量子力学

第7回目（5/30）

2AM　前期木曜2限

先進工学部マテリアル創成工学科　田村隆治

tamura☺rs.tus.ac.jp

認証コード：****

今回の授業で身に付くこと

２つの物理量が同時に確定値をとるためには、両者の演算子の同時固有状態が存在しなければならないことを理解する。

具体的には、なぜ位置と運動量の両方を確定させることができないのかを理解する。

量子力学における定常状態（再考）

演算子$\hat{\Omega}$の期待値 $\boxed{\langle\hat{\Omega}\rangle = \langle\Psi(x,t)|\hat{\Omega}|\Psi(x,t)\rangle}$

※一般に、期待値は時間に依存する。

※S.E.の解が位置の関数と時間の関数の積の形（変数分離形）で書けるときは定常状態を表すことを以前に述べた。ここでは、変数分離形で書かれるとき、物理量が時間変化しないことを証明しよう。

変数分離形 $\Psi(x,t) = \psi(x)\exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)$

$$\langle\hat{\Omega}\rangle = \int \Psi^* \,\hat{\Omega}\Psi dx = \int \psi(x)^* e^{\frac{iE_n t}{\hbar}}\,\hat{\Omega}\psi(x)e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}dx$$

$$= \int \psi(x)^*\,\hat{\Omega}\psi(x)dx = \langle\psi(x)|\hat{\Omega}|\psi(x)\rangle$$

※変数分離形はたしかに定常状態を表している。

例題：無限に深い井戸型ポテンシャル中の一次元電子の固有状態に関して、以下の演算子の期待値を求めよ。（20分）

固有状態 $\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$

演算子$\widehat{\Omega}$の期待値 $\langle\widehat{\Omega}\rangle = \langle\Psi|\widehat{\Omega}|\Psi\rangle$

期待値を求めたければ
両辺をΨではさんで
計算してやればいい

１．運動量p_x

２．運動量の二乗${p_x}^2$

例題：無限に深い井戸型ポテンシャル中の一次元電子の固有状態に関して、以下の演算子の期待値を求めよ。（20分）

固有状態　$\Psi_n(x) = \sqrt{\dfrac{2}{L}}\, sin\left(\dfrac{n\pi x}{L}\right)$

１．運動量p_x

$$\langle p_x \rangle = \langle \Psi_n | p_x | \Psi_n \rangle = \int_0^L \Psi_n{}^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \Psi_n dx = \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)(-i\hbar)\frac{n\pi}{L}\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$$

$$= -\frac{2in\pi\hbar}{L^2}\int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = -\frac{in\pi\hbar}{L^2}\int_0^L \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) dx$$

$$= \frac{in\pi\hbar}{L^2}\left[\frac{L}{2n\pi}\cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right]_0^L = 0$$

２．運動量の二乗$p_x{}^2$

$$\langle p_x{}^2 \rangle = \langle \Psi_n | p_x{}^2 | \Psi_n \rangle = -\frac{2}{L}\int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)(-i\hbar)^2\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$$

$$= \frac{2\hbar^2}{L}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = \frac{2\hbar^2}{L}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \int_0^L \frac{1 - cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)}{2} dx$$

$$= \frac{2\hbar^2}{L}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \frac{L}{2} = \left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2$$

エルミート共役な演算子

演算子$\hat{P}$のエルミート共役な演算子$\hat{P}^\dagger$を以下の式で定義する。

$$\langle m|\hat{P}^\dagger|n\rangle = \langle n|\hat{P}|m\rangle^* \qquad {}^\forall\Psi_m, {}^\forall\Psi_n$$

※$\langle m|\hat{P}|n\rangle$を演算子$\hat{P}$の行列成分とみることができる。すると、この定義式は、演算子$\hat{P}^\dagger$の行列のmn成分は、演算子$\hat{P}$の行列のnm成分の複素共役であることを表している。

※ $\hat{P}$ がエルミート演算子であれば、定義1より、右辺 $= \langle n|\hat{P}|m\rangle^* = \langle m|\hat{P}|n\rangle$なので$\hat{P}^\dagger = \hat{P}$。エルミート演算子のエルミート共役な演算子は自分自身である。そのため、エルミート演算子は自己共役演算子ともよばれる。

※複素共役をとり転置しても不変な行列をエルミート行列という。オブザーバブル演算子にはその行列がエルミート行列となることが課せられる。

左辺を少し変形して、

$$(\text{左辺}) = \left\langle m|\hat{P}^\dagger n\right\rangle^* = \left\langle \hat{P}^\dagger n|m\right\rangle \qquad \therefore \left\langle \hat{P}^\dagger n|m\right\rangle = \langle n|\hat{P}|m\rangle$$

$|m\rangle$ は任意のケットなので、

$$\boxed{\langle n|\hat{P} = \left\langle \hat{P}^\dagger n\right|} \qquad \boxed{\langle n|\hat{P}^\dagger = \left\langle \hat{P} n\right|}$$

※演算子$\hat{P}$とΨ_nの順序を変えると、†(ダガー)が付く。

※ 右式は、左式で$\hat{P}$ を$\hat{P}^\dagger$ とすると、$\left(\hat{P}^\dagger\right)^\dagger = \hat{P}$(次スライド参照)より得られる。

特に、 $\hat{P}$ がエルミート演算子の場合、

$$\boxed{\langle n|\hat{P} = \left\langle \hat{P} n\right|}$$

※これをエルミート演算子の定義に用いても良い。ただちにエルミート演算子の定義式が得られる。

エルミート共役の性質

$$\left(\hat{P}^\dagger\right)^\dagger = \hat{P}$$

$$\langle m|\hat{P}|n\rangle = \left\langle \hat{P}^\dagger m \middle| n\right\rangle = \langle n|\hat{P}^\dagger m\rangle^* = \langle n|\hat{P}^\dagger|m\rangle^* = \left\langle \left(\hat{P}^\dagger\right)^\dagger n|m\right\rangle^*$$
$$= \left\langle m \middle| \left(\hat{P}^\dagger\right)^\dagger n\right\rangle = \left\langle m|\left(\hat{P}^\dagger\right)^\dagger|n\right\rangle$$

$$\left(\hat{P}\hat{Q}\right)^\dagger = \hat{Q}^\dagger\hat{P}^\dagger$$

$$\left\langle m|\left(\hat{P}\hat{Q}\right)^\dagger|n\right\rangle = \langle \hat{P}\hat{Q}m|n\rangle = \langle \hat{Q}m|\hat{P}^\dagger|n\rangle = \langle \hat{Q}m|\hat{P}^\dagger n\rangle = \langle m|\hat{Q}^\dagger|\hat{P}^\dagger n\rangle$$
$$= \langle m|\left(\hat{Q}^\dagger\hat{P}^\dagger\right)|n\rangle$$

$$\left(c\hat{Q}\right)^\dagger = c^*\hat{Q}^\dagger$$

$$\left\langle m|\left(c\hat{Q}\right)^\dagger|n\right\rangle = \langle \left(c\hat{Q}\right)m|n\rangle = c^*\langle \hat{Q}m|n\rangle = c^*\langle m|\hat{Q}^\dagger|n\rangle = \langle m|\left(c^*\hat{Q}^\dagger\right)|n\rangle$$

$$\left(\hat{P} \pm \hat{Q}\right)^\dagger = \hat{P}^\dagger \pm \hat{Q}^\dagger$$

$$\left\langle m|\left(\hat{P} \pm \hat{Q}\right)^\dagger|n\right\rangle = \langle \left(\hat{P} \pm \hat{Q}\right)m|n\rangle = \langle \hat{P}m|n\rangle \pm \langle \hat{Q}m|n\rangle$$
$$= \langle m|\hat{P}^\dagger|n\rangle \pm \langle m|\hat{Q}^\dagger|n\rangle = \langle m|\left(\hat{P}^\dagger \pm \hat{Q}^\dagger\right)|n\rangle$$

同時固有状態

固有値方程式 $\hat{P}|\Psi\rangle = p|\Psi\rangle$

【解釈】系が$|\Psi\rangle$の状態にあるとき、物理量Pを測定すれば、測定値としてpが得られる。

固有値方程式
$$\hat{P}|\Psi\rangle = p|\Psi\rangle$$
$$\hat{Q}|\Psi\rangle = q|\Psi\rangle$$

【解釈】系が$|\Psi\rangle$の状態にあるとき、物理量Pを測定すれば測定値としてpが、物理量Qを測定すれば測定値としてqが得られる。

このとき、$|\Psi\rangle$は物理量PとQの同時固有状態であるという。

物理量PとQの同時固有状態は、このように、物理量PとQの両方が確定した状態である。

※物理量PとQの両方を確定させることができるかどうかは、同時固有状態が存在するかどうかにかかっている。

【重要事項】演算子$\hat{P}$と$\hat{Q}$の同時固有状態が存在するかどうかは、演算子$\hat{P}$と$\hat{Q}$の交換関係だけで決まる。

交換関係と同時固有状態

交換子 $\boxed{[\hat{P}, \hat{Q}] \equiv \hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P}}$

$[\hat{P}, \hat{Q}] = 0$のとき、「$\hat{P}$と$\hat{Q}$は交換する」、あるいは、「$\hat{P}$と$\hat{Q}$は可換である」という。

※演算子の差$\hat{A} - \hat{B}$がゼロであることは次のように理解すると良い。
任意の$|\Psi\rangle$について$(\hat{A} - \hat{B})|\Psi\rangle = 0$であれば、$\hat{A} - \hat{B} = 0$

以降、以下が成り立つことを示す。

$\hat{P}$と$\hat{Q}$が交換する場合

$\hat{P}$と$\hat{Q}$の同時固有状態が存在する。
（$\hat{P}$と$\hat{Q}$の両方を確定させることができる。）

$\hat{P}$と$\hat{Q}$が交換しない場合

$\hat{P}$と$\hat{Q}$の同時固有状態は存在しない。
（$\hat{P}$と$\hat{Q}$の両方を確定させることはできない。）

演算子の可換性と同時固有状態

演算子PとQが可換である場合　$\left[\hat{P}, \hat{Q}\right] = 0$

$|\Psi\rangle$ をPの固有状態（固有値p）とする。すなわち、

$$\hat{P}|\Psi\rangle = p|\Psi\rangle$$

$\hat{P}(\hat{Q}|\psi\rangle) = p(\hat{Q}|\psi\rangle)$

ここで、$\hat{Q}|\Psi\rangle$を考える。PとQは可換なので、

$$\boxed{\hat{P}\hat{Q}|\Psi\rangle} = \hat{Q}\hat{P}|\Psi\rangle = p\hat{Q}|\Psi\rangle$$

$p|\psi\rangle$

従って、$\hat{Q}|\Psi\rangle$はPの固有状態（固有値p）である。

固有値pを有する固有状態が1つしかない（＝縮退がない）場合は、$\hat{Q}|\Psi\rangle$は$|\Psi\rangle$そのものである。従って、qを複素数として以下の式が成り立つ。

$$\hat{Q}|\Psi\rangle = q|\Psi\rangle$$

これは、$|\Psi\rangle$ がQの固有状態（固有値q）でもあることを示している。

演算子Pの固有状態$|\Psi\rangle$はQの固有状態でもある（同時固有状態）。

※固有値pに縮退がある場合でも、縮退した固有関数$|\Psi_i\rangle$ $(i = 1,2,\cdots,m)$の線形結合により作った固有関数$|\Phi_i\rangle$を用いて$\hat{Q}|\Phi_i\rangle = q|\Phi_i\rangle$とすることができる。

二重縮退のある場合

※補足資料

同じ固有値pを有する独立な固有状態を$|\psi_1\rangle$、$|\psi_2\rangle$とする。$\hat{Q}|\psi_1\rangle$、$\hat{Q}|\psi_2\rangle$がPの固有状態（固有値p）であることはすでにわかっているので、以下のようにかける。

$$\hat{Q}|\psi_1\rangle = c_{11}|\psi_1\rangle + c_{12}|\psi_2\rangle \qquad {c_{11}}^2 + {c_{12}}^2 = 1$$

$$\hat{Q}|\psi_2\rangle = c_{21}|\psi_1\rangle + c_{22}|\psi_2\rangle \qquad {c_{21}}^2 + {c_{22}}^2 = 1$$

$$\therefore \hat{Q}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}c_{11} & c_{12}\\ c_{21} & c_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} \equiv Q\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}$$ ※ 上の2式を書き換えたもの

$|\psi_1\rangle$と$|\psi_2\rangle$の一次結合を考える。

$$\begin{pmatrix}{\psi_1}'\\ {\psi_2}'\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} \equiv P\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} \quad \therefore \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = P^{-1}\begin{pmatrix}{\psi_1}'\\ {\psi_2}'\end{pmatrix}$$

$$\hat{Q}\begin{pmatrix}{\psi_1}'\\ {\psi_2}'\end{pmatrix} = \hat{Q}P\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = P\hat{Q}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = PQ\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = PQP^{-1}\begin{pmatrix}{\psi_1}'\\ {\psi_2}'\end{pmatrix}$$

$$\therefore \hat{Q}\begin{pmatrix}{\psi_1}'\\ {\psi_2}'\end{pmatrix} = PQP^{-1}\begin{pmatrix}{\psi_1}'\\ {\psi_2}'\end{pmatrix}$$

※ PQP^{-1}が対角化されるようなPを採用すれば、$|{\psi_1}'\rangle$、$|{\psi_2}'\rangle$は$\hat{Q}|\Psi\rangle = q|\Psi\rangle$を満足することがわかる。従って、$P$と$Q$の同時固有状態が存在する。

※3重以上の縮退があっても全く同様。

演算子の可換性と同時固有状態

演算子$\hat{P}$と$\hat{Q}$が交換する場合

Pに縮退がない場合、Pの固有関数はそのままQの固有関数となる。

Pに縮退がある場合、Pの固有関数の線形結合をつくることで、Q の固有関数を作ることができる。

※演算子が可換な場合、縮退のない方の演算子の固有関数を採用すれば、そのまま両方の演算子の同時固有状態が得られる。

まとめ

演算子$\hat{P}$と$\hat{Q}$が可換であれば同時固有状態が存在する。
あるいは、PとQの両方の物理量を確定させることができる。

※可換な演算子の例：運動量演算子$\hat{p}_x$と運動エネルギー演算子$\frac{\hat{p}_x{}^2}{2m}$

$\hat{p}_x$の固有関数：$\Psi = e^{ikx}$　　固有値：$\hbar k$

一つのkの値につき一つの固有状態（縮退なし）

縮退がないので$\Psi = e^{ikx}$はそのまま運動量エネルギー演算子の固有関数となる。

運動エネルギー固有値：$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$　（二重縮退）　逆はどうか？

演算子の可換性と同時固有状態

次に、演算子$\hat{P}$と$\hat{Q}$の同時固有状態が存在する場合を考える。
$\hat{P}$の固有状態$|\Psi_n\rangle$が$\hat{Q}$の固有状態にもなっているとする。すなわち、

$$\hat{P}\left|\Psi_n\right\rangle = p_n\left|\Psi_n\right\rangle$$

$$\hat{Q}\left|\Psi_n\right\rangle = q_n\left|\Psi_n\right\rangle$$

固有関数

任意の状態 $\left|\Phi\right\rangle = \sum_n c_n \left|\Psi_n\right\rangle$　固有関数の完全性（完備性）

$$\hat{P}\hat{Q}\left|\Phi\right\rangle = \sum_n c_n \hat{P}\hat{Q}\left|\Psi_n\right\rangle = \sum_n c_n q_n p_n \left|\Psi_n\right\rangle$$

$$\hat{Q}\hat{P}\left|\Phi\right\rangle = \sum_n c_n \hat{Q}\hat{P}\left|\Psi_n\right\rangle = \sum_n c_n p_n q_n \left|\Psi_n\right\rangle$$

$$\therefore \hat{P}\hat{Q}\left|\Phi\right\rangle = \hat{Q}\hat{P}\left|\Phi\right\rangle \qquad \forall\left|\Phi\right\rangle \qquad \therefore \hat{P}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{P}$$

同時固有状態が存在すれば演算子は可換である。

同時固有状態が存在することと演算子が可換であることは同値である。

※演算子が可換でなければ、同時固有状態は存在しない。
※演算子$\hat{P}$と$\hat{Q}$が交換しない場合、両者の物理量が同時に確定することはない。

これまでに学習した演算子間の交換関係

慣れないうちは最後にΨをつける

位置と運動量の交換関係

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

$$[x, \hat{p}_y] = x\hat{p}_y - \hat{p}_y x = x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)x = x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right) - x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right) = 0$$

$$[x, \hat{p}_x] = [y, \hat{p}_y] = [z, \hat{p}_z] = i\hbar$$

位置xと運動量p_xの同時固有状態は存在しない。
（位置xと運動量p_xの両方が確定することはない。）
運動量p_xが確定した状態では位置xが不確定となる。（逆も然り）

※完全に自由な粒子の固有関数$\Psi = e^{ikx}$は運動量が$\hbar k$で確定した状態。
このとき、粒子の存在確率はxによらず一定で、位置が全く不確定となる。

運動量間の交換関係

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = \hat{p}_x\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{p}_x = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\right)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) = 0$$

第7回目のまとめ

以下の内容を良く消化して、人に説明できるようにしましょう。

1．物理量PとQの両方が確定値をとるためには、演算子$\hat{P}$と$\hat{Q}$の同時固有状態が存在しなければならない。

2．演算子$\hat{P}$と$\hat{Q}$の同時固有状態が存在するかどうかは、$\hat{P}$と$\hat{Q}$の交換関係で決まる。

3．演算子$\hat{P}$と$\hat{Q}$が交換する場合、両者の同時固有状態が存在する。
演算子$\hat{P}$と$\hat{Q}$が交換しない場合、両者の同時固有状態は存在しない。

レポート課題（20分）

$\hat{A}$, $\hat{B}$ をエルミート演算子としたとき、$\hat{A}+i\hat{B}, \hat{A}-i\hat{B}$ は、互いにエルミート共役な演算子であるを示せ。

※ $\hat{A}=0$ とすればわかるように、エルミート演算子に虚数単位 i を掛けるともはやエルミート演算子ではなくなる。たとえば、ポテンシャルVに i を掛けるとエルミート演算子でなくなる。

ヒント>>tamura☺rs.tus.ac.jpまで

※提出方法

〆切：6/5(水)　　　提出先：LETUS

フォーマット：手書き・ワープロいずれも可

ファイル形式：PDF　　ファイル名書式：”82xxxxx材料太郎.pdf”