量子力学第二演習　　No.5　97/5/22

1. 波動関数 $\Psi_1(q)$ と $\Psi_2(q)$ が座標 q の関数であるとしよう。演算子 $\hat{A}$ に対して、演算子 $\hat{A}^\dagger$ が存在し、任意のΨ_1, Ψ_2 に対して

$$\int (\hat{A}\Psi_2(q))^*\Psi_1(q)\mathrm{d}q = \int \Psi_2^*(q)\hat{A}^\dagger\Psi_1(q)\mathrm{d}q$$

を満たすとき、$\hat{A}^\dagger$ を $\hat{A}$ に対するエルミート共役な演算子と呼ぶ。

(1) ブラケット記号を導入し、$\Psi_1(q) = |\Psi_1\rangle$, $\Psi_2(q) = |\Psi_2\rangle$ と書く。さらに、

$$\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle = \int \Psi_1^*(q)\Psi_2(q)\mathrm{d}q, \quad \langle\Psi_1|\hat{A}|\Psi_2\rangle = \int \Psi_1^*(q)\hat{A}\Psi_2(q)\mathrm{d}q$$

のように記法の定義をする。このとき、$\langle\Psi_1|\hat{A}^\dagger|\Psi_2\rangle = \langle\Psi_2|\hat{A}|\Psi_1\rangle^*$ を証明せよ。

(2) 状態 $|\Psi\rangle$ に作用すると、状態 $\langle\Psi_2|\Psi\rangle|\Psi_1\rangle$ を与える演算子を、$|\Psi_1\rangle\langle\Psi_2|$ と書くことにする。波動関数 $\Psi_n(q)$ $(= |n\rangle$、n は整数 $)$ が正規直交 (すなわち $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$) であって、しかも、任意の状態 $|\Psi\rangle$ が $|\Psi\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$ のように展開できるとしよう。このとき、$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$ を示せ。(ヒント: $\sum_n |n\rangle\langle n|$ を任意の状態に作用させたとき、状態が変わらないことを示せばよい。)

(3) 波動関数 $\Psi_\nu(q)$ ($= |\nu\rangle$、ν は実数) が正規直交 (すなわち $\langle\mu|\nu\rangle = \delta(\mu-\nu)$) であって、しかも、任意の状態 $|\Psi\rangle$ が $|\Psi\rangle = \int \mathrm{d}\nu c_\nu|\nu\rangle$ のように展開できるとしよう。このとき、$\int \mathrm{d}\nu|\nu\rangle\langle\nu| = 1$ を示せ。

(4) (3) で述べた性質をもつ $|n\rangle$ (または (4) で述べた性質をもつ $|\nu\rangle$) が存在したとしよう。このような性質をもつ $|n\rangle$(または $|\nu\rangle$) の集合は完全であるという。このとき、(1) の結果を使って、$\langle\Psi|\hat{A}^\dagger\hat{A}|\Psi\rangle \geq 0$ を示せ。

2. 正規直交な波動関数 $|\nu\rangle$ の完全な集合があるとする。これについて、以下の問いに答えよ。

(1) 一般の状態を表す $|\Psi\rangle$、一般の演算子 $\hat{A}$ に対し

$$|\Psi\rangle = \int \mathrm{d}\nu\langle\nu|\Psi\rangle|\nu\rangle, \quad \hat{A} = \int\int \mathrm{d}\nu\mathrm{d}\mu\langle\mu|\hat{A}|\nu\rangle|\mu\rangle\langle\nu|$$

を示せ。

(2) 一次元の位置演算子を $\hat{x}$ とし、その固有状態を $|x\rangle$ とする。つまり、$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$ である。固有状態 $|x\rangle$ の集合は、正規直交な波動関数の完全な集合であるとする。このとき、位置の演算子 $\hat{x}$ の行列要素 $\langle x''|\hat{x}|x'\rangle$ を求めよ。

(3) 位置と運動量の間の交換関係 $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$ の両辺の行列表示を計算せよ。その結果から、運動量演算子 $\hat{p}$ の行列要素 $\langle x''|\hat{p}|x'\rangle$ を求めよ。(ヒント: デルタ関数の満たす関係式 $x\delta'(x) = -\delta(x)$ を使え。)

(4) 運動量演算子の固有状態を $|p\rangle$ と書く。すなわち、$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ である。(3) の結果を使って、$\langle x'|p\rangle$ を固有値 p の関数として求めよ。

3. 時間に依存する Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|q,t\rangle = \hat{H}|q,t\rangle$$

を考える。以下の問いに答えよ。

(1) ハミルトニアン $\hat{H}$ が時間に依存しないとする。Schrödinger 方程式の解が

$$|q,t\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|q,0\rangle$$

で与えられることを示せ。

(2) ハミルトニアンが時間に依存するが、異なる時刻のハミルトニアンが互いに交換するとする。(つまり、$[\hat{H}(t),\hat{H}(t')] = 0$) このとき、 Schrödinger 方程式の解が

$$|q,t\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \hat{H}(t')\mathrm{d}t'\right)|q,0\rangle$$

で与えられることを示せ。

(3) 異なる時刻のハミルトニアンが非可換なときには、(2) の証明は破綻することを説明せよ。

(4) 一次元の自由粒子を考えよう。初期条件は、$|x,0\rangle = |x\rangle$ とする。　すなわち、時刻 $t = 0$ では位置の固有状態にある。ハミルトニアンは、$\hat{H} = \hat{p}^2/2m$ で与えられる。このとき、$\langle x'|x,t\rangle$ を計算せよ。