量子力学II　演習問題 2

2018 年 4 月 18 日

1　運動量演算子

講義ノートの第 1 章、第 2 章においては、運動量演算子 $\hat{p}$ が座表表示の波動関数 $\psi(x)$ に対して微分演算子として作用することを仮定して、位置と運動量の交換関係を導いた。ここでは逆に、交換関係を仮定して、$\hat{p}$ の $\psi(x)$ に対する作用を導こう。

一次元座標の自由度を持つ粒子を考える。このときヒルベルト空間は無限次元である。交換関係 $[\hat{x},\hat{p}]=\mathrm{i}\hbar$ を満たす位置演算子 $\hat{x}$ と運動量演算子 $\hat{p}$ に対して、固有状態 $|x\rangle, |p\rangle$ をそれぞれ $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle, \hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ として定め、座標表示の波動関数を $\psi(x) := \langle x|\psi\rangle$ とする。$\{|x\rangle\}$ と $\{|p\rangle\}$ はそれぞれ以下の規格化条件および完全性条件を満たす。但し、$\delta(x)$ はデルタ関数[1]であり、$\hat{I}$ は恒等演算子である。

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x-x'), \langle p|p'\rangle = \delta(p-p'), \int \mathrm{d}x\,|x\rangle\langle x| = \hat{I}, \int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}|p\rangle\langle p| = \hat{I}$$

(1) 交換関係から次の等式を導け。$(x-x')\langle x|\hat{p}|x'\rangle = \mathrm{i}\hbar\delta(x-x')$

(2) デルタ関数についての次の等式を示せ。

$$x\frac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}x}(x) = -\delta(x)$$

但し、デルタ関数 $\delta(x)$ の微分は次のようにして定義される。

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\delta}{\mathrm{d}x}(x-a)f(x)\,\mathrm{d}x = -\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-a)\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x)\,\mathrm{d}x = -\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(a)$$

ここで $f(x)$ は無限遠で十分に速くゼロとなる滑らかな任意の関数である。

(3) (1) と (2) から次の等式を導け。

$$\langle x|\hat{p}|x'\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x'}[\delta(x-x')]$$

[1] デルタ関数 $\delta(x)$ は次のようにして定義される。$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-a)f(x)\,\mathrm{d}x = f(a)$
ここで $f(x)$ は無限遠で十分に速くゼロとなる滑らかな任意の関数である。

(4) (3) から次の等式を導け。

$$\hat{p}\psi(x) := \langle x|\,\hat{p}\,|\psi\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}(x)$$

2　Ehrenfest の定理

(1) 位置演算子 $\hat{\vec{\mathbf{r}}}$ と運動量演算子 $\hat{\vec{\mathbf{p}}}$ について、交換関係 $[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ を元にして次の等式を示せ。但し、$f(\vec{\mathbf{k}}) = f(k_1, k_2, k_3)$ と $g(\vec{\mathbf{x}}) = g(x_1, x_2, x_3)$ は共に十分滑らかな関数とする。

$$\left[\hat{r}_i, f\left(\hat{\vec{\mathbf{p}}}\right)\right] = i\hbar\frac{\partial f}{\partial k_i}(\hat{\vec{\mathbf{p}}}), \qquad \left[\hat{p}_i, g\left(\hat{\vec{\mathbf{r}}}\right)\right] = -i\hbar\frac{\partial g}{\partial x_i}(\hat{\vec{\mathbf{r}}})$$

以下では、系のハミルトニアンを $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{\mathbf{p}}}^2}{2m} + V\left(\hat{\vec{\mathbf{r}}}\right)$ とする。また、ここでは時刻 t での状態 $|\psi\rangle$ における物理量 $\hat{A}$ の期待値を $\left\langle \hat{A} \right\rangle_\psi (t) := \left.\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle\right|_t$ と表記する。このとき、Schrödinger 描像を用いても Heisenberg 描像を用いても期待値の定義は同じであることに注意せよ。以下の問いにおいては、いずれの描像を用いて答えても良い。

(2) $\hat{\vec{\mathbf{r}}}$ と $\hat{\vec{\mathbf{p}}}$ の交換関係を用いて、任意の t、$|\psi\rangle$ に対して次の等式を示せ。

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle\hat{\vec{\mathbf{r}}}\right\rangle_\psi (t) = \frac{1}{m}\left\langle\hat{\vec{\mathbf{p}}}\right\rangle_\psi (t)$$

(3) $\hat{\vec{\mathbf{r}}}$ と $\hat{\vec{\mathbf{p}}}$ の交換関係を用いて、任意の t、$|\psi\rangle$ に対して次の等式を示せ。

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle\hat{\vec{\mathbf{p}}}\right\rangle_\psi (t) = -\left\langle\boldsymbol{\nabla}V\left(\hat{\vec{\mathbf{r}}}\right)\right\rangle_\psi (t)$$

(2) と (3) で示した等式を Ehrenfest の定理といい、量子力学的な位置と運動量の期待値の時間発展が対応する古典量の時間発展と形式的に似ているということを示しているが、一般には両者は一致しないことに注意せよ。なぜならば、一般には $\left\langle\boldsymbol{\nabla}V(\hat{\vec{\mathbf{r}}})\right\rangle_\psi (t) \neq \boldsymbol{\nabla}V\left(\left\langle\hat{\vec{\mathbf{r}}}\right\rangle_\psi (t)\right)$ だからである。それでは、どのような状況でこの等号が成立するのかを考えよう。

(4) ここでは簡単のために空間次元を 1 次元とし、ポテンシャルの形として $V(x) = \lambda x^n \ \ (\lambda \in \mathbb{R},\ \ n \in \mathbb{N} \cup \{0\})$ を仮定する。このとき、任意の t、$|\psi\rangle$ に対して次の等式が成立するための n についての条件を求めよ。

$$\langle V'(\hat{r})\rangle_\psi (t) = V'\left(\langle\hat{r}\rangle_\psi (t)\right)$$

3　同時固有状態

講義ノート 2.5 節においては、2 つの物理量 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が交換するならば両者の同時固有状態を取れる、ということを示した。ここでは、その逆が成立するか否かを考えよう。

(1) 2 つの物理量 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が同時固有状態 $|a,b\rangle$ $\left(\hat{A}\,|a,b\rangle = a\,|a,b\rangle\,,\hat{B}\,|a,b\rangle = b\,|a,b\rangle\right)$ を持ち、$\{|a,b\rangle\}$ がヒルベルト空間の正規直交完全系をなすとする。このとき、$[\hat{A},\hat{B}] = 0$ が常に成立するか否かを答えよ。また、常に成立するとする場合はそのことを証明し、常には成立しないとする場合は反例を挙げよ。

次は、交換関係ではなく反交換関係について考えよう。

(2) 2 つの物理量 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が反交換関係 $\{\hat{A},\hat{B}\} := \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = 0$ を満たすとする。但し、$\hat{A}$ と $\hat{B}$ のいずれも、恒等的にゼロではないとする[2]。このとき、$\hat{A}$ と $\hat{B}$ は同時固有状態を持ちうるか否かを答えよ。また、持ちうるとする場合は具体例を挙げ、持ち得ないとする場合はそのことを証明せよ。

[2] 4/18 に追加した箇所である。