

量子力学A演習 解答例 (演習7) v1.4

1. 状態 $|A\rangle$ で、ある観測可能な物理量 M を測定した場合、その対応する演算子 \hat{M} の固有状態 $\{|\lambda_j\rangle\}$ のどれかが観測されるのであるが、それぞれの観測される確率をすべて足し合わせた全確率が1になるためには $|A\rangle$ は規格化されている必要があることを示せ

(解答例) $|A\rangle = \sum_{j=1}^N \alpha_j |\lambda_j\rangle$ の時、状態が $|\lambda_j\rangle$ に収縮し、固有値 λ_j が観測される確率を $P(\lambda_j)$ とすると、

$$\text{全確率は } \sum_{j=1}^N P_j(\lambda_j) = \sum_{j=1}^N \alpha_j^* \alpha_j = \sum_{j=1}^N \langle A | \lambda_j \rangle \langle \lambda_j | A \rangle = \langle A | \left(\sum_{j=1}^N |\lambda_j\rangle \langle \lambda_j| \right) | A \rangle = \langle A | A \rangle .$$

ここで、 $\sum_{j=1}^N |\lambda_j\rangle \langle \lambda_j| = \hat{I}$ を使った。よって、 $\sum_{j=1}^N P_j(\lambda_j) = 1$ (全確率が1) のためには、 $\langle A | A \rangle = 1$ (規格化) の必要がある。

2. $\hat{U}(t) = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}$ の時、 $\hat{U}^\dagger(t)$ を求め、 $\hat{U}(t)$ がユニタリ演算子であることを示せ

(解答例) \hat{H} はエルミート演算子なので、 $\hat{U}^\dagger(t) = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} = e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}$ 。 $\hat{U}\hat{U}^\dagger(t) = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} e^{i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} = \hat{I}$ 。 よって、 $\hat{U}(t)$ はユニタリ演算子。

3. 有限時間の時間発展演算子 $\hat{U}(t) = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}$ (3.7.16)式を使いスピン状態の時間変化に関する問題を解いてみよう。

今、z軸方向に向いた一様な静磁場 (B_z) 中に1つの電子スピンのあったとする。電子スピンは磁気モーメントを持つので、 $\sigma_z = +1$ の時 (磁場にスピンが平行の時) はエネルギー E が高く、 $\sigma_z = -1$ の時 (磁場にスピンが反平行の時) は E が低くなる。また、 E は磁場の大きさにも比例するので、電子スピンのエネルギーに対応する演算子、ハミルトニアン \hat{H} は B_z と $\hat{\sigma}_z$ の積 (B_z は $\hat{\sigma}_z$ にかかるただの数となる) で書ける。すなわち、 $\hat{H} \propto B_z \hat{\sigma}_z$ 。

この時、比例定数と B_z の積を、後で式が見やすくなるように $\frac{\hbar\omega}{2}$ と書くことにすると、 \hat{H} は次のようになる。

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \hat{\sigma}_z \quad (3.7.38) . \quad \text{以下の問いに答えよ。}$$

(1) $\hat{\sigma}_z$ の固有状態はハミルトニアン \hat{H} (3.7.38) の同時固有状態 (σ_z も E も同時に正確に決めることができる状態) であることを確かめよ。また、 \hat{H} の固有値を求めなさい。

(解答例)

$$\hat{\sigma}_z |u\rangle = (+1)|u\rangle, \quad \hat{H}|u\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \hat{\sigma}_z |u\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} (+1)|u\rangle, \quad (\text{演1})$$

$$\hat{\sigma}_z |d\rangle = (-1)|d\rangle, \quad \hat{H}|d\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} \hat{\sigma}_z |d\rangle = \frac{\hbar\omega}{2} (-1)|d\rangle, \quad (\text{演2})$$

なので、 $\hat{\sigma}_z$ の固有状態 $|u\rangle, |d\rangle$ は \hat{H} の固有状態でもある事がわかる (すなわち、 $|u\rangle, |d\rangle$ は $\hat{\sigma}_z$ と \hat{H} の同時固有状態)。

\hat{H} の固有値は $|u\rangle, |d\rangle$ の状態に対して、それぞれ $\frac{\hbar\omega}{2}, -\frac{\hbar\omega}{2}$ (演3)

(参考) 同時固有状態を持つことは $[\hat{\sigma}_z, \hat{H}] = [\hat{\sigma}_z, \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{\sigma}_z] = \frac{1}{2}\hbar\omega[\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_z] = 0$ となることからわかる (3-6-3節参照)。

(2) 初期状態が $|\Psi(0)\rangle = \alpha_u |u\rangle + \alpha_d |d\rangle$ の時、時刻 t での状態、 $|\Psi(t)\rangle$ を求めよ。

(解答例) (3.7.16)式より、有限時間間隔 t の時間発展演算子 $\hat{U}(t)$ は $\hat{U}(t) = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t}$ となるので、

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\Psi(0)\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t} |\Psi(0)\rangle = e^{-i\frac{\omega}{2}\hat{\sigma}_z t} |\Psi(0)\rangle = e^{-i\frac{\omega}{2}\hat{\sigma}_z t} (\alpha_u |u\rangle + \alpha_d |d\rangle)$$

$$= \alpha_u e^{-i\frac{\omega}{2}\hat{\sigma}_z t} |u\rangle + \alpha_d e^{-i\frac{\omega}{2}\hat{\sigma}_z t} |d\rangle = \alpha_u e^{-i\frac{\omega t}{2}} |u\rangle + \alpha_d e^{+i\frac{\omega t}{2}} |d\rangle \quad (\text{演4})$$

(参考) σ_z を観測する場合、時間がたっても α_u, α_d の位相が変化するだけなので $\sigma_z = +1, \sigma_z = -1$ がそれぞれ観測される確率 $P(u), P(d)$ は時間変化しない (確かめよ)。

(3) 初期状態が $\sigma_z = +1$ (すなわち、 $|u\rangle$) の時、時刻 t におけるスピンのz成分の期待値 $\langle \hat{\sigma}_z \rangle_t$ を求めよ。

(解答例) $|\Psi(0)\rangle = |u\rangle$ なので $|\Psi(0)\rangle = \alpha_u |u\rangle + \alpha_d |d\rangle$ において $\alpha_u = 1, \alpha_d = 0$ 。

$$\text{式 (演4) より、 } |\Psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}} |u\rangle \quad (\text{演5})$$

時間がたっても状態は $|u\rangle$ のままで、その方向を変えない。

$$\langle \hat{\sigma}_z \rangle_t = \langle \Psi(t) | \hat{\sigma}_z | \Psi(t) \rangle = e^{\frac{i\omega t}{2}} \langle u | \hat{\sigma}_z | u \rangle e^{-\frac{i\omega t}{2}} = \langle u | u \rangle = 1 \quad (\text{演6})$$

(4) 初期状態が $\sigma_x = +1$ (すなわち、 $|r\rangle$) の時、時刻 t での状態、 $|\Psi(t)\rangle$ を求めよ。

(解答例) $|\Psi(0)\rangle = |r\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|d\rangle$ なので、 $\alpha_u = \frac{1}{\sqrt{2}}$ 、 $\alpha_d = \frac{1}{\sqrt{2}}$ (演7)

式 (演4) より $|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-\frac{i\omega t}{2}}|u\rangle + e^{+\frac{i\omega t}{2}}|d\rangle)$ (演8)

(初期状態が $|r\rangle$ の時、どの時間で σ_z を測定しても、 $\sigma_z = +1$ と $\sigma_z = -1$ の結果が $1/2$ の確率で観測される (期待値は 0))

(5) (4)の $|\Psi(t)\rangle$ で σ_x を観測したところ、 $\sigma_x = +1$ か $\sigma_x = -1$ の測定結果が得られた。それぞれの観測される確率を求めよ。

(解答例) $|\Psi(t)\rangle = \alpha_r(t)|r\rangle + \alpha_l(t)|l\rangle$ と書いたとすると、

$$\sigma_x = +1 \text{ の観測される確率 } P(r) = \alpha_r^* \alpha_r = \langle \Psi(t) | r \rangle \langle r | \Psi(t) \rangle$$

$$\sigma_x = -1 \text{ の観測される確率 } P(l) = \alpha_l^* \alpha_l = \langle \Psi(t) | l \rangle \langle l | \Psi(t) \rangle$$

これらの式と (演7) (演8)より、

$$\begin{aligned} P(r) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{\frac{i\omega t}{2}} \langle u | + e^{-\frac{i\omega t}{2}} \langle d |) \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|u\rangle + |d\rangle) \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle u | + \langle d |) \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-\frac{i\omega t}{2}}|u\rangle + e^{+\frac{i\omega t}{2}}|d\rangle) \right) \\ &= \frac{1}{2}(e^{\frac{i\omega t}{2}} \langle u | u \rangle + e^{-\frac{i\omega t}{2}} \langle d | d \rangle) \frac{1}{2}(e^{-\frac{i\omega t}{2}} \langle u | u \rangle + e^{\frac{i\omega t}{2}} \langle d | d \rangle) = \left| \frac{1}{2}(e^{-\frac{i\omega t}{2}} + e^{\frac{i\omega t}{2}}) \right|^2 = \cos^2 \frac{\omega t}{2} \quad (\text{演9}) \end{aligned}$$

同様に、 $P(l) = \sin^2 \frac{\omega t}{2}$ (演10)

(演9)(演10)より、どの時間でも $P(r) + P(l) = 1$ になることがわかる。

(6) (4)の $|\Psi(t)\rangle$ での期待値 $\langle \sigma_x \rangle_t$ 、 $\langle \sigma_y \rangle_t$ 、 $\langle \sigma_z \rangle_t$ を求めよ。

(解答例)

$$\langle \hat{\sigma}_x \rangle_t = \langle \Psi(t) | \hat{\sigma}_x | \Psi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{\frac{i\omega t}{2}} \langle u | + e^{-\frac{i\omega t}{2}} \langle d |) \hat{\sigma}_x \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-\frac{i\omega t}{2}}|u\rangle + e^{+\frac{i\omega t}{2}}|d\rangle)$$

$$= \frac{1}{2}(\langle u | \hat{\sigma}_x | u \rangle + e^{-i\omega t} \langle d | \hat{\sigma}_x | u \rangle + e^{i\omega t} \langle u | \hat{\sigma}_x | d \rangle + \langle d | \hat{\sigma}_x | d \rangle) \quad (\text{演11})$$

一方、 $\hat{\sigma}_x$ の外積の表現 $\hat{\sigma}_x = |u\rangle \langle d| + |d\rangle \langle u|$ ((3-5-17) 式) を使うと、 $\hat{\sigma}_x |u\rangle = |d\rangle$ 、 $\hat{\sigma}_x |d\rangle = |u\rangle$ となるので、(演11)は

$$\langle \hat{\sigma}_x \rangle_t = \frac{1}{2}(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) = \cos \omega t \quad (\text{演12})$$

同様に、 $\langle \hat{\sigma}_y \rangle_t = \langle \Psi(t) | \hat{\sigma}_y | \Psi(t) \rangle = \frac{1}{2}(\langle u | \hat{\sigma}_y | u \rangle + e^{-i\omega t} \langle d | \hat{\sigma}_y | u \rangle + e^{i\omega t} \langle u | \hat{\sigma}_y | d \rangle + \langle d | \hat{\sigma}_y | d \rangle)$ (演13)

$\hat{\sigma}_y$ の外積の表現 $\hat{\sigma}_y = -i|u\rangle \langle d| + i|d\rangle \langle u|$ ((3-5-18) 式) を使うと、 $\hat{\sigma}_y |u\rangle = i|d\rangle$ 、 $\hat{\sigma}_y |d\rangle = -i|u\rangle$ となるので、(演13)は

$$\langle \hat{\sigma}_y \rangle_t = \frac{i}{2}(e^{-i\omega t} - e^{i\omega t}) = \frac{1}{2i}(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) = \sin \omega t \quad (\text{演14})$$

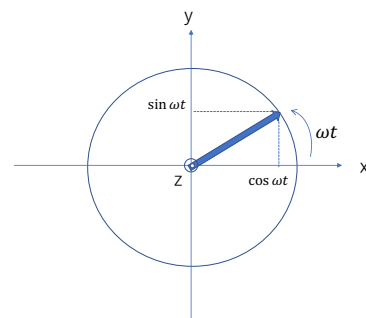
$$\langle \hat{\sigma}_z \rangle_t = \langle \Psi(t) | \hat{\sigma}_z | \Psi(t) \rangle$$

$$= \frac{1}{2}(\langle u | \hat{\sigma}_z | u \rangle + e^{-i\omega t} \langle d | \hat{\sigma}_z | u \rangle + e^{i\omega t} \langle u | \hat{\sigma}_z | d \rangle + \langle d | \hat{\sigma}_z | d \rangle) = 0 \quad (\text{演15})$$

(7) (6)の結果は、古典的にはスピンのような運動をしている事に対応するのか、述べよ。

(解答例) xy 平面上において、スピンの角速度 ω で磁場軸 (z 軸) の周りを反時計回りに回転 (歳差運動) をする事に対応する。(右図参照)

(参考) コマが回転している場合 (角運動量を持っている場合)、コマは倒れないで重力の方向の周りに歳差運動をする。今の場合、重力が磁場に、コマがスピンの作る磁気モーメントに、コマの回転がスピン角運動量に当たる。(力学の剛体の運動を復習せよ)



(重要) 量子力学では、期待値が歳差運動するのであって、実際の観測値は固有値だけになる

4. $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$ を示せ。

(解答例) 左辺 $=[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = (\hat{A}\hat{B})\hat{C} - \hat{C}(\hat{A}\hat{B})$.

$$\text{右辺} = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}) + (\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A})\hat{B} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{A}\hat{C}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}\hat{B} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B}$$

よって、右辺=左辺なので与式は証明された。

(参考) 同様に、 $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$ (演16) を証明できる。

5. 期待値の時間変化の方程式 ((3.7.31) 式)

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{M} \rangle_t = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{M}, \hat{H}] \rangle_t$$

を使い、次の設問に答えよ。

(1) ハミルトニアンが $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$ で表される時、 $\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle$ を求めよ。

(解答例) $\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle_t = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle_t$. (*)

$$[\hat{x}, \hat{H}] = [\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)] = \frac{1}{2m} [\hat{x}, \hat{p}^2] + [\hat{x}, V(x)] = \frac{1}{2m} (\hat{p}[\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{p}) = i\hbar \frac{\hat{p}}{m}$$

ここで、 $[\hat{x}, V(x)] = 0$ (\hat{x} は x をかけるだけの演算子)、不確定性関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ 、および、交換子に対する公式 (問題2 解答例の (演16) 式を見よ) を使った。

(*) の式に上の結果を代入すると、 $\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle_t = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle_t = -\frac{i}{\hbar} \langle i\hbar \frac{\hat{p}}{m} \rangle_t = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle_t$ となる。

(2) 上の \hat{H} に対して、 $[\hat{p}, \hat{H}] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$ を示せ。

(解答例)

$$[\hat{p}, \hat{H}] = [\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)] = \frac{1}{2m} [\hat{p}, \hat{p}^2] + [\hat{p}, V(x)] = 0 + [\hat{p}, V(x)]$$

$\hat{p} \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ なので、交換子を任意の波動関数に作用させて考えると、

$$[\hat{p}, V(x)]\psi(x) = (\hat{p}V(x) - V(x)\hat{p})\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (V(x)\psi(x)) - V(x)(-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = -i\hbar \frac{\partial V(x)}{\partial x} \psi(x).$$

よって、 $[\hat{p}, \hat{H}] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x}$.

(3) 上の \hat{H} に対して、 $\frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$ を示せ。

(これは Ehrenfest の定理である (演習2(6)の参考を参照))

(解答例)

(2)の結果を $\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle_t = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle_t$ の右辺に代入すると、 $\frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$ が得られる。

演習2(6)を解く場合、部分積分などの面倒な計算が必要であったが、ここで解いた方法では交換関係の簡単な計算で求まる。