量子論, 演習問題 III (担当：加藤雄介）　2018.07.16

記号の詳細は講義ノートを参照のこと。特に断らない限り積分の範囲は $(-\infty, \infty)$ とする。

例題 01: 有限次元複素内積空間上の線形演算子と行列表現 V が正規直交基底 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \cdots |\psi_D\rangle$ で張られる D 次元複素内積空間であるとする。$|\psi\rangle$ ならば $\hat{A}|\psi\rangle \in V$ であり、$|\psi\rangle \in V, |\varphi\rangle \in V,$ ならば任意の複素数 α, β に対して $\hat{A}|\alpha\psi + \beta\varphi\rangle = \alpha|\hat{A}\psi\rangle + \beta|\hat{A}\varphi\rangle$ であるとき $\hat{A}$ は V 上の線形演算子であるという。

$|\psi\rangle \in V$ と $\hat{A}|\psi\rangle \in V$ が

$$|\psi\rangle = \sum_{\ell=1}^{D} c_\ell |\psi_\ell\rangle, \quad \hat{A}|\psi\rangle = \sum_{\ell=1}^{D} \tilde{c}_\ell |\psi_\ell\rangle \tag{1}$$

と表されるとき、関係式

$$\sum_{\ell'=1}^{D} A_{\ell\ell'} c_{\ell'} = \tilde{c}_\ell \tag{2}$$

すなわち

$$\begin{pmatrix} \tilde{c}_1 \\ \vdots \\ \tilde{c}_D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{D1} & \cdots & A_{DD} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_D \end{pmatrix} \tag{3}$$

に現れる行列を $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \cdots |\psi_D\rangle$ における $\hat{A}$ の行列表現という。

$$A_{\ell\ell'} = \langle \psi_\ell | \hat{A}\psi_{\ell'} \rangle \tag{4}$$

を示せ。

解答例：

(1) の第二式と $|\psi_\ell\rangle$（をブラベクトルとして内積をとると）$\langle\psi_\ell|\hat{A}\psi\rangle = \tilde{c}_\ell$ となり、この左辺は $\sum_{\ell'=1}^{D} \langle\psi_\ell|\hat{A}\psi_{\ell'}\rangle c_{\ell'}$ となり、

$$\sum_{\ell'=1}^{D} \langle\psi_\ell|\hat{A}\psi_{\ell'}\rangle c_{\ell'} = \tilde{c}_\ell \tag{5}$$

となる. この式と (2) を比較して (4) が得られる。

例題 02: 3 次元第一励起状態で張られる（3 次元複素）内積空間における角運動量演算子 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ の行列表現 講義中計算で示したように

$$\hat{L}_z|\psi_{100}\rangle = \mathrm{i}\hbar|\psi_{010}\rangle, \quad \hat{L}_z|\psi_{010}\rangle = -\mathrm{i}\hbar|\psi_{100}\rangle, \quad \hat{L}_z|\psi_{001}\rangle = 0 \tag{6}$$

となる。$\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$ についても同様な計算により

$$\hat{L}_x|\psi_{100}\rangle = 0, \quad \hat{L}_x|\psi_{010}\rangle = \mathrm{i}\hbar|\psi_{001}\rangle, \quad \hat{L}_x|\psi_{001}\rangle = -\mathrm{i}\hbar|\psi_{010}\rangle \tag{7}$$

$$\hat{L}_y|\psi_{100}\rangle = -\mathrm{i}\hbar|\psi_{001}\rangle, \quad \hat{L}_y|\psi_{010}\rangle = 0, \quad \hat{L}_y|\psi_{001}\rangle = \mathrm{i}\hbar|\psi_{100}\rangle \tag{8}$$

となる（ここの導出は省略)。このとき基底 $\{|\psi_{100}\rangle, |\psi_{010}\rangle, |\psi_{001}\rangle\}$ における $\hat{L}_z, \hat{L}_x, \hat{L}_y$ の行列表現 $\mathcal{L}_z, \mathcal{L}_x, \mathcal{L}_y$ を求めよ。

解答例：

$$\langle\psi_{100}|\hat{L}_z\psi_{010}\rangle = -\mathrm{i}\hbar, \quad \langle\psi_{010}|\hat{L}_z\psi_{100}\rangle = \mathrm{i}\hbar \tag{9}$$

でそれ以外の行列要素はゼロであるから、

$$\mathcal{L}_z = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i}\hbar & 0 \\ \mathrm{i}\hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{10}$$

となる。同様な計算により

$$\mathcal{L}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\mathrm{i}\hbar \\ 0 & \mathrm{i}\hbar & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{L}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathrm{i}\hbar \\ 0 & 0 & 0 \\ -\mathrm{i}\hbar & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{11}$$

となる。ちなみにこの基底における $\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ の行列表現は

$$\mathcal{L}_z^2 + \mathcal{L}_x^2 + \mathcal{L}_y^2 = \begin{pmatrix} \hbar^2 & 0 & 0 \\ 0 & \hbar^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hbar^2 & 0 \\ 0 & 0 & \hbar^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \hbar^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hbar^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\hbar^2 & 0 & 0 \\ 0 & 2\hbar^2 & 0 \\ 0 & 0 & 2\hbar^2 \end{pmatrix} \tag{12}$$

で与えられる。

例題 03: 別の基底での行列表現 前問の 3 次元第一励起状態で張られる（3 次元複素）内積空間の別の正規直交基底

$$|L_z = \hbar\rangle = \frac{|\psi_{100}\rangle + \mathrm{i}|\psi_{010}\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |L_z = 0\rangle = |\psi_{001}\rangle, \quad |L_z = -\hbar\rangle = \frac{|\psi_{100}\rangle - \mathrm{i}|\psi_{010}\rangle}{\sqrt{2}}, \tag{13}$$

における角運動量演算子 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ の行列表現を $\mathcal{L}'_z, \mathcal{L}'_x, \mathcal{L}'_y$ を求めよ。

解答例：

$$\mathcal{L}'_z = \begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix} \tag{14}$$

となる。同様な計算により

$$\mathcal{L}'_x = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{L}'_y = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\mathrm{i}\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{\mathrm{i}\hbar}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{\mathrm{i}\hbar}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\mathrm{i}\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \tag{15}$$

となる。前問と基底が違うので、同じ演算子でも行列表現が異なる。ただし $\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$ の行列表現は

$$(\mathcal{L}'_z)^2 + (\mathcal{L}'_x)^2 + (\mathcal{L}'_y)^2 = \begin{pmatrix} \hbar^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hbar^2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \hbar^2 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \hbar^2 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\hbar^2 & 0 & 0 \\ 0 & 2\hbar^2 & 0 \\ 0 & 0 & 2\hbar^2 \end{pmatrix} \tag{16}$$

となり、前問と同じ行列表現となる。

例題 04: $\hat{L}_+, \hat{L}_-$ 例題 03 と同じ基底で $\hat{L}_+, \hat{L}_-$ の行列表現 $\hat{\mathcal{L}}'_+, \hat{\mathcal{L}}'_-$ を求めよ。

答：

$$\mathcal{L}'_+ = \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{2}\hbar & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\hbar \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{L}'_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{2}\hbar & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \end{pmatrix} \tag{17}$$

これより、

$$\frac{\hat{L}_-}{\sqrt{2}\hbar}|L_z=\hbar\rangle=|L_z=0\rangle,\quad \frac{\hat{L}_-}{\sqrt{2}\hbar}|L_z=0\rangle=-|L_z=-\hbar\rangle,\quad \frac{\hat{L}_-}{\sqrt{2}\hbar}|L_z=-\hbar\rangle=0 \tag{18}$$

$$\frac{\hat{L}_+}{\sqrt{2}\hbar}|L_z=\hbar\rangle=0,\quad \frac{\hat{L}_+}{\sqrt{2}\hbar}|L_z=0\rangle=-|L_z=\hbar\rangle,\quad \frac{\hat{L}_+}{\sqrt{2}\hbar}|L_z=-\hbar\rangle=|L_z=0\rangle \tag{19}$$

となり、$\hat{L}_-$ が $\hat{L}_z$ の固有値を $\hbar$ だけ下げる演算子、$\hat{L}_+$ が $\hat{L}_z$ の固有値を $\hbar$ だけ上げる演算子であることがわかる。