量子力学

第7回目（6/1）

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：4993

エルミート演算子の性質

エルミート演算子$\hat{\Omega}$

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

固有関数

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

正規直交基底をなす。

固有値		固有関数
ω_1	-------	$\lvert\Psi_1\rangle$
ω_2	-------	$\lvert\Psi_2\rangle$
ω_3	-------	$\lvert\Psi_3\rangle$
ω_4	-------	$\lvert\Psi_4\rangle$

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。
この空間はヒルベルト空間と呼ばれる。

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$(c_1, c_2, c_3, \cdots)$により指定される。

一般の状態 $|\Psi(x,t)\rangle = c_1(t)|\Psi_1\rangle + c_2(t)|\Psi_2\rangle + c_3(t)|\Psi_3\rangle + \cdots = \sum_i c_i(t)|\Psi_i\rangle$

※$c_i(t)$は一般に複素数である。

規格化条件は次の式で与えられる。

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

$|\Psi_i\rangle$： Ω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。

※一般の状態$|\Psi\rangle$について次の量を考える。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 $\boxed{\langle\hat{\Omega}\rangle = \langle\Psi(x,t)|\hat{\Omega}|\Psi(x,t)\rangle}$

※物理量Ωを多数回測定すれば、その平均値として$\langle\hat{\Omega}\rangle$が得られることを意味する。

演算子の期待値

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

※測定量の平均値である期待値は実数でなければならない。

そこで、演算子の期待値が実数となる条件を調べる。

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

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

※これはエルミート演算子の定義そのものである。

※ エルミート演算子の固有値は実数なので、期待値が実数であれば固有値も実数となる。一方、固有値が実数であれば当然期待値も実数になるので、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=期待値が実数)⇔(固有値が実数)は等価である。

量子力学における定常状態（再考）

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

※期待値は、多数回測定したときの平均値である。

※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と以前述べた。定常状態とは、期待値が時間変化しない状態である。それを以下に示す。

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

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

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

※一般に、物理量を表す演算子は時間tを含まない。

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

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。

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

※このような演算子$\hat{P}^\dagger$が存在するのかと疑問に思うかもしれないが、$\hat{P}$ から $\hat{P}^\dagger$を求めることができる。

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

※この両式がブラ・ケットの計算に便利なことを今後学習する。

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

同時固有状態

固有値方程式 $\boxed{\hat{P}|\Psi_n\rangle = p_n|\Psi_n\rangle}$

【意味】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。（物理量が確定した状態）

固有値方程式 $\boxed{\begin{array}{l}\hat{P}|\Psi_n\rangle = p_n|\Psi_n\rangle \\ \hat{Q}|\Psi_n\rangle = q_n|\Psi_n\rangle\end{array}}$

【意味】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の両方が確定した状態が存在する。

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。

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$\hat{Q}$の両方が確定した状態が存在する。）

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$\hat{Q}$の両方が確定した状態は存在しない。）

※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、

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

PとQは可換なので、

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

これは、$\hat{Q}|\Psi_n\rangle$がPの固有状態（固有値p_n）であることを示す。

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。

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

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$|\Psi_n^i\rangle$ $(i=1,2,\cdots,m)$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。

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

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

※ $\hat{P}$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 $\left|\Phi\right\rangle = \sum_n c_n\left|\Psi_n\right\rangle$ 　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の両方が確定する状態は存在しない。）
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6，7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。

オブザーバブルを表す演算子はエルミート演算子である。エルミート演算子には以下の性質がある。

1．固有値は実数である。（この結果、期待値も実数となる）

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．固有関数は、正規直交基底をなす。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）

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

※定常状態では、$\langle \hat{\Omega} \rangle = \langle \Psi(x)|\hat{\Omega}|\Psi(x)\rangle$となり、$\langle \hat{\Omega} \rangle$は時間変化しない。

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：6/7(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”