ハイゼンベルグの不確定性原理

☆ 言葉での表現

量子の位置と運動量は同時に決めることができない

☆ 波動関数を使った説明

LCAO近似

$$\psi(x) = \sum_{i=1}^{N} C_i \phi_i(x)$$

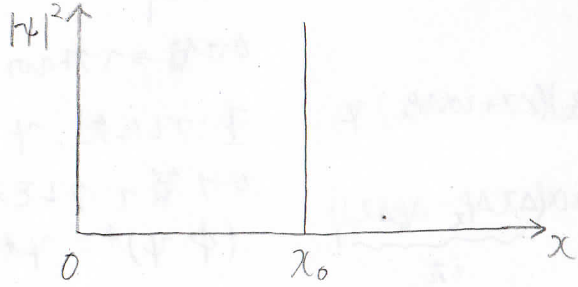
位置xでの存在確率密度

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x)$$

運動量演算子 $\hat{p}$

$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ より $\phi_i = A\exp\left(i\frac{p}{\hbar}x\right)$

粒子の位置が1点(x_0)に定まったとき



$$|\psi(x)|^2 = \begin{cases} \infty & (x = x_0) \\ 0 & (x \neq x_0) \end{cases}$$

$$\int \psi^*(x)\psi(x)dx = 1 \text{ (有限)}$$

デルタ関数

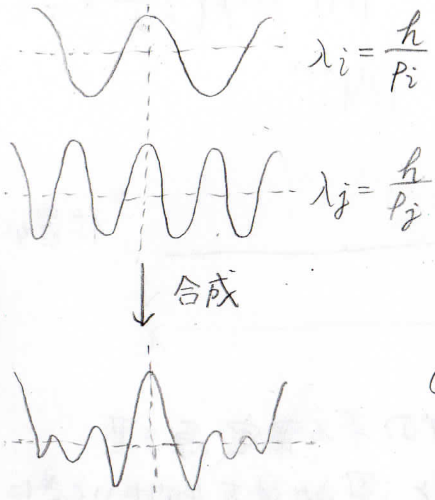
$$|\psi(x)|^2 = \delta(x - x_0)$$

$\delta(x-x_0)$は偶関数のためコサイン成分のみ考える

それぞれの$\phi_i(x)$は、

$$\phi_i = A\exp\left\{i\frac{p_i}{\hbar}(x-x_0)\right\} = A\cos\left\{\frac{p_i}{\hbar}(x-x_0)\right\}$$

ド・ブロイ波長の式 $\lambda = h/p$より、$\lambda_i = h/p_i$

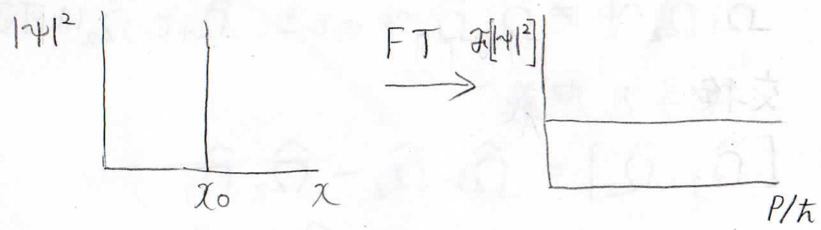


$$\delta(x-x_0) = A\sum_{i=1}^{\infty} \cos\left\{\frac{p_i}{\hbar}(x-x_0)\right\}$$

デルタ関数に近づく

波長の異なる波を同じ割合で無限回足したのが$\delta(x-x_0)$

フーリエ変換(各波長の波に分離)



$$\mathcal{F}[|\psi|^2] = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x_0)e^{-i\frac{x}{\lambda}}dx$$

$$= 1 \text{ (全ての}p\text{が等確率で分布)}$$

結論

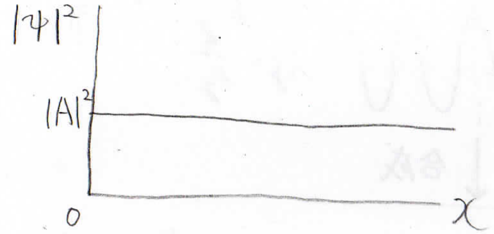
xを1点に定めると pがランダムになる

$\Delta x = 0 \Rightarrow \Delta p = \infty$ （Δ：値のブレ）

同様に

$\Delta p = 0 \Rightarrow \Delta x = \infty$

$$|\psi(x)|^2 = |A|^2 \exp\left(i\frac{p}{\hbar}x - i\frac{p}{\hbar}x\right)$$
$$= |A|^2$$



位置がランダムになる

☆ハイゼンベルグの不確定性原理

だいたいの位置と運動量を知りたいときには $\Delta x \cdot \Delta p$ が最小となる点が欲しい

2つの演算子 $\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2$ について

$\hat{\Omega}_1\hat{\Omega}_2\psi \neq \hat{\Omega}_2\hat{\Omega}_1\psi$ のとき、「$\hat{\Omega}_1$と$\hat{\Omega}_2$は可変でない」と言う

交換子を定義

$$[\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2] = \hat{\Omega}_1\hat{\Omega}_2 - \hat{\Omega}_2\hat{\Omega}_1$$

$[\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2] = \hat{0}$ のとき、$\hat{\Omega}_1$と$\hat{\Omega}_2$は可変

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)x$$

$$\hat{p}_x(\hat{x}\psi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)$$
$$= -i\hbar\left(\psi + x\left(i\frac{p_x}{\hbar}\right)\psi\right)$$
$$= -i\hbar\psi + \underbrace{xp\psi}_{\hat{x}(\hat{p}_x\psi)}$$

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

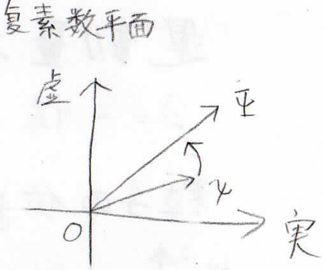
$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \neq \hat{0}$ 可変でない

$\Delta x \equiv \hat{x} - \bar{x}$ 　　$\bar{x}, \bar{p}_x$：ブレの中心

$\Delta p_x \equiv \hat{p}_x - \bar{p}_x$ 　　$\Delta x, \Delta p_x$：ブレの大きさ

$$\Phi = \underbrace{(\Delta x + i\alpha\Delta p)}_{\text{不確定性を考慮}}\psi$$

複素数平面



かけ算→ベクトルの回転

Φ：ブレた先、ψ 計算上

かけ算でブレを考慮

$(\phi\psi)^* = \psi^*\phi^*$

$\Phi^*\Phi$

$$= \psi^*(\Delta x - i\alpha\Delta p_x)(\Delta x + i\alpha\Delta p_x)\psi$$
$$= \left\{\Delta x^2 + \alpha^2\Delta p_x^2 + i\alpha\underbrace{(\Delta x\Delta p_x - \Delta p_x\Delta x)}_{i\hbar}\right\}$$
$$\times \psi^*\psi$$

≥ 0 （存在確率密度であるため）

演算子をスカラーと見る

$\int\psi^*\psi dx \geq 0$ より $(\overline{\Delta x})^2 + \alpha^2(\overline{\Delta p_x})^2 + i\alpha(i\hbar) \geq 0$

$$(\overline{\Delta p_x})^2\left\{\alpha - \frac{\hbar}{2(\overline{\Delta p_x})^2}\right\}^2 - \frac{\hbar^2}{4(\overline{\Delta p_x})^2} + (\overline{\Delta x})^2 \geq 0$$

$\alpha = \frac{\hbar}{2(\overline{\Delta p_x})^2}$ のとき最小値 $-\frac{\hbar^2}{4(\overline{\Delta p_x})^2} + (\overline{\Delta x})^2 \geq 0$

したがって $(\overline{\Delta x})^2(\overline{\Delta p_x})^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$，$\Delta x = \overline{\Delta x}$，$\Delta p_x = \overline{\Delta p_x}$ と再定義 → $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$

ハイゼンベルグの不確定性原理
↓