91. 入り口

並進演算子と運動量演算子

並進演算子 $\hat{T}(a)$ によって $\hat{T}(a)|x\rangle = |x+a\rangle$

となるとする。

このとき $\hat{T}(a)$ はユニタリー性 $\hat{T}^{\dagger}(a) = \hat{T}^{-1}(a)$

をもつのでユニタリー演算子である。

ユニタリー演算子で変換される前後では

確率は保存される。

(証明)

あるユニタリー演算子を $\hat{U}$ とし、$\hat{U}|\phi\rangle = |\phi'\rangle$ とする。

$\langle\phi'|\phi'\rangle = \langle\phi|\hat{U}^{\dagger}\hat{U}|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{U}^{-1}\hat{U}|\phi\rangle = \langle\phi|\phi\rangle$ //

$\hat{T}(a) = (\hat{T}(\Delta a))^N$, $\Delta a = \dfrac{a}{N}$ のような無限小並進

を考える。

エルミートな運動量演算子 $\hat{p} = \hat{p}^{\dagger}$ を用いて

$\hat{T}(\Delta a) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar}\Delta a\,\hat{p}$ とおくと、

$\hat{T}^{\dagger}(\Delta a) = \hat{I} + \frac{i}{\hbar}\Delta a\,\hat{p}$ より

$$\hat{T}^{\dagger}\hat{T} = \left(\hat{I} + \frac{i}{\hbar}\Delta a\,\hat{p}\right)\left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar}\Delta a\,\hat{p}\right)$$

$$= \hat{I} + \underbrace{O((\Delta a)^2)}_{\text{ムシ}}$$

よってユニタリー性を満たすことが分かる。

古典量$x^m p^n$に演算子$\hat{P}$, $\hat{Q}$をどのように対応させるか(演算子順序の問題)

α-順序

$$x^m p^n \Rightarrow (\hat{Q}^m \hat{P}^n)^{(\alpha)}$$

$$\equiv \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial v}\right)^n \left(\exp\left[\left(\frac{1}{2}+\alpha\right)\frac{-iv\hat{P}}{\hbar}\right] \hat{Q}^m \exp\left[\left(\frac{1}{2}-\alpha\right)\frac{-iv\hat{P}}{\hbar}\right]\right)\Bigg|$$

$\alpha = -\frac{1}{2}$ととると、

$$x^m p^n \Rightarrow \hat{Q}^m \hat{P}^n$$

$\alpha = \frac{1}{2}$ととると、

$$x^m p^n \Rightarrow \hat{P}^n \hat{Q}^m$$

$\alpha = 0$ (ワイル順序)ととると、

$$x^m p^n \Rightarrow (\hat{Q}^m \hat{P}^n)_W$$

$$\equiv \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial v}\right)^n \left(e^{-iv\hat{P}/2\hbar}\, \hat{Q}^m\, e^{-iv\hat{P}/2\hbar}\right)\Big|_{v=0}$$

有限の並進演算子は指数関数を用いて

$$\hat{T}(a) = \lim_{N\to\infty}\left(\hat{I} - \frac{ia\hat{P}}{\hbar}\frac{1}{N}\right)^N = \exp\left[-\frac{ia\hat{P}}{\hbar}\right]$$

と書ける。

状態の時間変化

時間推進演算子を $\hat{U}(t,t_0)$ とおき

$\hat{U}(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle = |\Psi(t)\rangle$ が成り立つとする。

$$\hat{U}(t,t_0) = \hat{U}(t, t_{N-1})\cdots\hat{U}(t_j, t_{j-1})\cdots\hat{U}(t_1, t_0)$$

$$\left(t_j = t_{j-1} + \Delta t \quad , \Delta t = \frac{t-t_0}{N}\right)$$

のように無限小時間推進を考える。

無限小時間推進の母関数は $\hat{H}$ だから

$$\hat{U}(t_j, t_{j-1}) = \hat{\mathbb{I}} - \frac{i}{\hbar}\Delta t\,\hat{H}(t_j)$$

とおく。

ハミルトニアン $\hat{H}$ はエルミート演算子だから

$\hat{U}$ がユニタリー性をもつことはすぐに分かる。

よって有限の時間推進は

$$\hat{U}(t,t_0) = \lim_{N\to\infty}\left(\hat{\mathbb{I}} - \frac{i}{\hbar}\Delta t\,\hat{H}(t_N)\right)\cdots\left(\hat{\mathbb{I}} - \frac{i}{\hbar}\Delta t\,\hat{H}(t_1)\right)$$

と書ける。

$$|\Psi(t+\Delta t)\rangle = \left(\hat{\mathbb{I}} - \frac{i}{\hbar}\Delta t\,\hat{H}(\hat{P},\hat{Q};t)\right)|\Psi(t)\rangle$$

を変形して

$$i\hbar\frac{|\Psi(t+\Delta t)\rangle - |\Psi(t)\rangle}{\Delta t} = \hat{H}(\hat{P},\hat{Q};t)|\Psi(t)\rangle$$

$\Delta t \to 0$ とすれば $i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}(\hat{P},\hat{Q};t)|\Psi(t)\rangle$

(シュレーディンガー方程式)

一方、状態$|\Psi(t)\rangle$は時間推進によって

$$|\Psi(t)\rangle = \lim_{N\to\infty}\left(\hat{I} - \frac{it}{\hbar}\frac{\hat{H}}{N}\right)^N |\Psi(0)\rangle$$

$$= \exp\left[-\frac{it}{\hbar}\hat{H}\right]|\Psi(0)\rangle$$

演算子$\hat{A}$の期待値は

$$\langle\Psi(t)|\hat{A}|\Psi(t)\rangle$$

$$= \langle\Psi(0)|e^{\frac{it\hat{H}}{\hbar}}\hat{A}\,e^{-\frac{it\hat{H}}{\hbar}}|\Psi(0)\rangle$$

($\hat{A}_H(t) \equiv e^{\frac{it\hat{H}}{\hbar}}\hat{A}\,e^{-\frac{it\hat{H}}{\hbar}}$, $|\Psi(0)\rangle = |\Psi\rangle_H$ とすれば)

$$= {}_H\langle\Psi|\hat{A}_H(t)|\Psi\rangle_H$$

$\hat{A}_H(t)$を微分して

$$\frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = \frac{\partial\hat{A}_H(t)}{\partial t} + \frac{i\hat{H}}{\hbar}e^{\frac{it\hat{H}}{\hbar}}\hat{A}\,e^{-\frac{it\hat{H}}{\hbar}} - \frac{i\hat{H}}{\hbar}e^{\frac{it\hat{H}}{\hbar}}\hat{A}\,e^{-\frac{it\hat{H}}{\hbar}}$$

$$= \frac{\partial\hat{A}_H(t)}{\partial t} - \frac{i}{\hbar}[\hat{A}_H(t), \hat{H}]$$

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

$\hat{A}_H(t)$が陽にtに依存しないとき

$$i\hbar\frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = [\hat{A}_H(t), \hat{H}]$$

(ハイゼンベルグ方程式)

$$\Psi(t,x) = \langle x|\hat{U}(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle$$
$$= \int d^3x_0 \langle x|\hat{U}(t,t_0)|x_0\rangle\langle x_0|\Psi(t_0)\rangle$$
$$= \int d^3x_0\, K(x,x_0;t,t_0)\,\Psi(t_0,x_0)$$

とする。この $K(x,x_0;t,t_0) \equiv \langle x|\hat{U}(t,t_0)|x_0\rangle$ をファインマン核という。

$\hat{U}(t,t_0)$ が $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0)$ を満たすこと

(証明)

$$\hat{U}(t+\Delta t,t_0) = \hat{U}(t+\Delta t,t)\hat{U}(t,t_0)$$
$$= \left(\hat{1} - \frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}(t)\right)\hat{U}(t,t_0)$$
$$\rightarrow\ i\hbar\frac{\hat{U}(t+\Delta t,t_0)-\hat{U}(t,t_0)}{\Delta t} = \hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0)$$

$\Delta t\to 0$ とすれば $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0)$ □

を用いると、ファインマン核は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}K(x,x_0;t,t_0) = \hat{H}(-i\hbar\nabla,x;t)K(x,x_0;t,t_0)$$

とカりシュレーディンガー方程式を満たす。

一方，$\hat{U}(t,t')\hat{U}(t',t_0)=\hat{U}(t,t_0)$ であることを

用いると，$\int d^3x' K(x,x';t,t')K(x';x_0;t';t_0)=K(x,x_0;t,t_0)$

が成り立つことが分かる。

$$\hat{U}(t,t_0)=\lim_{N\to\infty}\left(\hat{I}-\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}(t_N)\right)\cdots\left(\hat{I}-\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}(t_1)\right)$$

であるから

$$K(x,x_0;t,t_0)=\lim_{N\to\infty}\langle x|\left(\hat{I}-\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}(t_N)\right)\cdots\left(\hat{I}-\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}(t_1)\right)|x_0\rangle$$

$\hat{H}$ が時間に依らなければ，指数関数を用いて

$$K(x,x_0;T)=\langle x|\exp\left[-\frac{iT}{\hbar}\hat{H}\right]|x_0\rangle \quad (T\equiv t-t_0)$$

ここで

$$\begin{aligned}
&\langle x|\exp\left[-\frac{iT}{\hbar}\hat{H}\right]|x_0\rangle\\
&=\int d^3p\,\langle x|p\rangle\langle p|\exp\left[-\frac{i}{\hbar}T\hat{H}(\hat{p})\right]|x_0\rangle\\
&=\int d^3p\,\exp\left[-\frac{i}{\hbar}TH(p)\right]\underbrace{\langle x|p\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}p\cdot x\right]}\underbrace{\langle p|x_0\rangle}_{\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}p\cdot x_0\right]}\\
&=\int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\exp\left[\frac{i}{\hbar}p\cdot(x-x_0)\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}TH(p)\right]\\
&=\int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\{p\cdot\Delta x-TH(p)\}\right] \quad (\Delta x\equiv x-x_0)
\end{aligned}$$

$$\therefore K(x,x_0;T)=\int\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\{p\cdot\Delta x-TH(p)\}\right]$$

具体例：自由粒子

$\hat{H} = \frac{p^2}{2m}$ を代入して

$$K(\Delta x; T) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left\{p\cdot\Delta x - T\frac{p^2}{2m}\right\}\right]$$

フレネル積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left[-i|\alpha|x^2 \mp i|\beta|x\right] = \sqrt{\frac{\pi}{i|\alpha|}} \exp\left[i\frac{|\beta|^2}{4|\alpha|}\right]$$

について $\alpha \to \frac{T}{2m\hbar}$, $|\beta| \to \frac{\Delta x_j}{\hbar}$ $(j = 1, 2, 3)$ とすると、

$$K(\Delta x; T) = \underbrace{\left(\frac{m}{2\pi i\hbar T}\right)^{\frac{3}{2}}}_{} \exp\left[\frac{im(\Delta x)^2}{2\hbar T}\right]$$

前因子という