量子力学

第6回目（5/23）

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。

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、同時固有状態と演算子の交換関係、および、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】

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}_x{}^2}{2m} + V$$

ブラ・ケット表記

※時間に依存しないS.E.はハミルトニアン$\hat{H}$の固有値方程式であるが、一般の演算子$\hat{\Omega}$についても以下のように固有値方程式を考えることができる。

【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、観測量としてω_nが得られると考える。

※ $\hat{\Omega}$が物理量を表す演算子であるためには、観測量が実数である必要がある。このことを過不足なく表現するのが、エルミート演算子という概念である。

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

※ ベクトルと呼ぶのは、幾何ベクトルと同じ性質を有するためで、一言で言うと、
和とスカラー倍で閉じている空間の元であるためである。後で説明する。

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。そこで、位置xを特別扱いせず、**エネルギー固有状態$\Psi_n(x)$を単に状態$|n\rangle$と表すことにする。**

※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）

時間に依存しないS.E.（ケット表記）

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

※ 一般の物理量 $\hat{\Omega}$ に対しても、その固有状態を $|m\rangle$ などと表記しよう。

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

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

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

例題1：$\langle m|n\rangle^* = \langle n|m\rangle$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：$\langle m|\hat{\Omega}|n\rangle = \langle m|\hat{\Omega}n\rangle$を示せ。

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

量子力学の基本体系

物理量は固有値方程式の固有値で与えられる。

※固有値方程式：$\hat{\Omega}\,|n\rangle = \omega_n |n\rangle$
※測定値は固有値ω_nによって与えられる。

固有値は実数でなければならない

※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量である。観測可能量をオブザーバブルとよぶ。従って、この要請を次のように言い換えよう。

※なお、観測できない量の例として波動関数の位相がある。

オブザーバブルを表す演算子の固有値は実数でなければならない

※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。

定義１	$\langle\Psi\|\hat{\Omega}\|\Phi\rangle^* = \langle\Phi\|\hat{\Omega}\|\Psi\rangle \quad {}^\forall\Psi, {}^\forall\Phi$
定義２	$\langle\Psi\|\hat{\Omega}\|\Psi\rangle^* = \langle\Psi\|\hat{\Omega}\|\Psi\rangle \quad {}^\forall\Psi$

※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い。
定義2は、定義1で任意のΦとしてΨ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「状態にΨおける物理量$\hat{\Omega}$の期待値が実数である」ことを表している。すなわち、エルミート演算子を要請することと、物理量の期待値の実数性を要請することは等価である。

※定義２で任意の関数Ψとして$\hat{\Omega}$の固有関数を取れば、定義２は固有値が実数であることを表している（次スライド）。

※以上まとめると、エルミート演算子の定義２から、期待値、固有値の実数性が導かれる。

※定義２から定義１を導くことを本日の課題とする。

左から $\langle n|$ をかける　固有値が異なるから。

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

単なる数　$\langle n|n\rangle = 1$

エルミート演算子の性質

1. 固有値は実数である。

エルミート

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

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

※自身とその複素共役が等しければ、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（オブザーバブル）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。

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

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

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

※“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、これらの演算子の固有値が実数となることが保証されている。

実数関数の演算子$\hat{\Omega}$

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

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 $\hat{p}_x = -i\hbar \dfrac{d}{dx}$

Ψ_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）。

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

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

運動量演算子はエルミート演算子

エルミート演算子Ωの二乗Ω^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	
	ω_1	$\|\Psi_1\rangle$	すべて直交
	ω_2	$\|\Psi_2\rangle$	
	ω_3	$\|\Psi_3\rangle$	
	ω_4	$\|\Psi_4\rangle$	

エルミート演算子$\hat{\Omega}$

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

固有関数

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

正規直交基底

※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(完全性)。

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

※規格化された固有関数を単位直交ベクトルと見なすことができる。

任意の波動関数

$$\boxed{|\Psi\rangle = c_1|\Psi_1\rangle + c_2|\Psi_2\rangle + c_3|\Psi_3\rangle + c_4|\Psi_4\rangle + \cdots = \sum_i c_i|\Psi_i\rangle}$$

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

※任意の状態はヒルベルト空間の座標$(c_1, c_2, c_3, \cdots)$により一意に指定される。

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ことに注意。
※規格化条件が次の式で与えられることを示そう。

$|\Psi_i\rangle$： Ωの固有状態

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

$$\boxed{\sum_i |c_i|^2 = 1}$$

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

【要請】系が状態$|\Psi\rangle$にあるとき、物理量Ωを測定するとΩの固有値ω_iのどれか１つが得られる。またω_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$\langle\Psi|\hat{\Omega}|\Psi\rangle$を考えよう。物理量$\hat{\Omega}$の期待値を表すことがわかる。

$$\langle\Psi|\hat{\Omega}|\Psi\rangle = \int \left(\sum_i c_i^* {\Psi_i}^*\right)\hat{\Omega}\left(\sum_j c_j \Psi_j\right) dx = \int \left(\sum_i c_i^* {\Psi_i}^*\right)\left(\sum_j c_j \omega_j \Psi_j\right) dx$$

$$= \sum_{i,j} c_i^* c_j \omega_j \int {\Psi_i}^* \Psi_j dx = \sum_i |c_i|^2 \omega_i = \langle\omega\rangle$$

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

エルミート演算子の意味

演算子$\hat{\Omega}$の期待値

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

エルミート演算子の定義２

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

※エルミート演算子の定義２は、任意のΨにおける$\hat{\Omega}$の期待値が実数であることを表現したものである。

※すでに述べたように、Ψは任意の関数なので Ψとして$\hat{\Omega}$の固有関数を選べば、ただちに固有値の実数性も導かれる。一方、固有値が実数であれば期待値の定義より期待値も実数となるので、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。

※ このようにエルミート演算子の概念は、観測量が実数となることを過不足なく表現している。

量子力学における定常状態（再考）

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

※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していると以前に述べた。ここでは、定常状態において、物理量が時間変化しないことを確認しよう。

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

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

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

※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$\hat{\Omega}$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）

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

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

任意の演算子$\hat{P}$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。

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

※$\langle m|\hat{P}|n\rangle$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成分の複素共役をとることで得られることを表している。(エルミート行列は複素共役を取って転置した行列である。)

※ $\hat{P}$ がエルミート演算子であれば、定義1より、$\langle n|\hat{P}|m\rangle = \langle m|\hat{P}|n\rangle^*$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。

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

【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 $$\boxed{\begin{aligned}\hat{P}|\Psi\rangle &= p|\Psi\rangle \\ \hat{Q}|\Psi\rangle &= q|\Psi\rangle\end{aligned}}$$

【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、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。

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。

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。

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

$|\Psi\rangle$ をPの固有状態（固有値p）とする。すなわち、

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

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

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

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

ここで、固有値p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、$\hat{Q}|\Psi\rangle$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m重の縮退がある場合は、m個の固有関数$|\Psi_i\rangle$ $(i=1,2,\cdots,m)$の線形結合からなる、m個の固有関数$|\Phi_i\rangle$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）なので、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。

※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、

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

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。

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。

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

※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。

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

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

※ヒント：定義2のΨは任意なので、Ψはとして $\Psi + c\Phi$（ただし、Ψ、Φ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

〆切：5/29(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”