

# 量子力学

第6回目 (5/25)

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 : 3996

# 結晶中の一電子固有状態: Blochの定理(1928年)

長さを $L(=Na)$ として周期的境界条件を適用。  $\Psi(x+Na) = \Psi(x)$

$\Psi(x+a) = C\Psi(x)$ より、  $\Psi(x+Na) = C^N\Psi(x)$

$$\therefore C^N\Psi(x) = \Psi(x) \quad \therefore C^N = 1$$

$$\therefore C = \exp\left(\frac{2n\pi i}{N}\right) \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, N-1 \quad \begin{array}{l} 1\text{の原始}N\text{乗根} \\ (\text{根は}N\text{個ある}) \end{array}$$

$$\therefore C = \exp\left(\frac{2n\pi i}{L}a\right) = e^{ika} \quad \text{ただし、} k \equiv \frac{2n\pi}{L} \quad \begin{array}{l} \text{許される}k\text{の値} \\ n = 0, 1, 2, 3, \dots, N-1 \end{array}$$

以上より、  $\Psi(x+a) = e^{ika}\Psi(x)$  Blochの定理

※Blochの定理の別表現も導いておこう。

両辺に $e^{-ik(x+a)}$ を掛けると、  $\Psi(x+a)e^{-ik(x+a)} = \Psi(x)e^{-ikx}$

これは、 $\Psi(x)e^{-ikx}$ が周期 $a$ の周期関数であることを表している。

この周期関数を $u(x)$ で表す。  $\therefore u(x+a) = u(x)$

Blochの定理の別表現

$\Psi(x) = u(x)e^{ikx}$

Blochの定理

$$k = 0, \frac{2\pi}{L}, \frac{4\pi}{L}, \frac{6\pi}{L}, \dots, \frac{2(N-1)\pi}{L}$$

※Blochの定理は、結晶中の一電子定常状態(エネルギー固有状態)がある有限領域内の波数 $k$ で指定できることを示している。

# Bloch電子が従う固有値方程式

※ややアドバンスな内容

結晶中の一電子固有関数  $\Psi(x) = u(x)e^{ikx}$

$$k = 0, \frac{2\pi}{L}, \frac{4\pi}{L}, \dots, \frac{2(N-1)\pi}{L}$$

※時間に依存しないS.E.に代入して、 $u(x)$ の満たすべき式を導こう。

$$\text{ハミルトニアン} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(x) \quad V(x) = V(x+a)$$

$$\begin{aligned} \hat{p}_x \Psi &= -i\hbar \frac{d}{dx} u(x)e^{ikx} = \hbar k u(x)e^{ikx} + e^{ikx} \hat{p}_x u(x) \\ &= e^{ikx} (\hbar k + \hat{p}_x) u(x) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{p}_x^2 \Psi &= -i\hbar \frac{d}{dx} e^{ikx} (\hbar k u(x) + \hat{p}_x u(x)) \\ &= \hbar k e^{ikx} (\hbar k u(x) + \hat{p}_x u(x)) + e^{ikx} (\hbar k \hat{p}_x u(x) + \hat{p}_x^2 u(x)) \\ &= e^{ikx} (\hbar^2 k^2 + 2\hbar k \hat{p}_x + \hat{p}_x^2) u(x) = e^{ikx} (\hat{p}_x + \hbar k)^2 u(x) \end{aligned}$$

$$\therefore \frac{1}{2m} e^{ikx} (\hat{p}_x + \hbar k)^2 u(x) + V(x) u(x) e^{ikx} = E u(x) e^{ikx}$$

$$\therefore \frac{1}{2m} (\hat{p}_x + \hbar k)^2 u(x) + V(x) u(x) = E u(x)$$

※ $u(x)$ の満たすべき式。微分方程式が $k$ を含むことから $u(x)$ と $E$ は $k$ にも依存する。そこで  $u_k(x)$ 、 $E_k$ と書くことにする。

# Bloch電子が従う固有値方程式

※ややアドバンスな内容

$$\hat{H}_k \equiv \frac{1}{2m} (\hat{p}_x + \hbar k)^2 + V(x) \quad \text{とおくと、}$$

$$\boxed{\hat{H}_k u_k(x) = E_k u_k(x)} \quad u_k(x) \text{の満たすべき式}$$

$$k = 0, \frac{2\pi}{L}, \frac{4\pi}{L}, \dots, \frac{2(N-1)\pi}{L}$$

※これは固有値方程式である。従って、 $u_k(x)$ と $E_k$ の組を求めることになる。固有値 $E_k$ は多数存在するので、値の小さいものから  $n = 1, 2, 3, \dots$  とラベル付けしてエネルギーを  $E_{nk}$  と表す。この  $n$  を **バンド指標** とよぶ。

※通常、 $k$  の範囲は  $k = -\frac{N\pi}{L}, \dots, \frac{N\pi}{L} - \frac{2\pi}{L}$  にとる。このとき、 $-\frac{\pi}{a} \leq k < \frac{\pi}{a}$  の領域でエネルギーを表すことができる。この領域を **ブリルアン・ゾーン** (Brillouin zone) とよぶ。結晶中の一電子のエネルギー  $E_{nk}$  をB.Z.内の波数  $k$  に対して表示したものが **バンド図** とよばれるものである。

※Blochの定理より、結晶中の一電子エネルギー固有状態は以下の式で完全に表されることがわかった。**Bloch電子は、波数  $k$  とバンド指標  $n$  で完全に指定される。** また、波数  $k$  とバンド指標  $n$  を **量子数** とよぶ。

Bloch関数

$$\boxed{\Psi_{nk}(x) = u_{nk}(x) e^{ikx}}$$

$n$ : バンド指標、 $k$ : 波数

# エネルギーバンド図

※ややアドバンスな内容

$$\Psi_{nk}(x) = u_{nk}(x)e^{ikx} \quad G = \frac{2\pi}{a} \text{として、} -\frac{G}{2} \leq k < \frac{G}{2}$$

※Gを逆格子ベクトルとよぶ。

Blochの定理は、結晶中の一電子エネルギー $E_{nk}$ をすべて、 $-\frac{\pi}{a} \leq k < \frac{\pi}{a}$ の $k$ を用いて表せることを保証する。

例) 自由電子もBloch関数で表すことができる。  $\because V(x+a) = V(x)$   
エネルギー固有関数はすでに求めている。

$$\textcircled{1} \quad \Psi(x) = e^{ikx} \quad \because u(x) = 1 \quad -\frac{\pi}{a} \leq k < \frac{\pi}{a}$$

$$E_{1k} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

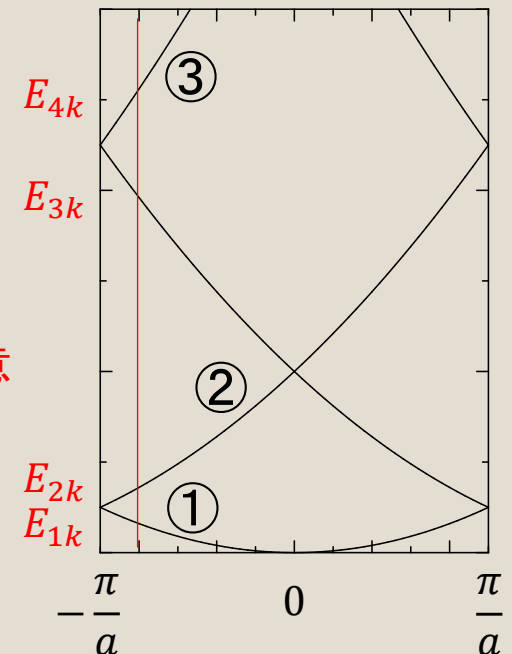
$$\textcircled{2} \quad \Psi(x) = e^{i(k+G)x} = \boxed{e^{iGx}} e^{ikx} \quad \because u(x) = e^{iGx}$$

$$E_{2k} = \frac{\hbar^2 (k+G)^2}{2m}$$

$$\textcircled{3} \quad \Psi(x) = e^{i(k+2G)x} = \boxed{e^{2iGx}} e^{ikx} \quad \because u(x) = e^{2iGx}$$

$$E_{3k} = \frac{\hbar^2 (k+2G)^2}{2m}$$

周期 $a$ の周期関数となっていることに注意



# 量子力学の基本体系

ブラ・ケット表記      $\langle \rangle$  : ブラケット

$\langle m|$  : ブラベクトル

$|n\rangle$  : ケットベクトル



これまではエネルギー固有状態を位置  $x$  の関数  $\Psi_n(x)$  と表してきた。

今後は位置  $x$  も物理量 (演算子) と考える。従って、位置  $x$  を特別扱いせず、**エネルギー固有状態  $\Psi_n(x)$  を単に  $|n\rangle$  と表すことにする。** 固有値の小さいものから  $n = 1, 2, 3, \dots$  とラベル付けしたと考えればよい。

※このようにすると、位置  $x$  の関数として表せない状態も取り込むことができる。  
(スピンなど)

※ ベクトルと呼ぶのは内積が定義できるためである。後で説明する。

時間に依存しないS.E.は以下のように簡単に表される。

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

※ ハミルトニアン演算子だけでなく、一般の物理量  $\hat{\Omega}$  の固有状態も  $|m\rangle$  と表記しよう。同様に固有値の小さいものから  $m = 1, 2, 3, \dots$  とラベル付けしたと考えればよい。

# ブラ・ケット表記

対応関係

固有状態

$$\Psi_n(x) \longleftrightarrow |n\rangle$$

固有値方程式

$$\hat{\Omega}\Psi_n = \omega_n \Psi_n \longleftrightarrow \hat{\Omega}|n\rangle = \omega_n |n\rangle$$

積分

$$\int \Psi_m^* \Psi_n dx \longleftrightarrow \langle m|n\rangle$$

$$\int \Psi_m^* \hat{\Omega}\Psi_n dx \longleftrightarrow \langle m|\hat{\Omega}|n\rangle$$

定義

$$\langle m|l\rangle = \langle n|l\rangle \quad \forall |l\rangle \quad \text{なら、} \langle m| = \langle n|$$

$$\langle l|m\rangle = \langle l|n\rangle \quad \forall \langle l| \quad \text{なら、} |m\rangle = |n\rangle$$

例題1:  $\langle m|n\rangle^* = \langle n|m\rangle$  となることを示せ。

$$\langle m|n\rangle^* = \left( \int \Psi_m^* \Psi_n dx \right)^* = \int \Psi_m \Psi_n^* dx = \int \Psi_n^* \Psi_m dx = \langle n|m\rangle$$

例題2:  $\langle m|\hat{\Omega}|n\rangle = \langle m|\hat{\Omega}n\rangle$  となることを示せ。

$$\langle m|\hat{\Omega}|n\rangle = \int \Psi_m^* \hat{\Omega}\Psi_n dx = \int \Psi_m^* (\hat{\Omega}\Psi_n) dx = \langle m|\hat{\Omega}n\rangle$$

# 第6回目で学ぶ内容

量子力学の基本体系について学習する。特に、**同時固有状態**、および、演算子の**交換関係**について学習し、両者の関係を理解する。

## 今回の内容

### 【時間に依存しないSchrödinger方程式】

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V \quad \text{ブラ・ケット表記}$$

※時間に依存しないS.E.は、要するに、ハミルトニアン  $\hat{H}$  の固有値方程式である。これを、一般の演算子  $\hat{\Omega}$  にも拡張する。

### 【一般の物理量に対する固有値方程式】

$$\hat{\Omega}|n\rangle = \omega_n|n\rangle$$

※ 系が  $|n\rangle$  で表される状態にあるとき、 $\omega_n$  が観測量を与えると考える。

※  $\hat{\Omega}$  が物理量を表す演算子であるためには、観測量が実数となる必要がある。このことが、本日学習するエルミート演算子の概念につながることを学習する。



# 量子力学の基本体系

物理量は演算子によって表される。

※測定値は固有値によって与えられると考える。

**測定値は実数でなければならない**

※従って、固有値は実数でなければならない。しかし、すべての演算子の固有値が実数である必要は無い。実数である必要があるのは**観測可能な量**である。従って、この要請を次のように言い換えよう。

**観測可能な量を表す演算子の固有値は実数でなければならない**

※**観測可能な量**のことを**オブザーバブル**とよぶ。観測できない量の例として波動関数の位相がある。

※この要請は次の要請と同値であることを今回学習する。

**オブザーバブルを表す演算子はエルミート演算子でなければならない**

※すべての演算子がエルミート演算子というわけではない。オブザーバブルでない演算子はいくらでも定義できる。今後たびたび現れる。

# エルミート演算子

以下のいずれかの関係式を満足する演算子 $\hat{\Omega}$ を  
**エルミート演算子**という。

$$\text{定義1} \quad \langle \Psi | \hat{\Omega} | \Phi \rangle^* = \langle \Phi | \hat{\Omega} | \Psi \rangle \quad \forall \Psi, \forall \Phi$$

$$\text{定義2} \quad \langle \Psi | \hat{\Omega} | \Psi \rangle^* = \langle \Psi | \hat{\Omega} | \Psi \rangle \quad \forall \Psi$$

※実は、この2つの定義は同値である。どちらの定義を使っても良く、便利な方を用いれば良い。定義2は、定義1で $\Phi$ として $\Psi$ を選ぶとただちに得られる。

※後で明らかになるが、定義2は「**物理量 $\hat{\Omega}$ の期待値が実数である**」ことを表している。すなわち、エルミート演算子であることと物理量の期待値が実数であることは同値である。

※定義2から定義1を導くことを本日の課題とする。

# エルミート演算子の性質

## 1. 固有値は実数である。

$$\hat{\Omega}|n\rangle = \omega_n|n\rangle \quad \langle n|\hat{\Omega}|n\rangle = \omega_n$$

$$\omega_n^* = \langle n|\hat{\Omega}|n\rangle^* = \langle n|\hat{\Omega}|n\rangle = \omega_n$$

※自身とその複素共役が等しければ、それは実数である。

※観測される量は固有値なので、エルミート演算子はたしかに観測量となる資格をもっている。

## 2. 固有値の異なる固有関数は直交する。

$$\langle n|\hat{\Omega}|m\rangle = \omega_m \langle n|m\rangle$$

$$\langle n|\hat{\Omega}|m\rangle = \langle m|\hat{\Omega}|n\rangle^* = \omega_n^* \langle n|m\rangle = \omega_n \langle n|m\rangle \quad \because \langle m|n\rangle^* = \langle n|m\rangle$$

$$\therefore \omega_m \langle n|m\rangle = \omega_n \langle n|m\rangle \quad \therefore \langle n|m\rangle = 0 \quad \because \omega_m \neq \omega_n$$

※“直交”とは、内積が定義されていて、それがゼロとなること。

※ $\langle n|m\rangle$ で内積を定義する。これにより、直交性が導入される。

※同じ固有値をもつ固有関数が2つ以上あるときは縮退しているという。

縮退した固有関数の例： $e^{ikx}$  と  $e^{-ikx}$  （運動エネルギーの固有値が等しい）

# エルミート演算子の例

以下すべて、 $\forall \Psi_n, \forall \Psi_m$ とする。

※ここでは、これまで学習した演算子がすべてエルミート演算子になっていることを示す。

※従って、固有値が実数となることが保証されている。

## 実数関数のポテンシャル $\hat{\Omega}$

$$\langle n | \hat{\Omega} | m \rangle^* = \left( \int \Psi_n^* \hat{\Omega} \Psi_m dx \right)^* = \int \Psi_n \hat{\Omega}^* \Psi_m^* dx = \int \Psi_m^* \hat{\Omega} \Psi_n dx = \langle m | \hat{\Omega} | n \rangle$$

実数関数で表される演算子はすべてエルミート演算子

運動量演算子  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$   $\Psi_n$ は無限遠でゼロになるものとする  
(波動関数の有界性を要請)。

$$\begin{aligned} \langle n | \hat{p}_x | m \rangle^* &= \left( \int \Psi_n^* \hat{p}_x \Psi_m dx \right)^* = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right)^* \Psi_m^* dx = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n \frac{d\Psi_m^*}{dx} dx \\ &= i\hbar [\Psi_n \Psi_m^*]_{-\infty}^{\infty} - i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Psi_n}{dx} \Psi_m^* dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m^* \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi_n dx = \langle m | \hat{p}_x | n \rangle \end{aligned}$$

運動量演算子はエルミート演算子

## エルミート演算子 $\Omega$ の二乗 $\Omega^2$ の場合

$$\langle n | \hat{\Omega}^2 | m \rangle^* = \langle n | \hat{\Omega} | \hat{\Omega} m \rangle^* = \langle \hat{\Omega} m | \hat{\Omega} | n \rangle = \langle \hat{\Omega} n | \hat{\Omega} m \rangle^* = \langle m | \hat{\Omega} | \hat{\Omega} n \rangle = \langle m | \hat{\Omega}^2 | n \rangle$$

エルミート演算子の二乗はエルミート演算子

運動エネルギー演算子もエルミート演算子

# エルミート演算子の性質

固有値

固有関数

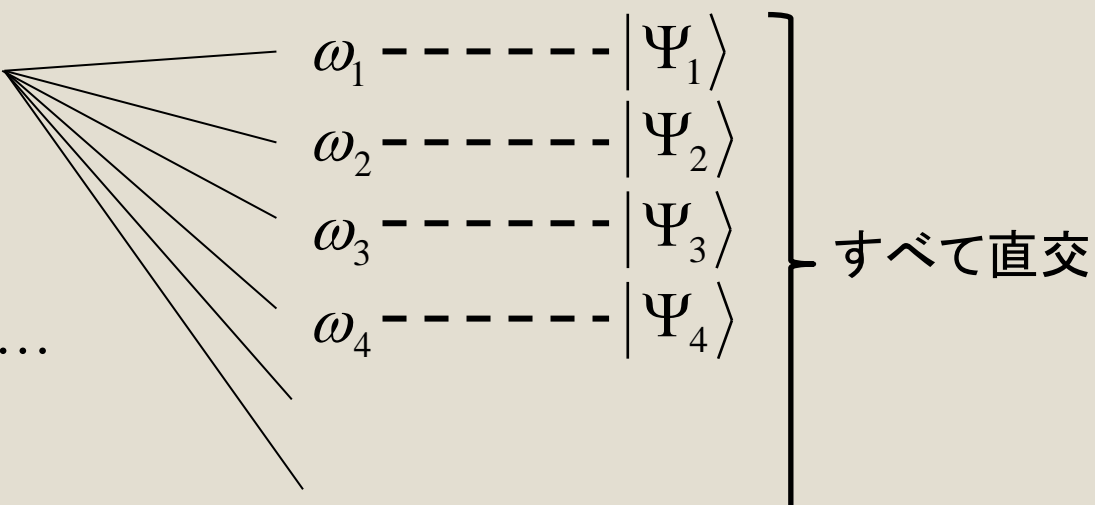
エルミート演算子  $\hat{\Omega}$

$$\hat{\Omega}|\Psi_n\rangle = \omega_n|\Psi_n\rangle$$

固有関数

$$|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle, |\Psi_3\rangle, |\Psi_4\rangle, \dots$$

正規直交基底


$$\left. \begin{array}{l} \omega_1 \text{ --- } |\Psi_1\rangle \\ \omega_2 \text{ --- } |\Psi_2\rangle \\ \omega_3 \text{ --- } |\Psi_3\rangle \\ \omega_4 \text{ --- } |\Psi_4\rangle \end{array} \right\} \text{すべて直交}$$

※縮退のある場合も、互いに直交するように固有関数をとることができる。

※「正規」:規格化されていることをさす。  $\langle\Psi_n|\Psi_n\rangle = 1$

※正規直交基底の例:3次元空間の単位直交ベクトル  $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$

3次元空間の任意の点は正規直交基底の線形結合で一意に表せる。

$$\vec{r} = c_1\vec{e}_1 + c_2\vec{e}_2 + c_3\vec{e}_3$$

※通常のベクトルとの違いは、固有関数は無限次元空間のベクトルである点にある。

任意の波動関数

$$|\Psi\rangle = c_1|\Psi_1\rangle + c_2|\Psi_2\rangle + c_3|\Psi_3\rangle + c_4|\Psi_4\rangle + \dots = \sum_i c_i|\Psi_i\rangle$$

任意の波動関数は固有関数の線型結合で一意に表せる。

これを固有関数の**完全性**(完備性)という

任意の状態  $|\Psi(x, t)\rangle = c_1(t)|\Psi_1\rangle + c_2(t)|\Psi_2\rangle + c_3(t)|\Psi_3\rangle + \cdots = \sum_i c_i(t)|\Psi_i\rangle$

※ $c_i(t)$ は一般に複素数である。

※規格化条件が次の式で与えられることを示そう。

$$\sum_i |c_i|^2 = 1$$

$|\Psi_i\rangle$  :  $\Omega$ の固有状態

$$\hat{\Omega}|\Psi_i\rangle = \omega_i|\Psi_i\rangle$$

$$\because \langle\Psi|\Psi\rangle = \int \left( \sum_i c_i^* \Psi_i^* \right) \left( \sum_j c_j \Psi_j \right) dx = \sum_{i,j} c_i^* c_j \int \Psi_i^* \Psi_j dx = \sum_i |c_i|^2 \int \Psi_i^* \Psi_i dx = \sum_i |c_i|^2$$

【要請】系が状態 $|\Psi\rangle$ にあるとき、物理量 $\Omega$ を測定すると $\Omega$ の固有値 $\omega_i$ のどれか1つが得られる。また $\omega_i$ の得られる確率は $|c_i|^2$ で与えられる。

※この要請をもとに次の量を考えよう。物理量 $\hat{\Omega}$ の期待値を表すことがわかる。

$$\begin{aligned} \langle\Psi|\hat{\Omega}|\Psi\rangle &= \int \left( \sum_i c_i^* \Psi_i^* \right) \hat{\Omega} \left( \sum_j c_j \Psi_j \right) dx = \int \left( \sum_i c_i^* \Psi_i^* \right) \left( \sum_j c_j \omega_j \Psi_j \right) dx \\ &= \sum_{i,j} c_i^* c_j \omega_j \int \Psi_i^* \Psi_j dx = \sum_i |c_i|^2 \omega_i = \langle\omega\rangle \end{aligned}$$

演算子 $\hat{\Omega}$ の期待値

$$\langle\hat{\Omega}\rangle = \langle\Psi(x, t)|\hat{\Omega}|\Psi(x, t)\rangle$$

## 演算子の期待値

演算子 $\hat{\Omega}$ の期待値

$$\langle \hat{\Omega} \rangle = \langle \Psi(x, t) | \hat{\Omega} | \Psi(x, t) \rangle$$

任意の状態 $\Psi$ に対して演算子の期待値が実数となる条件を調べる。

$$\langle \hat{\Omega} \rangle^* = \langle \hat{\Omega} \rangle \text{より、}$$

$$\langle \Psi | \hat{\Omega} | \Psi \rangle^* = \langle \Psi | \hat{\Omega} | \Psi \rangle \quad \forall \Psi$$

※このように物理量の期待値が実数となることは、物理量を表す演算子がエルミート演算子であることと同値である。

※  $\Psi$ は任意の関数なので  $\Psi$ として $\hat{\Omega}$ の固有関数を選べば、ただちに固有値も実数となる。一方、固有値が実数であれば期待値も実数なので、**期待値が実数であることと固有値が実数であることは同値である。**

※以上より、**エルミート演算子であることと固有値が実数であることは同値である。**

# 量子力学における定常状態(再考)

演算子 $\hat{\Omega}$ の期待値

$$\langle \hat{\Omega} \rangle = \langle \Psi(x, t) | \hat{\Omega} | \Psi(x, t) \rangle$$

※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学習した。定常状態において期待値が変化しないことを以下に示す。

$$\text{定常状態} \quad \Psi(x, t) = \psi(x) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)$$

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

※量子力学における定常状態とは物理量の期待値が時間変化しない状態である。



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  $\hat{\Omega}$  の期待値  $\langle \hat{\Omega} \rangle = \langle \Psi | \hat{\Omega} | \Psi \rangle$

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)

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

### 1. 運動量 $p_x$

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= \langle \Psi_n | p_x | \Psi_n \rangle = \int_0^L \Psi_n^* \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) \Psi_n dx = \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) (-i\hbar) \frac{n\pi}{L} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \\ &= -\frac{2in\pi\hbar}{L^2} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = -\frac{in\pi\hbar}{L^2} \int_0^L \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) dx \\ &= \frac{in\pi\hbar}{L^2} \left[ \frac{L}{2n\pi} \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) \right]_0^L = 0 \end{aligned}$$

### 2. 運動量の二乗 $p_x^2$

$$\begin{aligned} \langle p_x^2 \rangle &= \langle \Psi_n | p_x^2 | \Psi_n \rangle = -\frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) (-i\hbar)^2 \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \\ &= \frac{2\hbar^2}{L} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = \frac{2\hbar^2}{L} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \int_0^L \frac{1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)}{2} dx \\ &= \frac{2\hbar^2}{L} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \frac{L}{2} = \left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2 \end{aligned}$$

# 同時固有状態

固有値方程式

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

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

固有値方程式

$$\begin{aligned}\hat{P}|\Psi_n\rangle &= p_n|\Psi_n\rangle \\ \hat{Q}|\Psi_n\rangle &= q_n|\Psi_n\rangle\end{aligned}$$

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

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

逆に、物理量 $P$ と $Q$ の同時固有状態が存在すれば、物理量 $P$ と $Q$ の両方を確定させることができる。

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**だけで決まることを示す。

※特に重要なのは、ハミルトニアンと交換する演算子である。そのような演算子があると縮退したエネルギー固有状態を分離することができる。

# 交換関係と同時固有状態

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

$[\hat{P}, \hat{Q}] = 0$  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。

## 1. $\hat{P}$ 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。)

## 2. $\hat{P}$ 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 $\hat{P}$ 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。

# 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  $[\hat{P}, \hat{Q}] = 0$

$|\Psi_n\rangle$  を $P$ の固有状態(固有値 $p_n$ )とする。すなわち、

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

$P$ と $Q$ は可換なので、

$$\hat{P}\hat{Q}|\Psi_n\rangle = \hat{Q}\hat{P}|\Psi_n\rangle = p_n\hat{Q}|\Psi_n\rangle$$

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

ここで、固有値 $p_n$ を有する固有状態が1つしかない(=縮退がない)とする。このとき、 $\hat{Q}|\Psi_n\rangle$ は $|\Psi_n\rangle$ に等しいはず。従って、 $q_n$ を複素数として以下の式が成り立つ。

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

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

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

※固有値 $p_n$ に $m$ 重縮退がある場合は、 $m$ 個の固有関数 $|\Psi_n^i\rangle$  ( $i = 1, 2, \dots, m$ )の線形結合からなる、 $m$ 個の固有関数 $|\Phi_n^i\rangle$ を用いて $\hat{Q}|\Phi_n^i\rangle = q_n|\Phi_n^i\rangle$ とすることができる。

# 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

$P$ に縮退がない場合は  $P$  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となる。

## 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 $\hat{Q}$ の固有状態になっているとする。

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

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

※  $\hat{P}$ に縮退がある場合は、 $\hat{P}$ の固有状態 $|\Psi_n\rangle$ は一意に定まらないが、 $\hat{Q}$ の固有状態になるように $|\Psi_n\rangle$ を定めるものとする。

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

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

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

$$\therefore \hat{P}\hat{Q}|\Phi\rangle = \hat{Q}\hat{P}|\Phi\rangle \quad \forall |\Phi\rangle \quad \therefore \hat{P}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{P}$$

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。

# これまでに学習した演算子間の交換関係

## 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6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。

オブザーバブルを表す演算子には**エルミート演算子**であることが課せられる。また、エルミート演算子には以下の性質がある。

1. 固有値は実数。
2. 固有値の異なる固有関数はすべて直交する。固有値の同じ固有関数が2つ以上ある場合も、固有関数が直交するようにとることができる※。
3. 固有関数により**正規直交基底**をつくることができる。任意の波動関数は固有関数の線形結合で表すことができる。**(完全性)**
4. 系が $\Psi(x, t)$ で表される状態にあるとき、演算子 $\hat{\Omega}$ の期待値は以下の式で与えられる。

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

※定常状態であれば  $\langle \hat{\Omega} \rangle$  は時間変化せず、 $\langle \hat{\Omega} \rangle = \langle \Psi(x) | \hat{\Omega} | \Psi(x) \rangle$  である。

## レポート課題(40分)

エルミート演算子の定義に関して、演算子  $\hat{\Omega}$  が定義2を満たすなら、定義1も満たすことを示せ。

※定義1から定義2は自明。従って、両者が同値であることを証明せよ。

$$\begin{array}{ll} \text{定義1} & \langle \Psi | \hat{\Omega} | \Phi \rangle^* = \langle \Phi | \hat{\Omega} | \Psi \rangle \quad \forall \Psi, \forall \Phi \\ \text{定義2} & \langle \Psi | \hat{\Omega} | \Psi \rangle^* = \langle \Psi | \hat{\Omega} | \Psi \rangle \quad \forall \Psi \end{array}$$

※ヒント: 定義2の $\Psi$ は任意なので、 $\Psi$ として  $\Psi + c\Phi$  (ただし、 $\Psi$ 、 $\Phi$ は任意の関数、 $c = 1, i$ ) とせよ。

ヒント>>tamura☺rs.tus.ac.jpまで

### ※提出方法

×切: 5/31(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"