量子論, 演習問題 I (担当：加藤雄介）　2018.07.12

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: エルミートとユニタリー 複素内積空間あるいは複素ヒルベルト空間上の線形演算子がエルミートであることの定義を述べよ。またエルミート演算子を正規直交基底を用いて行列として表したとき、その行列の性質について述べよ。また線形演算子がユニタリーであることの定義を述べよ。

例題 02: 期待値 $A(t)$ の時間発展方程式

量子力学のシュレディンガー描像（講義で扱った形式）では、古典力学から量子力学への移行は

step1 運動量 $p(t)$ と位置 $x(t)$ を時間に依らない線形作用素（線形演算子）$\hat{p}$, $\hat{x}$ に対応させる。

step2 古典力学で $p(t)$, $x(t)$, t を用いて表される物理量 $A(p(t), x(t), t)$ は

$$A(p(t), x(t), t) \to A(\hat{p}, \hat{x}, t) = \hat{A} \tag{1}$$

という演算子に対応させる。[1] 特に古典力学の力学的エネルギー E を運動量 $p(t)$ と位置 $x(t)$ を用いて表す関数

$$E = \frac{p^2(t)}{2m} + V(x(t), t) = H(p(t), x(t), t) \tag{2}$$

をハミルトニアン（ハミルトン関数）と呼ぶ。[2] ハミルトニアンの引数の $p(t)$, $x(t)$ を $\hat{p}$, $\hat{x}$ に置き換えて得られる演算子

$$H(\hat{p}, \hat{x}, t) = \hat{H}(t) \tag{3}$$

を量子系のハミルトニアンと呼ぶ。

step3 状態ベクトルの時間発展方程式は

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \tag{4}$$

と与えられる。ここで状態ベクトルの微分は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{|\Delta\psi(t)\rangle}{\Delta t}, \quad |\Delta\psi(t)\rangle = |\psi(t + \Delta t)\rangle - |\psi(t)\rangle \tag{5}$$

と定義し、これを場合によっては $|\frac{\mathrm{d}\psi(t)}{\mathrm{d}t}\rangle$ とも書くことにする。状態 $|\psi(t)\rangle$ における $\hat{x}$ の期待値 $\langle\psi(t)|\hat{x}\psi(t)\rangle = x(t)$ が満たす方程式を以下導く。

1.
$$\frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} = \left\langle \psi(t) \middle| \hat{x}\frac{\mathrm{d}\psi(t)}{\mathrm{d}t} \right\rangle + \left\langle \frac{\mathrm{d}\psi(t)}{\mathrm{d}t} \middle| \hat{x}\psi(t) \right\rangle \tag{6}$$

を示せ。

---

[1] $A(\hat{p}, \hat{x}, t)^\dagger = A(\hat{p}, \hat{x}, t)$ となることを確認する。そうでない場合は当面考えなくて良いが、その場合は $(A(\hat{p}, \hat{x}, t)^\dagger + A(\hat{p}, \hat{x}, t))/2$ という演算子を対応させる。

[2] 正しく言うと

$$\frac{\mathrm{d}p(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H(p, x, t)}{\partial x}\bigg|_{p \to p(t), x \to x(t)}, \quad \frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H(p, x, t)}{\partial p}\bigg|_{p \to p(t), x \to x(t)}$$

が成り立つような関数 $H(p, x, t)$ をハミルトニアンという。

2. 式 (6) の右辺第一項が

$$\left\langle \psi(t) \middle| \hat{x} \frac{\mathrm{d}\psi(t)}{\mathrm{d}t} \right\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \left\langle \psi(t) \middle| \hat{x}\hat{H}(t)\psi(t) \right\rangle \tag{7}$$

と書けることを示せ。

3. 式 (6) の右辺第二項が

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}\psi(t)}{\mathrm{d}t} \middle| \hat{x}\psi(t) \right\rangle = \frac{-1}{\mathrm{i}\hbar} \left\langle \psi(t) \middle| \hat{H}(t)\hat{x}\psi(t) \right\rangle \tag{8}$$

と書けることを示せ。

解答例

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{\mathrm{d}\psi(t)}{\mathrm{d}t} \middle| \hat{x}\psi(t) \right\rangle &= \left\langle \hat{x}\frac{\mathrm{d}\psi(t)}{\mathrm{d}t} \middle| \psi(t) \right\rangle, \qquad (\text{from } \hat{x} = \hat{x}^\dagger) && (9)\\
&= \left\langle \psi(t) \middle| \hat{x}\frac{\mathrm{d}\psi(t)}{\mathrm{d}t} \right\rangle^*, \qquad (\text{from } \langle\psi|\psi'\rangle = \langle\psi'|\psi\rangle^*) && (10)\\
&= \left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \left\langle \psi(t) \middle| \hat{x}\hat{H}(t)\psi(t) \right\rangle \right)^*, \qquad \text{from (7)} && (11)\\
&= -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \left\langle \psi(t) \middle| \hat{x}\hat{H}(t)\psi(t) \right\rangle^* && (12)\\
&= -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \left\langle \hat{x}\psi(t) \middle| \hat{H}(t)\psi(t) \right\rangle^*, \qquad (\text{from } \hat{x} = \hat{x}^\dagger) && (13)\\
&= -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \left\langle \hat{H}(t)\hat{x}\psi(t) \middle| \psi(t) \right\rangle^* \qquad (\text{from } \hat{H}(t) = \hat{H}^\dagger(t)) && (14)\\
&= -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar} \left\langle \psi(t) \middle| \hat{H}(t)\hat{x}\psi(t) \right\rangle, \qquad (\text{from } \langle\psi|\psi'\rangle = \langle\psi'|\psi\rangle^*) && (15)
\end{aligned}$$

4. 式 (6), (7) , (8) より方程式

$$\frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\left\langle \psi(t) \middle| [\hat{x}, \hat{H}(t)]\psi(t) \right\rangle}{\mathrm{i}\hbar} \tag{16}$$

を導け。

5. $A(\hat{p}, \hat{x}, t)$ の期待値 $\langle\psi(t)|A(\hat{p}, \hat{x}, t)\psi(t)\rangle = A(t)$ の時間発展方程式

$$\frac{\mathrm{d}A(t)}{\mathrm{d}t} = \left\langle \psi(t) \middle| \frac{\partial A(\hat{p}, \hat{x}, t)}{\partial t}\psi(t) \right\rangle + \frac{\left\langle \psi(t) \middle| [A(\hat{p}, \hat{x}, t), \hat{H}(t)]\psi(t) \right\rangle}{\mathrm{i}\hbar} \tag{17}$$

を導け。

例題 03: $[\hat{p}, \hat{x}] = -\mathrm{i}\hbar$ **と古典的運動方程式**

一次元自由粒子 $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m)$ において、$[\hat{p}, \hat{H}]$ を計算せよ。運動量の期待値 $p(t)$ が $\frac{\mathrm{d}p(t)}{\mathrm{d}t} = 0$ を満たすことを示せ。また正準交換関係 $[\hat{p}, \hat{x}] = -\mathrm{i}\hbar$ を用いて $[\hat{x}, \hat{H}]$ を計算せよ。位置の期待値 $x(t)$ が

$$\frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{p(t=0)}{m}$$

を満たすことを示せ。

解答例：講義ノート参照のこと

例題 04: 一次元量子系 $\psi(p)$ と $\psi(x)$ の関係 運動量演算子 $\hat{p}$ の固有状態 $|p\rangle$ を

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle, \quad \langle p'|p\rangle = \delta(p'-p) \tag{18}$$

を満たすものとして定義する。ある量子状態 $|\psi\rangle$ が $|p\rangle$ の基底として

$$|\psi\rangle = \int \psi(p)|p\rangle \mathrm{d}p \tag{19}$$

と表されるとき、$\psi(p)$ を状態 $|\psi\rangle$ の p-表示の波動関数という。運動量演算子 $\hat{p}$ は状態 $|\psi\rangle$ を $\hat{p}|\psi\rangle = \int p\psi(p)|p\rangle \mathrm{d}p$ に移すので、波動関数 $\psi(p)$ に実数 p をかけると考えることもできる。

1. $$|p\rangle = C\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}|x\rangle \mathrm{d}x \tag{20}$$

   と書けることを示せ。C の値は導かなくてよい。

   注：講義で紹介したように規格化定数も含めて

   $$|p\rangle = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}|x\rangle \mathrm{d}x \tag{21}$$

   と書ける。

2. (21) を用いて

   $$|x\rangle = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}|p\rangle \mathrm{d}p \tag{22}$$

   を示せ。

3. (21) を用いて

   $$\psi(p) = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}|\psi(x)\mathrm{d}x \tag{23}$$

   を示せ。

4. $$\psi(x) = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\psi(p)\mathrm{d}p \tag{24}$$

   を示せ。

5. $\|\psi\|$ が有限であるとき、演算子 $\hat{X}$ を次のように定義する。

   $$\hat{X}|\psi\rangle = \int \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\psi(p)}{\mathrm{d}p}|p\rangle \mathrm{d}p \tag{25}$$

   このとき、

   - $[\hat{p}, \hat{X}] = -\mathrm{i}\hbar$
   - $\hat{X}^\dagger = \hat{X}$

   を示せ。この二つの性質から、$\hat{X}$ は $\hat{x}$ そのものであるとみなすことができる。

   解答例：

   「交換関係」

   $$\hat{p}\hat{X}|\psi\rangle = \int p\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(p)}{\partial p}\right)|p\rangle \mathrm{d}p, \quad \hat{X}\hat{p}|\psi\rangle = \int \left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial(p\psi(p))}{\partial p}\right)|p\rangle \mathrm{d}p \tag{26}$$

二つの両辺を差し引くと

$$[\hat{p}, \hat{X}]|\psi\rangle = \int \left(p\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(p)}{\partial p}\right) - \left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial(p\psi(p))}{\partial p}\right)\right)|p\rangle\mathrm{d}p = -\mathrm{i}\hbar\int\psi(p)|p\rangle\mathrm{d}p = -\mathrm{i}\hbar|\psi\rangle \tag{27}$$

これが任意のベクトル $|\psi\rangle$ で成り立つから $[\hat{p}, \hat{X}] = -\mathrm{i}\hbar$ とかける。
「エルミート性」
ノルムが有限である任意のベクトル $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$ に対して

$$\langle\varphi|\hat{X}\psi\rangle = \langle\hat{X}\varphi|\psi\rangle \tag{28}$$

を示す。$\|\varphi\|^2 = \int|\varphi(p)|^2\mathrm{d}p$ が有限だから $\varphi(p\to\pm\infty) = 0$. 同様に $\psi(p\to\pm\infty) = 0$.

$$\begin{aligned}
\langle\varphi|\hat{X}\psi\rangle = \int\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(p)}{\partial p}\langle\varphi|p\rangle\mathrm{d}p &= \int\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(p)}{\partial p}\varphi^*(p)\mathrm{d}p && (29)\\
&= -\int\mathrm{i}\hbar\psi(p)\frac{\partial\varphi^*(p)}{\partial p}\mathrm{d}p \quad \text{ここで部分積分を用いた} && (30)\\
&= \left(\int\mathrm{i}\hbar\psi^*(p)\frac{\partial\varphi(p)}{\partial p}\mathrm{d}p\right)^* && (31)
\end{aligned}$$

一方

$$\begin{aligned}
\langle\hat{X}\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{X}\varphi\rangle^* &= \left(\int\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi(p)}{\partial p}\langle\psi|p\rangle\mathrm{d}p\right)^* && (32)\\
&= \left(\int\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi(p)}{\partial p}\psi^*(p)\mathrm{d}p\right)^* && (33)
\end{aligned}$$

これら二つの式の最右辺の式は等しく、(28) が成り立つことが示された。

問題 01: ボルンの確率規則（離散スペクトルの場合）

1. 3 次元調和振動子のエネルギー固有状態 $|\psi_{100}\rangle$ で $\hat{L}_z$ を測定したとき、確率がゼロでない測定値を全て挙げ、それぞれの測定確率を求めよ。
2. 3 次元調和振動子のエネルギー固有状態 $|\psi_{010}\rangle$ で $\hat{L}_z$ を測定したとき、確率がゼロでない測定値を全て挙げ、それぞれの測定確率を求めよ。
3. 3 次元調和振動子のエネルギー固有状態 $|\psi_{001}\rangle$ で $\hat{L}_z$ を測定したとき、確率がゼロでない測定値を全て挙げ、それぞれの測定確率を求めよ。

問題 02: 不確定性関係の証明

ある量子状態 $|\psi\rangle$ における物理量 $\hat{A}$ の期待値を $\langle\hat{A}\rangle$ と略記する。$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle\hat{1}$, $\Delta\hat{B} = \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle\hat{1}$ としたとき次の不等式

$$\left\langle\left(\Delta\hat{A}\right)^2\right\rangle\left\langle\left(\Delta\hat{B}\right)^2\right\rangle \geq \frac{|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle|^2}{4} \tag{34}$$

を示せ。

ヒント：任意の実数 λ に対して $(\Delta\hat{A} + \mathrm{i}\lambda\Delta\hat{B})|\psi\rangle$ のノルムが正または 0 であることを用いればよい。

問題 03: $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \mathrm{i}C\hat{1}$ が有限次元では起きないこと

有限次元の複素内積空間で $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \mathrm{i}C\hat{1}$ を満たす線形作用素 $\hat{A}, \hat{B}$ と実数 $C \neq 0$ は存在しないことを示せ。

このことから、正準交換関係 $[\hat{p}, \hat{x}] = -\mathrm{i}\hbar$ は無限次元ヒルベルト空間でのみ実現することがわかる。

問題 04: 調和振動子における運動量と位置の期待値が従う運動方程式

一次元調和振動子 $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m) + m\omega^2\hat{x}^2/2$ において、$[\hat{p}, \hat{H}]$ と $[\hat{x}, \hat{H}]$ を計算せよ。運動量と位置の期待値が従う運動方程式を導き、古典的運動方程式と一致することを示せ。

問題 05: 調和振動子の基底状態における $\psi(p)$

一次元調和振動子 $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m) + m\omega^2\hat{x}^2/2$ における基底状態 $|\psi_0\rangle$ における p 表示での波動関数 $\langle p|\psi_0\rangle = \psi(p)$ を求める。

1. $\hat{a}|\psi_0\rangle = 0$ と

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\mathrm{i}\ell}{\hbar}\hat{p} + \frac{\hat{x}}{\ell}\right) \tag{35}$$

と $\hat{x}$ が $\psi_0(p)$ を $\mathrm{i}\hbar\mathrm{d}\psi_0(p)/\mathrm{d}p$ に置き換える働きがあることを用いて、$\psi_0(p)$ が満たす微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}\psi_0(p)}{\mathrm{d}p} + \left(\frac{\ell}{\hbar}\right)^2 p\psi_0(p) = 0 \tag{36}$$

を導け。

2. 前問の微分方程式を解き、

$$\psi_0(p) = C' \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\ell p}{\hbar}\right)^2\right] \tag{37}$$

を導け。

注：ガウス積分の公式, $\alpha > 0$ として

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p \exp\left[-\alpha p^2\right] \mathrm{d}p = (\pi/\alpha)^{\frac{1}{2}} \tag{38}$$

と規格化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p |\psi_0(p)|^2 = 1$$

より $C' = \pi^{-\frac{1}{4}}(\ell/\hbar)^{\frac{1}{2}}$ となる。