量子力学 10 講 復習ノート

2022 年 6 月 4 日

1　第 9 講 運動方程式

今までは，測定に時間がかからない（一瞬で行われる，物理量に影響がない）状況で，測定する前後の一瞬を考えてきた．しかし現実の系は当然時間変化する．これを定量的に扱うことを考える．[*1]

1.1　時間発展演算子

まず時間を進める演算子 $\hat{U}(t)$ を導入する．ここで $\hat{U}(t)$ はユニタリであることを要請する：$\hat{U}(t)^\dagger\hat{U}(t)=\hat{I}$．次の性質がある．

$$
\begin{aligned}
&\hat{U}(t)\hat{U}(s)=\hat{U}(t+s)\\
&\hat{U}(0)=\hat{I}\\
&\hat{U}(t)^\dagger=(\hat{U}(t))^{-1}=\hat{U}(-t)
\end{aligned}
$$

上から，「t の経過と s の経過を合わせると $t+s$ の経過になる」，「初期状態は変化をうまない」，「逆演算は逆向きの時間経過」という意味．

1.2　シュレディンガー描像とハイゼンベルグ描像

量子系の時間変化の記述には，シュレディンガー描像とハイゼンベルグ描像という，二通りの流儀がある：

シュレディンガー描像　状態が変化，物理量は不変．
ハイゼンベルグ描像　物理量が変化，状態は不変．

シュレディンガーとハイゼンベルグは，同時期に別々に上記の描像を発表した．これらは同値な結果を与える．

シュレディンガー描像では，状態が変化し，それは次のように表される．

$$|\psi(t)\rangle=\hat{U}(t)\,|\psi(0)\rangle$$

[*1] 教科書とは異なる順序で議論を組み立てる．自主ゼミで発表した．得られる結果は変わらない．

このとき物理量の期待値は

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}\rangle_t &= \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle \\ &= \langle\hat{U}(t)\psi|\hat{A}|\hat{U}(t)\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\hat{U}(t)^\dagger\hat{A}\hat{U}(t)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}(t)|\psi\rangle\end{aligned}$$

と表される．一行目の式がシュレディンガー描像，三行目の式がハイゼンベルグ描像を表している．

1.3　シュレディンガー描像

1.3.1　確率の保存

まず，Born の確率公式を使って考察してみよう．時間変化を含めた Born の確率公式は以下のようになる．

$$\mathbb{P}(|\chi\rangle \xleftarrow{t} |\psi\rangle) = |\langle\chi|\psi(t)\rangle|^2 = |\langle\chi|\hat{U}(t)|\psi\rangle|^2$$

これは，初期状態 $|\psi\rangle$ が時刻 t には状態 $|\psi(t)\rangle$ に変化して，そのときに $|\chi\rangle$ に瞬時に遷移する確率を表している．ここでは $|\chi\rangle$ を時間によらず一定にとったが，$|\chi\rangle$ も $|\psi\rangle$ とともに時間変化させるとどうなるだろう？時刻 t においてこの確率は以下のようになる．

$$\mathbb{P}(|\chi(t)\rangle \leftarrow |\psi(t)\rangle) = |\langle\chi(t)|\psi(t)\rangle|^2 = |\langle\hat{U}(t)\chi|\hat{U}(t)\psi\rangle|^2 = |\langle\chi|\hat{U}(t)^\dagger\hat{U}(t)|\psi\rangle|^2 = |\langle\chi|\psi\rangle|^2$$

つまり，遷移先の状態もともに時間変化させれば，確率は保存される．

1.3.2　シュレディンガー方程式

量子系の状態変化を記述する運動方程式，シュレディンガー方程式を要請する．

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

ここで $\hat{H}$ はハミルトニアン（Hamiltonian）で，エネルギーの次元を持つ．ここでは，ハミルトニアンが時間に依存しない状況を考える．シュレディンガー方程式に $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi\rangle$ を代入する．

$$i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t)}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}\hat{U}(t)|\psi\rangle$$

ここで初期状態 $|\psi\rangle$ は好きに決められるので，

$$i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t)}{\partial t} = \hat{H}\hat{U}(t)$$

が必要．これは $\hat{U}(t)$ についての簡単な微分方程式で，初期条件 $\hat{U}(0) = \hat{I}$ と合わせてこれを解くと

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

となる．ここで

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^n$$

である．時間発展演算子には，ユニタリーであることを要請していた．これを確認すると，

$$\begin{aligned}\hat{U}(t)^\dagger\hat{U}(t) &= e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^\dagger t}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{H}^\dagger-\hat{H})t}\end{aligned}$$

これが恒等演算子 $\hat{I}$ に等しいので，$\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ となる．つまり，ハミルトニアンは自己共役である．

1.3.3　エネルギー固有状態

ハミルトニアンは自己共役でであるから，物理量を表しうる．実際，ハミルトニアンはエネルギーを表す物理量であり，その固有値が系のエネルギーとみなされる．ハミルトニアンを実際に構成して，具体的に固有値問題を解く（エネルギーを求める）ことは次章にまわして，固有状態のときについて考えよう．固有状態ということは，すなわち状態ベクトルが

$$\hat{H}\,|\phi\rangle = E\,|\phi\rangle$$

を満たすということ．離散スペクトルならば，上式を満たすような固有ベクトルを集めて CONS が作れるので，このときは測定値は 100% で E になる．この固有状態の時間発展を考える．

$$\begin{aligned}|\phi(t)\rangle &= \hat{U}(t)\,|\phi\rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\,|\phi\rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\,|\phi\rangle\end{aligned}$$

となる．ここで三番目の等号は e^z の定義を振り返ればわかる．これを利用して，他の（固定した）状態への遷移確率は,

$$\mathbb{P}(|\chi\rangle \xleftarrow{t} |\phi\rangle) = |\,\langle\chi|\phi(t)\rangle\,|^2 = |e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\,\langle\chi|\phi\rangle\,|^2 = |\,\langle\chi|\phi\rangle\,|^2$$

となる．つまり，任意の状態への遷移確率は変化しない．この著しい特徴から，エネルギー固有状態は定常状態と呼ばれる．

1.4　ハイゼンベルグ描像

今までシュレディンガー描像で考えてきたが，ハイゼンベルグ描像を見てみよう．ハイゼンベルグ描像は，状態が不変で，物理量が変化するとみなすのだった．この物理量の変化というのは次のように表される．

$$\hat{A}(t) = \hat{U}(t)^\dagger \hat{A}\hat{U}(t)$$

ここで $\hat{U}(t)$ は時間発展演算子で，シュレディンガー描像でみてきたものと性質は変わらない．シュレディンガー描像で得られた結果 $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ を用いて，物理量の時間変化を求める．

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\hat{A}(t)}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}\hat{U}(t)^\dagger}{\mathrm{d}t}\hat{A}\hat{U}(t) + \hat{U}(t)^\dagger\hat{A}\frac{\mathrm{d}\hat{U}(t)}{\mathrm{d}t} \\ &= \frac{i}{\hbar}\hat{H}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} - e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\frac{i}{\hbar}\hat{H} \\ &= -\frac{i}{\hbar}\left(\hat{A}(t)\hat{H} - \hat{H}\hat{A}(t)\right) = -\frac{i}{\hbar}[\hat{A}(t),\hat{H}]\end{aligned}$$

これがハイゼンベルグ描像における基礎方程式で，ハイゼンベルグ方程式である．ここではシュレディンガー方程式からハイゼンベルグ方程式が導出された．

一方で，ハイゼンベルグ方程式を要請としてシュレディンガー方程式を導出することもできる．まず，ハイ

ゼンベルグ方程式から，

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\hat{A}(t)}{\mathrm{d}t} &= -\frac{i}{\hbar}(\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U} - \hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}) \\
&= -\frac{i}{\hbar}\hat{U}(t)^\dagger(\hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A})\hat{U}(t) \\
&= \hat{U}(t)^\dagger\left[\hat{A}, -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\right]\hat{U}(t)
\end{aligned}
$$

ここで，ハミルトニアンが時間変化しないことを用いた．一方で $\hat{A}(t) = \hat{U}(t)^\dagger\hat{A}\hat{U}(t)$ より

$$
\frac{\mathrm{d}\hat{A}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\hat{U}^\dagger}{\mathrm{d}t}\hat{A}\hat{U} + \hat{U}^\dagger\hat{A}\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}
$$

である．$\hat{U}(t)\hat{U}(t)^\dagger = \hat{I}$ から，この両辺を時間微分して，

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^\dagger + \hat{U}\frac{\mathrm{d}\hat{U}^\dagger}{\mathrm{d}t} &= 0 \\
\hat{U}\frac{\mathrm{d}\hat{U}^\dagger}{\mathrm{d}t} &= -\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^\dagger
\end{aligned}
$$

となることを使うと，

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\hat{A}(t)}{\mathrm{d}t} &= \hat{U}^\dagger\hat{U}\frac{\mathrm{d}\hat{U}^\dagger}{\mathrm{d}t}\hat{A}\hat{U} + \hat{U}^\dagger\hat{A}\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^\dagger\hat{U} \\
&= \hat{U}(t)^\dagger\left(\hat{A}\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^\dagger - \frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^\dagger\hat{A}\right)\hat{U}(t) \\
&= \hat{U}(t)^\dagger\left[\hat{A}, \frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^\dagger\right]\hat{U}(t)
\end{aligned}
$$

だから，二通りの表し方を比較して，

$$
\hat{U}(t)^\dagger\left[\hat{A}, -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\right]\hat{U}(t) = \hat{U}(t)^\dagger\left[\hat{A}, \frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^\dagger\right]\hat{U}(t)
$$

これが任意の $\hat{A}$ で成り立つのだから，

$$
\begin{aligned}
-\frac{i}{\hbar}\hat{H} &= \frac{\mathrm{d}\hat{U}(t)}{\mathrm{d}t}\hat{U}(t)^\dagger \\
-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}(t) &= \frac{\mathrm{d}\hat{U}(t)}{\mathrm{d}t}
\end{aligned}
$$

である．この微分方程式を解けば，$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ がわかる．シュレディンガー描像では状態が時間変化する：$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)\,|\psi\rangle$．これに先程求めた $\hat{U}(t)$ を用いて時間微分すれば，シュレディンガー方程式が出てくる．

2　10 講 調和振動子

古典力学からのアナロジーで，量子力学でも調和振動子を考える．古典力学の調和振動子の力学的エネルギーは，位置 x と運動量 p，角振動数 ω によって

$$
E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2
$$

と表される．古典力学からのアナロジーで，これらをすべて演算子に置き換えたものをハミルトニアンとする．

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2$$

ハイゼンベルグ方程式を考えると，運動方程式は次のようになる．

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\hat{P}}{\mathrm{d}t} &= -\frac{i}{\hbar}[\hat{P}(t), \hat{H}] = -m\omega^2\hat{X} \\ \frac{\mathrm{d}\hat{X}}{\mathrm{d}t} &= -\frac{i}{\hbar}[\hat{X}(t), \hat{H}] = \frac{\hat{P}}{m}\end{aligned}$$

この計算には正準交換関係 $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar\hat{I}$ を使った．この運動方程式を解くことを考える．第一式に i をかけ，第二式に $m\omega$ をかけたものを足し合わせると，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(m\omega\hat{X} + i\hat{P}\right) = -i\omega(m\omega\hat{X} + i\hat{P})$$

となる．したがって

$$m\omega\hat{X}(t) + i\hat{P}(t) = e^{-i\omega t}(m\omega\hat{X}(0) + i\hat{P}(0))$$

両辺を比較することで解が得られる．

$$\begin{aligned}\hat{X}(t) &= \hat{X}(0)\cos\omega t + \frac{1}{m\omega}\hat{P}(0)\sin\omega t \\ \hat{P}(t) &= \hat{P}(0)\cos\omega t - m\omega\hat{X}(0)\sin\omega t\end{aligned}$$

次にハミルトニアンの固有値問題を考える．ここで先程計算で利用した式を $\hat{A} = m\omega\hat{X} + i\hat{P}$ とおく．すると，

$$[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = 2m\hbar\omega\hat{I}$$

となるので，これが $\hat{I}$ となるように係数を付け足したものを新しく $\hat{A}$ とおく：$\hat{A} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{X} + i\hat{P})$．$[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = \hat{I}$ である．これを用いて $\hat{H}$ を書き直す．

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hbar\omega\left(\hat{A}^\dagger\hat{A} + \frac{1}{2}\hat{I}\right) \\ &= \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\hat{I}\right)\end{aligned}$$

ここで $\hat{N} = \hat{A}^\dagger\hat{A}$ とおいた．ハミルトニアンの固有値問題は $\hat{N}$ の固有値問題を解くことに置き換わった．$\hat{N}$ と $\hat{A}$ の性質は次のようになる．どれも簡単な計算をすればわかる．

$$\begin{aligned}[\hat{N}, \hat{A}] &= -\hat{A} \\ [\hat{N}, \hat{A}^\dagger] &= \hat{A}^\dagger\end{aligned}$$