量子力学A演習 解答例 （**演習８**） v1.4

1. $|\psi>$、$|\phi>$ を任意の状態ベクトルとするとき、お互いがエルミート共役の関係にある演算子$\hat{M}$と$\hat{M}^\dagger$の間には次の関係式が成りたつ（演習４の(3)、式(3-4-28)で$B \to \phi$, $A \to \psi$ とおいた）。

$$<\phi|\hat{M}|\psi> = <\psi|\hat{M}^\dagger|\phi>^* \qquad (3\text{-}8\text{-}48)$$

$\hat{M}$が$\hat{M}(\hat{x},\hat{p})$で表される場合、$\hat{x} \to x, \hat{p} \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ で置き換えた$M(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})$を定義すると、

位置表示の波動関数の表式では、(3-8-48)式のエルミート共役の関係は(3-8-17)式を使って次式で表される。

（エルミート共役の関係）
$$\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*(x)M\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}(M^\dagger\phi(x))^*\psi(x)dx \qquad (3\text{-}8\text{-}49)$$

(1) $\hat{x}^\dagger = \hat{x}$ （$\hat{x}$ はエルミート演算子）

（解答例）(3-8-49)の左辺は、$\hat{M} = \hat{x}\ (\to x)$ の置き換えをして、

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*(x)\hat{x}\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*(x)x\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*(x)x^*\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}(x\phi(x))^*\psi(x)dx$$

ここで、$x^* = x$ （実数）であることを使った。この式の最右辺を、(3-8-49)式の右辺 $\int_{-\infty}^{+\infty}(\hat{M}^\dagger\phi(x))^*\psi(x)dx$ と比べると、$\hat{M}^\dagger = \hat{x}^\dagger$ が x に対応しているので、 $\hat{x}^\dagger = \hat{x}$ となる（よって、$\hat{x}$ はエルミート演算子）

(2) $\hat{i}^\dagger = -\hat{i}$

（解答例）

(3-8-49)の左辺で $\hat{M} = \hat{i}\ (\to i)$ の置き換えをして、

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*(x)\hat{i}\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*(x)i\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}(-i\phi(x))^*\psi(x)dx$$

これを、(3-8-49)式の右辺と比べると $\hat{M}^\dagger = \hat{i}^\dagger$ が $-i$ に対応しているので、$\hat{i}^\dagger = -\hat{i}$.（$\hat{i}$ はエルミート演算子ではない）

(3) $\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger = -\frac{\partial}{\partial x}$

（解答例）

部分積分を使うと、$\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)dx = [\phi^*(x)\psi(x)]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial\phi^*(x)}{\partial x}\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}(-\frac{\partial}{\partial x}\phi(x))^*\psi(x)dx$

ここで、$[\phi^*(x)\psi(x)]_{-\infty}^{+\infty} = 0$ であることを使った（$\phi^*(\pm\infty) = 0, \psi(\pm\infty) = 0$）.

これを、エルミート共役の関係の定義 (3-8-49)式 と比べると、$\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^\dagger = -\frac{\partial}{\partial x}$

（ $\frac{\partial}{\partial x}$ はエルミート演算子では無い。）

(4) $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ はエルミート演算子

（解答例）

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)dx = [\phi^*(x)(-i\hbar)\psi(x)]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} -i\hbar\frac{\partial\phi^*(x)}{\partial x}\psi(x)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\phi(x))^*\psi(x)dx$$

これを、エルミート共役の関係の定義 (3-8-49)式 と比べると$\hat{p} = \hat{p}^\dagger$ （$\hat{p}$ はエルミート演算子）

2. 時間に依存しないケット版のSchrödinger方程式(3.7.18)を再掲する。

$$\hat{H}\,|E_j> = E_j|E_j> \qquad (3.8.50)$$

ここで、$|E_j>$ はハミルトニアン $\hat{H}$ の固有状態で、E_j は固有値である。

この両辺に左から $<x|$ をかける事により、**波動関数で表した時間に依存しないSchrödinger方程式**（位置表示での定常状態のSchrödinger方程式とも言う）。

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\varphi_j(x) = E_j\varphi_j(x) \qquad (3.8.51)$$

を求めよ。ただし、$<x|E_j> = \varphi_j(x)$ とした。$\varphi_j(x)$ はx表示でのエネルギー固有関数とも呼ばれる。

（$|E_j> = \int \varphi_j(x)|x>dx$）

（解答例） $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$

(3-8-50)式の両辺に左から $<x|$ をかけると、

右辺は、$<x|E_j|E_j> = E_j <x|E_j> = E_j\varphi_j(x),$

左辺は、$<x|\hat{H}|E_j> = <x|\left(\dfrac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{x})\right)|E_j>.$ 　　ここで、(3-8-31)式 $<x|\hat{p} = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}<x|$ を使うと、

$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}<x|E_j> + V(x)<x|E_j> = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi_j(x) + V(x)\varphi_j(x).$ よって、(3-8-51)式が得られる。

3. 時間に依存したSchrödinger方程式の形式解は (3.7.20)で表された。

$$|\Psi(t)> = \sum_j \alpha_j(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t}|E_j> \qquad (3.8.52)$$

これの両辺に左から $<x|$ をかける事により、形式解の位置表示を求めよ。

$$\Psi(x,t) = \sum_j \alpha_j(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t}\varphi_j(x) \qquad (3.8.53)$$

（解答例）

両辺に左から $<x|$ をかけると、$<x|\Psi(t)> = <x|\sum_j \alpha_j(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t}|E_j>$

左辺は $<x|\Psi(t)> = \Psi(x,t)$、

右辺は $<x|\sum_j \alpha_j(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t}|E_j> = \sum_j \alpha_j(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t}<x|E_j> = \sum_j \alpha_j(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t}\varphi_j(x)$

量子力学A演習 解答例 （**演習9**）

1. 「位置表示での時間に依存するSchrödinger方程式」は、 式 (3-8-55)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\Big)\,\Psi(x,t)$$

であった。$\Psi(x,t)=\varphi(x)\cdot f(t)$ と置き、$\varphi(x)$ と $f(t)$ が満たす２つの方程式を求める（変数分離法）。

(1) $\varphi(x)$の満たす方程式は「位置表示の時間に依存しないSchrödinger方程式」式(3-8-61)

$$\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\Big)\varphi(x)=E\varphi(x)$$

になっていることを示せ。

(2) $f(t)$ の満たす方程式を書き、$f(t)=Ce^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ が解であることを示せ。

（解答例）

(1)
$$i\hbar\frac{\partial f(t)}{\partial t}\varphi(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}\cdot f(t)+V(x)\ \varphi(x)\cdot f(t)$$

両辺を$\varphi(x)\cdot f(t)$で割る

$$i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{\partial f(t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi(x)}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}+V(x)$$

（tのみの関数 ＝ xのみの関数）

この式が恒等的に成り立つのは、左辺＝右辺＝定数（$=E$ とする）の場合のみ。

$$\begin{cases} i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{\partial f(t)}{\partial t}=E & \to i\hbar\frac{df(t)}{dt}=Ef(t) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi(x)}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}+V(x)=E & \to \Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\Big)\varphi(x)=E\varphi(x) \end{cases}$$

よって、$\varphi(x)$の満たす方程式は式(3-8-61)になっている。

(2) $i\hbar\frac{df(t)}{dt}=Ef(t)$ はすぐ解けて、$f(t)=Ce^{-\frac{iE}{\hbar}t}$.　　ここで、Cは定数

2. 位置表示での位置の固有関数は(3-8-90)式 $u_{x'}(x)\equiv\ <x|x'>\ =\delta(x-x')$ であることを求めよ。

（解答例） 任意の状態$|\alpha>$ は $\hat{x}$ の固有関数を基底にして、式(3-8-87)のように、

$|\alpha>=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_\alpha(x)|x>dx$ と書ける。$|\alpha>$として$|x'>$をとると

$$|x'>=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_{x'}(x)|x>dx=\int_{-\infty}^{+\infty}u_{x'}(x)|x>dx.\quad (*)$$

ここで、$\Psi_{x'}(x)$ は(3-8-10）式のように「位置表示での波動関数」であるが、元の状態$|\alpha>$に位置の固有関数$|x'>$を取ったので、$\Psi_{x'}(x)$は位置表示での「位置の固有関数」と呼べる。なので、$\Psi_{x'}(x)=u_{x'}(x)$ と記号を書き換えた。

（＊）式より $u_{x'}(x)=\ <x|x'>$.（(3-8-11)式参照）。

一方、 $\hat{x}$ の固有関数は正規直交基底をなすので、 $<x|x'>\ =\delta(x-x')$. である（(3-8-13)式参照）。

よって、$u_{x'}(x)=\ <x|x'>\ =\delta(x-x')$.

3. 位置表示での運動量の固有関数(3-8-76)式 $<x|p> = u_p(x) = c_p e^{+i\frac{p}{\hbar}x}$ において、規格化定数 c_p が $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ であることを $<x|x'> = <x|\hat{I}|x'> = \int_{-\infty}^{+\infty} <x|p><p|x'>dp$ から出発して求めよ。

（hint: 左辺、右辺を別々に計算し、最後に等しいと置く。右辺は、 $<x|p> = c_p e^{+i\frac{p}{\hbar}x}$ とデルタ関数の表式 $\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx}dk$ を使う）

（解答例）

左辺： $<x|x'> = \delta(x-x')$

右辺：
$$\int_{-\infty}^{+\infty} <x|p><p|x'>dp = \int_{-\infty}^{+\infty} u_p(x)u_p^*(x')dp = \int_{-\infty}^{+\infty} c_p e^{+i\frac{p}{\hbar}x} c_p^* e^{-i\frac{p}{\hbar}x'} dp$$
$$= |c_p|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{+i\frac{p}{\hbar}(x-x')}dp = |c_p|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{+ik(x-x')}\hbar dk = \hbar |c_p|^2 2\pi\delta(x-x')$$

ここで、$p = \hbar k$ とおき、$\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x')}dk$ を使った。

左辺＝右辺より、

$$\delta(x-x') = \hbar |c_p|^2 2\pi \delta(x-x')$$
$$|c_p|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \quad \to c_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad \text{（正の値を採用）}$$

4. 連続固有値を持つ $\hat{x}$, $\hat{p}$ に対応する行列の行列要素（基底を$\{|x>\}$に選ぶ）を $<x|\hat{x}|x'>$, $<x|\hat{p}|x'>$ のように考えた時、

(1) $<x|\hat{x}|x'>$ は対角行列、かつ、エルミート行列であることを示せ。

(2) $<x|\hat{p}|x'>$ はエルミート行列であることを示せ。

（hint: δ 関数は偶関数なので、$\delta(-x) = \delta(x)$）

（解答例）

(1)　$\hat{x}$を行列で表示した場合の x 行 x' 列は

$$<x|\hat{x}|x'> = x'<x|x'> = x\delta(x-x')$$

$x = x'$ の時のみ０でない値を持つので、対角行列

$\hat{x}^\dagger$ を行列で表示した場合の x 行 x' 列は

$$<x|\hat{x}^\dagger|x'> = <x'|\hat{x}|x>^* = (x<x'|x>)^* = (x\delta(x'-x))^* = x\delta(x-x') = <x|\hat{x}|x'>$$

ここで、δ 関数は偶関数なので、$\delta(x'-x) = \delta(x-x')$、また、$x^* = x$ を使った。

ゆえに、$\hat{x}$に対応する行列＝$\hat{x}^\dagger$に対応する行列 なので、エルミート行列

(2)　$\hat{p}$を行列で表示した場合の x 行 x' 列は

$$<x|\hat{p}|x'> = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}<x|x'> = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')$$

$$<x|\hat{p}^\dagger|x'> = <x'|\hat{p}|x>^* = (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}<x'|x>)^* = i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')$$ （最後の式の変形は下の注を見よ）

ゆえに、$\hat{p}$に対応する行列＝$\hat{p}^\dagger$に対応する行列 なので、エルミート行列

（注）　$X \equiv x'-x$ とおくと、$\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x) = \frac{\partial\delta(X)}{\partial X}\frac{\partial X}{\partial x'} = \frac{\partial\delta(X)}{\partial X}$ 、$\frac{\partial}{\partial x}\delta(x'-x) = \frac{\partial\delta(X)}{\partial X}\frac{\partial X}{\partial x} = -\frac{\partial\delta(X)}{\partial X}$

よって、 $\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x) = -\frac{\partial}{\partial x}\delta(x'-x) = -\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')$.　　最後のところは、$\delta(x'-x) = \delta(x-x')$ を使った。