量子論, 演習問題II+講義への補足 (担当：加藤雄介）　2018.07.15

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。

講義（第 08 回）への補足: Schrödinger 方程式の導出について 確率の保存から時間発展演算子をユニタリーであるとすると状態ベクトルの従う微分方程式はエルミート演算子 $\hat{\Omega}(t)$ を用いて

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = -\mathrm{i}\hat{\Omega}(t)|\psi(t)\rangle \tag{1}$$

と表される。系が時間並進対称性を持つ場合 $\hat{\Omega}(t)$ は時間に依存しない演算子 $\hat{\Omega}$ となる。時刻 t における $\hat{\Omega}$ の期待値 $\langle\psi(t)|\hat{\Omega}\psi(t)\rangle = \Omega(t)$ の従う微分方程式は

$$\frac{\mathrm{d}\Omega(t)}{\mathrm{d}t} = \mathrm{i}\langle\psi(t)|[\hat{\Omega},\hat{\Omega}]\psi(t)\rangle = 0 \tag{2}$$

となる。時間並進対称な系においてエネルギー E とエネルギーだけの関数 $f(E)$ は保存するから、演算子 $\hat{\Omega}$ はエネルギーに対応する演算子 $\hat{H}$ だけの関数 $f(\hat{H})$ で表されるだろう。さらにここで踏み込んで

$$\hat{\Omega} = \lambda\hat{H} \tag{3}$$

と置き、物理量 $\hat{A} = A(\hat{p},\hat{x},t)$ の期待値 $A(t)$ の時間発展を表す式

$$\frac{\mathrm{d}A(t)}{\mathrm{d}t} = \left\langle\frac{\partial A(\hat{p},\hat{x},t)}{\partial t}\right\rangle - \mathrm{i}\lambda\langle[A(\hat{p},\hat{x},t),\hat{H}]\rangle \tag{4}$$

と対応する古典力学における方程式を比べることにする。古典力学で物理量 $A(p(t),x(t),t)$ の時間発展は

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}A(p(t),x(t),t)}{\mathrm{d}t} &= \left(\frac{\partial A(p,x,t)}{\partial t} + \frac{\partial A(p,x,t)}{\partial p}\frac{\mathrm{d}p(t)}{\mathrm{d}t} + \frac{\partial A(p,x,t)}{\partial x}\frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t}\right)\Big|_{(p,x)=(p(t),x(t))} && (5)\\ &= \left(\frac{\partial A(p,x,t)}{\partial t} - \frac{\partial A(p,x,t)}{\partial p}\frac{\partial H(p,x,t)}{\partial x} + \frac{\partial A(p,x,t)}{\partial x}\frac{\partial H(p,x,t)}{\partial p}\right)\Big|_{(p,x)=(p(t),x(t))} && (6)\\ &= \left(\frac{\partial A(p,x,t)}{\partial t} + (A,H)_{\mathrm{PB}}\right)\Big|_{(p,x)=(p(t),x(t))} && (7)\end{aligned}$$

と書かれる。(5) から (6) は古典力学の正準方程式

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

を用いた。これは $H(p,x,t) = p^2/(2m) + V(x,t)$ とおくとそれぞれ

$$\frac{\mathrm{d}p(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial V(x,t)}{\partial x}\Big|_{x\to x(t)}, \quad \frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{p(t)}{m} \tag{8}$$

という見慣れた式に他ならない。(6) から (7) への変形では Poisson の括弧式 (Poisson bracket)

$$(A,H)_{\mathrm{PB}} = -\frac{\partial A(p,x,t)}{\partial p}\frac{\partial H(p,x,t)}{\partial x} + \frac{\partial A(p,x,t)}{\partial x}\frac{\partial H(p,x,t)}{\partial p} \tag{9}$$

を導入した。これは解析力学で用いられる記号である。

$$(\quad,\quad)_{\mathrm{PB}} \leftrightarrow -\mathrm{i}\lambda[\quad,\quad]$$

と対応させると、量子力学における方程式 (4) と古典力学における方程式 (7) の対応がつく。これが (3) の置き換えを正当化している。(3) を用いて Schrödinger 方程式は

$$\frac{\mathrm{i}}{\lambda}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \tag{10}$$

の形で与えられる。両辺の次元を比べると $[\lambda] = \mathrm{E}^{-1}\mathrm{T}^{-1}$ の次元を持つことがわかる。ここまででではまだ λ の値は決まらない。例えば、正準交換関係も

$$[\hat{p}, \hat{x}] = -\frac{\mathrm{i}}{\lambda} \tag{11}$$

と置けば、自由粒子において運動量、位置の期待値の時間変化が

$$\frac{\mathrm{d}p(t)}{\mathrm{d}t} = 0, \quad \frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{p(0)}{m} \tag{12}$$

と与えられる。λ の値を決めるのは不確定性関係である。(11) より

$$\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle \geq \frac{1}{4\lambda^2} \tag{13}$$

となる。これが λ の大きさを規定する。$\lambda = 1/\hbar$ とおく。実験値と比べて $\hbar = 1.0545718\times10^{-34}\mathrm{J}\cdot\mathrm{s}$ が得られる ($\hbar$ を測定から定めるのは複数の方法がある。ここでは λ の決め方の一例を示した。)。

講義（第 13 回）への補足 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ を満たす演算子に対する同時固有ベクトル

$$\hat{A}|a,b\rangle = a|a,b\rangle, \quad \hat{B}|a,b\rangle = b|a,b\rangle$$

を正規直交基底として選ぶことができる。
証明 : $\hat{A}$ の固有状態の集合 $\{|a,\ell\rangle\}_{a,\ell}$ を正規直交基底として取れる。a は $\hat{A}$ の固有値を表し、$\ell = 1,2,\cdots,m_a$ は縮退した固有状態を区別するラベルである。

- $m_a = 1$ のときは、$\hat{B}|a,1\rangle$ は

$$\hat{A}\hat{B}|a,1\rangle = \hat{B}\hat{A}|a,1\rangle = a\hat{B}|a,1\rangle \tag{14}$$

  より、$\hat{A}$ の固有状態で、固有値は a。この固有値には縮退がない ($m_a = 1$) ので、

$$\hat{B}|a,1\rangle = C|a,1\rangle, \quad C \text{ は定数} \tag{15}$$

- $m_a \geq 2$ のとき、$|a,1\rangle,\cdots,|a,m_a\rangle$ で張られる線形空間を V とする。$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$ なら、$|\psi\rangle \in V$ となり、$|\psi\rangle$ は $|a,1\rangle,\cdots,|a,m_a\rangle$ の線形結合で表される。$\hat{B}|a,\ell\rangle, \ell = 1,\cdots,m_a$ は

$$\hat{A}\hat{B}|a,\ell\rangle = \hat{B}\hat{A}|a,\ell\rangle = a\hat{B}|a,\ell\rangle \tag{16}$$

  より、$\hat{B}|a,\ell\rangle \in V$, したがって

$$\hat{B}|a,\ell\rangle = \sum_{\ell'=1}^{m_a} B_{\ell'\ell}|a,\ell'\rangle, \quad \ell = 1,\cdots,m_a \tag{17}$$

と書ける。この式と $|a,\ell''\rangle$ との内積を取ると

$$\langle a,\ell''|\hat{B}|a,\ell\rangle = \sum_{\ell'=1}^{m_a} B_{\ell'\ell}\langle a,\ell''|a,\ell'\rangle = \sum_{\ell'=1}^{m_a} B_{\ell'\ell}\delta_{\ell'',\ell'} = B_{\ell''\ell} \tag{18}$$

以下に示すように

$$B^*_{\ell'\ell} = B_{\ell\ell'}, \quad \ell,\ell' = 1,\cdots,m_a \tag{19}$$

が成り立つ。便宜上 $|\varphi_\ell\rangle = |a,\ell\rangle$ と置くと

$$\begin{aligned} B^*_{\ell'\ell} &= \langle\varphi'_\ell|\hat{B}|\varphi_\ell\rangle^* & (20)\\ &= \langle\hat{B}\varphi'_\ell|\varphi_\ell\rangle^* & (21)\\ &= \langle\varphi_\ell|\hat{B}\varphi'_\ell\rangle = B_{\ell\ell'} & (22)\end{aligned}$$

となり、(19) となる。よって、$B_{\ell\ell'}$ を ℓ,ℓ' 成分とする行列 B はエルミート行列となり、

$$\sum_{\ell'=1}^{m_a} B_{\ell\ell'}c^{(\alpha)}_{\ell'} = b^{(\alpha)}c^{(\alpha)}_\ell, \quad \ell = 1,\cdots,m_a \tag{23}$$

を満たす m_a 個の固有値 $b^{(\alpha)}$ と固有ベクトル $\left(c^{(\alpha)}_1,\cdots,c^{(\alpha)}_{m_a}\right)^T$, $\alpha = 1,\cdots,m_a$ が存在する。それらは互いに固有ベクトルは互いに直交し、それぞれが規格化されているように選ぶことができる (標準内積における直交性)。

$$\sum_{\ell=1}^{m_a}(c^{(\alpha')}_\ell)^* c^{(\alpha)}_\ell = \delta_{\alpha',\alpha} \tag{24}$$

これを用いて m_a 個の状態ベクトル

$$|\tilde{\psi}^{(\alpha)}\rangle = \sum_{\ell=1}^{m_a} c^{(\alpha)}_\ell|a,\ell\rangle \tag{25}$$

を定義すると、これは

$$\hat{B}|\tilde{\psi}^{(\alpha)}\rangle = \sum_{\ell=1}^{m_a} c^{(\alpha)}_\ell\hat{B}|a,\ell\rangle = \sum_{\ell'=1}^{m_a}\sum_{\ell=1}^{m_a} B_{\ell'\ell}c^{(\alpha)}_\ell|a,\ell'\rangle = \sum_{\ell'=1}^{m_a} b^{(\alpha)}c^{(\alpha)}_{\ell'}|a,\ell'\rangle = b^{(\alpha)}|\tilde{\psi}^{(\alpha)}\rangle \tag{26}$$

を満たし、かつ

$$\langle\tilde{\psi}^{(\alpha')}|\tilde{\psi}^{(\alpha)}\rangle = \sum_{\ell'=1}^{m_a} c^{(\alpha')}_{\ell'}\sum_{\ell=1}^{m_a} c^{(\alpha)}_\ell\langle a,\ell'|a,\ell\rangle = \sum_{\ell=1}^{m_a}(c^{(\alpha')}_\ell)^* c^{(\alpha)}_\ell = \delta_{\alpha',\alpha} \tag{27}$$

となる。よって、$\hat{A},\hat{B}$ の同時固有状態を正規直交基底に選ぶことが可能である。

例題 01: $\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z$ の非可換性とエネルギー準位の縮退 ハミルトニアン $\hat{H}$ と $\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z$ が可換であるとき、すなわち

$$[\hat{H},\hat{L}_x] = 0, \quad [\hat{H},\hat{L}_y] = 0, \quad [\hat{H},\hat{L}_z] = 0, \tag{28}$$

が成り立つとき、

$$[\hat{H},\hat{\boldsymbol{L}}^2] = 0, \quad [\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{L}_z] = 0 \tag{29}$$

も成立するので、$\hat{H}$ と $\hat{\boldsymbol{L}}^2$,$\hat{L}_z$ の同時固有状態

$$\hat{H}|\psi_{E,\lambda,M}\rangle = E|\psi_{E,\lambda,M}\rangle, \quad \hat{\boldsymbol{L}}^2|\psi_{E,\lambda,M}\rangle = \hbar^2\lambda|\psi_{E,\lambda,M}\rangle, \quad \hat{L}_z|\psi_{E,\lambda,M}\rangle = \hbar M|\psi_{E,\lambda,M}\rangle \tag{30}$$

の集合 $\{|\psi_{E,\lambda,M}\rangle\}$ を正規直交基底

$$\langle\psi_{E',\lambda',M'}|\psi_{E,\lambda,M}\rangle = \delta_{E',E}\delta_{\lambda',\lambda}\delta_{M',M} \tag{31}$$

に選ぶことが可能である。ここで λ と M は無次元実数である。$\hat{L}_x$ や $\hat{L}_y$ は $\hat{L}_z$ と可換ではないため、$|\psi_{E,\lambda,M}\rangle$ は一般には $\hat{L}_x$ や $\hat{L}_y$ の固有状態ではない（3 次元調和振動子の第一励起状態の例を参照)。以下ではそれ以外に $\hat{L}_x, \hat{L}_y$ と $\hat{L}_z$ の非可換性から言えることを考える。$|\varphi^{(x)}\rangle = \hat{L}_x|\psi_{E,\lambda,M}\rangle, \quad |\varphi^{(y)}\rangle = \hat{L}_y|\psi_{E,\lambda,M}\rangle$ とする。

1. エネルギー準位は一般に縮退を持ちうることを示せ。
   解答例：
   E,λ,M を適当に選べば、$\|\varphi^{(x)}\| > 0$ となる [1]。このとき $[\hat{H},\hat{L}_x] = 0, [\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{L}_x] = 0$ より

$$\hat{H}|\varphi^{(x)}\rangle = E|\varphi^{(x)}\rangle, \quad \hat{\boldsymbol{L}}^2|\varphi^{(x)}\rangle = \hbar^2\lambda|\varphi^{(x)}\rangle \tag{33}$$

すなわち、$|\varphi^{(x)}\rangle$ はハミルトニアンと $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ の同時固有状態であり、その固有値は $|\psi_{E,\lambda,M}\rangle$ のそれと等しい。以下に示すように $|\varphi^{(x)}\rangle$ と $|\psi_{E,\lambda,M}\rangle$ は平行（=片方が、もう片方の定数倍であること）でない。よって二つの別の量子状態 $|\varphi^{(x)}\rangle$ と $|\psi_{E,\lambda,M}\rangle$ が同じエネルギー固有値を持つ縮退した状態にある。

$|\varphi^{(x)}\rangle$ と $|\psi_{E,\lambda,M}\rangle$ が平行である（同じ量子状態を表す）とき

$$\hat{L}_x|\psi_{E,\lambda,M}\rangle = C|\psi_{E,\lambda,M}\rangle \quad C \text{ は定数} \tag{34}$$

となり、$\|\varphi^{(x)}\| > 0$ より右辺の C はゼロでない。さらに C は $\hat{L}_z$ の固有値でもあるのでゼロでない実数となる。両辺と $|\psi_{E,\lambda,M}\rangle$ との内積をとり、$\langle\psi_{E,\lambda,M}|\psi_{E,\lambda,M}\rangle = 1$ を用いると

$$C = \langle\psi_{E,\lambda,M}|\hat{L}_x\psi_{E,\lambda,M}\rangle \tag{35}$$

さらに $\hat{L}_x = -\mathrm{i}[\hat{L}_y,\hat{L}_z]/\hbar$ を用いると

$$\begin{aligned}
C &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Big(\langle\psi_{E,\lambda,M}|\hat{L}_y\hat{L}_z\psi_{E,\lambda,M}\rangle - \langle\psi_{E,\lambda,M}|\hat{L}_z\hat{L}_y\psi_{E,\lambda,M}\rangle\Big) && (36)\\
&= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Big(\hbar M\langle\psi_{E,\lambda,M}|\hat{L}_y\psi_{E,\lambda,M}\rangle - \langle\hat{L}_z\psi_{E,\lambda,M}|\hat{L}_y\psi_{E,\lambda,M}\rangle\Big) && (37)\\
&= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Big(\hbar M\langle\psi_{E,\lambda,M}|\hat{L}_y\psi_{E,\lambda,M}\rangle - \hbar M\langle\psi_{E,\lambda,M}|\hat{L}_y\psi_{E,\lambda,M}\rangle\Big) = 0 && (38)
\end{aligned}$$

となり、$C \neq 0$ と矛盾する

[1] 全ての E,λ,M の値に対して、つねに $\|\varphi^{(x)}\| = 0$ となるなら、任意の状態ベクトル $|\psi\rangle = \sum_{E,\lambda,M}\psi(E,\lambda,M)||\psi_{E,\lambda,M}\rangle$ に対して

$$\hat{L}_x|\psi\rangle = \sum_{E,\lambda,M}\psi(E,\lambda,M)\hat{L}_x|\psi_{E,\lambda,M}\rangle = 0 \tag{32}$$

となるが、これは $\hat{L}_x = 0$ を意味するので矛盾。$\hat{L}_x$ の固有状態として固有値 $\hbar$ を持つ状態は存在するから

2. $|\varphi^{(x)}\rangle, |\varphi^{(y)}\rangle$ を組み合わせると $|\psi_{E,\lambda,M\pm1}\rangle$ を構成することができることを示せ（実際に構成せよ）。

解答例：

$\hat{L}_x = -\mathrm{i}[\hat{L}_y, \hat{L}_z]/\hbar, \quad \hat{L}_y = -\mathrm{i}[\hat{L}_z, \hat{L}_x]/\hbar,$ を用いると

$$|\varphi^{(x)}\rangle = \hat{L}_x|\psi_{E,\lambda,M}\rangle = -\mathrm{i}M|\varphi^{(y)}\rangle + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{L}_z|\varphi^{(y)}\rangle \tag{39}$$

$$|\varphi^{(y)}\rangle = \hat{L}_y|\psi_{E,\lambda,M}\rangle = \mathrm{i}M|\varphi^{(x)}\rangle - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{L}_z|\varphi^{(x)}\rangle \tag{40}$$

(39)+i(40) より

$$|\varphi^{(x)}\rangle + \mathrm{i}|\varphi^{(y)}\rangle = -M(|\varphi^{(x)}\rangle + \mathrm{i}|\varphi^{(y)}\rangle) + \frac{\hat{L}_z}{\hbar}(|\varphi^{(x)}\rangle + \mathrm{i}|\varphi^{(y)}\rangle) \tag{41}$$

これを整理して

$$\hat{L}_z(|\varphi^{(x)}\rangle + \mathrm{i}|\varphi^{(y)}\rangle) = \hbar(M+1)(|\varphi^{(x)}\rangle + \mathrm{i}|\varphi^{(y)}\rangle) \tag{42}$$

を得る。よって、

$$|\varphi^{(x)}\rangle + \mathrm{i}|\varphi^{(y)}\rangle \propto |\psi_{E,\lambda,M+1}\rangle \tag{43}$$

あるいは $\hat{L}_+ = \hat{L}_x + \mathrm{i}\hat{L}_y$

$$|\psi_{E,\lambda,M+1}\rangle = \frac{c^{(+)}_{\lambda,M}\hat{L}_+|\psi_{E,\lambda,M}\rangle}{\hbar} \tag{44}$$

と表される。ここで $c^{(+)}_{\lambda,M}$ は規格化因子である。次に (39)−i(40) より

$$|\varphi^{(x)}\rangle - \mathrm{i}|\varphi^{(y)}\rangle = M(|\varphi^{(x)}\rangle - \mathrm{i}|\varphi^{(y)}\rangle) - \frac{\hat{L}_z}{\hbar}(|\varphi^{(x)}\rangle - \mathrm{i}|\varphi^{(y)}\rangle) \tag{45}$$

これを整理して

$$\hat{L}_z(|\varphi^{(x)}\rangle - \mathrm{i}|\varphi^{(y)}\rangle) = \hbar(M-1)(|\varphi^{(x)}\rangle - \mathrm{i}|\varphi^{(y)}\rangle) \tag{46}$$

を得る。よって、

$$|\varphi^{(x)}\rangle - \mathrm{i}|\varphi^{(y)}\rangle \propto |\psi_{E,\lambda,M-1}\rangle \tag{47}$$

あるいは $\hat{L}_- = \hat{L}_x - \mathrm{i}\hat{L}_y$

$$|\psi_{E,\lambda,M-1}\rangle = \frac{c^{(-)}_{\lambda,M}\hat{L}_-|\psi_{E,\lambda,M}\rangle}{\hbar} \tag{48}$$

と表される。ここで $c^{(-)}_{\lambda,M}$ は規格化因子である。