第 1 章

数学の準備

問題 1.1

$$\mathscr{O}\boldsymbol{e}_i = \boldsymbol{e}_j O_{ji} \tag{1.1}$$

とする。また、$\boldsymbol{e}_i$ は正規直交基底である。

(a) 問

$$O_{ij} = \boldsymbol{e}_i \cdot \mathscr{O}\boldsymbol{e}_j \tag{1.2}$$

を示せ。

(a) 解

$$\begin{aligned}
\mathscr{O}\boldsymbol{e}_j &= \boldsymbol{e}_k O_{kj} && (1.3)\\
\boldsymbol{e}_i \cdot (\mathscr{O}\boldsymbol{e}_j) &= \boldsymbol{e}_i \cdot (\boldsymbol{e}_k O_{kj}) && (1.4)\\
\boldsymbol{e}_i \cdot \mathscr{O}\boldsymbol{e}_j &= \delta_{ik} O_{kj} && (1.5)\\
&= O_{ij} && (1.6)\\
\therefore O_{ij} &= \boldsymbol{e}_i \cdot \mathscr{O}\boldsymbol{e}_j && (1.7)
\end{aligned}$$

(b) 問

$$\boldsymbol{b} = \mathscr{O}\boldsymbol{a} \tag{1.8}$$

とするとき、

$$b_i = O_{ij} a_j \tag{1.9}$$

であることを示せ。

(b) 解

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{b} &= \mathscr{O}\boldsymbol{a} && (1.10)\\
b_i\boldsymbol{e}_i &= \mathscr{O}(a_k\boldsymbol{e}_k) && (1.11)\\
&= a_k\mathscr{O}\boldsymbol{e}_k && (1.12)\\
&= a_k\boldsymbol{e}_jO_{jk} && (1.13)\\
b_i\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{e}_l &= a_kO_{jk}\boldsymbol{e}_j\cdot\boldsymbol{e}_l && (1.14)\\
b_i\delta_{il} &= a_kO_{jk}\delta_{jl} && (1.15)\\
b_l &= a_kO_{lk} && (1.16)\\
\therefore b_i &= O_{ij}a_j && (1.17)
\end{aligned}
$$

問題 1.2

問

行列 A, B を次の通りとする。

$$
A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 2 \\ 0 & 2 & -1 \end{bmatrix} \qquad B = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{1.18}
$$

このとき、$[A, B] = AB - BA$ と $\{A, B\} = AB + BA$ を求めよ。

解

$$
\begin{aligned}
AB &= \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 2 \\ 0 & 2 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1-1+0 & -1+0+0 & 1+0+0 \\ 1-2+2 & -1+0+0 & 1+0+2 \\ 0-2-1 & 0+0+0 & 0+0-1 \end{bmatrix} && (1.19)\\
&= \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 3 \\ -3 & 0 & -1 \end{bmatrix} && (1.20)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
BA &= \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 2 \\ 0 & 2 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1-1+0 & 1-2+2 & 0-2-1 \\ -1+0+0 & -1+0+0 & 0+0+0 \\ 1+0+0 & 1+0+2 & 0+0-1 \end{bmatrix} && (1.21)\\
&= \begin{bmatrix} 0 & 1 & -3 \\ -1 & -1 & 0 \\ 1 & 3 & -1 \end{bmatrix} && (1.22)
\end{aligned}
$$

である。

$$
\begin{aligned}
[A,B] &= AB - BA && (1.23)\\
&= \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 3 \\ -3 & 0 & -1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 1 & -3 \\ -1 & -1 & 0 \\ 1 & 3 & -1 \end{bmatrix} && (1.24)\\
&= \begin{bmatrix} 0 & -2 & 4 \\ 2 & 0 & 3 \\ -4 & -3 & 0 \end{bmatrix} && (1.25)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\{A,B\} &= AB + BA && (1.26)\\
&= \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 3 \\ -3 & 0 & -1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 1 & -3 \\ -1 & -1 & 0 \\ 1 & 3 & -1 \end{bmatrix} && (1.27)\\
&= \begin{bmatrix} 0 & 0 & -2 \\ 0 & -2 & 3 \\ -2 & 3 & -2 \end{bmatrix} && (1.28)
\end{aligned}
$$

問題 1.3

問

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \quad (1.29)$$

を示せ。なお、$A^\dagger$ は共役 (adjoint) 行列であり、

$$(A^\dagger)_{ij} = (A^*)_{ji} = ((A^*)^t)_{ij} = (\big(A^t\big)^*)_{ij} \quad (1.30)$$

である。即ち、A の複素共役をとったものを転置したものである。

解

$$
\begin{aligned}
\big((AB)^\dagger\big)_{ij} &= ((AB)^*)_{ji} && (1.31)\\
&= ((AB)_{ji})^* && (1.32)\\
&= (A_{jk}B_{ki})^* && (1.33)\\
&= {A_{jk}}^* {B_{ki}}^* && (1.34)\\
&= \big((A^t)_{kj}\big)^* \big((B^t)_{ik}\big)^* && (1.35)\\
&= (\big(A^t\big)^*)_{kj} (\big(B^t\big)^*)_{ik} && (1.36)\\
&= (A^\dagger)_{kj} (B^\dagger)_{ik} && (1.37)\\
&= (B^\dagger A^\dagger)_{ij} && (1.38)
\end{aligned}
$$

よって、

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \quad (1.39)$$

である。

問題 1.4

次の関係を示せ。

(a) 問

$$\mathrm{tr}(AB) = \mathrm{tr}(BA) \tag{1.40}$$

(a) 解

$$\mathrm{tr}C = C_{ii} \tag{1.41}$$

であり、

$$C = AB \tag{1.42}$$
$$C_{ij} = A_{ik}B_{kj} \tag{1.43}$$

である。従って、

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}(AB) &= A_{ik}B_{ki} &(1.44)\\ &= B_{ki}A_{ik} &(1.45)\\ &= B_{ik}A_{ki} &(1.46)\\ &= \mathrm{tr}(BA) &(1.47)\end{aligned}$$

である。

(b) 問

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1} \tag{1.48}$$

(b) 解

$\boldsymbol{1}$ を単位行列とすると、

$$(AB)(AB)^{-1} = \boldsymbol{1} \tag{1.49}$$
$$A^{-1}AB(AB)^{-1} = A^{-1}\boldsymbol{1} \tag{1.50}$$
$$\boldsymbol{1}B(AB)^{-1} = A^{-1} \tag{1.51}$$
$$B(AB)^{-1} = A^{-1} \tag{1.52}$$
$$B^{-1}B(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1} \tag{1.53}$$
$$\boldsymbol{1}(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1} \tag{1.54}$$
$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1} \tag{1.55}$$

である。

(c) 問

U はユニタリー行列、即ち $U^{-1} = U^{\dagger}$ とする。$B = U^{\dagger}AU$ のとき、$A = UBU^{\dagger}$ であることを示せ。

(c) 解

$$B = U^{\dagger}AU \tag{1.56}$$
$$= U^{-1}A(U^{\dagger})^{-1} \tag{1.57}$$
$$UBU^{\dagger} = UU^{-1}A(U^{\dagger})^{-1}U^{\dagger} \tag{1.58}$$
$$UBU^{\dagger} = \boldsymbol{1}A\boldsymbol{1} \tag{1.59}$$
$$\therefore A = UBU^{\dagger} \tag{1.60}$$

である。

(d) 問

エルミート行列 A と B の積、$C = AB$ もまたエルミート行列ならば、A と B は可換であることを示せ。

(d) 解

A と B がエルミート行列であることから、

$$A = A^{\dagger} \qquad B = B^{\dagger} \tag{1.61}$$

である。更に、C がエルミート行列であることから

$$C = C^\dagger \tag{1.62}$$
$$AB = (AB)^\dagger \tag{1.63}$$
$$= B^\dagger A^\dagger \tag{1.64}$$
$$= BA \tag{1.65}$$

である。よって、A と B は可換である。

(e) 問

A がエルミート行列であり、逆行列 A^{-1} が存在する場合、A^{-1} もまたエルミート行列であることを示せ。

(e) 解

$$AA^{-1} = \boldsymbol{1} \tag{1.66}$$
$$\left(AA^{-1}\right)^\dagger = (\boldsymbol{1})^\dagger = ((\boldsymbol{1})^*)^t = \boldsymbol{1} \tag{1.67}$$
$$\left(A^{-1}\right)^\dagger A^\dagger = \boldsymbol{1} \tag{1.68}$$
$$\left(A^{-1}\right)^\dagger A = \boldsymbol{1} \qquad (\because A^\dagger = A) \tag{1.69}$$
$$\left(A^{-1}\right)^\dagger = A^{-1} \tag{1.70}$$

従って、A^{-1} もまたエルミート行列である。

(f) 問

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \tag{1.71}$$

のとき、

$$A^{-1} = \frac{1}{A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21}} \begin{bmatrix} A_{22} & -A_{12} \\ -A_{21} & A_{11} \end{bmatrix} \tag{1.72}$$

であることを示せ。

(f) 解

行列 B を

$$B = \frac{1}{A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21}} \begin{bmatrix} A_{22} & -A_{12} \\ -A_{21} & A_{11} \end{bmatrix} \tag{1.73}$$

と置く。このとき、

$$AB = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \frac{1}{A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21}} \begin{bmatrix} A_{22} & -A_{12} \\ -A_{21} & A_{11} \end{bmatrix} \tag{1.74}$$

$$= \frac{1}{A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21}} \begin{bmatrix} A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21} & -A_{11}A_{12} + A_{12}A_{11} \\ A_{21}A_{22} - A_{22}A_{21} & -A_{21}A_{12} + A_{22}A_{11} \end{bmatrix} \tag{1.75}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \boldsymbol{1} \tag{1.76}$$

よって、$B = A^{-1}$ である。

問題 1.5

次の性質を 2×2 行列に対して確かめよ。

(1) 問

ある行、あるいはある列の要素がすべてゼロならば、行列式はゼロである。

(1) 解

次の 4 つの行列の行列式を考える。

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ a & b \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} a & b \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & a \\ 0 & b \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} a & 0 \\ b & 0 \end{bmatrix} \tag{1.77}$$

1 つ目の行列は

$$\begin{vmatrix} 0 & 0 \\ a & b \end{vmatrix} = 0 \cdot b - b \cdot a = 0 \tag{1.78}$$

である。2 つ目の行列は

$$\begin{vmatrix} a & b \\ 0 & 0 \end{vmatrix} = a \cdot 0 - b \cdot 0 = 0 \tag{1.79}$$

である。3 つ目の行列は

$$\begin{vmatrix} 0 & a \\ 0 & b \end{vmatrix} = 0 \cdot b - a \cdot 0 = 0 \tag{1.80}$$

である。4 つ目の行列は

$$\begin{vmatrix} a & 0 \\ b & 0 \end{vmatrix} = a \cdot 0 - 0 \cdot b = 0 \tag{1.81}$$

である。よって、確かに行列式がゼロになることが分かる。

(2) 問

$A_{ij} = A_{ii}\delta_{ij}$ ならば、$|A| = \Pi_i A_{ii} = A_{11}A_{22} \cdots A_{NN}$ である。

(2) 解

次の行列の行列式で確かめる。

$$\begin{vmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{vmatrix} = a \cdot b - 0 \cdot 0 = ab \tag{1.82}$$

よって、確かに対角要素の総積になっていることが分かる。

(3) 問

2 つの行、あるいは 2 つの列を入れ替えると行列式の符号が変わる。

(3) 解

次の 3 つの行列の行列式で考える。

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \qquad B = \begin{bmatrix} c & d \\ a & b \end{bmatrix} \qquad C = \begin{bmatrix} b & a \\ d & c \end{bmatrix} \tag{1.83}$$

それぞれの行列式は

$$|A| = ad - bc \qquad |B| = cb - da = -|A| \qquad |C| = bc - ad = -|A| \tag{1.84}$$

よって、確かに行、列を入れ替えると符号は変わる。

(4) 問

$$|A| = \left(|A^\dagger|\right)^* \tag{1.85}$$

(4) 解

行列 A を次のように置く。

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \tag{1.86}$$

このとき、行列式 $|A|$ と $|A^\dagger|$ は

$$|A| = ad - bc \tag{1.87}$$

$$A^\dagger = \begin{bmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{bmatrix} \tag{1.88}$$

$$|A^\dagger| = a^*d^* - c^*b^* \tag{1.89}$$

$$= (ad - bc)^* \tag{1.90}$$

$$= (|A|)^* \tag{1.91}$$

$$\left(|A^\dagger|\right)^* = (|A|)^{**} = |A| \tag{1.92}$$

$$\therefore |A| = \left(|A^\dagger|\right)^* \tag{1.93}$$

(5) 問

$$|AB| = |A||B| \tag{1.94}$$

(5) 解

行列 A, B を次の通りに置く。

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \qquad B = \begin{bmatrix} e & f \\ g & h \end{bmatrix} \tag{1.95}$$

このとき、行列式 $|A|, |B|, |AB|$ は、

$$|A| = ad - bc \qquad |B| = eh - fg \tag{1.96}$$

$$\begin{aligned}
AB &= \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e & f \\ g & h \end{bmatrix} && (1.97) \\
&= \begin{bmatrix} ae + bg & af + bh \\ ce + dg & cf + dh \end{bmatrix} && (1.98) \\
|AB| &= (ae + bg)(cf + dh) - (af + bh)(ce + dg) && (1.99) \\
&= (acef + adeh + bcgf + bdgh) - (acfe + adfg + bche + bdhg) && (1.100) \\
&= adeh - adfg + bcgf - bche && (1.101) \\
&= ad(eh - fg) - bc(eh - fg) && (1.102) \\
&= (ad - bc)(eh - fg) && (1.103) \\
&= |A||B| && (1.104)
\end{aligned}$$

となる。

問題 1.6

問題 1.5 で示した性質を利用して以下の性質を証明せよ。

(6) 問

ある 2 つの行 (または列) が同じであるならば、行列式の値はゼロである。

(6) 解

そのような行列を A とおく。該当する行 (または列) 同士を入れ替えた行列 B は同一の行列 A である。($A = B$) 一方で、行列式の性質により、行 (または列) を入れ替えると行列式の符号が反転することから、

$$\begin{aligned}
|A| &= -|B| = -|A| && (1.105) \\
2|A| &= 0 && (1.106) \\
|A| &= 0 && (1.107)
\end{aligned}$$

従って、同一の行または列をもつ行列では行列式はゼロになる。

(7) 問

$$|A^{-1}| = (|A|)^{-1} \tag{1.108}$$

(7) 解

単位行列 $\boldsymbol{1}$ の行列式は、対角行列であることから

$$|\boldsymbol{1}| = 1 \tag{1.109}$$

である。従って、

$$AA^{-1} = \boldsymbol{1} \tag{1.110}$$
$$|AA^{-1}| = |\boldsymbol{1}| \tag{1.111}$$
$$|A||A^{-1}| = 1 \tag{1.112}$$
$$|A^{-1}| = (|A|)^{-1} \tag{1.113}$$

である。

(8) 問

$AA^\dagger = \boldsymbol{1}$ ならば $|A|(|A|)^* = 1$ である。

(8) 解

$$AA^\dagger = \boldsymbol{1} \tag{1.114}$$
$$|AA^\dagger| = |\boldsymbol{1}| \tag{1.115}$$
$$|A||A^\dagger| = 1 \tag{1.116}$$
$$|A|(|A|)^* = 1 \qquad (\because |A| = \left(|A^\dagger|\right)^*) \tag{1.117}$$

(9) 問

$U^\dagger O U = \Omega$ かつ $U^{-1} = U^\dagger$ ならば $|O| = |\Omega|$ である。

(9) 解

$$|U^\dagger OU| = |U^\dagger||O||U| \tag{1.118}$$
$$= |U^\dagger||U||O| \tag{1.119}$$
$$= |U^\dagger U||O| \tag{1.120}$$
$$= |\boldsymbol{1}||O| \tag{1.121}$$
$$= |O| \tag{1.122}$$

$$\therefore |U^\dagger OU| = |O| = |\Omega| \tag{1.123}$$

である。

問題 1.7

問

$|A| = 0$ のとき A^{-1} は存在しない。$\boldsymbol{c}$ に関する方程式

$$A\boldsymbol{c} = \mathbf{0} \tag{1.124}$$

が自明でない解 ($\boldsymbol{c} \neq \mathbf{0}$) をもつのは $|A| = 0$ のときだけであることを示せ。

解

問は次のように読み替えることができる。即ち、自明でない解をもち、かつ $|A| \neq 0$ であることはあり得ないことを示す。

$|A| \neq 0$ であるとき、A の逆行列 A^{-1} が存在する。従って、方程式の両辺にかけると、

$$A\boldsymbol{c} = \mathbf{0} \tag{1.125}$$
$$A^{-1}A\boldsymbol{c} = A^{-1}\mathbf{0} \tag{1.126}$$
$$\boldsymbol{c} = \mathbf{0} \tag{1.127}$$

となる。従って、このときは自明解のみが存在する。よって、自明でない解をもちながら $|A| \neq 0$ はあり得ないため、自明でない解をもつのは $|A| = 0$ のときのみである。

問題 1.8

問

行列のトレースはユニタリー変換に対して不変であることを示せ。つまり、$\Omega = U^\dagger OU$ ならば $\mathrm{tr}\Omega = \mathrm{tr}O$ であることを示せ。

解

問題 1.4(a) より

$$\mathrm{tr}(AB) = \mathrm{tr}(BA) \tag{1.128}$$

が成立する。従って、

$$\begin{align}
\mathrm{tr}\Omega &= \mathrm{tr}\big(U^\dagger O U\big) \tag{1.129}\\
&= \mathrm{tr}\big(O U U^\dagger\big) \tag{1.130}\\
&= \mathrm{tr}\big(O U U^{-1}\big) \tag{1.131}\\
&= \mathrm{tr} O \tag{1.132}
\end{align}$$

である。

問題 1.9

問

次の式を考える。

$$OU = U \begin{bmatrix} \omega_1 & & & \mathbf{0} \\ & \omega_2 & & \\ & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & & \omega_N \end{bmatrix} \qquad U = \begin{bmatrix} \boldsymbol{c}^1 & \boldsymbol{c}^2 & \cdots & \boldsymbol{c}^N \end{bmatrix} \tag{1.133}$$

この式が $\alpha = 1, 2, \cdots, N$ についての下の式を含むことを示せ。

$$O\boldsymbol{c}^\alpha = \omega_\alpha \boldsymbol{c}^\alpha \tag{1.134}$$

解

$$\begin{align}
OU &= O \begin{bmatrix} \boldsymbol{c}^1 & \boldsymbol{c}^2 & \cdots & \boldsymbol{c}^N \end{bmatrix} \tag{1.135}\\
&= \begin{bmatrix} O\boldsymbol{c}^1 & O\boldsymbol{c}^2 & \cdots & O\boldsymbol{c}^N \end{bmatrix} \tag{1.136}
\end{align}$$

$$U \mathrm{diag}(\omega_1, \omega_2, \cdots, \omega_N) = \begin{bmatrix} \omega_1\boldsymbol{c}^1 & \omega_2\boldsymbol{c}^2 & \cdots & \omega_N\boldsymbol{c}^N \end{bmatrix} \tag{1.137}$$

である。従って、それぞれの行列の列を比較することで、

$$O\boldsymbol{c}^\alpha = \omega_\alpha \boldsymbol{c}^\alpha \tag{1.138}$$

となる。

問題 1.10

問

固有値問題

$$\begin{bmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{21} & O_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \omega \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \tag{1.139}$$

では、固有ベクトルの成分の比例関係のみが求まり、個々の成分の値 (ベクトルのノルム) には任意性がある。$c_1 = 1, c_2 = c$ と置くことで、

$$\begin{cases} O_{11} + O_{12}c & = \omega \\ O_{21} + O_{22}c & = \omega c \end{cases} \tag{1.140}$$

となる。この方程式から c を消して得られる 2 次方程式の解 ω が、永年方程式を解いて得られる固有値に一致することを示せ。その固有値は次の通りである。

$$\omega_1 = \frac{1}{2}\left(O_{11} + O_{22} - \sqrt{(O_{22} - O_{11})^2 + 4O_{12}O_{21}}\right) \tag{1.141}$$

$$\omega_2 = \frac{1}{2}\left(O_{11} + O_{22} + \sqrt{(O_{22} - O_{11})^2 + 4O_{12}O_{21}}\right) \tag{1.142}$$

解

$$O_{11} + O_{12}c = \omega \tag{1.143}$$

$$c = \frac{\omega - O_{11}}{O_{12}} \tag{1.144}$$

$$O_{21} + O_{22}c = \omega c \tag{1.145}$$

$$O_{21} + O_{22} \cdot \frac{\omega - O_{11}}{O_{12}} = \omega \cdot \frac{\omega - O_{11}}{O_{12}} \tag{1.146}$$

$$O_{21}O_{12} + O_{22}\omega - O_{22}O_{11} = \omega^2 - \omega O_{11} \tag{1.147}$$

$$\omega^2 - (O_{11} + O_{22})\omega + O_{11}O_{22} - O_{12}O_{21} = 0 \tag{1.148}$$

$$\omega = \frac{1}{2}\left(O_{11} + O_{22} \pm \sqrt{(O_{11} + O_{22})^2 - 4(O_{11}O_{22} - O_{12}O_{21})}\right) \tag{1.149}$$

$$= \frac{1}{2}\left(O_{11} + O_{22} \pm \sqrt{(O_{22} - O_{11})^2 + 4O_{12}O_{21}}\right) \tag{1.150}$$

従って、確かに永年方程式で得られた固有値と等しい固有値が得られることが言える。

問題 1.11

次の 2 つの行列について、固有値、固有ベクトルを指定の方法で求めよ。

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \qquad B = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \tag{1.151}$$

(a) 問

永年行列式を利用して求めよ。

(a) 解

まず行列 A について考える。固有値を ω として、永年方程式及び固有値は

$$|A - \omega \boldsymbol{1}| = 0 \tag{1.152}$$

$$\begin{vmatrix} 3-\omega & 1 \\ 1 & 3-\omega \end{vmatrix} = 0 \tag{1.153}$$

$$\omega^2 - 6\omega + 8 = 0 \tag{1.154}$$

$$\omega = 3 \pm 1 = 4,\ 2 \tag{1.155}$$

である。

固有値 ω が 4 のときは、

$$A\boldsymbol{c} = 4\boldsymbol{c} \tag{1.156}$$

$$\begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \boldsymbol{c} = \boldsymbol{0} \tag{1.157}$$

$$\boldsymbol{c} = C \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \qquad (C \in \mathbb{R}) \tag{1.158}$$

一方で ω が 2 のときには、

$$A\boldsymbol{c} = 2\boldsymbol{c} \tag{1.159}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \boldsymbol{c} = \boldsymbol{0} \tag{1.160}$$

$$\boldsymbol{c} = C \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \qquad (C \in \mathbb{R}) \tag{1.161}$$

である。

次に行列 B について考える。同様に永年方程式とその固有値 ω は

$$|B - \omega \boldsymbol{1}| = 0 \tag{1.162}$$

$$\begin{vmatrix} 3-\omega & 1 \\ 1 & 2-\omega \end{vmatrix} = 0 \tag{1.163}$$

$$\omega^2 - 5\omega + 5 = 0 \tag{1.164}$$

$$\omega = \frac{1}{2}\left(5 \pm \sqrt{5}\right) \tag{1.165}$$

である。$\omega=\frac{5}{2}+\frac{\sqrt{5}}{2}$ のとき固有ベクトルは

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2}-\frac{\sqrt{5}}{2} & 1 \\ 1 & -\frac{1}{2}-\frac{\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix}\boldsymbol{c}=\boldsymbol{0} \tag{1.166}$$

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2}-\frac{\sqrt{5}}{2} & 1 \\ \frac{1}{2}-\frac{\sqrt{5}}{2} & 1 \end{bmatrix}\boldsymbol{c}=\boldsymbol{0} \tag{1.167}$$

$$\boldsymbol{c}=C\begin{bmatrix} 1 \\ -\frac{1}{2}+\frac{\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} \qquad (C\in\mathbb{R}) \tag{1.168}$$

$\omega=\frac{5}{2}-\frac{\sqrt{5}}{2}$ のとき固有ベクトルは

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2}+\frac{\sqrt{5}}{2} & 1 \\ 1 & -\frac{1}{2}+\frac{\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix}\boldsymbol{c}=\boldsymbol{0} \tag{1.169}$$

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2}+\frac{\sqrt{5}}{2} & 1 \\ \frac{1}{2}+\frac{\sqrt{5}}{2} & 1 \end{bmatrix}\boldsymbol{c}=\boldsymbol{0} \tag{1.170}$$

$$\boldsymbol{c}=C\begin{bmatrix} 1 \\ -\frac{1}{2}-\frac{\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} \qquad (C\in\mathbb{R}) \tag{1.171}$$

(b) 問

ユニタリー変換を使う方法で求めよ。

(b) 解

まず、行列 A について考える。行列 U を次の通りに置く。

$$U=\begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{bmatrix} \tag{1.172}$$

このとき、$U^{\dagger}AU$ が対角行列となる θ は

$$\frac{1}{2}(A_{11}-A_{22})\sin 2\theta - A_{12}\cos 2\theta = 0 \tag{1.173}$$

$$\cos 2\theta = 0 \tag{1.174}$$

$$\theta=\frac{\pi}{4} \tag{1.175}$$

である。更に、固有値は

$$\omega_1 = A_{11}\cos^2\theta + A_{22}\sin^2\theta + A_{12}\sin 2\theta \tag{1.176}$$

$$= 3\cdot\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 + 3\cdot\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 + 1\cdot 1 \tag{1.177}$$

$$= 4 \tag{1.178}$$

$$\omega_2 = A_{11}\sin^2\theta + A_{22}\cos^2\theta - A_{12}\sin 2\theta \tag{1.179}$$

$$= 3\cdot\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 + 3\cdot\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 - 1\cdot 1 \tag{1.180}$$

$$= 2 \tag{1.181}$$

である。また、それぞれの固有ベクトルは

$$\begin{bmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} \sin\theta \\ -\cos\theta \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \tag{1.182}$$

である。

次に行列 B について考える。同様に行列 U を置くと、行列 $U^\dagger BU$ が対角行列となる θ は

$$\frac{1}{2}(B_{11} - B_{22})\sin 2\theta - B_{12}\cos 2\theta = 0 \tag{1.183}$$
$$\frac{1}{2}\sin 2\theta - \cos 2\theta = 0 \tag{1.184}$$
$$\tan 2\theta = 2 \tag{1.185}$$
$$\frac{\sin^2 2\theta}{1 - \sin^2 2\theta} = 4 \tag{1.186}$$
$$\sin^2 2\theta = \frac{4}{5} \tag{1.187}$$
$$\cos^2 2\theta = \frac{1}{5} \tag{1.188}$$

$$\cos 2\theta = \frac{1}{\sqrt{5}} \tag{1.189}$$
$$2\cos^2\theta - 1 = \frac{\sqrt{5}}{5} \tag{1.190}$$
$$\cos^2\theta = \frac{5 + \sqrt{5}}{10} \tag{1.191}$$
$$\sin^2\theta = \frac{5 - \sqrt{5}}{10} \tag{1.192}$$

$$\sin 2\theta = \sqrt{\frac{4}{5}} = \frac{2\sqrt{5}}{5} \tag{1.193}$$

である。よって、固有値は

$$\omega_1 = B_{11}\cos^2\theta + B_{22}\sin^2\theta + B_{12}\sin 2\theta \tag{1.194}$$
$$= 3 \cdot \frac{5 + \sqrt{5}}{10} + 2 \cdot \frac{5 - \sqrt{5}}{10} + 1 \cdot \frac{2\sqrt{5}}{5} \tag{1.195}$$
$$= \frac{25 + 5\sqrt{5}}{10} \tag{1.196}$$
$$= \frac{5 + \sqrt{5}}{2} \tag{1.197}$$
$$\omega_2 = B_{11}\sin^2\theta + B_{22}\cos^2\theta - B_{12}\sin 2\theta \tag{1.198}$$
$$= 3 \cdot \frac{5 - \sqrt{5}}{10} + 2 \cdot \frac{5 + \sqrt{5}}{10} - 1 \cdot \frac{2\sqrt{5}}{5} \tag{1.199}$$
$$= \frac{25 - 5\sqrt{5}}{10} \tag{1.200}$$
$$= \frac{5 - \sqrt{5}}{2} \tag{1.201}$$

である。また、

$$\tan^2\theta = \frac{\frac{5-\sqrt{5}}{10}}{\frac{5+\sqrt{5}}{10}} \tag{1.202}$$

$$= \frac{(5-\sqrt{5})^2}{20} \tag{1.203}$$

$$\tan\theta = \frac{5-\sqrt{5}}{2\sqrt{5}} \tag{1.204}$$

$$= \frac{-1+\sqrt{5}}{2} \tag{1.205}$$

であることから、それぞれの固有ベクトルは

$$\begin{bmatrix} 1 \\ \tan\theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{-1+\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} \tan\theta \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{-1+\sqrt{5}}{2} \\ -1 \end{bmatrix} \tag{1.206}$$

である。

問題 1.12

次の関係を与える。

$$U^\dagger A U = \boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_1 & & & \mathbf{0} \\ & a_2 & & \\ & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & & a_N \end{bmatrix} \tag{1.207}$$

もしくは

$$A\boldsymbol{c}^\alpha = a_\alpha \boldsymbol{c}^\alpha \qquad (\alpha = 1, 2, \cdots, N) \tag{1.208}$$

(a) 問

次の等式を証明せよ。

$$|A^n| = a_1^n a_2^n \cdots a_N^n \tag{1.209}$$

(a) 解

$$\left(U^\dagger A U\right)^n = \boldsymbol{a}^n \tag{1.210}$$

$$U^\dagger A^n U = \boldsymbol{a}^n = \begin{bmatrix} a_1^n & & & \mathbf{0} \\ & a_2^n & & \\ & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & & a_N^n \end{bmatrix} \tag{1.211}$$

$$|U^\dagger A^n U| = |\boldsymbol{a}^n| \tag{1.212}$$
$$|U^\dagger||A^n||U| = a_1^n a_2^n \cdots a_N^n \tag{1.213}$$
$$|\boldsymbol{1}||A^n| = \tag{1.214}$$
$$|A^n| = a_1^n a_2^n \cdots a_N^n \tag{1.215}$$

(b) 問

次の等式を証明せよ。

$$\mathrm{tr}(A^n) = \sum_{\alpha=1}^{N} a_\alpha^n \tag{1.216}$$

(b) 解

$$U^\dagger A^n U = \boldsymbol{a}^n \tag{1.217}$$
$$\mathrm{tr}\big(U^\dagger A^n U\big) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{a}^n) \tag{1.218}$$
$$\mathrm{tr}\big(A^n U U^\dagger\big) = \mathrm{tr}(\mathrm{diag}(a_1^n, a_2^n, \cdots, a_N^n)) \qquad (\because \mathrm{tr}(AB) = \mathrm{tr}(BA)) \tag{1.219}$$
$$\mathrm{tr}(A^n) = \sum_{\alpha=1}^{N} a_\alpha^n \tag{1.220}$$

(c) 問

$G(\omega) = (\omega\boldsymbol{1} - A)^{-1}$ のとき、

$$(G(\omega))_{ij} = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{U_{i\alpha} {U_{j\alpha}}^*}{\omega - a_\alpha} = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{c_i^\alpha c_j^{\alpha *}}{\omega - a_\alpha} \tag{1.221}$$

であることを示せ。加えて、

$$(G(\omega))_{ij} = \langle i \,|\, \mathscr{G}(\omega) \,|\, j \rangle = \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{\langle i \,|\, \alpha \rangle \langle \alpha \,|\, j \rangle}{\omega - a_\alpha} \tag{1.222}$$

であることも示せ。

(c) 解

$U^\dagger A U = \boldsymbol{a}$ より、$A = U\boldsymbol{a}U^\dagger$ である。従って、$B = \omega\boldsymbol{1} - A$ の逆行列 $B^{-1} = G$ は

$$BB^{-1} = \boldsymbol{1} \tag{1.223}$$
$$(\omega\boldsymbol{1} - U\boldsymbol{a}U^\dagger)G = \boldsymbol{1} \tag{1.224}$$
$$U(\omega\boldsymbol{1} - \boldsymbol{a})U^\dagger G = \boldsymbol{1} \tag{1.225}$$

$\omega \boldsymbol{1} - \boldsymbol{a}$ の逆行列が存在する場合、

$$U(\omega \boldsymbol{1} - \boldsymbol{a})U^\dagger G = \boldsymbol{1} \tag{1.226}$$
$$(\omega \boldsymbol{1} - \boldsymbol{a})U^\dagger G = U^\dagger \boldsymbol{1} = U^\dagger \tag{1.227}$$
$$U^\dagger G = (\omega \boldsymbol{1} - \boldsymbol{a})^{-1} U^\dagger \tag{1.228}$$
$$G = U(\omega \boldsymbol{1} - \boldsymbol{a})^{-1} U^\dagger \tag{1.229}$$

である。$\omega \boldsymbol{1} - \boldsymbol{a}$ は対角行列であるので、その逆行列は

$$(\omega \boldsymbol{1} - \boldsymbol{a})^{-1} = \begin{bmatrix} (\omega - a_1)^{-1} & & & \mathbf{0} \\ & (\omega - a_2)^{-1} & & \\ & \mathbf{0} & \ddots & \\ & & & (\omega - a_N)^{-1} \end{bmatrix} \tag{1.230}$$

従って、

$$(G(\omega))_{ij} = \sum_\alpha U_{i\alpha}(\omega - a_\alpha)^{-1} {U^\dagger}_{\alpha j} \tag{1.231}$$
$$= \sum_\alpha \frac{U_{i\alpha} {U_{j\alpha}}^*}{\omega - a_\alpha} \tag{1.232}$$

である。更に、$U = [\boldsymbol{c}^1\ \boldsymbol{c}^2\ \cdots\ \boldsymbol{c}^N]$ より、$U_{ij} = c_i^j$ であるから、

$$(G(\omega))_{ij} = \sum_\alpha \frac{c_i^\alpha c_j^{\alpha *}}{\omega - a_\alpha} \tag{1.233}$$

となる。

次に 2 つ目の式の証明に移る。$\mathscr{G}$ の固有ケットを $|\alpha\rangle$ とするとき、行列 G を対角化して得られる対角行列が $(\omega \boldsymbol{1} - \boldsymbol{a})^{-1}$ であることから、

$$\mathscr{G}(\omega)\,|\alpha\rangle = (\omega - a_\alpha)^{-1}\,|\alpha\rangle \tag{1.234}$$

となる。(もしくは $|\alpha\rangle$ をこのように定義する) 従って、

$$(G(\omega))_{ij} = \langle i\,|\,\mathscr{G}\,|\,j\rangle \tag{1.235}$$
$$= \sum_\alpha \langle i\,|\,\mathscr{G}\,|\,\alpha\rangle \langle \alpha\,|\,j\rangle \tag{1.236}$$
$$= \sum_\alpha \left\langle i\,\middle|\,(\omega - a_\alpha)^{-1}\,\middle|\,\alpha\right\rangle \langle \alpha\,|\,j\rangle \tag{1.237}$$
$$= \sum_\alpha \frac{\langle i\,|\,\alpha\rangle \langle \alpha\,|\,j\rangle}{\omega - a_\alpha} \tag{1.238}$$

問題 1.13

問

行列 A が

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ b & a \end{bmatrix} \tag{1.239}$$

であるとき、

$$f(A)=\left[\begin{array}{cc}\frac{1}{2}(f(a+b)+f(a-b)) & \frac{1}{2}(f(a+b)-f(a-b))\\ \frac{1}{2}(f(a+b)-f(a-b)) & \frac{1}{2}(f(a+b)+f(a-b))\end{array}\right] \tag{1.240}$$

であることを示せ。

解

まず A を対角化する。固有ベクトルと対応する固有値は

$$\boldsymbol{c}^1=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{array}{c}1\\1\end{array}\right] \qquad \omega_1=a+b \tag{1.241}$$

$$\boldsymbol{c}^2=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{array}{c}1\\-1\end{array}\right] \qquad \omega_2=a-b \tag{1.242}$$

である。従って、ユニタリー行列 $U,U^\dagger$ と対角行列 $\boldsymbol{a}$ は

$$U=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{array}{cc}1&1\\1&-1\end{array}\right]=U^\dagger \qquad \boldsymbol{a}=\left[\begin{array}{cc}a+b&0\\0&a-b\end{array}\right] \tag{1.243}$$

である。従って、

$$\begin{aligned}
f(A)&=Uf(\boldsymbol{a})U^\dagger &(1.244)\\
&=\frac{1}{2}\left[\begin{array}{cc}1&1\\1&-1\end{array}\right]\left[\begin{array}{cc}f(a+b)&0\\0&f(a-b)\end{array}\right]\left[\begin{array}{cc}1&1\\1&-1\end{array}\right] &(1.245)\\
&=\frac{1}{2}\left[\begin{array}{cc}f(a+b)&f(a-b)\\f(a+b)&-f(a-b)\end{array}\right]\left[\begin{array}{cc}1&1\\1&-1\end{array}\right] &(1.246)\\
&=\frac{1}{2}\left[\begin{array}{cc}f(a+b)+f(a-b)&f(a+b)-f(a-b)\\f(a+b)-f(a-b)&f(a+b)+f(a-b)\end{array}\right] &(1.247)
\end{aligned}$$

となる。

問題 1.14

問

デルタ関数 $\delta(x)$ は次のように書くことができる。

$$\delta(x)=\lim_{\epsilon\to+0}\delta_\epsilon(x) \qquad \delta_\epsilon(x)=\left\{\begin{array}{ll}\frac{1}{2\epsilon} & (-\epsilon\le x\le\epsilon)\\ 0 & (\text{otherwise})\end{array}\right. \tag{1.248}$$

このとき、次の式を示せ。

$$a(0)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\ a(x)\delta(x) \tag{1.249}$$

解

極限と積分が可換であることを仮定すれば、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ a(x)\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ a(x) \lim_{\epsilon\to+0} \delta_\epsilon(x) \tag{1.250}$$

$$= \lim_{\epsilon\to+0} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ a(x)\delta_\epsilon(x) \tag{1.251}$$

$$= \lim_{\epsilon\to+0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \mathrm{d}x\ a(x)\frac{1}{2\epsilon} \tag{1.252}$$

$$= \lim_{\epsilon\to+0} \frac{1}{2\epsilon} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \mathrm{d}x\ a(x) \tag{1.253}$$

ここで、$A(x)$ を $a(x)$ の原始関数とすると、

$$= \lim_{\epsilon\to+0} \frac{1}{2\epsilon} \left[A(x)\right]_{-\epsilon}^{\epsilon} \tag{1.254}$$

$$= \lim_{\epsilon\to+0} \frac{A(\epsilon) - A(-\epsilon)}{2\epsilon} \tag{1.255}$$

$$= \frac{1}{2} \lim_{\epsilon\to+0} \left(\frac{A(\epsilon) - A(0)}{\epsilon} + \frac{A(0) - A(-\epsilon)}{\epsilon} \right) \tag{1.256}$$

$$= \frac{1}{2} \left(\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}x}(0) + \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}x}(0) \right) \tag{1.257}$$

$$= a(0) \tag{1.258}$$

従って、

$$a(0) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ a(x)\delta(x) \tag{1.259}$$

である。

問題 1.15

問

基底関数 $\{\psi_i(x)\}$ における演算子 $\mathscr{O}$ の表現行列 O_{ij} を考える。つまり、

$$\mathscr{O}\psi_i(x) = \sum_j \psi_j(x) O_{ji} \tag{1.260}$$

とするときに、

$$O_{ji} = \int \mathrm{d}x\ {\psi_j}^*(x) \mathscr{O} \psi_i(x) \tag{1.261}$$

であることを示せ。

また、式 1.260 をブラケット記法に書き換えると

$$\mathscr{O} \left| i \right\rangle = \sum_j \left| j \right\rangle \left\langle j \middle| \mathscr{O} \middle| i \right\rangle \tag{1.262}$$

となることも示せ。

解

$\psi_i(x)$ が正規直交基底であることから、

$$\int \mathrm{d}x\ {\psi_k}^* \mathscr{O} \psi_i = \int \mathrm{d}x\ {\psi_k}^* \left(\sum_j \psi_j O_{ji} \right) \tag{1.263}$$

$$= \sum_j \int \mathrm{d}x\ {\psi_k}^* \psi_j O_{ji} \tag{1.264}$$

$$= \sum_j \delta_{kj} O_{ji} \tag{1.265}$$

$$= O_{ki} \tag{1.266}$$

従って、

$$O_{ji} = \int \mathrm{d}x\ {\psi_j}^* \mathscr{O} \psi_i \tag{1.267}$$

となる。

また、この右辺はブラケット記法により、

$$O_{ji} = \langle j | \mathscr{O} | i \rangle \tag{1.268}$$

となるため、

$$\mathscr{O} \left| i \right\rangle = \sum_j \left| j \right\rangle O_{ji} \tag{1.269}$$

$$= \sum_j \left| j \right\rangle \langle j | \mathscr{O} | i \rangle \tag{1.270}$$

である。

問題 1.16

問

固有値問題

$$\mathscr{O} \phi = \omega \phi \tag{1.271}$$

を考える。完全系 ψ_i で ϕ を

$$\phi = \sum_i c_i \psi_i \tag{1.272}$$

と展開すると、この問題は行列の固有値問題

$$O \boldsymbol{c} = \omega \boldsymbol{c} \tag{1.273}$$

と等価になることを示せ。その証明の方法として、ブラケット記法を使う方法と使わない方法の 2 通りを示せ。

解

まず、ブラケット記法を使わずに示す。

$$\mathscr{O}\phi = \omega\phi \tag{1.274}$$

$$\mathscr{O}\left(\sum_j c_j \psi_j\right) = \omega\left(\sum_i c_i \psi_i\right) \tag{1.275}$$

$$\int \mathrm{d}x\ {\psi_k}^* \mathscr{O}\left(\sum_j c_j \psi_j\right) = \int \mathrm{d}x\ {\psi_k}^* \omega\left(\sum_i c_i \psi_i\right) \tag{1.276}$$

$$\sum_j c_j \left(\int \mathrm{d}x\ {\psi_k}^* \mathscr{O}\psi_j\right) = \omega \sum_i c_i \left(\int \mathrm{d}x\ {\psi_k}^* \psi_i\right) \tag{1.277}$$

$$\sum_j c_j O_{kj} = \omega \sum_i c_i \delta_{ki} \tag{1.278}$$

$$\sum_j O_{ij} c_j = \omega c_i \tag{1.279}$$

である。これは即ち行列の固有値問題に他ならない。従って、確かに関数の固有値問題は行列の固有値問題に書き換えることが可能である。

次にブラケット記法を用いて示す。

$$\mathscr{O}\left|\phi\right\rangle = \omega\left|\phi\right\rangle \tag{1.280}$$

$$\mathscr{O}\left(\sum_j c_j \left|j\right\rangle\right) = \omega\left(\sum_i c_i \left|i\right\rangle\right) \tag{1.281}$$

$$\sum_j c_j \mathscr{O}\left|j\right\rangle = \sum_i \omega c_i \left|i\right\rangle \tag{1.282}$$

$$\sum_j c_j \left\langle k \,\middle|\, \mathscr{O} \,\middle|\, j\right\rangle = \sum_i \omega c_i \left\langle k \,\middle|\, i\right\rangle \tag{1.283}$$

$$\sum_j c_j O_{kj} = \sum_i \omega c_i \delta_{ki} \tag{1.284}$$

$$\sum_j O_{ij} c_j = \omega c_i \tag{1.285}$$

従って、ブラケット記法でも同様である。

問題 1.17

番号付けが可能な (離散的な) 無限個の完全規格直交基底は

$$\sum_i \left|i\right\rangle\left\langle i\right| = 1 \tag{1.286}$$

$$\left\langle i|j\right\rangle = \delta_{ij} \tag{1.287}$$

となる。

一方で、連続無限の完全基底 $|x\rangle$ は、対応するように

$$\int \mathrm{d}x \, |x\rangle \langle x| = 1 \tag{1.288}$$

となる。これに左から $\langle a|$、右から $|b\rangle$ をかけると、

$$\int \mathrm{d}x \, \langle a|x\rangle \langle x|b\rangle = \langle a|b\rangle = \int \mathrm{d}x \; a^*(x)b(x) \tag{1.289}$$

となることから、

$$a^*(x) = \langle a|x\rangle \qquad\qquad b(x) = \langle x|b\rangle \tag{1.290}$$

である。

(a) 問

式 1.288 に、左から $\langle i|$、右から $|j\rangle$ をかける。すると、

$$\int \mathrm{d}x \; {\psi_i}^*(x)\psi_j(x) = \delta_{ij} \tag{1.291}$$

に等しいことを示せ。

(a) 解

$$\int \mathrm{d}x \, |x\rangle \langle x| = 1 \tag{1.292}$$

$$\int \mathrm{d}x \, \langle i|x\rangle \langle x|j\rangle = \langle i|j\rangle \tag{1.293}$$

$$\int \mathrm{d}x \; {\psi_i}^*(x)\psi_j(x) = \delta_{ij} \tag{1.294}$$

である。

(b) 問

式 1.286 に、左から $\langle x|$、右から $|x'\rangle$ をかける。すると、$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$ であれば

$$\sum_i \psi_i(x){\psi_i}^*(x') = \delta(x - x') \tag{1.295}$$

となることを示せ。

(b) 解

$$\sum_i |i\rangle \langle i| = 1 \tag{1.296}$$

$$\sum_i \langle x|i\rangle \langle i|x'\rangle = \langle x|x'\rangle \tag{1.297}$$

$$\sum_i \psi_i(x)\psi_i{}^*(x') = \delta(x - x') \tag{1.298}$$

である。

(c) 問

式 1.288 に、左から $\langle x'|$、右から $|a\rangle$ をかけると

$$a(x) = \int \mathrm{d}x' \delta(x - x')a(x') \tag{1.299}$$

が得られることを示せ。

(c) 解

$$\int \mathrm{d}x\, |x\rangle \langle x| = 1 \tag{1.300}$$

$$\int \mathrm{d}x\, \langle x'|x\rangle \langle x|a| = \langle x'|a\rangle \tag{1.301}$$

$$\int \mathrm{d}x \delta(x - x')a(x) = a(x') \tag{1.302}$$

$$\int \mathrm{d}x' \delta(x' - x)a(x') = a(x) \tag{1.303}$$

である。

(d) 問

ある演算子 $\mathscr{O}$ の連続基底 $|x\rangle$ における行列要素は

$$\langle x|\mathscr{O}|x'\rangle = O(x, x') \tag{1.304}$$

である。また、$\mathscr{O}\,|a\rangle = |b\rangle$ とする。これを変形すると、

$$\mathscr{O}\,|a\rangle = |b\rangle \tag{1.305}$$

$$\mathscr{O}1\,|a\rangle = \tag{1.306}$$

$$\int \mathrm{d}x\ \mathscr{O}\,|x\rangle \langle x|a\rangle = |b\rangle \tag{1.307}$$

となる。この式に $\langle x'|$ をかけると

$$b(x) = \mathscr{O}a(x) = \int \mathrm{d}x'\ O(x,x')a(x') \tag{1.308}$$

が得られることを示せ。

(d) 解

$$\int \mathrm{d}x\ \ \langle x'|\mathscr{O}|x\rangle \langle x|a\rangle = \langle x'|b\rangle \tag{1.309}$$

$$\int \mathrm{d}x\ O(x',x)a(x) = b(x') \tag{1.310}$$

$$b(x) = \int \mathrm{d}x'\ O(x,x')a(x') \tag{1.311}$$

である。

(e) 問

$$O_{ij} = \langle i|\mathscr{O}|j\rangle \Rightarrow O(x,x') = \sum_{i,j} \psi_i(x) O_{ij} {\psi_j}^*(x') \tag{1.312}$$

であることを示せ。

(e) 解

$$\begin{aligned}
O(x,x') &= \langle x|\mathscr{O}|x'\rangle &(1.313)\\
&= \langle x| \left(\sum_i |i\rangle \langle i| \right) \mathscr{O} \left(\sum_j |j\rangle \langle j| \right) |x'\rangle &(1.314)\\
&= \sum_{i,j} \langle x|i\rangle \langle i|\mathscr{O}|j\rangle \langle j|x'\rangle &(1.315)\\
&= \sum_{i,j} \psi_i(x) O_{ij} {\psi_j}^*(x') &(1.316)
\end{aligned}$$

である。

問題 1.18

問

ポテンシャル $-\delta(x)$ のもとに 1 次元運動する 1 つの電子の Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \delta(x) \right) |\Phi\rangle = \mathscr{E}\,|\Phi\rangle \tag{1.317}$$

である。

試行関数

$$|\tilde{\Phi}\rangle = N\exp(-\alpha x^2) \tag{1.318}$$

で変分法による計算を行い、得られるエネルギーが $-\pi^{-1}$ であることを示せ。また、それが正確な基底状態のエネルギーの -0.5 より大きいことを示せ。

なお、積分公式として

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ x^{2m}\exp(-\alpha x^2) = \frac{(2m)!\pi^{\frac{1}{2}}}{2^{2m}m!\alpha^{m+\frac{1}{2}}} \tag{1.319}$$

を用いてもよい。

解

エネルギーの期待値は

$$\begin{aligned}
\langle\tilde{\Phi}|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\ \tilde{\Phi}^*(x)\mathscr{H}\tilde{\Phi}(x) && (1.320)\\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\ \left(N^*\exp(-\alpha x^2)\right)\mathscr{H}\left(N\exp(-\alpha x^2)\right) && (1.321)\\
&= |N|^2\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\ \exp(-\alpha x^2)\left(-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \delta(x)\right)\exp(-\alpha x^2) && (1.322)\\
&= |N|^2\left\{\begin{array}{l} -\dfrac{1}{2}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\ \exp(-\alpha x^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\exp(-\alpha x^2)(-2\alpha x)\right) \\ -\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\ \delta(x)\exp(-2\alpha x^2) \end{array}\right\} && (1.323)\\
&= |N|^2\left\{\begin{array}{l} -\dfrac{1}{2}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\ \exp(-2\alpha x^2)(-2\alpha x)^2 \\ -\dfrac{1}{2}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\ \exp(-2\alpha x^2)(-2\alpha) \\ -1 \end{array}\right\} && (1.324)\\
&= |N|^2\left\{-2\alpha^2\cdot\frac{2!\ \pi^{\frac{1}{2}}}{2^2\ 1!\ (2\alpha)^{\frac{3}{2}}} + \alpha\cdot\frac{0!\ \pi^{\frac{1}{2}}}{2^0\ 0!\ (2\alpha)^{\frac{1}{2}}} - 1\right\} && (1.325)\\
&= |N|^2\left\{-2\alpha^2\cdot\frac{2\pi^{\frac{1}{2}}}{4\cdot 2^{\frac{3}{2}}\cdot\alpha^{\frac{3}{2}}} + \alpha\cdot\frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{2^{\frac{1}{2}}\cdot\alpha^{\frac{1}{2}}} - 1\right\} && (1.326)\\
&= |N|^2\left\{-2^{-\frac{3}{2}}\alpha^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{1}{2}} + 2^{-\frac{1}{2}}\alpha^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{1}{2}} - 1\right\} && (1.327)\\
&= |N|^2\left\{2^{-\frac{3}{2}}\alpha^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{1}{2}}(-1+2) - 1\right\} && (1.328)\\
&= |N|^2\left(2^{-\frac{3}{2}}\alpha^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{1}{2}} - 1\right) && (1.329)
\end{aligned}$$

である。また、規格化条件により、

$$\langle\tilde{\Phi}|\tilde{\Phi}\rangle = 1 \tag{1.330}$$

$$|N|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \exp(-2\alpha x^2) = 1 \tag{1.331}$$

$$|N|^2 \cdot \frac{\pi^{\frac{1}{2}}}{2^{\frac{1}{2}}\alpha^{\frac{1}{2}}} = 1 \tag{1.332}$$

$$|N|^2 = \frac{2^{\frac{1}{2}}\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}}} \tag{1.333}$$

である。従って、期待値の極小値は、α で微分してゼロになるときにとるため

$$\langle\tilde{\Phi}|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}\rangle = \frac{2^{\frac{1}{2}}\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{\frac{1}{2}}}\left(2^{-\frac{3}{2}}\alpha^{\frac{1}{2}}\pi^{\frac{1}{2}} - 1\right) \tag{1.334}$$

$$= 2^{-1}\alpha - 2^{\frac{1}{2}}\pi^{-\frac{1}{2}}\alpha^{\frac{1}{2}} \tag{1.335}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\left(\langle\tilde{\Phi}|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}\rangle\right) = 0 \tag{1.336}$$

$$2^{-1} - 2^{-\frac{1}{2}}\pi^{-\frac{1}{2}}\alpha^{-\frac{1}{2}} = 0 \tag{1.337}$$

$$\alpha^{-\frac{1}{2}} = 2^{-\frac{1}{2}}\pi^{\frac{1}{2}} \tag{1.338}$$

$$\alpha = 2\pi^{-1} \tag{1.339}$$

$$\min\left(\langle\tilde{\Phi}|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}\rangle\right) = 2^{-1}\cdot 2\pi^{-1} - 2^{\frac{1}{2}}\pi^{-\frac{1}{2}}\cdot 2^{\frac{1}{2}}\pi^{-\frac{1}{2}} \tag{1.340}$$

$$= \pi^{-1} - 2\pi^{-1} \tag{1.341}$$

$$= -\pi^{-1} \tag{1.342}$$

である。更にこの値は

$$2 < \pi \tag{1.343}$$

$$\frac{1}{\pi} < \frac{1}{2} = 0.5 \tag{1.344}$$

$$-0.5 < -\pi^{-1} \tag{1.345}$$

であるから、確かに基底状態の厳密なエネルギーよりも大きくなることが分かる。

問題 1.19

問

水素原子の Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r}\right)|\Phi\rangle = \mathscr{E}\,|\Phi\rangle \tag{1.346}$$

である。

試行関数として

$$|\tilde{\Phi}\rangle = N\exp(-\alpha r^2) \tag{1.347}$$

を用いて変分計算を行い、得られるエネルギーが $-\frac{4}{3\pi}$ であることを示せ。また、それが厳密なエネルギー -0.5 よりも大きいことを示せ。

なお、公式として

$$\nabla^2 f(r) = r^{-2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}\right) \tag{1.348}$$

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\ r^{2m}\exp(-\alpha r^2) = \frac{(2m)!\pi^{\frac{1}{2}}}{2^{2m+1}m!\alpha^{m+\frac{1}{2}}} \tag{1.349}$$

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\ r^{2m+1}\exp(-\alpha r^2) = \frac{m!}{2\alpha^{m+1}} \tag{1.350}$$

を用いてもよい。

解

まず規格化条件から、

$$\langle\tilde{\Phi}|\tilde{\Phi}\rangle = 1 \tag{1.351}$$

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\ \int_0^\pi \mathrm{d}\theta\ \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi\ r^2\sin\theta\big(N\exp(-\alpha r^2)\big)^* N\exp(-\alpha r^2) = 1 \tag{1.352}$$

$$4\pi|N|^2\int_0^\infty \mathrm{d}r\ r^2\exp(-2\alpha r^2) = 1 \tag{1.353}$$

$$4\pi|N|^2\cdot\frac{2!\ \pi^{\frac{1}{2}}}{2^3\ 1!\ (2\alpha)^{\frac{3}{2}}} = 1 \tag{1.354}$$

$$|N|^2 = 2^{\frac{3}{2}}\pi^{-\frac{3}{2}}\alpha^{\frac{3}{2}} \tag{1.355}$$

である。この下で、エネルギーの期待値を求めると、

$$\begin{aligned}
\langle\tilde{\Phi}|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}\rangle &= \int_0^\infty \mathrm{d}r\ \int_0^\pi \mathrm{d}\theta\ \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi\ r^2\sin\theta\big(N\exp(-\alpha r^2)\big)^*\left(-\frac{1}{2}\nabla^2-\frac{1}{r}\right)N\exp(-\alpha r^2) && (1.356)\\
&= 4\pi|N|^2\int_0^\infty \mathrm{d}r\ r^2\exp(-\alpha r^2)\left(-\frac{1}{2}r^{-2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)-\frac{1}{r}\right)\exp(-\alpha r^2) && (1.357)\\
&= 4\pi|N|^2\left\{\begin{array}{l} -\dfrac{1}{2}\displaystyle\int_0^\infty \mathrm{d}r\ \exp(-\alpha r^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\cdot\exp(-\alpha r^2)\cdot(-2\alpha r)\right)\\ -\displaystyle\int_0^\infty \mathrm{d}r\ r\exp(-2\alpha r^2)\end{array}\right\} && (1.358)\\
&= 4\pi|N|^2\left\{\begin{array}{l} \alpha\displaystyle\int_0^\infty \mathrm{d}r\Big(3r^2\exp(-2\alpha r^2)+r^3\exp(-2\alpha r^2)(-2\alpha r)\Big)\\ -\dfrac{0!}{2(2\alpha)^1}\end{array}\right\} && (1.359)\\
&= 4\pi|N|^2\left\{3\alpha\frac{2!\ \pi^{\frac{1}{2}}}{2^3\ 1!\ (2\alpha)^{\frac{3}{2}}}-2\alpha^2\frac{4!\ \pi^{\frac{1}{2}}}{2^5\ 2!\ (2\alpha)^{\frac{5}{2}}}-2^{-2}\alpha^{-1}\right\} && (1.360)\\
&= 4\pi\cdot 2^{\frac{3}{2}}\pi^{-\frac{3}{2}}\alpha^{\frac{3}{2}}\left\{2^{-\frac{7}{2}}3\pi^{\frac{1}{2}}\alpha^{-\frac{1}{2}}-2^{-\frac{9}{2}}3\pi^{\frac{1}{2}}\alpha^{-\frac{1}{2}}-2^{-2}\alpha^{-1}\right\} && (1.361)\\
&= 2^{\frac{7}{2}}\pi^{-\frac{1}{2}}\left\{2^{-\frac{9}{2}}3\pi^{\frac{1}{2}}\alpha^1-2^{-2}\alpha^{\frac{1}{2}}\right\} && (1.362)
\end{aligned}$$

となる。これを極小化する α は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\left(\langle\tilde{\Phi}|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}\rangle\right) = 0 \tag{1.363}$$

$$2^{\frac{7}{2}}\pi^{-\frac{1}{2}}\left\{2^{-\frac{9}{2}}3\pi^{\frac{1}{2}} - 2^{-3}\alpha^{-\frac{1}{2}}\right\} = 0 \tag{1.364}$$

$$\alpha^{-\frac{1}{2}} = 2^{-\frac{3}{2}}3\pi^{\frac{1}{2}} \tag{1.365}$$

$$\alpha = 2^3 3^{-2}\pi^{-1} = \alpha_0 \tag{1.366}$$

であるから、期待値の極小値は

$$\min\left(\langle\tilde{\Phi}|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}\rangle\right) = 2^{\frac{7}{2}}\pi^{-\frac{1}{2}}\left(2^{-\frac{9}{2}}3\pi^{\frac{1}{2}}\alpha_0 - 2^{-2}\alpha_0^{\frac{1}{2}}\right) \tag{1.367}$$

$$= 2^{\frac{7}{2}}\pi^{-\frac{1}{2}}\left(2^{-\frac{9}{2}}3\pi^{\frac{1}{2}}\cdot 2^3 3^{-2}\pi^{-1} - 2^{-2}2^{\frac{3}{2}}3^{-1}\pi^{-\frac{1}{2}}\right) \tag{1.368}$$

$$= 2^{\frac{7}{2}}\pi^{-\frac{1}{2}}\left(2^{-\frac{3}{2}}3^{-1}\pi^{-\frac{1}{2}} - 2^{-\frac{1}{2}}3^{-1}\pi^{-\frac{1}{2}}\right) \tag{1.369}$$

$$= -2^{\frac{7}{2}}\pi^{-\frac{1}{2}}\cdot 2^{-\frac{3}{2}}3^{-1}\pi^{-\frac{1}{2}} \tag{1.370}$$

$$= -\frac{4}{3\pi} \tag{1.371}$$

である。

$$3 < \pi \tag{1.372}$$

$$\frac{4}{3\pi} < \frac{4}{9} \tag{1.373}$$

$$-0.5 < -0.\dot{4} = -\frac{4}{9} < -\frac{4}{3\pi} \tag{1.374}$$

であることから、得られた値は厳密解よりも大きいことが分かる。

問題 1.20

問

変分原理を行列の固有値問題に適用する。2 次対称行列

$$O = \begin{bmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{12} & O_{22} \end{bmatrix} \tag{1.375}$$

に対して試行ベクトル

$$\boldsymbol{c} = \begin{bmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{bmatrix} \tag{1.376}$$

を考える。$\omega(\theta) = \boldsymbol{c}^\dagger O\boldsymbol{c}$ を極小にする θ の値 θ_0 を求め、そのときに丁度 O の最小固有値になることを示せ。

解

$$\omega(\theta) = \boldsymbol{c}^{\dagger} O \boldsymbol{c} \tag{1.377}$$
$$= \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} O_{11} & O_{12} \\ O_{12} & O_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{bmatrix} \tag{1.378}$$
$$= \cos\theta\,(O_{11}\cos\theta + O_{12}\sin\theta) + \sin\theta\,(O_{12}\cos\theta + O_{22}\sin\theta) \tag{1.379}$$
$$= O_{11}\cos^2\theta + 2O_{12}\cos\theta\sin\theta + O_{22}\sin^2\theta \tag{1.380}$$

従って、$\omega(\theta)$ を極小にする θ は

$$\frac{\mathrm{d}\omega(\theta)}{\mathrm{d}\theta} = 0 \tag{1.381}$$
$$-2O_{11}\cos\theta_0\sin\theta_0 + 2O_{12}\cos 2\theta_0 + 2O_{22}\sin\theta_0\cos\theta_0 = 0 \tag{1.382}$$
$$(O_{22} - O_{11})\sin 2\theta_0 + 2O_{12}\cos 2\theta_0 = 0 \tag{1.383}$$
$$\tan 2\theta_0 = \frac{2O_{12}}{O_{11} - O_{22}} \tag{1.384}$$
$$\theta_0 = \frac{1}{2}\tan^{-1}\left(\frac{2O_{12}}{O_{11} - O_{22}}\right) \tag{1.385}$$

であり、そのとき $\omega(\theta)$ は

$$\omega(\theta_0) = O_{11}\cos^2\theta_0 + O_{22}\sin^2\theta_0 + O_{12}\sin 2\theta_0 \tag{1.386}$$

となる。これは既にみた通りに行列 O の固有値の 1 つである。

問題 1.21

固有方程式の厳密解を $|\Phi_\alpha\rangle$ $(\alpha = 0, 1, \cdots)$ とする。基底状態の厳密解の波動関数 $|\Phi_0\rangle$ と直交する規格化された試行関数 $|\tilde{\Phi}'\rangle$ を考える。つまり、$\langle\tilde{\Phi}'|\Phi_0\rangle = 0$ とする。

(a) 問

基底状態に関する変分原理の証明と同様にして

$$\langle\tilde{\Phi}'|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}'\rangle \geq \mathscr{E}_1 \tag{1.387}$$

であることを示せ。

(a) 解

$|\tilde{\Phi}'\rangle$ を、基底関数を $|\Phi_\alpha\rangle$ として展開すると、

$$|\tilde{\Phi}'\rangle = \sum_{\alpha} |\Phi_\alpha\rangle\,\langle\Phi_\alpha|\tilde{\Phi}'\rangle \tag{1.388}$$
$$= \sum_{\alpha>0} |\Phi_\alpha\rangle\,\langle\Phi_\alpha|\tilde{\Phi}'\rangle \tag{1.389}$$

である。従って、この試行関数でのエネルギーの期待値は

$$\langle\tilde{\Phi}'|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}'\rangle = \left(\sum_{\alpha>0}\langle\tilde{\Phi}'|\Phi_\alpha\rangle\langle\Phi_\alpha|\right)\mathscr{H}\left(\sum_{\beta>0}|\Phi_\beta\rangle\langle\Phi_\beta|\tilde{\Phi}'\rangle\right) \tag{1.390}$$
$$= \sum_{\alpha>0,\beta>0}\langle\tilde{\Phi}'|\Phi_\alpha\rangle\langle\Phi_\alpha|\mathscr{H}|\Phi_\beta\rangle\langle\Phi_\beta|\tilde{\Phi}'\rangle \tag{1.391}$$
$$= \sum_{\alpha>0,\beta>0}\langle\tilde{\Phi}'|\Phi_\alpha\rangle\mathscr{E}_\beta\langle\Phi_\alpha|\Phi_\beta\rangle\langle\Phi_\beta|\tilde{\Phi}'\rangle \tag{1.392}$$
$$= \sum_{\alpha>0,\beta>0}\langle\tilde{\Phi}'|\Phi_\alpha\rangle\mathscr{E}_\beta\delta_{\alpha\beta}\langle\Phi_\beta|\tilde{\Phi}'\rangle \tag{1.393}$$
$$= \sum_{\alpha>0}\langle\tilde{\Phi}'|\Phi_\alpha\rangle\mathscr{E}_\alpha\langle\Phi_\alpha|\tilde{\Phi}'\rangle \tag{1.394}$$
$$= \sum_{\alpha>0}\mathscr{E}_\alpha\left|\langle\Phi_\alpha|\tilde{\Phi}'\rangle\right|^2 \tag{1.395}$$

各項について、$\mathscr{E}_\alpha \geq \mathscr{E}_1(\alpha > 0)$ より

$$\mathscr{E}_\alpha\left|\langle\Phi_\alpha|\tilde{\Phi}'\rangle\right|^2 \geq \mathscr{E}_1\left|\langle\Phi_\alpha|\tilde{\Phi}'\rangle\right|^2 \qquad (\alpha > 0) \tag{1.396}$$

であるので、

$$\langle\tilde{\Phi}'|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}'\rangle \geq \sum_{\alpha>0}\mathscr{E}_1\left|\langle\Phi_\alpha|\tilde{\Phi}'\rangle\right|^2 = \mathscr{E}_1\sum_{\alpha>0}\left|\langle\Phi_\alpha|\tilde{\Phi}'\rangle\right|^2 \tag{1.397}$$

更に、

$$\sum_{\alpha>0}\left|\langle\Phi_\alpha|\tilde{\Phi}'\rangle\right|^2 = \sum_{\alpha\geq 0}\left|\langle\Phi_\alpha|\tilde{\Phi}'\rangle\right|^2 \qquad (\because \langle\Phi_0|\tilde{\Phi}'\rangle = 0) \tag{1.398}$$
$$= \sum_{\alpha}\langle\tilde{\Phi}'|\Phi_\alpha\rangle\langle\Phi_\alpha|\tilde{\Phi}'\rangle \tag{1.399}$$
$$= \langle\tilde{\Phi}'|\,1\,|\tilde{\Phi}'\rangle = \langle\tilde{\Phi}'|\tilde{\Phi}'\rangle \tag{1.400}$$
$$= 1 \tag{1.401}$$

であることから、

$$\langle\tilde{\Phi}'|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}'\rangle \geq \mathscr{E}_1\sum_{\alpha>0}\left|\langle\Phi_\alpha|\tilde{\Phi}'\rangle\right|^2 \tag{1.402}$$
$$\geq \mathscr{E}_1 \tag{1.403}$$

となる。

(b) 問

関数 $|\tilde{\Phi}'\rangle$ を基底状態と第 1 励起状態の試行関数 $|\tilde{\Phi}_0\rangle$ と $|\tilde{\Phi}_1\rangle$ によって、

$$|\tilde{\Phi}'\rangle = x\,|\tilde{\Phi}_0\rangle + y\,|\tilde{\Phi}_1\rangle \tag{1.404}$$

と置く。$|\tilde{\Phi}'\rangle$ の規格化条件が

$$|x|^2 + |y|^2 = 1 \tag{1.405}$$

であることを示せ。

(b) 解

$$\langle\tilde{\Phi}'|\tilde{\Phi}'\rangle = 1 \tag{1.406}$$

$$\left(x^* \langle\tilde{\Phi}_0| + y^* \langle\tilde{\Phi}_1|\right)\left(x|\tilde{\Phi}_0\rangle + y|\tilde{\Phi}_1\rangle\right) = 1 \tag{1.407}$$

$$|x|^2 \langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Phi}_0\rangle + x^*y\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Phi}_1\rangle + y^*x\langle\tilde{\Phi}_1|\tilde{\Phi}_0\rangle + |y|^2\langle\tilde{\Phi}_1|\tilde{\Phi}_1\rangle = 1 \tag{1.408}$$

ここで、$\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Phi}_1\rangle$ は、$|\Psi_i\rangle$ を試行関数の基底関数とすると

$$\langle\tilde{\Phi}_0|\tilde{\Phi}_1\rangle = \left(\sum_i c_i^{0*}\langle\Psi_i|\right)\left(\sum_j c_j^1|\Psi_j\rangle\right) \tag{1.409}$$

$$= \sum_{i,j} c_i^{0*}c_j^1\langle\Psi_i|\Psi_j\rangle \tag{1.410}$$

$$= \sum_{i,j} c_i^{0*}c_j^1\delta_{ij} \tag{1.411}$$

$$= \sum_i c_i^{0*}c_i^1 \tag{1.412}$$

$$= \boldsymbol{c}^{0\dagger}\boldsymbol{c}^1 \tag{1.413}$$

$$= 0 \tag{1.414}$$

より直交するためにゼロである。従って、規格化条件に戻すと、

$$|x|^2\cdot 1 + x^*y\cdot 0 + y^*x\cdot 0 + |y|^2\cdot 1 = 1 \tag{1.415}$$

$$|x|^2 + |y|^2 = 1 \tag{1.416}$$

である。

(c) 問

x と y が、$|\tilde{\Phi}'\rangle$ が規格化され、かつ、$\langle\tilde{\Phi}'|\Phi_0\rangle = 0$ とする。

$$\langle\tilde{\Phi}'|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}'\rangle = E_1 - |x|^2(E_1 - E_0) \tag{1.417}$$

となることを示せ。

(補足) $E_1 \geq E_0$ より、

$$E_1 \geq E_1 - |x|^2(E_1 - E_0) = \langle\tilde{\Phi}'|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}'\rangle \tag{1.418}$$

である。さらに、(a) より $\langle\tilde{\Phi}'|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}'\rangle \geq \mathscr{E}_1$ であるので、

$$E_1 \geq \langle\tilde{\Phi}'|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}'\rangle \geq \mathscr{E}_1 \tag{1.419}$$

となる。よって、試行関数 $\tilde{\Phi}_1$ に関するハミルトニアンの期待値 E_1 は第 1 励起状態のエネルギーの真の値 $\mathscr{E}_1$ の上限となることが言える。

(c) 解

$$\langle\tilde{\Phi}_\beta|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}_\alpha\rangle = \sum_{i,j} c_i^{\beta *}\langle\Psi_i|\mathscr{H}|\Psi_j\rangle c_j^{\alpha} \tag{1.420}$$
$$= \sum_{i,j} c_i^{\beta *} H_{ij} c_j^{\alpha} \tag{1.421}$$
$$= \sum_{i} c_i^{\beta *} E_\alpha c_i^{\alpha} \tag{1.422}$$
$$= E_\alpha \boldsymbol{c}^{\beta\dagger}\boldsymbol{c}^{\alpha} \tag{1.423}$$
$$= E_\alpha \delta_{\alpha\beta} \tag{1.424}$$

である。したがって、

$$\langle\tilde{\Phi}'|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}'\rangle = \left(x^*\langle\tilde{\Phi}_0| + y^*\langle\tilde{\Phi}_1|\right)\mathscr{H}\left(x|\tilde{\Phi}_0\rangle + y|\tilde{\Phi}_1\rangle\right) \tag{1.425}$$
$$= |x|^2\langle\tilde{\Phi}_0|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}_0\rangle + x^*y\langle\tilde{\Phi}_0|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}_1\rangle + y^*x\langle\tilde{\Phi}_1|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}_0\rangle + |y|^2\langle\tilde{\Phi}_1|\mathscr{H}|\tilde{\Phi}_1\rangle \tag{1.426}$$
$$= |x|^2E_0 + x^*y\cdot 0 + y^*x\cdot 0 + |y|^2E_1 \tag{1.427}$$
$$= |x|^2E_0 + (1-|x|^2)E_1 \qquad (\because |\tilde{\Phi}'\rangle \text{ の規格化条件}) \tag{1.428}$$
$$= E_1 - |x|^2(E_1 - E_0) \tag{1.429}$$

となる。

問題 1.22

問

z 軸方向に均一な電場 F がかかった状態での水素原子の Schrödinger 方程式は

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r} + Fr\cos\theta\right)|\Phi\rangle = (\mathscr{H}_0 + Fr\cos\theta)|\Phi\rangle = \mathscr{E}(F)|\Phi\rangle \tag{1.430}$$

である。

試行関数 $|\tilde{\Phi}\rangle$ として、

$$|\tilde{\Phi}\rangle = c_1|1s\rangle + c_2|2p_z\rangle \tag{1.431}$$

を用いる。ここで $|1s\rangle$ と $|2p_z\rangle$ は $\mathscr{H}_0$ の規格化固有関数であり、

$$|1s\rangle = \pi^{-\frac{1}{2}}\exp(-r) \qquad \mathscr{H}_0|1s\rangle = -\frac{1}{2}|1s\rangle \tag{1.432}$$
$$|2p_z\rangle = (32\pi)^{-\frac{1}{2}} r\exp\left(-\frac{r}{2}\right)\cos\theta \qquad \mathscr{H}_0|2p_z\rangle = -\frac{1}{8}|2p_z\rangle \tag{1.433}$$

である。$\mathscr{E}(F)$ の上限 $E(F)$ を求めよ。

また、$E(F)$ をテイラー展開 $(1+x)^{\frac{1}{2}} \simeq 1 + \frac{1}{2}x$ を用いて F の多項式に書き換え、

$$E(F) = E(0) - \frac{1}{2}\alpha F^2 + \cdots \tag{1.434}$$

と比較することにより、近似的な双極子分極率 α を求めよ。

解

試行関数 $|\tilde{\Phi}\rangle$ での最良近似は、

$$\begin{bmatrix} \langle 1s|\mathscr{H}|1s\rangle & \langle 1s|\mathscr{H}|2p_z\rangle \\ \langle 2p_z|\mathscr{H}|1s\rangle & \langle 2p_z|\mathscr{H}|2p_z\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = E(F) \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \tag{1.435}$$

を満たす (c_1, c_2) である。左辺の係数行列の各要素の値を求めていく。

$$\begin{aligned}
\langle 1s|\mathscr{H}|1s\rangle &= \langle 1s|(\mathscr{H}_0 + Fr\cos\theta)|1s\rangle && (1.436)\\
&= \langle 1s|\left(\mathscr{H}_0|1s\rangle + Fr\cos\theta\,|1s\rangle\right) && (1.437)\\
&= -\frac{1}{2}\langle 1s|1s\rangle + F\langle 1s|r\cos\theta|1s\rangle && (1.438)\\
&= -\frac{1}{2}\cdot 1 + F\int_0^\infty \mathrm{d}r \int_0^\pi \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\; r^2\sin\theta\cdot\left(\pi^{-\frac{1}{2}}\exp(-r)\right)^*\cdot r\cos\theta\cdot\pi^{-\frac{1}{2}}\exp(-r) && (1.439)\\
&= -\frac{1}{2} + F\cdot 2\pi\cdot\pi^{-1}\int_0^\infty \mathrm{d}r\; r^3\exp(-2r)\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\;\sin\theta\cos\theta && (1.440)\\
&= -\frac{1}{2} + F\int_0^\infty 2t\mathrm{d}t\cdot t^6\exp(-2t^2)\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\;\sin 2\theta \qquad (r=t^2) && (1.441)\\
&= -\frac{1}{2} + 2F\int_0^\infty \mathrm{d}t\; t^7\exp(-2t^2)\left[-\frac{1}{2}\cos 2\theta\right]_0^\pi && (1.442)\\
&= -\frac{1}{2} && (1.443)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle 1s|\mathscr{H}|2p_z\rangle &= \langle 1s|\mathscr{H}_0|2p_z\rangle + F\langle 1s|r\cos\theta|2p_z\rangle && (1.444)\\
&= -\frac{1}{8}\langle 1s|2p_z\rangle \\
&\quad + F\int_0^\infty \mathrm{d}r\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\; r^2\sin\theta\cdot\left(\pi^{-\frac{1}{2}}\exp(-r)\right)^*\cdot r\cos\theta\cdot(32\pi)^{-\frac{1}{2}}r\exp\left(-\frac{r}{2}\right)\cos\theta && (1.445)\\
&= -\frac{1}{8}\cdot 0 + F\cdot 2\pi\cdot 32^{-\frac{1}{2}}\pi^{-1}\int_0^\infty \mathrm{d}r\; r^4\exp\left(-\frac{3}{2}r\right)\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\;\sin\theta\cos^2\theta && (1.446)\\
&= F\cdot 2^{1-\frac{5}{2}}\int_0^\infty 2t\mathrm{d}t\; t^8\exp\left(-\frac{3}{2}t^2\right)(-1)\int_0^\pi \mathrm{d}(\cos\theta)\;\cos^2\theta && (1.447)\\
&= F\cdot 2^{-\frac{1}{2}}\int_0^\infty \mathrm{d}t\; t^9\exp\left(-\frac{3}{2}t^2\right)(-1)\left[\frac{1}{3}\cos^3\theta\right]_0^\pi && (1.448)\\
&= F\cdot 2^{-\frac{1}{2}}\frac{4!}{2\left(\frac{3}{2}\right)^5}\left(-\frac{1}{3}\right)\left((-1)^3 - 1^3\right) && (1.449)\\
&= -F\cdot 2^{-\frac{1}{2}}\cdot\frac{2^3\cdot 3}{2^{-4}\cdot 3^5}\cdot 3^{-1}\cdot(-2) && (1.450)\\
&= F\cdot 2^{-\frac{1}{2}+3+4+1}\cdot 3^{1-5-1} = F\cdot 2^{\frac{15}{2}}\cdot 3^{-5} && (1.451)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle 2p_z|\mathscr{H}|1s\rangle &= \langle 1s|\mathscr{H}|2p_z\rangle^* && (1.452)\\
&= F\cdot 2^{\frac{15}{2}}\cdot 3^{-5} && (1.453)
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&\langle 2p_z|\mathscr{H}|2p_z\rangle && (1.454)\\
&= \langle 2p_z|\mathscr{H}_0|2p_z\rangle + F\langle 2p_z|r\cos\theta|2p_z\rangle && (1.455)\\
&= -\frac{1}{8}\langle 2p_z|2p_z\rangle \\
&\quad + F\int_0^\infty \mathrm{d}r \int_0^\pi \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi\ r^2\sin\theta \cdot \left((32\pi)^{-\frac{1}{2}} r\exp\left(-\frac{r}{2}\right)\cos\theta\right)^* \cdot r\cos\theta \cdot (32\pi)^{-\frac{1}{2}} r\exp\left(-\frac{r}{2}\right)\cos\theta && (1.456)\\
&= -\frac{1}{8} + F\cdot 2\pi\cdot(32\pi)^{-1}\int_0^\infty \mathrm{d}r\ r^5\exp(-r)\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\ \sin\theta\cos^3\theta && (1.457)\\
&= -\frac{1}{8} + F\cdot 2^{1-5}\int_0^\infty \mathrm{d}r\ r^5\exp(-r)(-1)\int_0^\pi \mathrm{d}(\cos\theta)\cos^3\theta && (1.458)\\
&= -\frac{1}{8} - F\cdot 2^{-4}\int_0^\infty \mathrm{d}r\ r^5\exp(-r)\left[\frac{1}{4}\cos^4\theta\right]_0^\pi && (1.459)\\
&= -\frac{1}{8} && (1.460)
\end{aligned}
$$

である。従って、固有値方程式は

$$
\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & 2^{\frac{15}{2}}3^{-5}F \\ 2^{\frac{15}{2}}3^{-5}F & -\frac{1}{8} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = E(F) \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \tag{1.461}
$$

となる。よって、固有値 ($\mathscr{E}(F)$ の上限) は

$$
\begin{aligned}
E_1(F) &= \frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2} - \frac{1}{8} - \sqrt{\left(-\frac{1}{8}+\frac{1}{2}\right)^2 + 4\cdot\left(2^{\frac{15}{2}}3^{-5}F\right)^2}\right) && (1.462)\\
&= \frac{1}{2}\left(-\frac{5}{8} - \sqrt{2^{-6}3^2 + 2^{2+15}3^{-10}F^2}\right) && (1.463)\\
&= \frac{1}{2}\left(-\frac{5}{8} - 2^{-3}3^1\sqrt{1+2^{23}3^{-12}F^2}\right) && (1.464)
\end{aligned}
$$

である。$|2^{23}3^{-12}F^2| << 1$ であるならば、テイラー展開により

$$
\begin{aligned}
E_1(F) &\simeq \frac{1}{2}\left(-\frac{5}{8} - 2^{-3}3^1\left(1+\frac{1}{2}2^{23}3^{-12}F^2\right)\right) && (1.465)\\
&= \frac{1}{2}\left(-1 - 2^{19}3^{-11}F^2\right) = E_1(0) - \frac{1}{2}2^{19}3^{-11}F^2 && (1.466)
\end{aligned}
$$

従って、

$$
E(F) = E(0) - \frac{1}{2}\alpha F^2 + \cdots \tag{1.467}
$$

と比較することにより、α は

$$
\begin{aligned}
\alpha &= 2^{19}3^{-11} && (1.468)\\
&= 2.959\cdots = 2.96 && (1.469)
\end{aligned}
$$

と求まる。