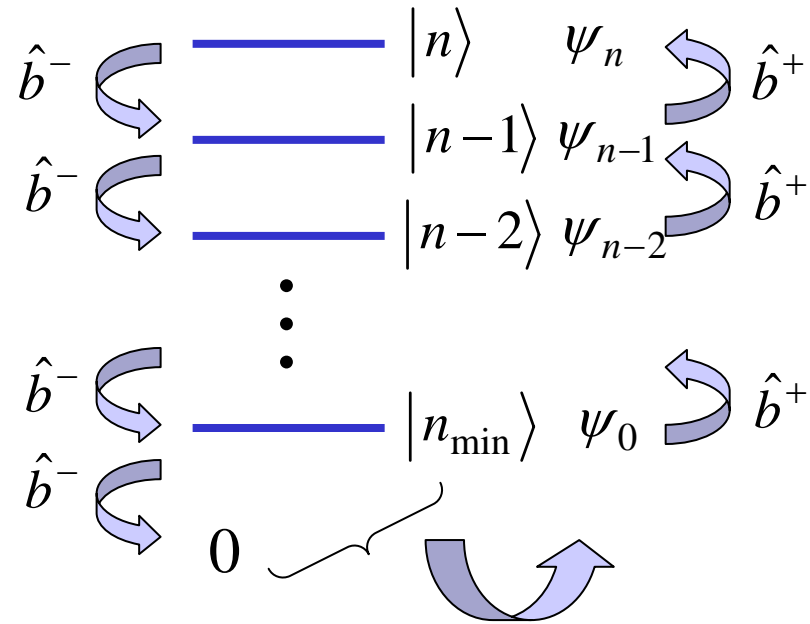
量子数を1つ下げる

☆ 最終的に

$\hat{b}^-|n_{\min}\rangle = 0$ ← 簡単な微分方程式 (1階微分方程式)

→ 解: ψ_0

$$\hat{b}^+\psi_0 = c'\psi_1, \quad \hat{b}^+\psi_1 = c'\psi_2, \quad \dots, \quad \hat{b}^+\psi_{n-1} = c'\psi_n$$



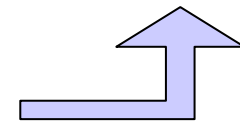
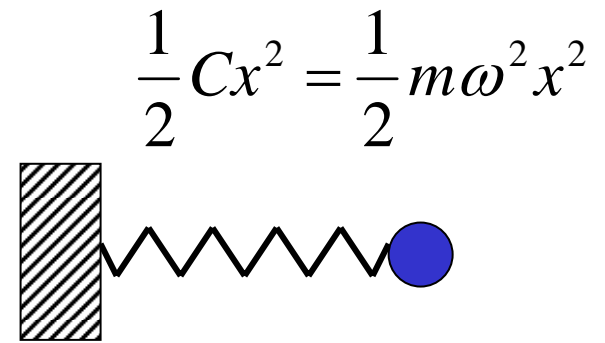
調和振動子

[下降演算子, 上昇演算子]

$$\hat{H} = \frac{m\omega^2}{2} x^2 + \frac{1}{2m} \hat{p}^2$$
$$= \frac{m\omega^2}{2} \left(x^2 + \frac{1}{m^2\omega^2} \hat{p}^2 \right)$$

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

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



共役な演算子

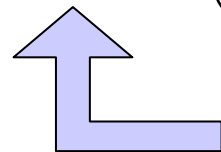
$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right)$$

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

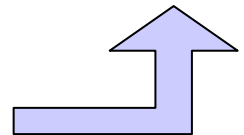
$$[\hat{a}^-, \hat{a}^+] = \hat{a}^- \hat{a}^+ - \hat{a}^+ \hat{a}^-$$

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

$$= 1$$



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



$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a}^- + \frac{1}{2} \right)$$

$$[\hat{a}^-, \hat{a}^+] = 1$$

固有状態 $|n\rangle$ の固有値を $\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ とおき,

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

$$[\hat{a}^-, \hat{a}^+] = \hat{a}^- \hat{a}^+ - \hat{a}^+ \hat{a}^- = 1 \quad (2)$$

$$\hat{a}^- \times (1) \quad \longrightarrow \quad \underbrace{\hat{a}^- \hat{a}^+ \hat{a}^-}_{\left(\hat{a}^+ \hat{a}^- + 1\right)} |n\rangle = n \hat{a}^- |n\rangle$$

$$\longrightarrow \quad \hat{a}^+ \hat{a}^- (\hat{a}^- |n\rangle) = (n-1) (\hat{a}^- |n\rangle)$$

$$\text{一方, (1) より} \quad \hat{a}^+ \hat{a}^- |n-1\rangle = (n-1) |n-1\rangle$$

$$\therefore \hat{a}^- |n\rangle = c |n-1\rangle; \quad \hat{a}^- : \text{下降演算子} \quad (3)$$

同様にして,

$$\hat{a}^+ |n\rangle = c' |n+1\rangle; \quad \hat{a}^+ : \text{上昇演算子}$$

[正規化定数 c]

$$(3) \text{ の複素共役 } \longrightarrow \langle n | \hat{a}^+ = \langle n-1 | c^* \longleftarrow \times(3)$$

$$\longrightarrow n = \langle n | \underbrace{\hat{a}^+ \hat{a}^-}_{\longleftarrow n | n \rangle} | n \rangle = \langle n-1 | c^* c | n-1 \rangle = |c|^2$$

$$\text{また, } \langle n | n \rangle = 1, \quad \langle n-1 | n-1 \rangle = 1$$

$$\therefore c = \sqrt{n}$$

$$\hat{a}^- | n \rangle = \sqrt{n} | n-1 \rangle$$

$$\hat{a}^+ | n \rangle = \sqrt{n+1} | n+1 \rangle$$

[固有状態]

$$\hat{a}^- |0\rangle = 0, \quad |0\rangle = u_0(x)$$

c-数にして $\left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx}\right) u_0(x) = 0$

$$\left(\frac{d\{u_0(x)\}}{u_0(x)} = -\frac{m\omega}{\hbar} x dx \quad \rightarrow \quad \int_{-\infty}^{\infty} C e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} = 1 \right)$$

→ 正規化した基底状態 $u_0(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$

一般的な励起状態 $|n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle$

$$u_n(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} 2^{n/2} (n!)^{1/2}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{n+\frac{1}{2}} \left(x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx}\right)^n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

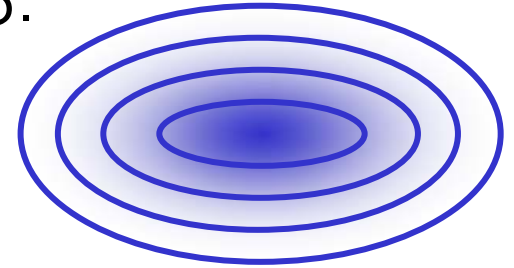
光子の生成, 消滅(場の量子化)

場: 空間に調和振動子が埋め込まれている.

電磁波 = 光子(フォトン)

1フォトンのエネルギー = $\hbar\omega$

(Einstein)



調和振動子では1準位上がるに従い $1\hbar\omega$ だけ増える

↔ フォトンが1つつつ増える

新しい見方, 新しい定義

$$\hat{a}^- |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

$$\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

$$\hat{a}^+ \hat{a}^- |n\rangle = n |n\rangle$$

$$[\hat{a}^-, \hat{a}^+] = \hat{a}^- \hat{a}^+ - \hat{a}^+ \hat{a}^- = 1$$

前提

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{a}^+ |n\rangle = c^+ |n+1\rangle : \text{“生成演算子”, フォトン数を1つ増やす} \\ \hat{a}^- |n\rangle = c^- |n-1\rangle : \text{“消滅演算子”, フォトン数を1つ減らす} \\ P_{n,n-1} = n \end{array} \right.$$

$$\begin{aligned} P_{n,n-1} &= |\langle n-1 | \hat{a}^- |n\rangle|^2 \\ &= |c^- \langle n-1 | n-1\rangle|^2 \\ &= |c^-|^2 = n \end{aligned}$$

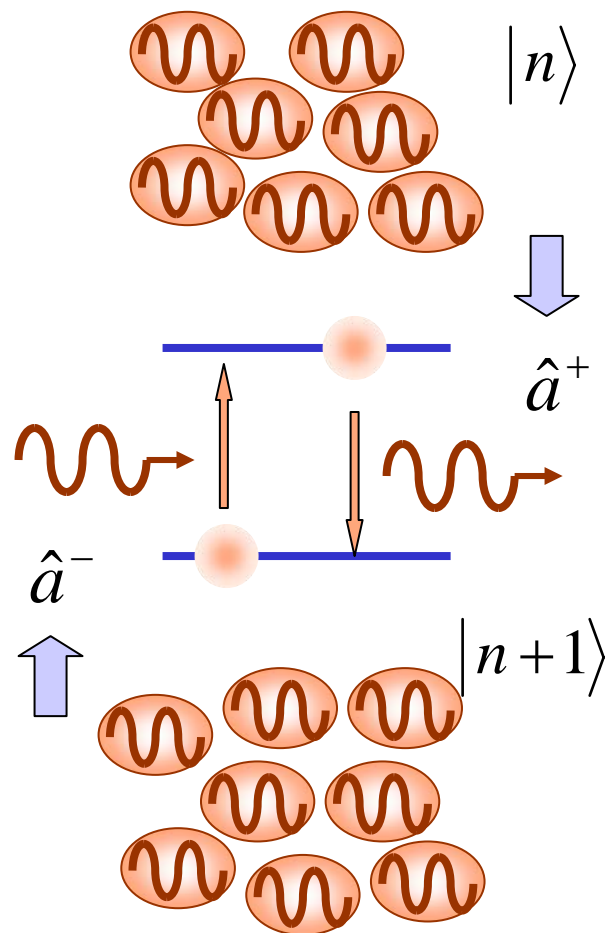
$$\therefore c^- = \sqrt{n}$$

$$\begin{aligned} c^+ &= \langle n+1 | \hat{a}^+ |n\rangle \\ &= \langle n | \hat{a}^- |n+1\rangle^* = \sqrt{n+1} \end{aligned}$$

$$\hat{a}^- |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$$

$$\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

電子準位



$$\hat{a}^+ \hat{a}^- |n\rangle = \sqrt{n} \hat{a}^+ |n-1\rangle = n |n\rangle$$

$\hat{a}^+ \hat{a}^-$: フォトン数に関する演算子

$|n\rangle$: フォトンの数が n である状態

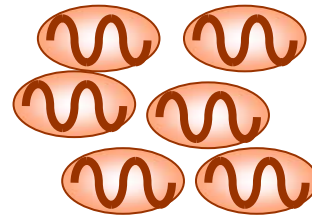
$|0\rangle$: フォトン数0の状態

n 個の光子を持つエネルギー固有状態, 固有関数

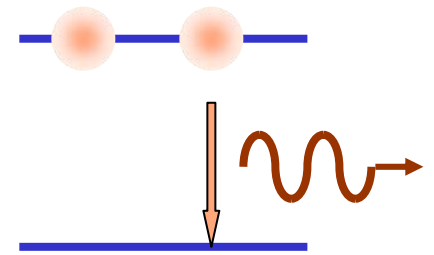
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad |n\rangle$$

誘導輻射

$$\begin{aligned} P_{n \rightarrow n+1} &= \left| \langle n+1 | \hat{a}^+ | n \rangle \right|^2 \\ &= \left| \sqrt{n+1} \langle n+1 | n+1 \rangle \right|^2 \\ &= n+1 \end{aligned}$$



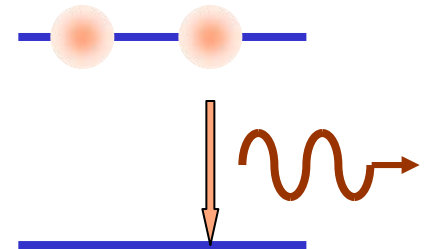
電子準位



自然輻射

$$P_{0 \rightarrow 1} = \left| \langle 1 | \hat{a}^+ | 0 \rangle \right|^2 = \left| \sqrt{1} \langle 1 | 1 \rangle \right|^2 = 1$$

電子準位

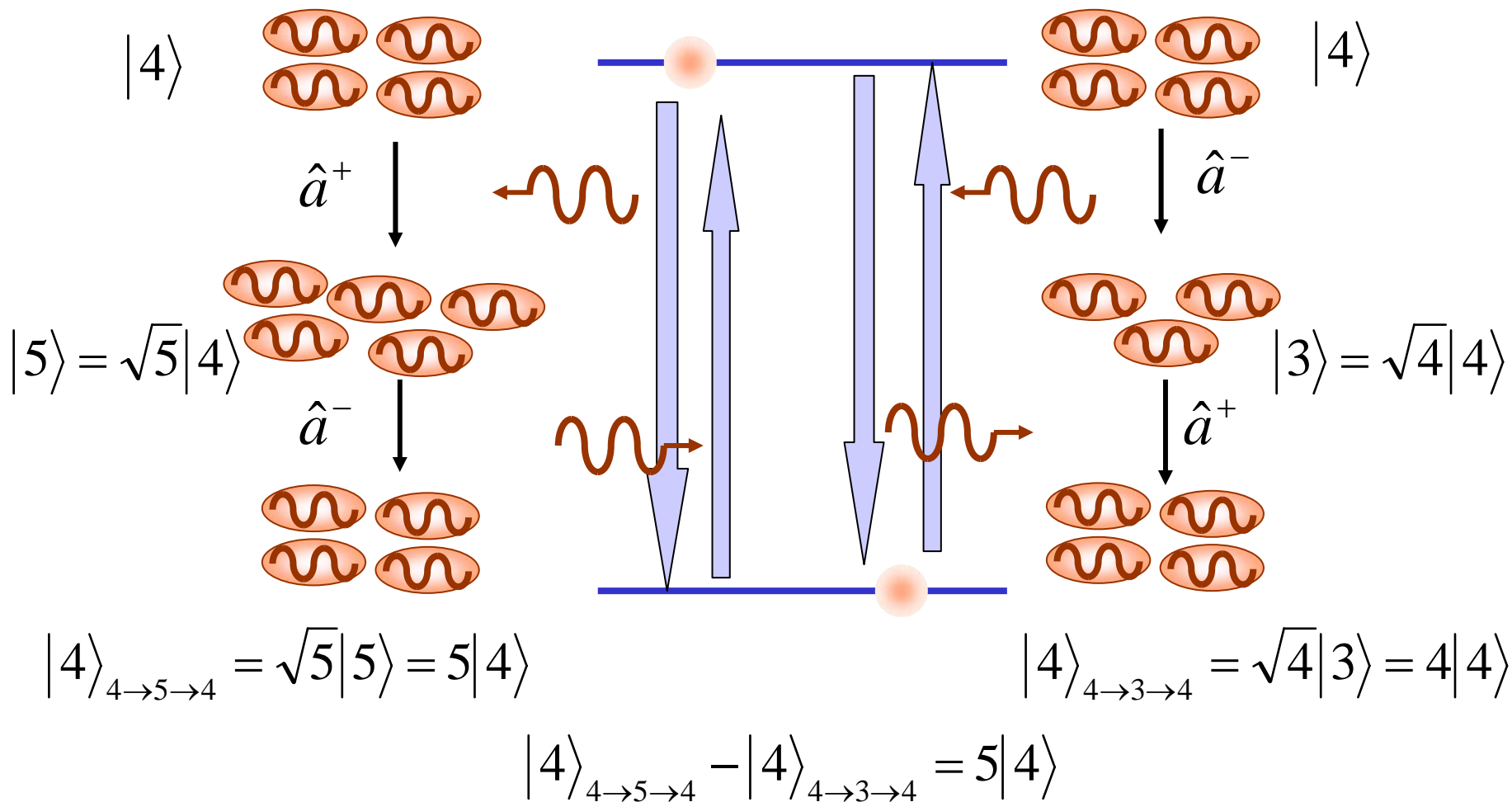


→ 「 n 個の光子が存在している誘導輻射
= 自然輻射に比べて $n+1$ 倍輻射しやすい」

レーザーの原理

$$[\hat{a}^-, \hat{a}^+] |n\rangle = \hat{a}^- \hat{a}^+ |n\rangle - \hat{a}^+ \hat{a}^- |n\rangle = (n+1)|n\rangle - n|n\rangle = |n\rangle$$

$$[\hat{a}^-, \hat{a}^+] = 1$$



角運動量演算子

角運動量に関する交換関係

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)(z\hat{p}_x - x\hat{p}_z) - (z\hat{p}_x - x\hat{p}_z)(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) \\ &= y\hat{p}_x\hat{p}_z z + \hat{p}_y xz\hat{p}_z - \hat{p}_x yz\hat{p}_z - x\hat{p}_y\hat{p}_z z \\ &= \underbrace{(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x)}_{\hat{L}_z} \underbrace{(z\hat{p}_z - \hat{p}_z z)}_{[z, \hat{p}_z] = i\hbar} = i\hbar\hat{L}_z \end{aligned}$$

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$$

$|\lambda, m\rangle$: \hat{L}^2, \hat{L}_z の共通固有ベクトル

(\hat{L}^2 と可換な角運動量成分は $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ のうち1つ)

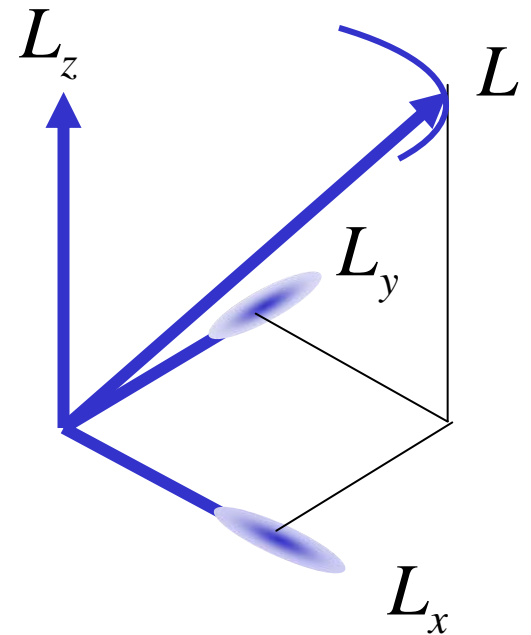
$$\begin{cases} \hat{L}^2 |\lambda, m\rangle = \lambda \hbar^2 |\lambda, m\rangle \\ \hat{L}_z |\lambda, m\rangle = m \hbar |\lambda, m\rangle \end{cases}$$

上昇・下降演算子を次式とおく

$$\hat{L}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y)$$

上昇・下降演算子に関する交換関係

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_{\pm}] = \pm \hbar \hat{L}_{\pm}, \quad [\hat{L}_+, \hat{L}_-] = \hbar \hat{L}_z$$



$$\hat{L}_z \hat{L}_+ \times |\lambda, m\rangle$$

$$\begin{aligned} \longrightarrow \hat{L}_z (\hat{L}_+ |\lambda, m\rangle) &= \hat{L}_+ (\hat{L}_z |\lambda, m\rangle) + \hbar \hat{L}_+ |\lambda, m\rangle = (m+1)\hbar (\hat{L}_+ |\lambda, m\rangle) \\ &\quad \longleftarrow \hat{L}_z \hat{L}_+ = \hat{L}_+ \hat{L}_z + \hbar \hat{L}_+ \end{aligned}$$

一方, $\hat{L}_z |\lambda, m+1\rangle = (m+1)\hbar |\lambda, m+1\rangle$

$$\longrightarrow \underline{\hat{L}_+ |\lambda, m\rangle = c |\lambda, m+1\rangle} \quad : \text{上昇演算子}$$

同様に

$$\underline{\hat{L}_- |\lambda, m\rangle = c' |\lambda, m-1\rangle} \quad : \text{下降演算子}$$

$$L^2 = \lambda \hbar^2 = \text{const.}; \quad \hat{L}_+ |m\rangle \cdots \rightarrow l = m_{\max}$$

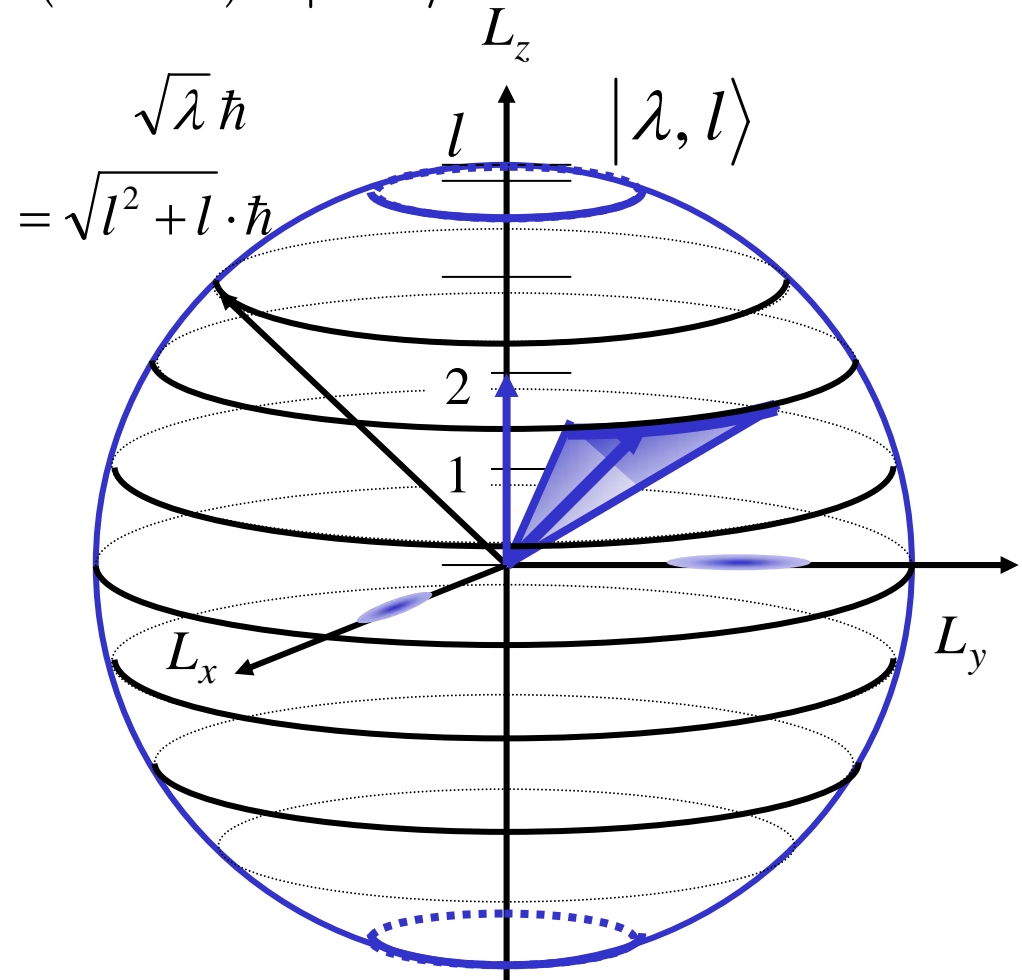
$$\hat{L}_+ |\lambda, l\rangle = 0 \quad : \text{簡単な微分方程式}$$

$$\hat{L}^2 = 2\hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z$$

$$\longrightarrow \lambda\hbar^2|\lambda, m\rangle = 2\hat{L}_-\hat{L}_+|\lambda, m\rangle + (m^2 + m)\hbar^2|\lambda, m\rangle$$

$$m_{\max} = l:$$

$$\begin{cases} \lambda\hbar^2|\lambda, l\rangle = (l^2 + l)\hbar^2|\lambda, l\rangle \\ \hat{L}_+|\lambda, l\rangle = 0 \end{cases}$$

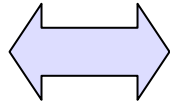


$$L^2 = \lambda \hbar^2 = (l^2 + l) \hbar^2 > l^2 \hbar^2 = L_{z, \max}^2$$

[量子力学]

$$\Delta L_x > 0, \quad \Delta L_y > 0$$

$$\longrightarrow L > L_{z, \max}$$



[古典力学]

$$L = L_{z, \max}; \quad L_x = L_y = 0$$

$$\left. \begin{aligned} \hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y &= \hbar e^{i\theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \\ |\lambda, m\rangle = |l, m\rangle &= Y_{lm}(\theta) e^{im\phi} \end{aligned} \right\}$$

$$\hat{L}_+ |l, l\rangle = \hbar e^{i\theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_{ll}(\theta) e^{il\phi} = 0$$

$$\longrightarrow \left(\frac{d}{d\theta} - l \cot \theta \right) Y_{ll}(\theta) = 0 \quad \longrightarrow \quad Y_{ll}(\theta) = c \sin^l \theta$$

$$w = \sin \theta \quad \rightarrow \quad dw = \cos \theta \cdot d\theta \quad \rightarrow \quad dY_{ll}/Y_{ll} = l dw/w$$

正規化条件

$$\longrightarrow |l, l\rangle = Y_{ll}(\theta)e^{il\phi} = \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \sin^l \theta e^{il\phi}$$

$$\hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y = \hbar e^{-i\theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$


$$\hat{L}_- |l, l\rangle = |l, l-1\rangle$$

$$\Rightarrow |l, m\rangle = \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{(l+m)!(2l+1)}{4\pi(l-m)!}} \frac{e^{im\phi}}{\left(\sqrt{1-\xi^2}\right)^m} \frac{d^{l-m}}{d\xi^{l-m}} (1-\xi^2)$$

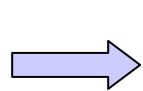
行列力学

演算子 \hat{A} の意味

☆ 物理量: 固有ベクトル $|k\rangle$


$$\hat{A}|k\rangle = a_k|k\rangle$$

$$\langle k| \times$$



$$\langle k|\hat{A}|k\rangle = \langle k|a_k|k\rangle = a_k \underbrace{\langle k|k\rangle}_1 = a_k$$

$$a_k = a_{kk} \text{ とおく}$$

☆ 遷移, 相互作用

$$\alpha_{ji} = \langle j|\hat{A}|i\rangle$$

$|i\rangle$

$|j\rangle$



\hat{A}

遷移, 相互作用

[シュレーディンガー 方程式による量子力学]



[行列力学]

物理量(演算子)空間

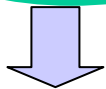
$$\hat{p}, q, \hat{L}, \theta, \hat{E}, t, \dots$$



作用

状態ベクトル空間

$$|k\rangle, |\lambda\rangle, |m\rangle, |i\rangle, \dots$$



所望の

固有値, 遷移量, 相互作用量

まとめる

$$\begin{pmatrix} \langle 1 | \hat{A} | 1 \rangle & \langle 1 | \hat{A} | 2 \rangle & \dots \\ \langle 2 | \hat{A} | 1 \rangle & \langle 2 | \hat{A} | 2 \rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & \alpha_{12} & \dots \\ \alpha_{21} & a_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

量子力学における物理量を要素とする行列 (エルミート行列)

$$\begin{pmatrix} a_1 & \alpha_{12} & \alpha_{13} & \alpha_{14} \\ \alpha_{12}^* & a_2 & \alpha_{23} & \alpha_{24} \\ \alpha_{13}^* & \alpha_{23}^* & a_3 & \alpha_{34} \\ \alpha_{14}^* & \alpha_{24}^* & \alpha_{34}^* & a_4 \end{pmatrix}$$

エルミート行列: 対称要素が複素共役(対角位置は実数)

[エルミート行列である根拠]

(1) 対角要素

対角要素 = 固有値 \Rightarrow 実数(測定値)

(2) 非対角要素

対称要素はお互いに逆遷移

$$|j\rangle = e^{i\theta} |i\rangle, \quad |i\rangle = e^{-i\theta} |j\rangle$$

[エルミート行列 \Leftrightarrow エルミート演算子]

エルミート演算子: $\hat{A}^+ = \hat{A}$, \hat{A}^+ : 演算子 \hat{A} の複素共役

(1) 対角要素

$$\left. \begin{aligned} a &= \langle a | \hat{A} | a \rangle, & a^* &= \langle a | \hat{A} | a \rangle^* = \langle a | \hat{A}^+ | a \rangle \\ a^* &= a, & \because a &: \text{実数} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \hat{A}^+ = \hat{A}$$

(1) 非対角要素

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{ij} &= \langle i | \hat{A} | j \rangle, & \alpha_{ji}^* &= \langle j | \hat{A} | i \rangle^* = \langle i | \hat{A}^+ | j \rangle \\ \alpha_{ji}^* &= \alpha_{ij} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \hat{A}^+ = \hat{A}$$

ベクトル演算

(1) エルミート演算子の異なる固有値の固有ベクトル

$$\langle b | \times \rightarrow \hat{A} | a \rangle = a | a \rangle,$$

$$\langle a | \times \rightarrow \hat{A} | b \rangle = b | b \rangle$$

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

$$\langle a | \hat{A} | b \rangle^* = b \langle a | b \rangle^*$$

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

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

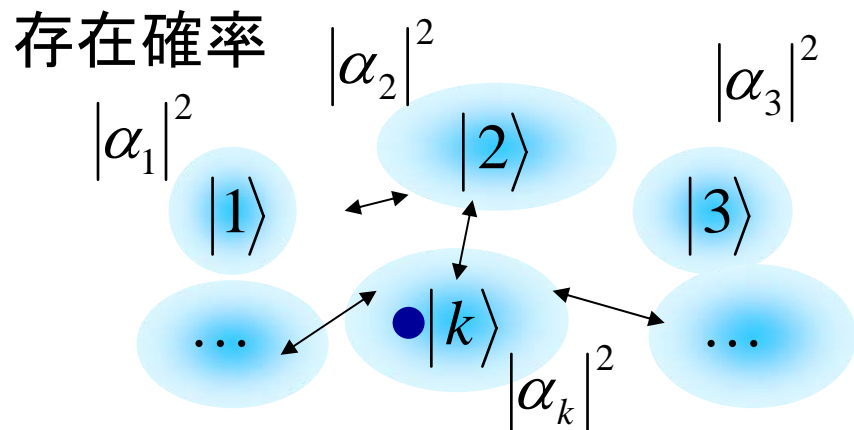
$$(a - b) \langle b | a \rangle = 0 \Rightarrow \langle b | a \rangle = 0$$

直交性

(2) 一般状態の物理量

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k |k\rangle$$

$$\alpha_k = \langle k | \psi \rangle, \quad \sum_{k=1}^{\infty} |\alpha_k|^2 = 1$$



$$\langle \psi | = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k^* \langle k | \times \hat{A} |\psi\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k^* \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k a_k |k\rangle$$

$$\hat{A} |k\rangle = a_k |k\rangle$$

測定

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$$

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_{k=1}^{\infty} \langle k | \alpha_k^* \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k a_k |k\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} a_k |\alpha_k|^2$$

状態 $|\psi\rangle$ で \hat{A} を測定して得られる結果の期待値

運動方程式の表示法各種

$$i\hbar \frac{dC_i}{dt} = \sum_{j=1}^{\infty} H_{ij} C_j, \quad C_i(t) = \langle x | \psi(t) \rangle$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle i | \psi \rangle = \sum_{j=1}^{\infty} H_{ij} \langle j | \psi \rangle$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \sum_{j=1}^{\infty} H_{ij} |j\rangle \langle j | \psi \rangle$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} = \hat{H}$$

$$\hat{E} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle$$

[不確定性原理]

不確定性関係

$$\Delta p \cdot \Delta q \geq \hbar$$

状態関数
(複素関数の重ね合せ)

$$\psi(q) = \sum_j c_j e^{i \frac{p_j}{\hbar} q}$$

物理量 = 演算子

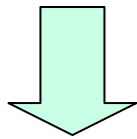
$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}$$

正準な交換関係

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

[運動方程式]

Schrödinger 方程式
(Schrödinger 描像,
Heisenberg 描像)



変換理論

$$\hat{H}\psi = \hat{E}\psi$$

$$\hat{a}^-|0\rangle = 0$$